

*CONSIDERATE LA VOSTRA SEMENZA :
FATTI NON FOSTE A VIVER COME BRUTI,
MA PER SEGUIR VIRTUTE E CANOSCENZA.*

Ulisse

Divina Commedia, if. XXVI, 118

Indice

Introduzione	1
1 Elettroni nei Superreticoli	3
1.1 Il metodo $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$	3
1.2 Supercelle e minizone	6
1.3 La Funzione Inviluppo	8
1.3.1 Condizioni di continuità all'interfaccia	11
1.4 Il potenziale di Krönig-Penney	12
1.5 Dinamica di un elettrone nel potenziale di Krönig-Penney	16
2 Le minibande in Si/SiO₂	21
2.1 Il metodo Tight-Binding	21
2.2 Le minibande	24
2.3 Valli e molteplicità	25
2.4 Densità degli stati	29
2.5 Energia termica nelle minibande	32
3 Trasporto semiclassico e metodo Monte Carlo	39
3.1 L'equazione di Boltzmann	39
3.2 Il termine di collisione	41
3.3 I meccanismi di scattering	43
3.3.1 Fononi	43

3.3.2	Impurezze	45
3.3.3	Urti tra elettroni	45
3.3.4	Rugosità dell'interfaccia	46
3.4	L'approssimazione a bande paraboliche	46
3.5	Il metodo Monte Carlo	49
4	Fenomeni di trasporto in superreticoli	55
4.1	Oscillazioni di Bloch	55
4.2	Scala di Wannier-Stark	58
4.3	Conducibilità differenziale negativa	60
4.4	Regimi di trasporto	63
5	Il modello di trasporto verticale in Si/SiO₂	67
5.1	Modello Many-Valley	67
5.2	Modello per i fononi	68
5.2.1	Fononi in Si	71
5.2.2	Fononi in SiO ₂	75
5.3	Scelta dello scattering fononico	82
5.3.1	Meccanismo del rigetto interno	83
6	Le simulazioni	85
6.1	Il programma simulativo	85
6.1.1	Fast self-scattering	85
6.1.2	Doppio tetto di probabilità	86
6.1.3	Stimatori e funzione di distribuzione	88
6.1.4	Scelta dello stato finale	90
6.2	Risultati	91
6.2.1	Simulazioni a singolo campo elettrico	92
6.2.2	Simulazioni in funzione del campo elettrico: energia media	98

6.2.3	Simulazioni in funzione del campo elettrico: velocità di deriva	100
Conclusioni		107
A	File di uscita del programma Monte Carlo	109
Bibliografia		113

Introduzione

Negli ultimi anni, sono stati utilizzati metodi di crescita epitassiale (MBE: molecular beam epitaxy; MOCVD: metal-organic chemical vapour deposition) che hanno permesso di realizzare strati ultra-sottili (5-100 Å) di semiconduttori. Inoltre, le applicazioni di microelettronica sono basate quasi interamente sul Silicio e sull'ossido di Silicio: il Silicio infatti è un ottimo semiconduttore, l'ossido è un ottimo isolante e viene anch'esso molto utilizzato nei dispositivi.

Insieme all'evoluzione delle tecniche sperimentali, occorre sviluppare anche nuovi metodi teorici per calcolare le proprietà elettroniche di questi sistemi innovativi, e contemporaneamente bisogna utilizzare metodi teorici e computazionali per descrivere i fenomeni che si verificano quando a queste strutture viene applicato un campo elettrico. Di tutti i metodi che sono stati utilizzati per il trasporto elettronico, quello che si è affermato da tempo come più flessibile ed efficace è il metodo Monte Carlo.

All'interno di questo quadro, si inseriscono i superreticoli, in particolare i superreticoli Si/SiO₂. Tuttavia, a tutt'oggi, anche se in letteratura si possono trovare numerose simulazioni Monte Carlo di superreticoli, nessuna di esse viene applicata a un sistema SiO₂: la gran parte dei calcoli di trasporto in superreticoli viene utilizzata per il GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

In questa tesi si utilizzerà il metodo Monte Carlo per simulare il trasporto verticale in un superreticolo SiO₂. Tale tipo di simulazione richiede tuttavia

un modello per la struttura a bande del superreticolo. Tale modello viene fornito, in forma analitica semplice, dall'approssimazione della funzione involuppo (EFA) unitamente al metodo tight-binding. Sono stati sviluppati 2 programmi che eseguono il calcolo delle minibande del superreticolo e che simulano il trasporto tramite metodo Monte Carlo.

Nel capitolo 1 si descriveranno le generalità dei superreticoli e della loro struttura elettronica: si introdurranno i concetti di supercella e di minizona, l'approssimazione della funzione involuppo e il modello di Krönig-Penney. Si userà questo modello per descrivere il moto di un elettrone.

Nel capitolo 2 si applicano i concetti descritti nel capitolo precedente al sistema fisico di interesse e si mostrerà la sua struttura elettronica. Alla fine del capitolo compare il calcolo analitico per l'energia cinetica di un elettrone in una minibanda.

Il capitolo 3 è una rassegna della teoria del trasporto semiclassico e del metodo Monte Carlo.

Il quarto capitolo descrive i principali fenomeni di trasporto che possono avvenire nei superreticoli al variare del campo elettrico e in presenza di agenti scattering. Tale descrizione sarà utile per interpretare i risultati delle simulazioni.

Il modello utilizzato nel programma di calcolo viene accuratamente descritto nel quinto capitolo. In particolare si presenta il modello adottato per lo scattering da fononi e si mostrano le probabilità di scattering calcolate.

Infine, nell'ultimo capitolo, si mostrano i risultati delle simulazioni per differenti valori di campo elettrico e di temperatura. I risultati verranno interpretati utilizzando le teorie descritte nei capitoli precedenti. S

Capitolo 1

Elettroni nei Superreticoli

Per descrivere il trasporto di carica in semiconduttori è necessario conoscere la struttura a bande del materiale in cui si muovono i portatori e i potenziali di interazione con i meccanismi di scattering. La conoscenza della struttura elettronica è di fondamentale importanza sia per simulare correttamente la legge del moto degli elettroni, sia per calcolare le probabilità di scattering. Un superreticolo è una struttura molto diversa dai materiali bulk: la ridotta dimensionalità genera effetti di confinamento e di ripiegamento delle bande. L'obiettivo di questo capitolo è dunque dare una descrizione accurata delle cosiddette minibande di un superreticolo.

1.1 Il metodo $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$

Per di cercare la dispersione energetica degli elettroni in un superreticolo, è necessario discutere il metodo $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ [1]. Tale metodo è stato introdotto per il calcolo delle bande di volume tramite la teoria perturbativa indipendente dal tempo al secondo ordine. Esso giustifica l'approssimazione di massa efficace che userò per calcolare le minibande di un superreticolo.

Per un materiale cristallino abbiamo la seguente equazione di Shrödinger

$$\widehat{H}_{cr}\psi_{cr}(\mathbf{r}) = E_{cr}\psi_{cr}(\mathbf{r}) , \quad (1.1)$$

dove l' operatore hamiltoniano è la somma del termine cinetico e del potenziale cristallino, mentre la soluzione è l'autofunzione di Bloch:

$$\widehat{H}_{cr} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + \widehat{W}_{cr}(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

$$\psi_{cr}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (1.3)$$

Supponendo note le soluzioni in un punto $\mathbf{k}_0$ di minimo per la banda del cristallo, posso sostituire l'autofunzione $\psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ nella (1.1) e ottenere l'equazione a cui soddisfa la $u_{n,\mathbf{k}_0}$

$$\widehat{H}_0 u_{n,\mathbf{k}_0} = \left[\frac{\hbar^2}{2m_e}\widehat{\mathbf{k}}^2 + \frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k}_0 \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \widehat{W}_{cr}(\mathbf{r}) \right] u_{n,\mathbf{k}_0} = E_{n,\mathbf{k}_0} u_{n,\mathbf{k}_0} . \quad (1.4)$$

Posso riscrivere la stessa equazione per un $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_0$

$$\widehat{H}_0 u_{n,\mathbf{k}} = \left[\frac{\hbar^2}{2m_e}\widehat{\mathbf{k}}^2 + \frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k} \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \widehat{W}_{cr}(\mathbf{r}) \right] u_{n,\mathbf{k}} = E_{n,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} , \quad (1.5)$$

a cui sommo e sottraggo i termini $\frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e $\frac{\hbar^2}{2m_e}\mathbf{k}^2$

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 u_{n,\mathbf{k}} &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_e}\widehat{\mathbf{k}}^2 + \frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k} \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \widehat{W}_{cr}(\mathbf{r}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\mathbf{k}^2 - \frac{\hbar}{m_e}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\mathbf{k}^2 \right] u_{n,\mathbf{k}} \\ &= E_{n,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (1.6)$$

e raccogliendo opportunamente i termini simili si ottiene

$$\left[\widehat{H}_0 + \frac{\hbar}{m_e}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2m_e}(\widehat{\mathbf{k}}^2 - \widehat{\mathbf{k}}_0^2) \right] u_{n,\mathbf{k}} = E_{n,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} . \quad (1.7)$$

Ora, se $\mathbf{k}$ appartiene a un intorno di $\mathbf{k}_0$, é possibile trattare i due termini aggiunti ad $\widehat{H}_0$ nella (1.7) con la teoria perturbativa [2] al secondo ordine: essa

ci consente di sviluppare la soluzione $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ della hamiltoniana perturbata sulle autofunzioni $u_{n',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ del problema imperturbato

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} C_{n'}(\mathbf{k}) u_{n',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) , \quad (1.8)$$

Posso sostituire lo sviluppo precedente nella (1.7), successivamente moltiplicare per $u_{n,\mathbf{k}_0}^*$ e integrare sulla cella per ottenere

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_{n'}(\mathbf{k}_0) - E_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} (\hat{\mathbf{k}}^2 - \hat{\mathbf{k}}_0^2) \right] \delta_{n,n'} + \frac{\hbar^2}{m_e} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \Pi_{n,n'} \right\} C_{n'}(\mathbf{k}) = 0 , \quad (1.9)$$

dove $\Pi_{n,n'} = \langle u_{n,\mathbf{k}_0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n',\mathbf{k}_0} \rangle$ è l'elemento di matrice dell'impulso su 2 stati di Bloch. Con l'aiuto della teoria perturbativa si ottiene l'espressione per l'energia:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \mathbf{k} + \frac{\hbar^2}{m_e^2} \sum_{n'} \frac{|\mathbf{k} \Pi_{n,n'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} . \quad (1.10)$$

Nella sommatoria precedente si consideri il termine a numeratore, esso può essere scritto per esteso come $|\mathbf{k} \Pi_{n,n'}|^2 = \sum_{i,j} k_i \Pi_{i;n,n'} \Pi_{j;n,n'} k_j$; di conseguenza si ricava per la (1.10) la seguente espressione

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} k_i k_j \quad (1.11)$$

dove compare il tensore inverso di massa efficace (la sommatoria sugli indici i, j di direzione spaziale è sottintesa):

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} = \frac{1}{m_e} + \frac{2}{m_e^2} \sum_{n'} \frac{\Pi_{i;n,n'} \Pi_{j;n,n'}}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} , \quad (1.12)$$

che corrisponde alla curvatura della banda in $\mathbf{k}_0$ e rappresenta l'approssimazione parabolica della stessa in un intorno del punto in cui la soluzione è nota esattamente. Il significato fisico del tensore di massa efficace sarà evidente quando si introdurrà il formalismo della funzione involuppo al par. (1.3.)

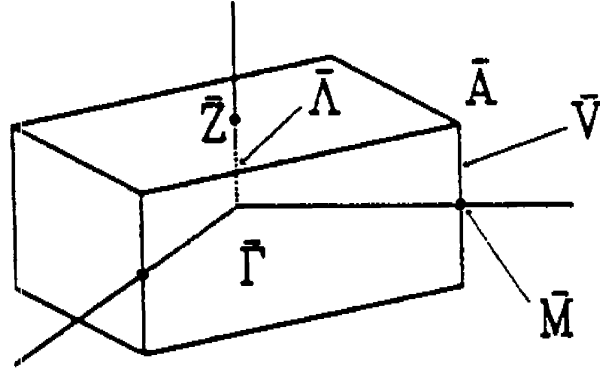


Figura 1.1: *Minizona per un sistema Si/SiO₂ [5]*

1.2 Supercelle e minizone

Un superreticolo è una struttura regolare costruita sovrapponendo n strati atomici di un certo materiale A (con passo reticolare a_A), m strati di un materiale B (con passo reticolare a_B), poi di nuovo A e così via. In questo modo lungo la direzione di crescita, poniamo z , si ha un susseguirsi di layers di materiali diversi, ottenendo una struttura periodica con passo $d = na_A + ma_B$. Questo comporta notevoli modificazioni nelle proprietà elettroniche del nuovo materiale rispetto ai materiali con cui è stato costruito.

Se consideriamo la direzione z , possiamo identificare la costante reticolare (superreticolo) d , nel piano xy invece la forma della cella viene mantenuta invariata. Poiché d è di molto superiore al passo reticolare originario, la cella che si ottiene si chiama supercella. D'altro canto nello spazio reciproco la dimensione k_z sarà $\frac{2\pi}{d}$: la zona di Brillouin di partenza viene sostituita dalla cosiddetta *minizona*, ridotta dello stesso fattore $\frac{d}{a}$ che moltiplica la cella dello spazio reale¹.

Poiché la struttura presenta una extra periodicità nella direzione z , si

¹Ho supposto per il momento $a_A = a_B$

impone che la funzione d'onda rispetti le condizioni di Born-Von Karman [8]

$$\chi(z + Nd) = \chi(z) . \quad (1.13)$$

Inoltre, la struttura è periodica, per cui si può giungere a dimostrare un enunciato analogo al teorema di Bloch per i cristalli

$$\chi(z + nd) = C_n \chi(z) = e^{iqnd} \chi(z) = e^{ik_z d} \chi(z) \quad (1.14)$$

dove $k_z = qn = \frac{2\pi}{Nd}n$ è lo pseudovettore nella direzione z associato alla minizone.

Per un un superreticolo, occorre modificare l'equazione di Shödinger aggiungendo il potenziale strutturale $U(\mathbf{r})$. Tale potenziale è definito dalla struttura a bande dei due materiali che vengono usati per costruire il superreticolo: il profilo del potenziale lungo la direzione z si produce con l'allineamento dei rispettivi livelli di Fermi [5]. Il potenziale $U(\mathbf{r})$ per gli elettroni banda di conduzione sarà ottenuto considerando i minimi delle rispettive bande di conduzione originarie rispetto al livello di fermi; lo stesso ragionamento può essere utilizzato per dedurre il potenziale, generato dagli offset della banda di valenza, a cui sono sottoposte le lacune. Il potenziale risultante è dunque un potenziale con la stessa periodicità del superreticolo.

In base a questo criterio si possono distinguere i superreticoli in 3 specie come si vede in fig(1.2). I superreticoli di tipo I sono costituiti da materiali per cui il gap del primo è contenuto nel gap del secondo (a) per cui elettroni e lacune sono confinati nello stesso materiale; i superreticoli di tipo II invece presentano i gap dei 2 materiali completamente sfasati (b); nelle strutture di tipo III i gap sono sfasati ma si sovrappongono per un intervallo. In quest'ultimo caso lacune ed elettroni sono confinati in materiali diversi (c). Il Si/SiO₂ è classificabile come superreticolo di 1° specie² [6].

²Per i valori del band offset si rimanda al par 2.3

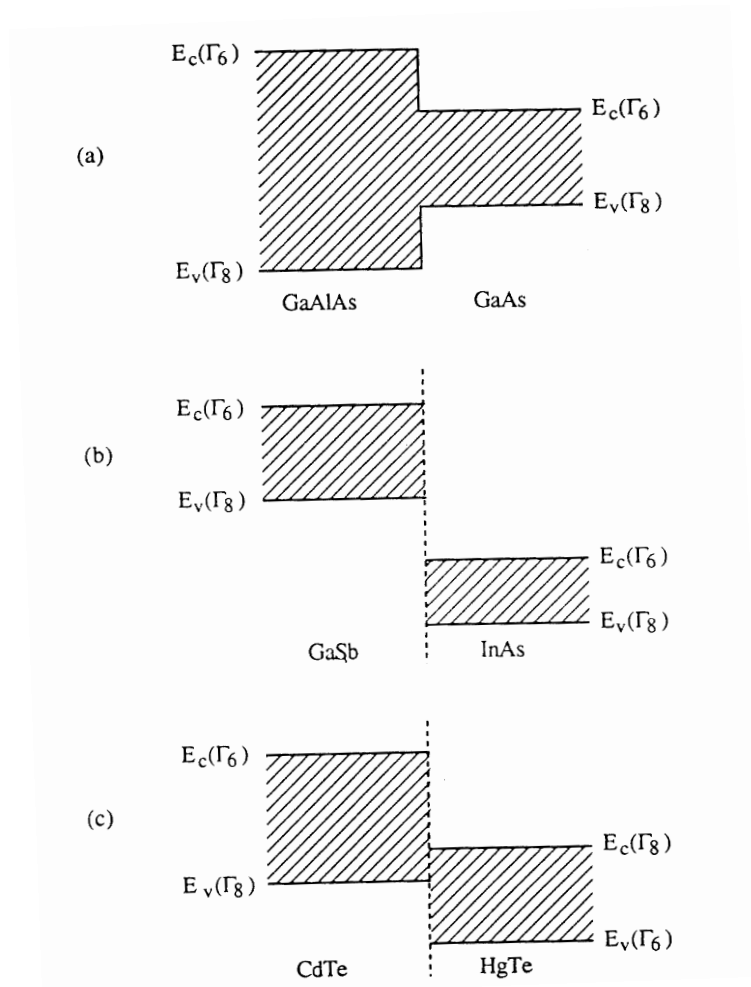


Figura 1.2: *Classificazione dei superreticoli*

1.3 La Funzione Involuppo

In base alle considerazioni del paragrafo precedente, l'equazione di Schrödinger da risolvere diviene

$$\left[\widehat{H}_{cr}(\mathbf{r}) + \widehat{U}(\mathbf{r}) \right] |\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.15)$$

dove $\widehat{H}_{cr}(\mathbf{r})$ è l'operatore hamiltoniano del cristallo e $\widehat{U}(\mathbf{r})$ è il potenziale strutturale. Si ipotizzi per la funzione d'onda una espansione sulle soluzioni

del problema cristallino imperturbato

$$|\Psi\rangle = \sum_{n', \mathbf{k}'} C_{n', \mathbf{k}'} |\psi_{n', \mathbf{k}'}\rangle \quad (1.16)$$

e si moltiplichino come al solito per $\langle \psi_{n, \mathbf{k}} |$

$$E_n(\mathbf{k})C_{n, \mathbf{k}} + \sum_{n', \mathbf{k}'} C_{n', \mathbf{k}'} \langle \psi_{n, \mathbf{k}} | \hat{U} | \psi_{n', \mathbf{k}'} \rangle = EC_{n, \mathbf{k}} . \quad (1.17)$$

Per poter procedere occorre analizzare il termine che compare nella somma: poiché il potenziale è periodico, posso svilupparlo in serie di Fourier

$$\hat{U}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \hat{U}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (1.18)$$

dove $\mathbf{G}$ sono i vettori del reticolo reciproco; l'argomento della sommatoria diventa:

$$\langle \psi_{n, \mathbf{k}} | \hat{U} | \psi_{n', \mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{NV_0} \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G})\mathbf{n}} \langle u_{n, \mathbf{k}} | u_{n', \mathbf{k}-\mathbf{G}} \rangle . \quad (1.19)$$

Ricordando che $\mathbf{n}$ è la posizione della cella primitiva n -esima si ha che $\frac{1}{N} \sum e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G})\mathbf{n}} = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{G}}$, dunque

$$\langle \psi_{n, \mathbf{k}} | \hat{U} | \psi_{n', \mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{V_0} \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{G}} \langle u_{n, \mathbf{k}} | u_{n', \mathbf{k}'} \rangle . \quad (1.20)$$

Se si tiene conto delle proprietà della funzione di Dirac, e si definisce

$$\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{G}}^{n, n'} = \frac{1}{V_0} \langle u_{n, \mathbf{k}} | u_{n', \mathbf{k}-\mathbf{G}} \rangle , \quad (1.21)$$

la (1.17) diventa:

$$E_n(\mathbf{k})C_{n, \mathbf{k}} + \sum_{n', \mathbf{k}-\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} C_{n', \mathbf{k}-\mathbf{G}} \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{G}}^{n, n'} = EC_{n, \mathbf{k}} . \quad (1.22)$$

L'approssimazione successiva consiste nel supporre

$$\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}-\mathbf{G}}^{n, n'} \simeq \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^{n, n'} = \delta_{n, n'} \quad (1.23)$$

In altre parole si assume che siano uguali le funzioni $u_{n,\mathbf{k}}$ e $u_{n',\mathbf{k}'}$, ipotesi giustificata dal fatto che stiamo lavorando nell'intorno di un punto $\mathbf{k}_0$; inoltre risulta evidente che così facendo si trascurano le interazioni interbanda (ovvero $n \neq n'$).

In questo modo si può arrivare all'espressione finale dell'equazione (1.17)

$$E_n(\mathbf{k})C_{n,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} \hat{U}_{\mathbf{G}} C_{n,\mathbf{k}-\mathbf{G}} = EC_{n,\mathbf{k}} . \quad (1.24)$$

Se si introduce la funzione

$$\mathcal{F}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} C_{n,\mathbf{k}} , \quad (1.25)$$

se si tiene conto che tutte le approssimazioni sono ragionevoli per un intorno di un punto $\mathbf{k}_0$ di minimo e se si considerano solo i termini con n fissato, si

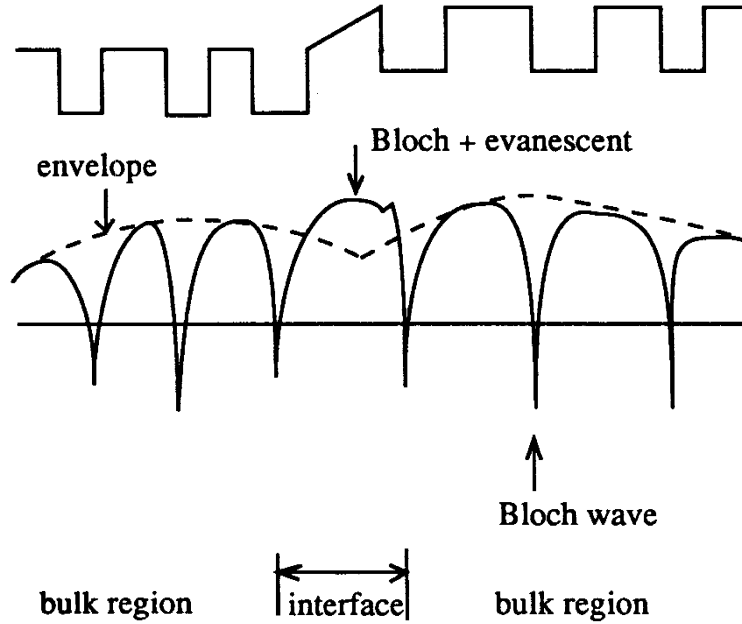


Figura 1.3: *Significato fisico della funzione inviluppo. La discontinuità della funzione inviluppo nasce dalle condizioni di continuità della corrente all'interfaccia (par. 1.3.1)*

modifica la (1.16) come segue:

$$|\Psi\rangle \simeq \sum_{\mathbf{k}} C_{n,\mathbf{k}} |\psi_{n,\mathbf{k}_0}\rangle = \mathcal{F}_n(\mathbf{r}) |u_{n,\mathbf{k}_0}\rangle \quad (1.26)$$

che è l'espressione della funzione d'onda del superreticolo all'interno dell'approssimazione della funzione inviluppo; la funzione definita in (1.25) è proprio la *funzione inviluppo*. Per ottenere l'equazione a cui essa soddisfa [3] basta applicare l'antitrasformazione di Fourier alla (1.24):

$$[\hat{E}_n(-i\nabla) + \hat{U}(\mathbf{r})] \mathcal{F}_n(\mathbf{r}) = E \mathcal{F}_n(\mathbf{r}) \quad (1.27)$$

dove compare l'operatore $\hat{E}_n(-i\nabla)$ che rappresenta la dispersione energetica del cristallo, e in approssimazione di banda parabolica può essere scritta come utilizzando la (1.11)

$$\hat{E}_n(-i\nabla) \simeq E_n(\hat{\mathbf{k}}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_{i,j}^*} \hat{k}_i \hat{k}_j . \quad (1.28)$$

Ora si capisce il significato fisico della funzione inviluppo (fig. 1.3). Il moto dell'elettrone nel cristallo viene assimilato al moto di un elettrone libero con massa m^* , purché esso rimanga confinato nel range di energie in cui la banda è approssimabile con una parabola; il valore della massa efficace tiene conto della presenza del potenziale cristallino. Se poi il caso fisico è quello di un elettrone in un superreticolo, allora l'hamiltoniana presenta il termine cinetico dell'elettrone di massa m^* e il termine di potenziale uguale al potenziale strutturale $\hat{U}(\mathbf{r})$. La soluzione mostra la funzione inviluppo che inviluppa geometricamente la parte periodica di Bloch, soluzione del problema cristallino. In questo modo si sono separati i due problemi che in partenza erano sovrapposti: potenziale cristallino e potenziale strutturale.

1.3.1 Condizioni di continuità all'interfaccia

In questo paragrafo vorrei esaminare un problema che si verifica quando si calcola la corrente attraverso un'interfaccia tra 2 materiali diversi. Ad

esempio, nel caso di un superreticolo, si avrà un tensore di massa efficace per ognuno dei 2 materiali: m_A nel primo materiale e m_B nel secondo. È evidente che con la tradizionale continuità al contorno per la derivata $\nabla\psi_a = \nabla\psi_b$ non c'è conservazione della corrente all'interfaccia

$$\vec{J}_a = -\frac{i\hbar}{m_a} \text{Re}(\psi_a^* \nabla\psi_a) \quad (1.29)$$

$$\vec{J}_b = -\frac{i\hbar}{m_b} \text{Re}(\psi_b^* \nabla\psi_b) , \quad (1.30)$$

infatti $\vec{J}_a \neq \vec{J}_b$. La corrente viene a dipendere ora anche dalla massa efficace dei materiali, per cui la condizione va sostituita con la seguente [4]

$$\frac{1}{m_a} \nabla\psi_a(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{m_b} \nabla\psi_b(\mathbf{r}_0) , \quad (1.31)$$

che unita alla condizione di continuità della funzione

$$\psi_a(\mathbf{r}_0) = \psi_b(\mathbf{r}_0) \quad (1.32)$$

dà luogo alle cosiddette “Current conserving boundary conditions”.

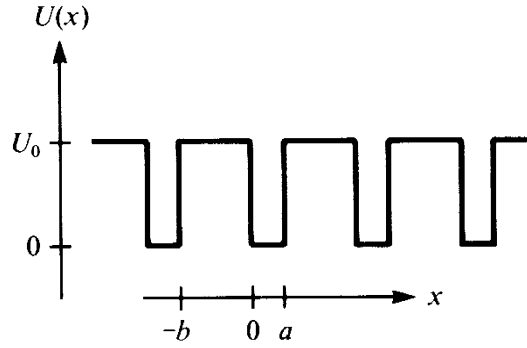
Più in generale, la massa efficace è una funzione della coordinata z di crescita della struttura, allora, per rendere evidente questa condizione, l'operatore hamiltoniano corretto è il seguente:

$$\widehat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(z)} \nabla + \widehat{U}(\mathbf{r}) . \quad (1.33)$$

Questa forma permette di ricavare la giusta equazione di continuità senza ulteriori ipotesi.

1.4 Il potenziale di Krönig-Penney

Come ho detto nel paragrafo 1.3, il potenziale strutturale viene disegnato dai minimi della banda di conduzione rispetto al livello di Fermi. Se i materiali usati per la costruzione del superreticolo non sono drogati, allora non si ha il

Figura 1.4: *Il potenziale di Krönig-Penney*

piegamento del profilo di potenziale dovuto agli accumuli di cariche di segno opposto alle interfacce. Posso quindi utilizzare come modello un potenziale a gradini unidimensionale, appunto il potenziale di Krönig-Penney [7]:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m(z)} \nabla + \hat{V}(z) \right) \psi(z) = E \psi(z) , \quad (1.34)$$

$$\hat{V}(z) = \begin{cases} 0 , & -b \leq z \leq 0 \\ V_0 , & 0 \leq z \leq a \end{cases} . \quad (1.35)$$

La soluzione è di tipo oscillante nella regione $V=0$, mentre è rispettivamente esponenziale od oscillante, a seconda che l'energia sia minore o maggiore di V_0 , nella regione $V=V_0$

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_a(z) = A_a \sin(\alpha z) + B_a \cos(\alpha z) , & 0 \leq z \leq a \\ \psi_b(z) = A_b \sin(\beta z) + B_b \cos(\beta z) , & -b \leq z \leq 0 \end{cases} \quad (1.36)$$

con

$$\alpha^2 = \frac{2m_a}{\hbar^2} E ,$$

$$\beta^2 = \frac{2m_b}{\hbar^2} (E - V_0) .$$

Il fatto che esistano energia al di sopra o al di sotto della barriera viene incluso nel coefficiente β che diventa immaginario per $E < V_0$, di conseguenza le funzioni circolari diventano iperboliche. All'autofunzione così scritta impongo le condizioni di continuità (1.32) e (1.31)

$$i) \quad \psi_a(0) = \psi_b(0)$$

$$ii) \quad \frac{1}{m_a} \frac{d\psi_a}{dz}(0) = \frac{1}{m_b} \frac{d\psi_b}{dz}(0)$$

e le condizioni di periodicità di bloch (1.14,1.13)

$$iii) \quad \psi_a(a) = e^{iq(a+b)} \psi_b(-b)$$

$$iv) \quad \frac{1}{m_a} \frac{d\psi_a}{dz}(a) = e^{iq(a+b)} \frac{1}{m_b} \frac{d\psi_b}{dz}(-b)$$

che generano il seguente sistema lineare

$$\begin{cases} B_a = B_b \\ \frac{\alpha}{m_a} A_a = \frac{\beta}{m_b} A_b \\ A_a \sin(\alpha a) + B_a \cos(\alpha a) = e^{iq(a+b)} [-A_b \sin(\beta b) + B_b \cos(\beta b)] \\ \frac{\alpha}{m_a} A_a \cos(\alpha a) - \frac{\alpha}{m_a} B_a \sin(\alpha a) = e^{iq(a+b)} \left[\frac{\beta}{m_b} A_b \cos(\beta b) + \frac{\beta}{m_b} B_b \sin(\beta b) \right] \end{cases} \quad (1.37)$$

L'unica soluzione non banale del problema si ottiene quando il determinante della matrice dei coefficienti si annulla. Per semplificare il calcolo elimino prima i coefficienti A_b e B_b utilizzando le prime due equazioni. L'equazione che annulla il determinante diventa ora piuttosto semplice:

$$\cos q(a+b) = \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - X \sin(\alpha a) \sin(\beta b) \quad (1.38)$$

$$\text{dove } X = \frac{\alpha^2 m_b^2 + \beta^2 m_a^2}{2\alpha\beta m_a m_b}.$$

Tale determinante rimane invariato per $E > V_0$ mentre per $E < V_0$ è necessario applicare la seguente trasformazione

$$\beta = i\beta_-$$

$$\begin{aligned}
\sin(i\beta_- b) &= i \sinh(\beta_- b) \\
\cos(i\beta_- b) &= \cosh(\beta_- b) \\
X &= \frac{\alpha^2 m_b^2 - \beta_-^2 m_a^2}{2i\alpha\beta_- m_a m_b}
\end{aligned} \tag{1.39}$$

In questo caso la dispersione $E(k)$ si ottiene da

$$\cos q(a+b) = \cos(\alpha a) \cosh(\beta_- b) - X \sin(\alpha a) \sinh(\beta_- b) \tag{1.40}$$

Questo modello non è solubile analiticamente. Ho quindi scritto un programma in FORTRAN90 per calcolare le soluzioni del potenziale di Krönig-Penney: il codice non fa altro che trovare gli zeri dell'equazione (1.38) tramite il metodo delle secanti. Per un risultato numerico delle bande nel modello

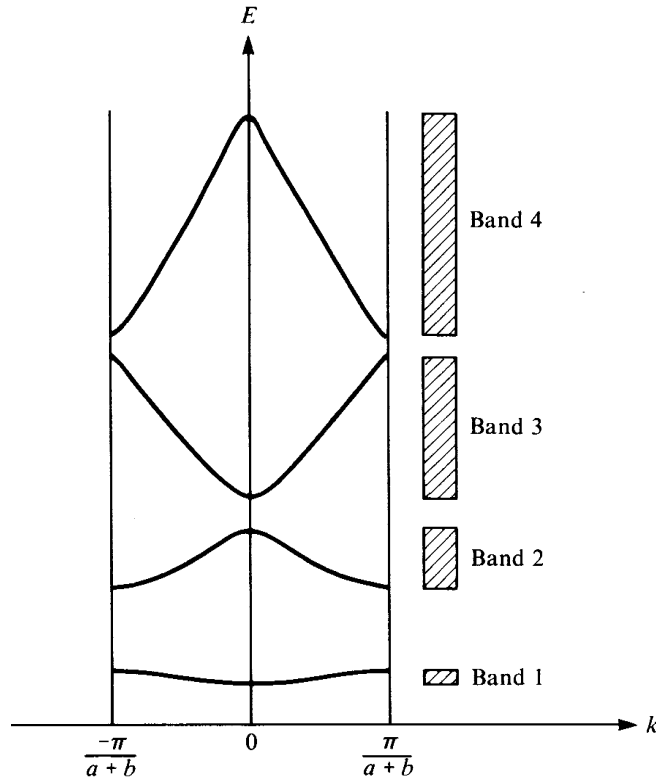


Figura 1.5: *Dispersione $E(k)$ nel modello di Krönig-Penney (tratto da [7]).*

di Krönig-Penney si veda il capitolo successivo, tuttavia ne ho riportato un esempio in fig.(1.5).

1.5 Dinamica di un elettrone nel potenziale di Krönig-Penney

Per poter meglio capire come un elettrone si muove in un superreticolo ho analizzato l'evoluzione di un pacchetto d'onde all'interno di un potenziale di Krönig-Penney in questo modo abbiamo potuto capire in che limiti un elettrone si propaga attraverso le barriere, ovvero quanto è possibile considerare semiclassico un portatore all'interno del superreticolo.

Per studiare la dinamica di un elettrone bisogna risolvere l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(z, t)\rangle = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} |\Psi(z, t)\rangle + \hat{V} |\Psi(z, t)\rangle \quad (1.41)$$

Poiché questo è uno studio generale del modello di Krönig-Penney, ho eseguito i calcoli considerando la stessa massa elettronica per entrambi le regioni di potenziale, e ho considerato il sistema di applicazione totalmente ideale, potendo variare le dimensioni e l'intensità del potenziale a piacimento.

La soluzione del problema è una combinazione lineare degli autostati $|k, n, t=0\rangle$, evoluti ognuno secondo la propria legge temporale

$$\begin{aligned} |\Psi_{k_0}(z, t)\rangle &= \sum_{n,k} a_{k_0}(n, k) |n, k, 0\rangle e^{-i \frac{E(k)}{\hbar} t} \\ &= \sum_{n,k} a_{k_0}(n, k) |n, k, t\rangle \end{aligned} \quad (1.42)$$

Ho scelto come forma per l'elettrone all'istante $t=0$ un pacchetto di minima indeterminazione di forma gaussiana

$$|\Psi_{k_0}(z, 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sigma} e^{ik_0 z} e^{-\frac{z^2}{4\sigma^2}} \quad (1.43)$$

dopodichè per trovare i coefficienti $a_{k_0}(k)$ basta sviluppare la funzione precedente sugli autostati a $t=0$

$$|\Psi_{k_0}(z, 0)\rangle = \sum_{n,k} a_{k_0}(n, k) |n, k, 0\rangle \quad (1.44)$$

$$a_{k_0}(n, k) = \langle n, k, 0 | \Psi_{k_0}(z, 0) \rangle \quad (1.45)$$

I coefficienti poi vanno sostituiti nella (1.42) per ottenere appunto la forma del pacchetto all'istante t . Gli autostati $|n, k, 0\rangle$ sono stati ricavati facilmente risolvendo il sistema lineare (1.37) nei coefficienti A_a , A_b , B_a e B_b , tali valori sono poi stati sostituiti all'espressione (1.36) la quale è stata poi normalizzata a 1.

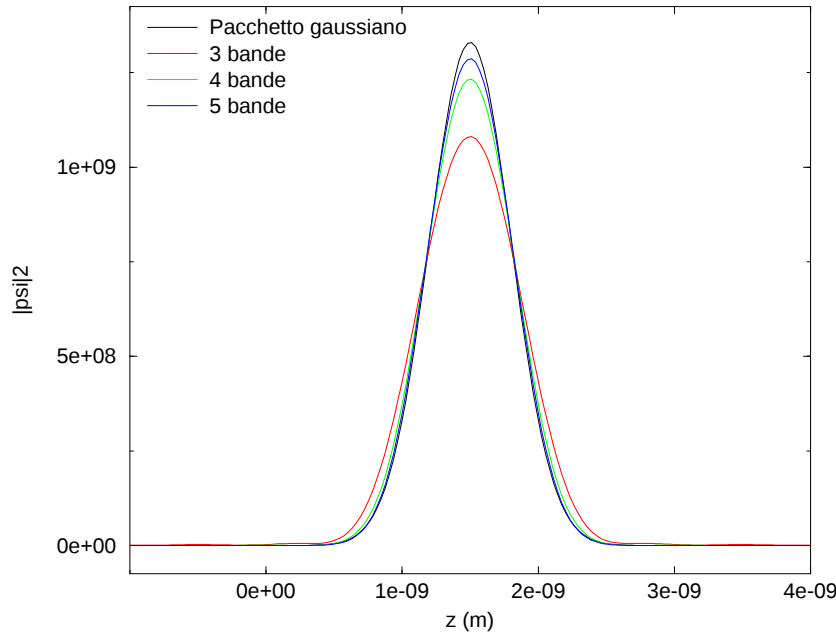


Figura 1.6: *Convergenza dello sviluppo in funzione del numero di minibande usate come base*

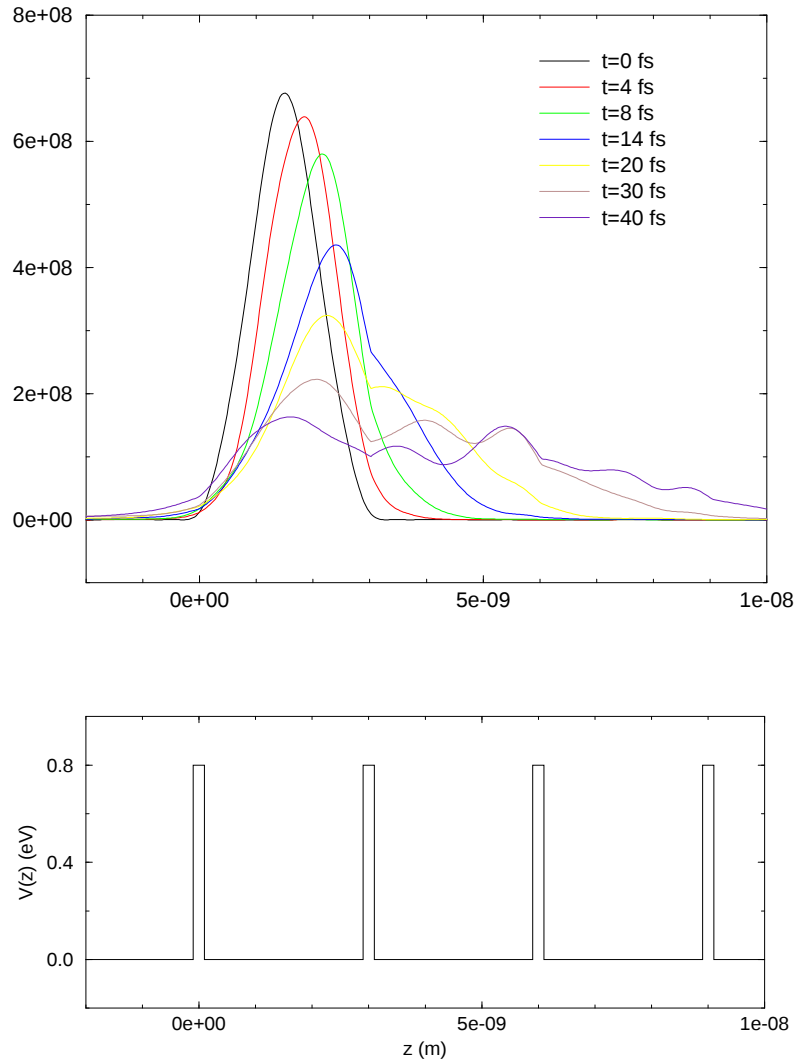


Figura 1.7: *Evoluzione temporale di un pacchetto gaussiano nel potenziale di Krönig-Penney. Il grafico in alto riporta il modulo quadro della funzione d'onda lungo la direzione spaziale z ; nel grafico in basso è rappresentato il potenziale utilizzato per la simulazione. Si noti che le discontinuità nella derivata della funzione corrispondono alla presenza della interfaccie*

Il primo problema che si presenta nell'implementazione del codice è dato dal numero finito di oggetti che posso inserire nella somma (1.42), sia per il fatto che numericamente bisogna discretizzare l'asse k , sia perché bisogna troncare la somma a un numero finito di minibande n . Nel primo caso la discretizzazione non porta molti problemi, essendo infatti le minibande quasi piatte, le autofunzioni a valori di k vicini sulla mesh differiscono di poco, per cui la differenza tra il pacchetto iniziale e il suo sviluppo è sensibilmente piccola³. Maggiori problemi invece nascono dal dover troncare la somma su n , infatti è evidente che aggiungendo termini di ordini superiori, le autofunzioni hanno un maggior numero di nodi per cui si raggiunge meglio la convergenza della serie al pacchetto scelto (fig. 1.6). Nelle simulazioni ho sviluppato il pacchetto su 5 bande.

Dalle simulazioni si nota che è notevole l'allargamento del pacchetto col passare del tempo. La causa di ciò è che all'istante $t = 0$ si è considerato un pacchetto molto concentrato, per cui è presente un largo numero di componenti che tendono a disperdere il pacchetto agli istanti successivi.

³Le autofunzioni (1.36) sono continue rispetto alla $E(k)$; se la banda è molto stretta per punti k vicini l'energia sarà quasi uguale e anche la variazione della funzione sarà limitata.

Capitolo 2

Le minibande in Si/SiO₂

In questo capitolo verrà trattata l'approssimazione usata per calcolare le bande in un forma analitica tale da poter essere usata nel codice Monte Carlo. Descriverò quindi i risultati ottenuti numericamente per le minibande del Si/SiO₂.

2.1 Il metodo Tight-Binding

Il metodo Tight-Binding [8] è utilizzato per calcolare la struttura elettronica dei solidi omogenei ma può essere applicato con successo anche ai superreticoli [9] considerando le buche di potenziale allo stesso modo degli atomi. Questo può essere fatto in virtù della separazione del problema strutturale da quello atomico discusso nel capitolo precedente, che ci consente di avere una hamiltoniana del tutto simile a quella cristallina (1.27). Oltretutto il metodo è semplice e fornisce le minibande in forma approssimata, ma analitica, quindi di più facile utilizzo nei programmi di calcolo. Considero per semplicità il caso unidimensionale.

Supponiamo note le autofunzioni $\chi_j(z - nd)$ (z è la direzione di crescita del superreticolo, nd è la posizione della buca n -esima e j è l'indice

dell'autovalore) soluzioni del problema della singola buca

$$\left[\hat{T} + \hat{V}(z - nd)\right] \chi_j(z - nd) = \epsilon_j \chi_j(z - nd) . \quad (2.1)$$

Abbiamo già visto (par. 1.2) che la periodicità del superreticolo impone che la funzione d'onda soddisfi una proprietà analoga al teorema di Bloch:

$$\Psi(z + nd) = C_n \Psi(z) = e^{ik_z d} \Psi(z) , \quad (2.2)$$

Come le bande di un cristallo nascono dai singoli atomi, così si può pensare che per N buche isolate esistano N autovalori degeneri j e che, avvicinando le buche, si perda la degenerazione: in questo modo il singolo livello di buca isolata dà origine a una banda con N livelli vicini e se $N \rightarrow \infty$ tale banda è continua. Con queste premesse è ragionevole costruire la funzione d'onda del superreticolo con una combinazione lineare delle funzioni d'onda di buca singola. In questo modo la minibanda j -esima che nasce dall'autofunzione j può essere scritta come

$$\Psi_{j,k_z}(z) = \sum_n e^{ik_z nd} \chi_j(z - nd) . \quad (2.3)$$

È banale mostrare che questa combinazione soddisfa la condizione di Bloch (2.2). Per comodità di scrittura passerò alla notazione di Dirac nel modo seguente $\Psi_{j,k_z}(z) = |\Psi\rangle$, $\chi_j(z - nd) = |z - nd\rangle$. Conviene poi scrivere il potenziale come somma dei potenziali di buca singola

$$\hat{V}_{SR}(z) = \hat{V}(z - nd) + \sum_{l \neq n} \left[\hat{V}(z - ld) - V_0 \right] \quad (2.4)$$

dove ho estratto dalla somma la componente derivante dalla buca con $l = n$ e V_0 è la profondità di ogni singola buca.

Posso procedere moltiplicando l'equazione di Schrödinger

$$\hat{T}|\Psi\rangle + \hat{V}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.5)$$

per $\langle z - md |$, operazione che mi consente di ottenere l'equazione in forma matriciale

$$\begin{aligned} & \sum_n e^{ik_z nd} \langle z - md | [\hat{T} + \hat{V}(z - nd)] | z - nd \rangle + \\ & + \sum_n \sum_{l \neq n} e^{ik_z nd} \langle z - md | \hat{V}(z - ld) | z - nd \rangle = \\ & = E_j(k_z) \sum_n e^{ik_z nd} \langle z - md | z - nd \rangle . \end{aligned} \quad (2.6)$$

Si riconosce facilmente nel primo addendo l'Hamiltoniana di singola buca (eq. 2.1) che permette di trasformare l'equazione in

$$\begin{aligned} & \sum_n \sum_{l \neq n} e^{ik_z nd} \langle z - md | \hat{V}(z - ld) | z - nd \rangle = \\ & = [E_j(k_z) - \epsilon_j] \sum_n e^{ik_z nd} \langle z - md | z - nd \rangle . \end{aligned} \quad (2.7)$$

A questo punto posso introdurre l'*approssimazione a primi vicini* [8], che consiste nel considerare significativa solamente l'interazione tra primi vicini. Questa ipotesi vale ragionevolmente nel caso di funzioni d'onda di singola buca molto localizzate, cioè quando l'integrale di overlap coi secondi vicini è quasi nullo. Inoltre, poichè il potenziale è invariante per traslazioni di vettore md , allora anche il termine (2.7) presenta la stessa invarianza (l'indice n viene saturato dalla sommatoria); posso quindi scegliere, per comodità, $m = 0$. Dunque dalle somme nell'equazione precedente vengono eliminati tutti i termini per cui i coefficienti l e n sono diversi da ± 1 . Per i rimanenti termini si deduce, sfruttando la simmetria del sistema, che

$$\langle z | z - d \rangle = \langle z | z + d \rangle \quad (2.8)$$

$$\langle z | \hat{V}(z - d) | z \rangle = \langle z | \hat{V}(z + d) | z \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle z | \hat{V}(z) | z - d \rangle = \langle z | \hat{V}(z) | z + d \rangle . \quad (2.10)$$

Rinomino questi tre termini rispettivamente r_j (integrale di sovrapposizione), s_j (integrale di spostamento), t_j (integrale di trasferimento). Ora è possibile

ricavare la banda approssimata dall'equazione (2.7)

$$E_j(k_z) = \epsilon_j - \frac{s_j + 2t_j \cos(k_z d)}{1 + 2r_j \cos(k_z d)} \quad (2.11)$$

e poiché r_j risulta trascurabile, l'espressione finale per la dispersione diventa:

$$E_j(k_z) = \epsilon_j - s_j - 2t_j \cos(k_z d) . \quad (2.12)$$

2.2 Le minibande

Ora ci sono tutti gli elementi per dare alle minibande una forma analitica semplice applicando in successione tutte le tecniche fino ad ora descritte. Innanzitutto considero un intorno dei punti k_0 di minimo della banda di conduzione del materiale che nel superreticolo presenta il gap minore¹ per poter applicare efficacemente l'approssimazione della funzione involuppo con banda parabolica, dunque posso riscrivere l'equazione (1.33) come segue

$$\widehat{H} = \widehat{\mathbf{p}}_i \frac{1}{2m_{i,j}^*} \widehat{\mathbf{p}}_j + \widehat{V}(z) \quad (2.13)$$

si noti che ho posto arbitrariamente $E_n(\mathbf{k}_0) = 0$ della eq.(1.28) per fissare lo zero dell'energia sul fondo della buca.

Poiché il potenziale strutturale è funzione solo della direzione z posso separare l'equazione di Schrödinger nelle 3 direzioni spaziali col risultato di avere l'equazione di particella libera lungo le direzioni x e y , mentre compare una equazione con il potenziale di Krönig-Penney per la direzione z . Dunque le soluzioni saranno del tipo (1.26) [3]

$$\Psi_{j,k_z}(\mathbf{r}) = \mathcal{F}_{j,k_z}(z) e^{-i(k_x x + k_y y)} u_{j,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) , \quad (2.14)$$

$$E_j(\mathbf{k}) = E_j(k_z) + \frac{\hbar^2}{2m_x} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} k_y^2 \quad (2.15)$$

¹GaAs in GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As e Si in Si/SiO₂

dove la funzione inviluppo $\mathcal{F}_{j,k_z}(z)$ e l'energia $E_j(k_z)$ sono le soluzioni del potenziale di Krönig-Penney.

Per quanto riguarda la soluzione del problema lungo la direzione z abbiamo ritenuto che il metodo migliore fosse riscrivere l'equazione (2.12) nella forma [10]

$$E_j(k_z) = \tilde{\epsilon}_j - \tilde{t}_j \cos(k_z d) ; \quad (2.16)$$

per poterla meglio adattare alla minibanda calcolata con il metodo di Krönig-Penney: in questa notazione $\tilde{\epsilon}_j = \epsilon_j - s_j$ è il valore centrale della minibanda j -esima, e $\tilde{t}_j = t_j$ è la sua semiampiezza. Dunque la legge di dispersione scritta per esteso diventa:

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_x} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} k_y^2 + [\tilde{\epsilon}_j - \tilde{t}_j \cos(k_z d)] \quad (2.17)$$

dove le masse m_x e m_y sono le masse efficaci relative all'ellissoide di minimo per il calcolo di volume, rispettivamente nelle direzioni² x e y .

È interessante notare che la formula precedente include il refolding delle bande dovuto alla bassa dimensionalità della struttura: da un singolo punto di minimo della banda originaria (ad esempio quella del Si in Si/SiO₂) si generano lungo la direzione k_z , più minibande (denotate dall'indice j) separate da un intervallo di energia non permessa.

2.3 Valli e molteplicità

Si può testare il metodo descritto con una semplice applicazione per il sistema GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As; il GaAs infatti ha il minimo in Γ con simmetria sferica quindi il tensore di massa efficace è uno scalare. I valori delle masse efficaci per i 2 materiali e del band offset³ sono tabulati [10]

²Questo vale se le direzioni scelte sono di alta simmetria, ipotesi che introdurrò nel prossimo paragrafo.

³Solitamente si indica l'offset della banda di conduzione con CBO

GaAs	$m^* = 0.067m_{el}$
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$m^* = (0.067 + 0.083x)m_{el}$
CBO	$E_c = 0.8x \text{ eV}$

Ho quindi calcolato le prime 2 minibande applicando il metodo di Krönig-Penney al sistema con le condizioni di continuità (1.31): i risultati ottenuti (fig. 2.2) sono in perfetto accordo con quelle riportati in letteratura (fig. 2.1) [11]. Il sistema utilizzato per il calcolo presenta una larghezza di buca di 65 Å e una barriera di 25 Å.

Considero ora il calcolo completo per il superreticolo di interesse per questo lavoro: Si/SiO₂ con buche di 25 Å e barriere di 5 Å. Un primo problema che sorge è dovuto al fatto che il silicio ha 6 valli equivalenti, disposte lungo le direzioni di simmetria (100), distanti $0.8\frac{a}{2}$ dal punto Γ e non hanno neppure simmetria sferica. È quindi necessario calcolare le minibande che si originano da ognuna delle 6 valli. In questa tesi studierò il sistema Si(001)/SiO₂: gli assi principali degli ellissoidi di minimo sono orientati in direzione parallela

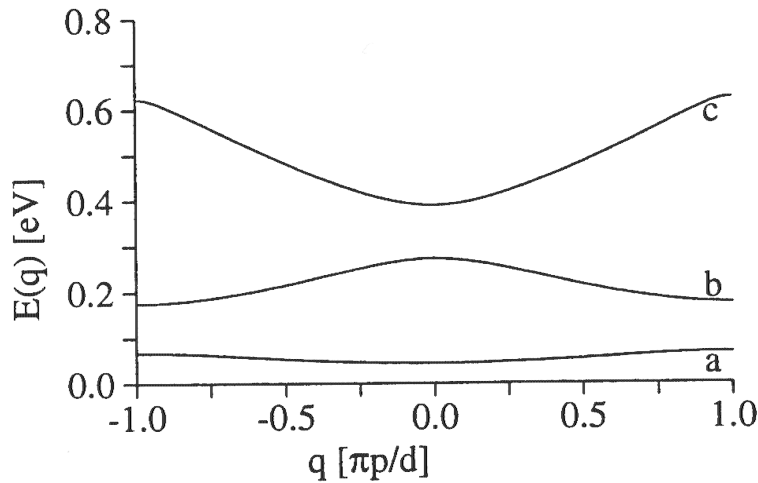


Figura 2.1: *Minibande del GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As in [11]*

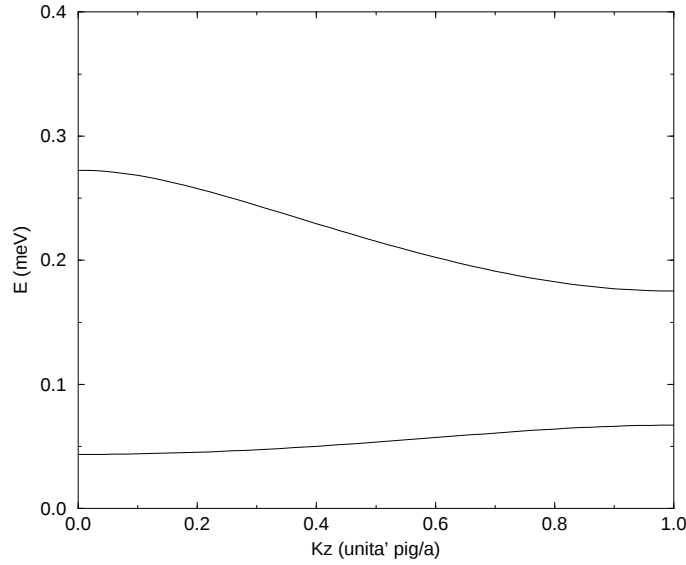


Figura 2.2: Prime 2 minibande calcolate per il sistema GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As. Il grafico riportato corrisponde alle prime 2 minibande della figura precedente, da confrontarsi nella regione $[0, \frac{\pi}{a}]$

e ortogonale alla direzione z di crescita del superreticolo, il che consente di avere il tensore di massa efficace in forma diagonale.

Per proseguire occorre utilizzare la legge di dispersione (2.17) applicandola ad ognuna delle 6 valli del silicio di volume. Le 4 valli nel piano $k_x k_y$ rimarranno in posizione invariata rispetto al Si di volume, pur modificando la legge di dispersione, mentre entrambe le valli nella direzione k_z verranno ripiegate nel punto Γ dando così origine a una minibanda doppiamente degenera. Per ogni minibanda dunque vale la (2.17), riscritta nel modo seguente:

$$E_j^\alpha(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_x^\alpha} (k_x - k_{0,x}^\alpha)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^\alpha} (k_y - k_{0,y}^\alpha)^2 + [\tilde{\epsilon}_j^\alpha - \tilde{t}_j^\alpha \cos(k_z d)] \quad (2.18)$$

dove il vettore $\mathbf{k}_0^\alpha$ è la coordinata del punto di minimo della valle α -esima del silicio.

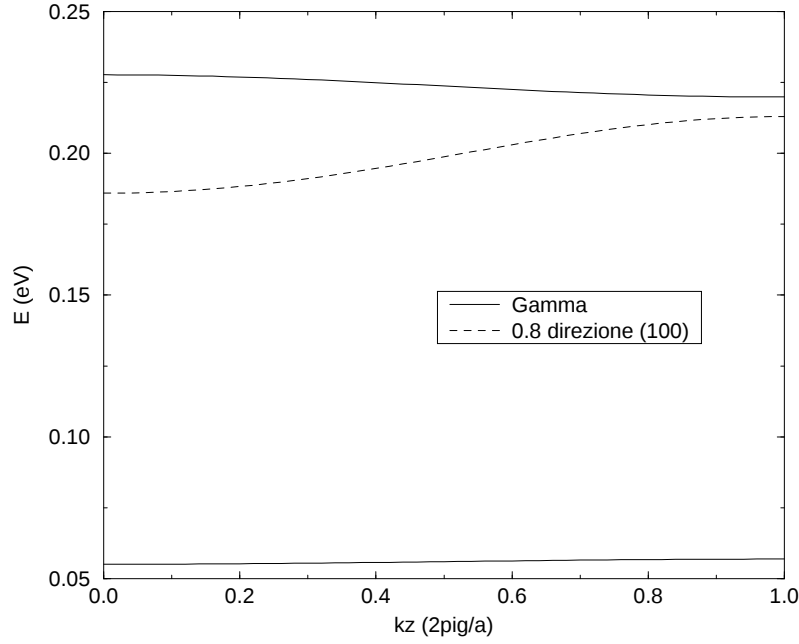


Figura 2.3: Minibande calcolate per il sistema Si/SiO₂. La linea tratteggiata è la minibanda alla distanza $0.8G$ lungo la direzione (100)

I dati che ho utilizzato per il calcolo della minibanda di Si/SiO₂ sono i seguenti:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Si} & m_{\perp}^* = 0.19m_{el} \\
 & m_{\parallel}^* = 0.97m_{el} \\
 \text{SiO}_2 & m^* = 0.3m_{el} \\
 \text{CBO} & E_c = 3.2 \text{ eV}
 \end{array}$$

Se i dati numerici relativi alle proprietà del Silicio sono facilmente reperibili [12], non è stato altrettanto semplice trovare in letteratura i valori della massa efficace per l'ossido di silicio. Il problema nasce dal fatto che nella regione di energia di interesse non è possibile definire per l'ossido la massa efficace in modo “tradizionale” come l'inverso della curvatura della banda:

l'elettrone infatti “attraversa” lo strato di ossido non viaggiando in banda di conduzione, ma per tunnelling. Si pone quindi il problema dello studio degli stati evanescenti nello strato di ossido. Esistono però esperimenti che, basandosi sulle previsioni teoriche per la corrente di tunnelling [13] in funzione della massa dell'elettrone, adattano i dati sperimentali alla teoria utilizzando la massa come parametro. Il valore che meglio riproduce le previsioni viene chiamato *Tunnelling effective mass* m^* per il SiO_2 . In questo modo il valore m^* include tutte le interazioni che, non trattate dalla teoria, possono intervenire durante l'attraversamento della barriera. La letteratura fornisce valori concordanti: $m^* = (0.29 \pm 0.02)m_{el}$ [14], $m^* = (0.30 \pm 0.02)m_{el}$ [15], quindi i calcoli successivi utilizzano $m^* = 0.30m_{el}$.

Infine il CBO all'interfaccia Si/SiO_2 è noto [6].

Riassumendo: la struttura del sistema presenta le minibande in Γ doppiamente degeneri, e 4 minibande lungo le direzioni (100) non degeneri. Le figura (2.3) riporta la struttura a bande calcolata: per semplicità ho rappresentato solo la direzione k_z poiché nelle altre direzioni la banda è parabolica.

2.4 Densità degli stati

In questo paragrafo calcolerò la densità degli stati [9] per il sistema Si/SiO_2 . L'espressione da valutare è:

$$\text{DOS}(E) = 2 \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \delta [E - \epsilon_{\alpha}(\mathbf{k})] \quad (2.19)$$

incluso il fattore 2 per la degenerazione di spin; ora α è l'indice di minibanda. L'equazione precedente può essere trasformata in un integrale

$$\text{DOS}(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int \delta [E - \epsilon_{\alpha}(\mathbf{k})] d\mathbf{k} \quad (2.20)$$

a cui sostituisco la relazione di dispersione (2.18)

$$= \frac{V}{4\pi^3} \sum_{\alpha} \int \delta \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_x^{\alpha}} (k_x - k_{0,x}^{\alpha})^2 - \frac{\hbar^2}{2m_y^{\alpha}} (k_y - k_{0,y}^{\alpha})^2 - \epsilon^{\alpha} + t^{\alpha} \cos(k_z d) \right] d\mathbf{k} \quad (2.21)$$

È necessario ora applicare la trasformazione in coordinate cilindriche

$$T : \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{m_x^{\alpha}}} (k_x - k_{0,x}^{\alpha}) &= \frac{1}{\sqrt{m_0}} k_{\parallel} \cos \vartheta \\ \frac{1}{\sqrt{m_y^{\alpha}}} (k_y - k_{0,y}^{\alpha}) &= \frac{1}{\sqrt{m_0}} k_{\parallel} \sin \vartheta \\ k_z^{\alpha} &= k_{\perp} \end{cases} \quad (2.22)$$

Ora la DOS è riscrivibile in modo da essere facilmente integrabile. Per comodità considero per ora una sola minibanda α :

$$\begin{aligned} \text{DOS}_{\alpha}(E) &= \\ &= \frac{V}{4\pi^3} \frac{\sqrt{m_x^{\alpha} m_y^{\alpha}}}{m_0} \int d\vartheta \int dk_{\perp} \int \delta \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{\parallel}^2 - \epsilon^{\alpha} + t^{\alpha} \cos(k_z d) \right] k_{\parallel} dk_{\parallel} \\ &= \frac{V \sqrt{m_x^{\alpha} m_y^{\alpha}}}{2\pi^2 \hbar^2} \int dk_{\perp} \int \delta \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{\parallel}^2 - \epsilon^{\alpha} + t^{\alpha} \cos(k_z d) \right] d \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \\ &= \frac{V \sqrt{m_x^{\alpha} m_y^{\alpha}}}{2\pi^2 \hbar^2} \int dk_{\perp} \int_0^{\infty} \delta [E - Y - \epsilon^{\alpha} + t^{\alpha} \cos(k_z d)] dY . \end{aligned} \quad (2.23)$$

Eseguo l'integrazione della δ nella variabile $Y = \frac{\hbar^2}{2m_0}$ e ottengo

$$\text{DOS}_{\alpha}(E) = \frac{V \sqrt{m_x^{\alpha} m_y^{\alpha}}}{2\pi^2 \hbar^2} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} \Theta [E - \epsilon^{\alpha} + t^{\alpha} \cos(k_z d)] dk_{\perp} \quad (2.24)$$

La funzione gradino Θ nasce dal fatto che la δ dell'integrale (2.23) è nulla in tutti i punti Y esclusi quelli in cui il suo argomento si azzerava. Se tale condizione si verifica per un punto Y fuori dal dominio di integrazione, allora l'integrale risulta nullo, in caso contrario l'integrale risulta 1. Il dominio di integrazione per k_z è la dimensione della minizona lungo la direzione z .

Per risolvere l'ultima integrazione sono necessarie alcune considerazioni sull'argomento della funzione integranda. Se l'energia è inferiore al fondo di minibanda ($E < \epsilon^{\alpha} - |t^{\alpha}|$) allora non esistono zeri per l'argomento; se invece

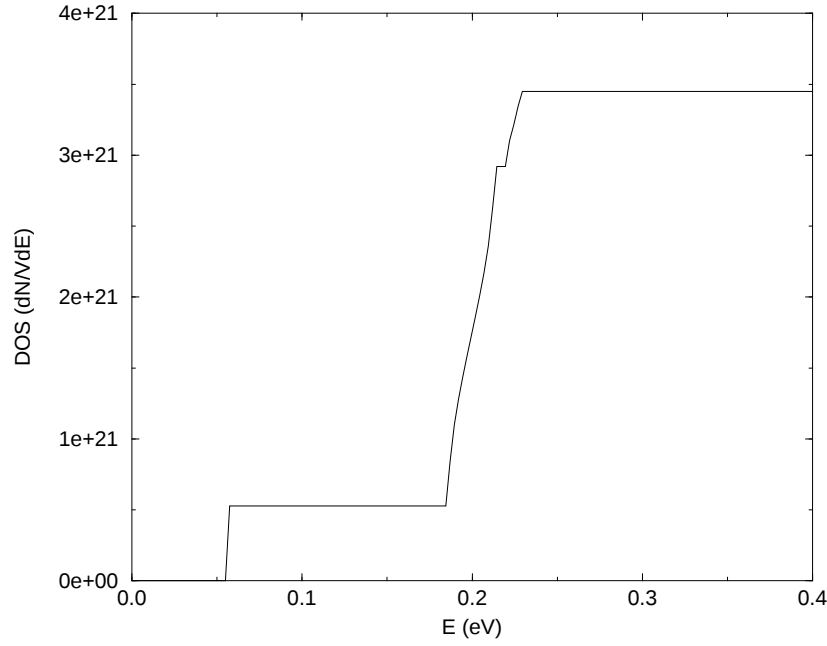


Figura 2.4: *DOS della prime 3 minibande in Si/SiO₂.*

l'energia è compresa tra il minimo e il massimo della minibanda lungo k_z ($E \in [\epsilon^\alpha - |t^\alpha|, \epsilon^\alpha + |t^\alpha|]$), allora esistono 2 soluzioni e l'integrazione dà come risultato la lunghezza dell'intervallo tra le 2 soluzioni. Infine per energie superiori al valore della minibanda in $k_z = \pm \frac{\pi}{d}$ il contributo alla DOS è uguale al numero totale di stati della minibanda. Con queste considerazioni posso ultimare il calcolo e ottenere:

$$\text{DOS}_\alpha(E) = \frac{V \sqrt{m_x^\alpha m_y^\alpha}}{\pi^2 \hbar^2} \begin{cases} 0 & , E < \epsilon^\alpha - |t^\alpha| \\ \frac{1}{d} \arccos\left(\frac{E - \epsilon^\alpha}{|t^\alpha|}\right) & , E \in [\epsilon^\alpha - |t^\alpha|, \epsilon^\alpha + |t^\alpha|] \\ \frac{\pi}{d} & , E > \epsilon^\alpha + |t^\alpha| \end{cases} \quad (2.25)$$

Infine sommando sulle minibande α e tenendo conto della molteplicità n^α si

trova la densità degli stati totale:

$$\text{DOS}(E) = \sum_{\alpha} n^{\alpha} \text{DOS}_{\alpha}(E) . \quad (2.26)$$

Il risultato è mostrato in figura (2.25), in esso si nota l'andamento a gradini tipico dei superreticoli.

2.5 Energia termica nelle minibande

Rispetto ai materiali omogenei il superreticolo presenta una legge di dispersione sensibilmente diversa, inoltre non è possibile definire un regime di trasporto in approssimazione parabolica. Una inevitabile conseguenza di quanto detto si manifesta nell'energia cinetica media degli elettroni. Nel caso di elettroni liberi, secondo il teorema di equipartizione dell'energia [16], l'energia termica è $\frac{1}{2}KT$ per ogni grado di libertà della particella; per elettroni in un solido che si muovono nella zona parabolica della banda, vale lo stesso teorema, infatti gli elettroni possono essere considerati liberi, anche se “appesantiti” da una massa efficace m^* . Dunque per gli elettroni in un solido cristallino l'energia cinetica media è $\bar{T} = \frac{3}{2}KT$.

Nel superreticolo che sto studiando, la minibanda è parabolica lungo 2 direzioni, se ne deduce che lungo ciascuno dei 2 gradi di libertà x e y si avrà un contributo all'energia cinetica media di $\frac{1}{2}KT$, lungo la direzione z invece essa dovrà essere compresa tra 0, nel caso di sistema bidimensionale con banda piatta lungo z , e $\frac{1}{2}KT$, nel caso di banda completamente parabolica tipica del bulk.

Il calcolo dell'energia termica si può sviluppare partendo dalla definizione della termodinamica

$$\bar{T} = \frac{\int e^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})} \epsilon(\mathbf{p}) d\mathbf{p}}{\int e^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})} d\mathbf{p}} \quad (2.27)$$

che si riscrive facilmente come

$$\bar{T} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})} d\mathbf{p} \quad (2.28)$$

con $\beta = \frac{1}{kT}$. Possiamo riscrivere la minibanda (2.17) in modo sintetico

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^3 \epsilon_i(p_i) \quad (2.29)$$

dove l'indice i rappresenta le direzioni spaziali x, y e z . Trascurando alcuni passaggi, si ottiene

$$\bar{T} = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \epsilon_i(p_i)} dp_i \quad (2.30)$$

che, per quanto detto precedentemente e per la forma della minibanda (per evitare confusione scriverò $t_\beta = \Delta$), diventa

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{1}{\beta} - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int e^{-\beta \Delta [1 - \cos(\frac{p_z}{\hbar} d)]} dp_z \\ &= \frac{1}{\beta} - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln [e^{-\beta \Delta} I(\beta, \Delta)] \\ &= \frac{1}{\beta} + \Delta - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln I(\beta, \Delta) , \end{aligned} \quad (2.31)$$

dove ho posto

$$I(\beta, \Delta) = \int_{-\frac{\pi \hbar}{d}}^{\frac{\pi \hbar}{d}} e^{\beta \Delta \cos(\frac{p_z}{\hbar} d)} dp_z . \quad (2.32)$$

Gli estremi di integrazione che non ho scritto per brevità sono gli estremi della zona di Brillouin lungo la direzione z : intendo in questo modo integrare solamente la prima minibanda nella prima zona.

Per calcolare l'integrale (2.32) è conveniente applicare la sostituzione di coordinate $\frac{\pi \hbar}{d} = \xi$. Si nota anche che la funzione integranda è pari: posso riscrivere l'integrale nel modo seguente

$$I(\beta, \Delta) = 2 \frac{\hbar}{d} \int_0^\pi e^{\beta \Delta \cos \xi} d\xi . \quad (2.33)$$

Con la successiva trasformazione di coordinate $c = -\cos(\xi)$ si riconduce l'integrale a una forma analitica nota [26] che ci consente di scrivere direttamente la soluzione

$$\begin{aligned} I(\beta, \Delta) &= 2 \frac{\hbar}{d} \int_{-1}^1 (1 - c^2)^{-\frac{1}{2}} e^{\beta \Delta c} dc \\ &= 2 \frac{\hbar}{d} \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \mathcal{I}_0(\beta \Delta) , \end{aligned} \quad (2.34)$$

dove compaiono la funzione fattoriale Γ e la funzione di Bessel per argomento complesso $\mathcal{I}_0(\beta\Delta)$. Sostituendo questo risultato nella (2.31) si ottiene l'espressione per l'energia cinetica media:

$$\bar{T}(\beta, \Delta) = \frac{1}{\beta} + \Delta - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{I}_0(\beta\Delta) ; \quad (2.35)$$

per avere la forma analitica in funzione della temperatura basta applicare la sostituzione $\beta = \frac{1}{KT}$:

$$\bar{T}(T, \Delta) = KT + \Delta - \left[\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{I}_0(\beta\Delta) \right]_{\beta = \frac{1}{KT}} . \quad (2.36)$$

Il superreticolo è un sistema fisico intermedio tra i sistemi bidimensionali (le buche quantiche) e i bulk, completamente tridimensionali. Dunque è ragionevole aspettarsi che nel limite bidimensionale, con minibanda piatta, l'energia cinetica media sia $\bar{T} = KT$, e che nel limite di banda con ampiezza infinita $\bar{T} = \frac{3}{2}KT$. Questo significa che l'energia cinetica media calcolata solamente per il grado di libertà traslazionale z (gli ultimi 2 termini della (2.36)) deve essere compresa tra 0 e $\bar{T} = \frac{1}{2}KT$. Infatti, per $\Delta \rightarrow 0$, si annulla l'esponente nella prima delle equazioni (2.31) quindi $\bar{T} = KT$; per $\Delta \rightarrow \infty$, lo stesso esponente tende a $-\infty$, esso può tendere a un valore finito solo se $\left[1 - \cos\left(\frac{p_z d}{\hbar}\right)\right] \rightarrow 0$: in questo caso si può dunque sviluppare in serie il coseno e ottenere $1 - \cos\left(\frac{p_z d}{\hbar}\right) \simeq \cos^2 p_z^2$. In quest'ultimo caso la banda, poiché è molto ampia, è occupata solo nella zona parabolica, si ritorna quindi al caso tridimensionale.

La figura (2.5) riporta la componente dipendente da z dell'energia cinetica media, in funzione della temperatura e dell'ampiezza di minibanda. In figura (2.6) invece è riportato lo stesso grafico per $T = 77 \text{ K}$ e $T = 300 \text{ K}$ nelle quali si può facilmente notare che per calori molto bassi (o molto alti) dell'ampiezza Δ , si raggiungono il caso bidimensionale (e tridimensionale). È interessante notare il massimo nella regione intermedia in cui si verifica $T_z < \frac{1}{2}KT$: gli elettroni popolano il fondo di banda oltre il limite parabolico; aumentando il valore di Δ invece prevale il comportamento parabolico

della minibanda e $\bar{T} \rightarrow \frac{1}{2}KT$. Infine in figura (2.7) è rappresentata l'energia cinetica come somma dei contributi dei tre gradi di libertà.

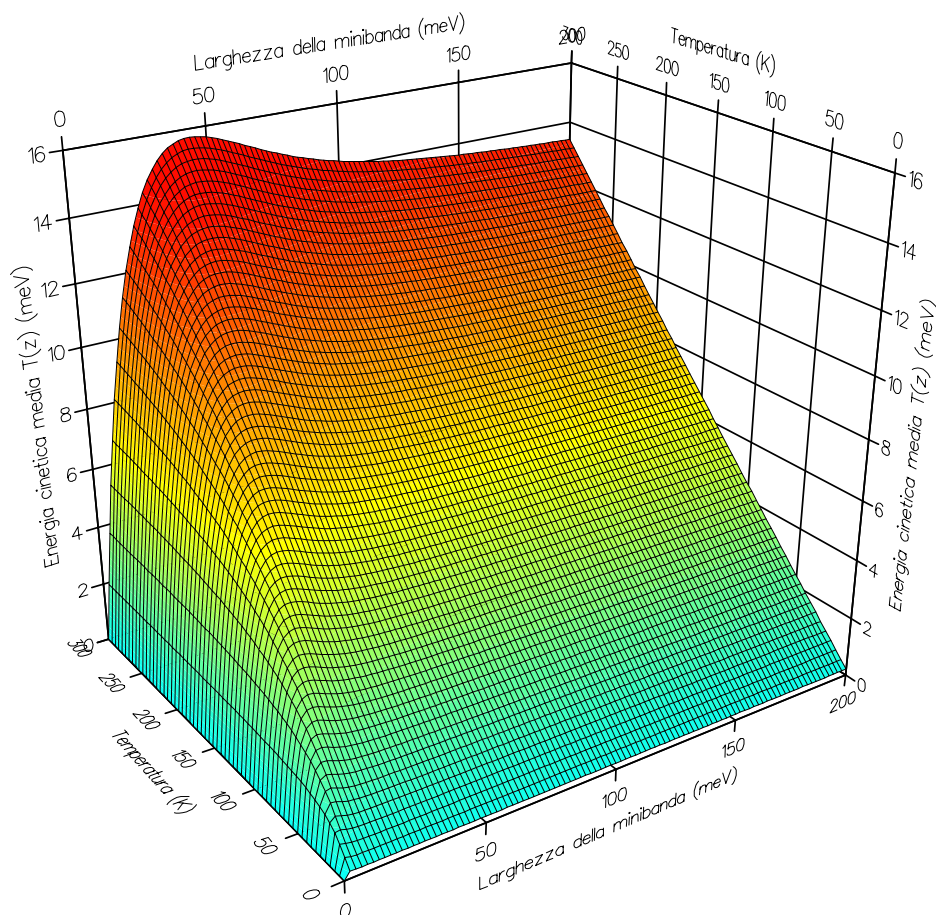


Figura 2.5: *Energia cinetica media per la direzione z di un elettrone in un superreticolo in funzione dell'ampiezza della minibanda e della temperatura.*

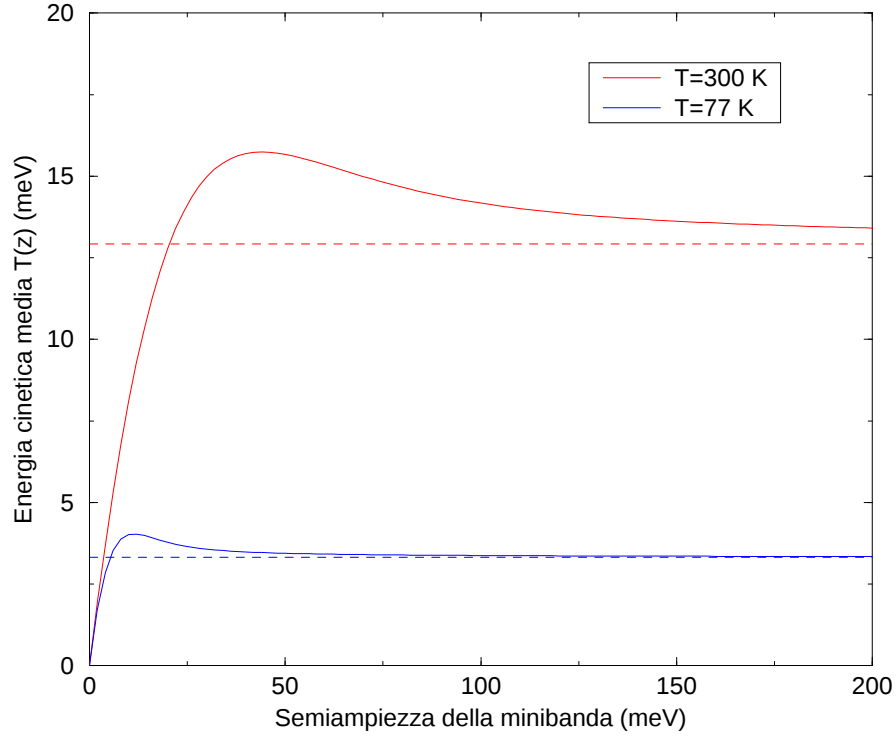


Figura 2.6: *Energia cinetica media per la direzione z per un elettrone in un superreticolo in funzione dell'ampiezza della minibanda a temperatura $T = 77\text{ K}$ e $T = 300\text{ K}$. Si nota il raggiungimento dei limiti bidimensionale e tridimensionale.*

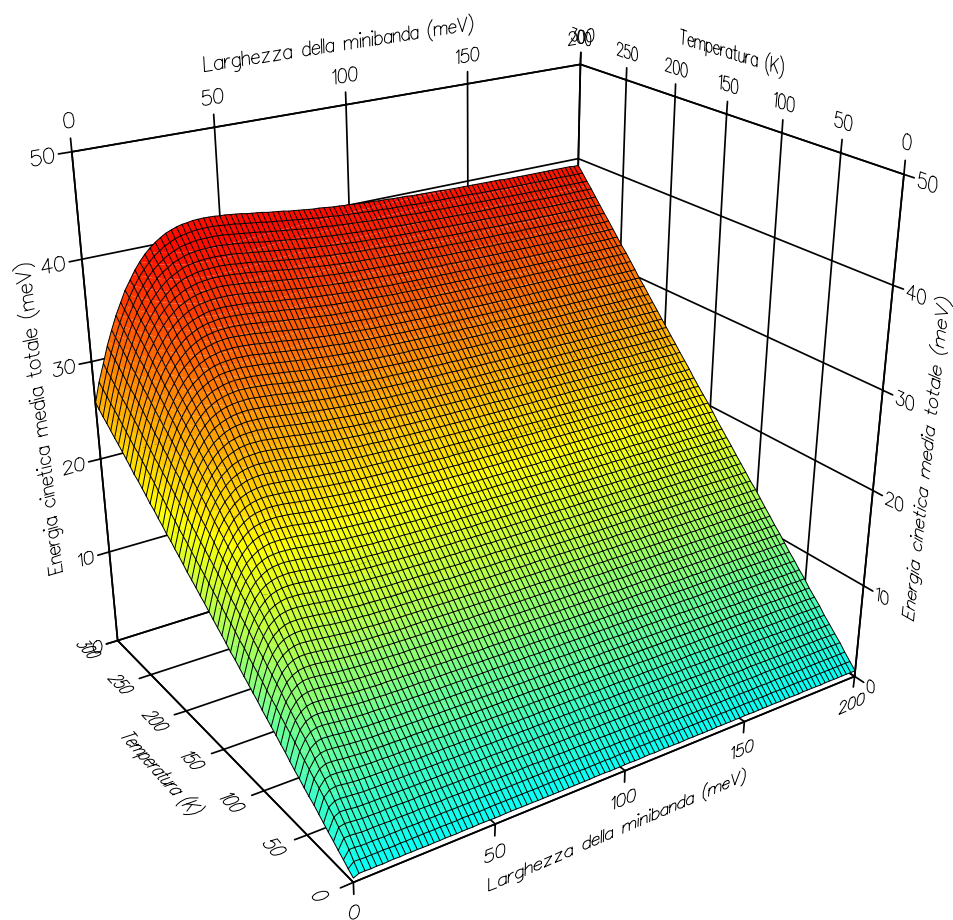


Figura 2.7: *Energia cinetica totale di un per un elettrone in unsuperreticolo in funzione dell'ampiezza della minibanda e della temperatura.*

Capitolo 3

Trasporto semiclassico e metodo Monte Carlo

3.1 L'equazione di Boltzmann

Per analizzare il trasporto elettronico all'interno di un materiale occorre prendere in esame il moto dell'elettrone ¹, sotto l'azione di campi elettrici e magnetici, e la sua interazione con i meccanismi di scattering. La teoria utilizzata in gran parte degli studi di trasporto si basa sull'*approssimazione semiclassica* della dinamica elettronica. Secondo tale approssimazione si suppone che il pacchetto d'onde che descrive il portatore abbia dimensioni spaziali sufficientemente ridotte rispetto alle variazioni dei campi esterni e ai cammini liberi medi; parimenti si suppone che il pacchetto Fourier-trasformato sia di dimensioni ridotte rispetto alla zona di Brillouin. In questo modo l'elettrone è descrivibile con le coordinate $(\mathbf{r}, \mathbf{k}_0)$ come una particella classica. Con tali ipotesi si può giungere a dimostrare, tramite il *teorema della massa efficace* [8], che il centro del pacchetto segue la legge della dinamica semiclassica:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_0}{dt} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_g \wedge \mathbf{B} \right) \quad (3.1)$$

¹L'oggetto di questa tesi è il trasporto degli elettroni in banda di conduzione.

dove $\mathbf{v}_g$ è la velocità di gruppo dell'elettrone e $\mathbf{k}_0$ è il centro del pacchetto nello spazio reciproco. In sostanza tale teorema afferma che la dinamica di un elettrone immerso in campi esterni è assimilabile a quella di una particella classica con impulso $\hbar\mathbf{k}_0$ soggetta alle medesime forze. Nonostante questa relazione sia formalmente uguale alla legge classica $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$, si ricordi che $\hbar\mathbf{k}_0$ è lo pseudomomento dell'elettrone nel reticolo reciproco e che la dispersione $E(\mathbf{k})$ di particella libera viene rimpiazzata dalla struttura a bande del materiale.

Al contrario, i potenziali che descrivono gli agenti di scattering non sono lentamente variabili rispetto alle dimensioni del pacchetto, dunque non possono essere studiati correttamente con l'approccio soprae descritto: è necessario utilizzare una trattazione quantistica. Tuttavia, anche se nel calcolo delle probabilità di transizione si usa il formalismo della meccanica quantistica, nella regola d'oro di Fermi compare la conservazione classica dell'energia quando si esegue l'approssimazione di scattering completato.

Si suppone infine che la densità di portatori sia sufficientemente bassa per poter considerare significativa solo la probabilità di collisione a due corpi e che l'intervallo di tempo tra due urti successivi sia molto maggiore del tempo di collisione, in modo da poter considerare gli urti puntuali nello spazio e nel tempo.

La quantità che riveste il ruolo fondamentale all'interno della pittura semiclassica è la *funzione di distribuzione* $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ definita come proporzionale alla densità dei portatori nello spazio delle fasi a 6 dimensioni $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Generalmente si normalizza la funzione di distribuzione al numero di particelle

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_V d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = N \quad (3.2)$$

con V volume del cristallo e N numero totale di portatori per orientazione di spin. Poiché in assenza di campo magnetico non vengono coinvolte interazioni di spin, non verranno espressamente indicate le variabili di spin. Quando la

funzione di distribuzione viene normalizzata a 1

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \rightarrow \frac{1}{N} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t), \quad (3.3)$$

diviene palese il suo significato fisico: essa rappresenta la probabilità di trovare un dato elettrone al tempo t in un intorno $(d\mathbf{r}, d\mathbf{k})$ dello stato $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$.

L'evoluzione temporale della funzione di distribuzione è governata dall'*equazione di Boltzmann* [16]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.4)$$

dove

- $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ è la velocità di gruppo dei portatori all'interno del materiale,
- $\mathbf{F}$ è la somma delle forze esterne che agiscono sugli elettroni,
- $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ è la variazione temporale della funzione di distribuzione dovuta a processi di collisione.

Nel momento in cui si conosce la funzione di distribuzione in funzione dei campi esterni, della temperatura, dei parametri del materiale, si possono ricavare da essa tutte le grandezze d'interesse per il trasporto, ad esempio la velocità di deriva degli elettroni o la loro energia cinetica media.

Si nota immediatamente che è di fondamentale importanza la conoscenza della struttura a bande $E(\mathbf{k})$ per la soluzione della (3.4) e, come si vedrà nel paragrafo successivo, essa è indispensabile anche per il calcolo del termine di collisione.

3.2 Il termine di collisione

Il termine di collisione a secondo membro della equazione (3.4) è dovuto all'esistenza di interazioni degli elettroni con agenti di scattering. Esso può

essere espresso come la differenza tra il numero dei portatori che entrano in un generico intervallo $d\mathbf{k}$, centrato attorno un punto $\mathbf{k}$, e il numero di portatori che ne escono per effetto delle collisioni per unità di tempo (si assume per semplicità omogeneità spaziale):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' [f(\mathbf{k}')P(\mathbf{k}', \mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k})) - f(\mathbf{k})P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k}'))] \quad (3.5)$$

dove si è indicato con $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ la probabilità di transizione per unità di tempo dallo stato $\mathbf{k}$ allo stato $\mathbf{k}'$. I fattori $(1 - f(\mathbf{k}))$ sono rappresentativi del principio di esclusione di Pauli; nel limite di basse concentrazioni ($f \rightarrow 0$) tali termini sono ininfluenti.

Dal punto di vista semiclassico il problema del trasporto è descritto completamente dalla soluzione esatta della equazione di Boltzmann. Tuttavia, sostituendo alla (3.4) la forma esplicita dell'integrale di collisione si ottiene una equazione integro-differenziale di non facile soluzione: il grado di complessità dell'equazione dipende dal modello fisico utilizzato per la dispersione energetica e per i meccanismi di scattering, e la sua soluzione analitica è tuttora un problema irrisolto anche per semplici modelli fisici. Nel tempo si sono tentate soluzioni analitiche approssimate [17] e sono state proposte varie tecniche varie tecniche numeriche per il problema integro-differenziale [18]. La tecnica che si è affermata come più accurata è il *metodo Monte Carlo* [19] che verrà discusso tra breve.

Le probabilità di transizione, dovute ai meccanismi di scattering, vengono ricavate tramite la *regola d'oro di Fermi*:

$$P(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n', \mathbf{k}' | \widehat{H}' | n, \mathbf{k} \rangle|^2 \delta [E_{n'}(\mathbf{k}') - E_n(\mathbf{k})] , \quad (3.6)$$

in cui $\widehat{H}'$ è l'operatore hamiltoniano della perturbazione che induce la transizione tra gli stati $n, \mathbf{k}$ e $n', \mathbf{k}'$. Per quanto riguarda il calcolo esplicito delle probabilità di transizione si rimanda ai capitoli successivi.

3.3 I meccanismi di scattering

Come già detto, gli elettroni all'interno del materiale vengono accelerati dal campo elettrico e sono soggetti ad eventi di scattering che, interrompendo il moto libero, modificano lo stato degli elettroni. Di seguito compare una discussione dei principali meccanismi di scattering che sono presenti in un materiale bulk. Tale discussione è comunque utile per capire da cosa dipendono le intensità dei diversi meccanismi di scattering, quindi capire quali di essi possono essere introdotti nelle simulazioni, e quali possono essere scartati perché ininfluenti sui risultati finali.

3.3.1 Fononi

I fononi sono i quanti di vibrazione degli atomi del reticolo rispetto alla posizione di equilibrio e sono la più potente forma di interazione nei materiali abbastanza puri, soprattutto ad alte temperature.

A seconda del tipo di vibrazione degli ioni nel reticolo, i fononi possono essere *acustici* oppure *ottici*. Un'altra importante caratteristica si accompagna alle vibrazioni reticolari: se il materiale è polare, l'oscillazione degli ioni provoca una variazione del campo elettrico associato all'onda di polarizzazione prodotta dal moto degli ioni; è proprio questo campo elettrico a causare l'accoppiamento con l'elettrone in moto. Nel caso di fononi acustici questa interazione prende il nome di piezoelettrica, per quelli ottici si parla di accoppiamento polare. Nel caso di materiali non polari invece l'elettrone interagisce solo con la distorsione del reticolo tramite il cosiddetto *potenziale di deformazione*[20]. Solitamente l'interazione con fononi viene descritta con la regola d'oro di Fermi (3.6) utilizzando modelli analitici semplici per le bande. I fononi ottici, sia polari che non, saranno i soli meccanismi di scattering introdotti nelle simulazioni del trasporto elettronico. Le ragioni di tale

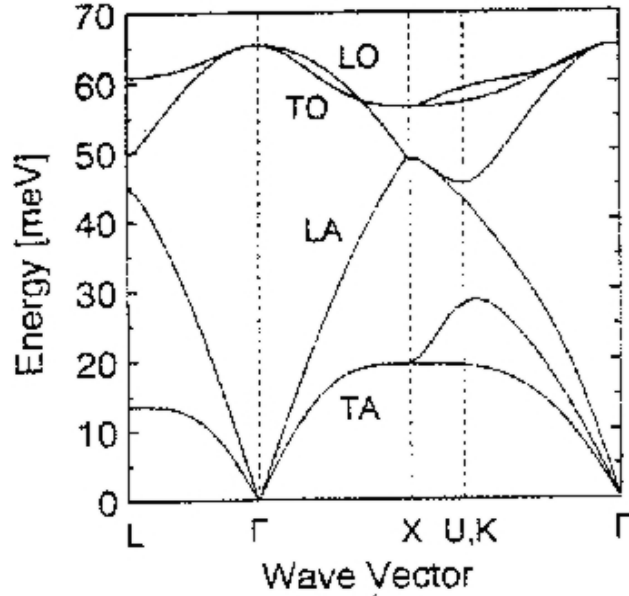


Figura 3.1: *Dispersione fononica del Silicio*

scelta, basate sulle considerazioni che saranno esposte in questo paragrafo, sono descritte in dettaglio nel paragrafo (5.2).

Fononi acustici da potenziale di deformazione. L'interazione da potenziale di deformazione con i fononi acustici viene descritta associando alla deformazione del cristallo l'Hamiltoniana di interazione:

$$\widehat{H}' = \mathcal{E} \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{r}} \quad (3.7)$$

dove $\mathcal{E}$ è il potenziale di deformazione e $\mathbf{y}$ lo spostamento degli ioni dalla sede di equilibrio. Questo tipo di fononi è utile per trasferire piccole quantità di energia, è quindi necessario inserirli per le simulazioni a bassi campi e basse temperature al fine di raggiungere la condizione prossima all'equilibrio.

Fononi ottici da potenziale di deformazione. Anche i fononi ottici non polari vengono descritti tramite il potenziale di deformazione, ma ora si assume che l'Hamiltoniano della perturbazione, al primo ordine di approssimazione, sia direttamente proporzionale allo spostamento [21]

$$\widehat{H}' = \mathcal{E} \mathbf{y} . \quad (3.8)$$

Generalmente la dispersione dei fononi ottici è molto piatta dunque si approssima la loro energia a una costante rispetto a $\mathbf{k}$. Come si vedrà in seguito questo meccanismo di scattering è isotropo.

Fononi ottici polari. I fononi ottici polari sono legati alle vibrazioni dei dipoli elettrici associati alla carica degli ioni. L'interazione polare consente di trasferire valori molto bassi di momento (la probabilità va come $|\mathbf{q}|^{-2}$).

3.3.2 Impurezze

Durante il suo moto l'elettrone può interagire con impurezze neutre, in questo caso l'interazione è a corto raggio, o impurezze ionizzate, e allora l'interazione è coulombiana a lungo raggio. Questo meccanismo è efficace solo se la concentrazione di impurezze è alta ($n \geq 10^{17} \text{cm}^{-3}$), o a basse temperature. Inoltre la collisione è elastica quindi inefficace ai fini della dissipazione dell'energia.

3.3.3 Urti tra elettroni

L'interazione tra elettroni è di complessa descrizione. Di solito viene utilizzata la teoria di Böhm-Pines [22] che consente di separare l'accoppiamento coulombiano a lungo range (interazione elettrone-plasmone) da quello a corto raggio descritto tramite una interazione a 2 corpi. Il rate di scattering però viene a dipendere dalla funzione di distribuzione creando un problema non

lineare che necessita di un calcolo autoconsistente. Inoltre nell'urto tra 2 elettroni si conservano momento ed energia totali, con l'unico effetto di una redistribuzione degli stessi che comporta una variazione della forma della $f(\mathbf{k})$ e di tutte le grandezze che da essa dipendono.

In generale tale interazione viene introdotta solo per densità di carica sufficientemente elevate: $n \geq 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

3.3.4 Rugosità dell'interfaccia

Un importante meccanismo di scattering presente nelle eterostrutture è dovuto alla rugosità delle interfacce. Generalmente si suppone che la superficie di interfaccia possieda un forma analitica del tipo [9]

$$z = z(\boldsymbol{\rho}) , \quad (3.9)$$

dove $\boldsymbol{\rho}$ è la coordinata nel piano parallelo all'interfaccia. Successivamente, con l'aiuto della teoria perturbativa, si può ricavare la probabilità di scattering da interfaccia.

Si dimostra che tale processo è efficiente soprattutto alle basse temperature, quando la popolazione fononica è bassa. Ovviamente quanto più l'interfaccia è rugosa, tanto più lo scattering è efficace. Per gli scopi della nostra ricerca supporremo le interfacce idealmente lisce.

3.4 L'approssimazione a bande paraboliche

Nel presente paragrafo, verrà descritto il calcolo per la probabilità di scattering da fonone ottico non polare, in un materiale bulk con approssimazione parabolica della banda di conduzione. Il calcolo esposto nel seguito, è utile anche per i superreticoli: esso verrà in gran part riutilizzato per il calcolo delle probabilità di scattering in Si/SiO₂. Inoltre è interessante anche il

confronto tra le probabilità di scattering (e il loro calcolo) per il sistema tridimensionale e per il superreticolo. Se si suppone che durante il suo moto l'elettrone occupi solo stati in prossimità del minimo della banda di conduzione, si può introdurre l'approssimazione parabolica per la $\epsilon(\mathbf{k})$; se inoltre in questo range di energia la banda ha simmetria sferica, allora:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} |\mathbf{k}|^2. \quad (3.10)$$

Tale espressione è formalmente identica alla relazione che lega energia e impulso di un elettrone libero con la sostituzione $m_{el} \rightarrow m^*$, e ricordando che $\mathbf{k}_0$ è lo pseudo impulso; questo significa che a basse energie possiamo trattare il moto di un elettrone libero con una massa efficace (par. 1.1) che tiene conto della presenza dei potenziali.

Ora è necessario calcolare le probabilità di scattering all'interno di questa approssimazione. Mostrerò il calcolo per uno scattering da fonone ottico non polare [23]: l'elettrone passa dallo stato $\mathbf{k}$ allo stato $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}$ ², e $\mathbf{q}$ è il momento trasferito dal fonone. Il punto di partenza per la trattazione dello scattering è la regola d'oro di Fermi (3.6), che rappresenta la probabilità di transizione dallo stato $\mathbf{k}$ allo stato $\mathbf{k}'$; se integrata su tutti gli stati finali $\mathbf{k}'$ dà la probabilità di scattering totale relativa a un certo stato iniziale:

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int |M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} \pm \hbar\omega_{\pm(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}) d\mathbf{k}'. \quad (3.11)$$

Passando alla variabile

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{k} \quad (3.12)$$

e applicando la trasformazione in coordinate polari

$$(q_1, q_2, q_3) \rightarrow (q, \phi, \theta) \quad (3.13)$$

²Si ricordi che la legge di conservazione dello pseudoimpulso è $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} + \mathbf{G}$; l'equazione scritta in realtà tiene in considerazione i soli processi "normali" in cui $\mathbf{G} = 0$

si ricava:

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int q^2 |M(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k} \pm \mathbf{q}} \pm \hbar \omega_{\mathbf{q}}) dq \quad (3.14)$$

Fino ad ora il calcolo è generale e può essere applicato anche per ricavare la probabilità di scattering dai superreticolo; tale derivazione verrà effettuata al capitolo quinto. A questo punto inserisco la relazione di dispersione parabolica e contemporaneamente faccio uso delle (3.12,3.13) per esplicitare l'argomento della delta

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k} \pm \mathbf{q}} \pm \hbar \omega_{\mathbf{q}} &= \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} \pm \mathbf{q})^2}{2m^*} \pm \hbar \omega_{\mathbf{q}} \\ &= -\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \mp \frac{\hbar^2}{m^*} kq \cos(\theta) \pm \hbar \omega_{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

Prima di procedere occorre fare attenzione alle integrazioni con la funzione delta: la prima integrazione sull'angolo polare fissa gli estremi q^+ e q^- per la seconda integrazione, in particolare per l'assorbimento del fonone si ha:

$$q^\pm = \sqrt{k^2 \cos^2(\theta) + \frac{2m^* \omega_{\mathbf{q}}}{\hbar}} \pm k \quad (3.16)$$

mentre nel caso di emissione

$$q^\pm = k \pm \sqrt{k^2 \cos^2(\theta) + \frac{2m^* \omega_{\mathbf{q}}}{\hbar}} \quad (3.17)$$

Dopo l'integrazione sugli angoli, nell'ipotesi in cui M non dipenda da questi (vera per lo scattering da ottici non polari) si ottiene l'espressione in cui andrà inserito l'elemento di matrice specifico dell'interazione considerata

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \frac{m^* V}{2\pi \hbar^3 k} \int_{q^-}^{q^+} |M(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 q dq; \quad (3.18)$$

nel caso in esame [23]

$$|M(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 = \frac{\hbar (D_t K)^2}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

Le espressioni sovrapposte si riferiscono rispettivamente ad assorbimento ed emissione; ρ è la densità del materiale; $D_t K$ è la costante di accoppiamento; N_q la popolazione fononica all'equilibrio secondo la distribuzione di Bose-Einstein.

Con l'integrazione della (3.18) si ottiene finalmente³

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \frac{(m^*)^{\frac{3}{2}} (D_t K)^2}{\sqrt{2\rho\hbar^3\omega_0}} \left[\begin{array}{c} N_q \\ N_q + 1 \end{array} \right] \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0} \quad (3.20)$$

Osservando quest'ultima si nota che la probabilità di scattering con fononi ottici non polari dipende solamente dall'energia. Inoltre, a parte la costante moltiplicativa, la forma analitica è molto semplice.

3.5 Il metodo Monte Carlo

Il metodo Monte Carlo è una tecnica numerica che si basa sulla generazione di numeri casuali secondo una data distribuzione di probabilità. Tale metodo non è usato solo in fisica, ma lo si può applicare a una gran varietà di problemi numerici, tutti in genere riconducibili alla valutazione dell'integrale di una funzione nota.

Nel caso fisico in cui si voglia simulare il trasporto, le distribuzioni coinvolte sono quelle dei voli liberi e delle probabilità di scattering, in questo modo siamo in grado di simulare la traiettoria della particella nello spazio delle fasi $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, quando ad essa vengono applicati campi esterni.

Se il fenomeno allo studio è di tipo omogeneo e stazionario, è sufficiente simulare il moto di una sola particella, il cui cammino è seguito per un tempo abbastanza lungo da essere rappresentativo dell'intero gas di elettroni; in altre parole si suppone che essa sia in grado di visitare tutte le regioni

³Come già detto al paragrafo 3.3.1 si approssima la dispersione dei fononi ottici a una costante

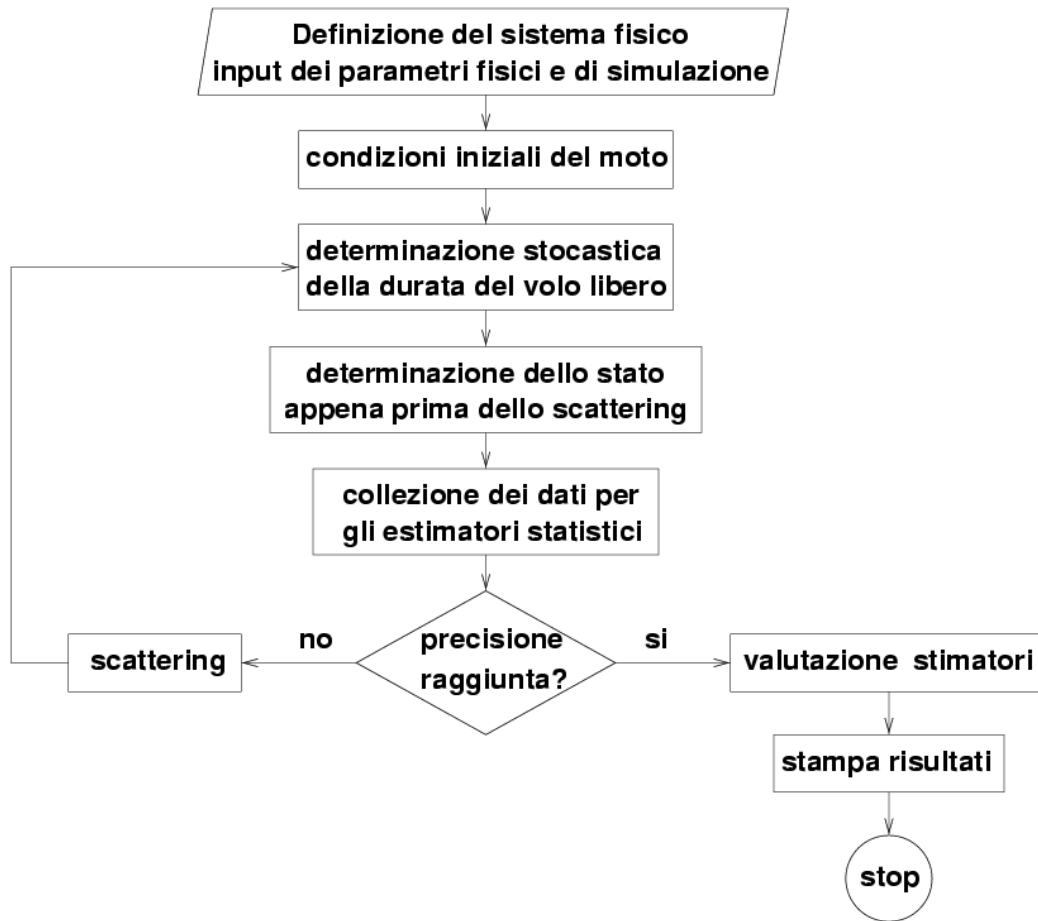


Figura 3.2: *Diagramma di flusso di un programma Monte Carlo a singola particella*

di interesse dello spazio delle fasi. Infatti ipotesi fondamentale per una simulazione Monte Carlo di un fenomeno stazionario con una sola particella del trasporto è l'ipotesi ergodica: si suppone che in condizioni stazionarie la media temporale di un'osservabile per una particella e la media d'insieme a un dato istante coincidano. Esiste un'altra tecnica detta "Ensemble Monte Carlo", utilizzata nei casi in cui i fenomeni di trasporto non siano omogenei o stazionari, che simula l'evoluzione di un gran numero di particelle e calcola

le medie d'insieme per ricavare le quantità fisiche.

Ora descriverò il funzionamento generale di un programma che risolve l'equazione di Boltzmann tramite il metodo Monte Carlo. In figura (3.2) è riportato il diagramma a blocchi di un tipico codice Monte Carlo a singola particella [19]. Per prima cosa bisogna definire il sistema fisico su cui eseguire la simulazione, includendo la struttura a bande, i campi esterni, i processi di scattering e i dati riguardanti il funzionamento della simulazione ⁴.

Il processo fisico è composto dalla ripetizione di un ciclo principale: il **volo libero** e l'**interazione** che interviene a modificare lo stato dell'elettrone. Questo stesso ciclo viene ripetuto nella simulazione finché non vengono ottenuti i risultati di interesse con l'accuratezza desiderata: infatti l'accuratezza dei risultati aumenta con il progredire della simulazione in virtù dell'ipotesi ergodica.

Scelta del tempo di volo

Sotto l'azione di un campo elettrico $\mathbf{E}$ l'elettrone viene accelerato e il suo vettore d'onda obbedirà (nel tempo tra 2 eventi di scattering) all'equazione

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e\mathbf{E} , \quad (3.21)$$

In questa fase del moto non intervengono interazioni di altro tipo, si parla dunque di *volo libero*. Si può verificare che se $P[\mathbf{k}(t)]dt$ è la probabilità che un elettrone nello stato $\mathbf{k}(t)$ subisca un urto al tempo dt , allora la probabilità che un volo libero cominciato a $t = 0$ venga interrotto da uno scattering in un intervallo dt dopo il tempo t è

$$P(t)dt = P[\mathbf{k}(t)]e^{-\int_0^t P[\mathbf{k}(t')]dt'}dt , \quad (3.22)$$

Su tale distribuzione dovrebbe basarsi la generazione dei numeri casuali per riprodurre i voli liberi, ma la complessa forma analitica rende di fatto irrealizzabile tale proposito. Una soluzione elegante ed efficiente del problema

⁴Durata della simulazione, precisione richiesta ai risultati etc...

è stata suggerita de Rees [24, 25] introducendo il *self-scattering*: operativamente si assume una probabilità di scattering costante $\Gamma_0 = \frac{1}{\tau_0} = \max[P(\mathbf{k})]$. Così facendo si considera uno scattering fittizio, appunto il self-scattering la cui distribuzione di probabilità è $P_{ss}(\mathbf{k}) = \Gamma_0 - P(\mathbf{k})$, di conseguenza la probabilità totale è costante ugual a Γ_0 ; in base a quest'ultima viene generato il volo, e, se il meccanismo prescelto è il self-scattering, l'elettrone viene fatto proseguire indisturbato dato che la fine del volo è dovuta alla sovrastima (della probabilità di scattering) da noi introdotta. In questo modo si può riscrivere la (3.22) in modo più semplice [19]

$$P(t)dt = \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{t}{\tau_0}} \quad (3.23)$$

da cui risulta elementare ricavare la durata dei voli liberi [19]

$$t_r = -\tau_0 \ln(r) \quad (3.24)$$

dove r è un numero casuale distribuito uniformemente tra 0 e 1. La fine del volo è il momento della simulazione in cui raccogliere i valori delle grandezze fisiche di interesse su cui effettuare la statistica che darà i risultati della simulazione.

Scelta del meccanismo di scattering

Una volta generato il volo e calcolato il nuovo valore dello pseudo-vettore d'onda si può calcolare l'energia dello stato finale tramite la dispersione scelta per la banda. Quindi occorre determinare l'evento che ha posto fine al volo dell'elettrone: si calcolano le probabilità $P_i(\mathbf{k})$ per ciascuno dei meccanismi di interazione considerati e si estrae un numero casuale r distribuito uniformemente tra 0 e Γ_0 . Tale valore deve essere confrontato con le somme successive dei P_i e verrà selezionato l' n -esimo meccanismo di interazione se

$$\sum_{i=1}^{n-1} P_i < r < \sum_{i=1}^n P_i, \quad (3.25)$$

risulta infatti evidente che la probabilità di una tale scelta è proporzionale a P_i .

Lo stato finale dell'elettrone dopo la collisione viene determinato in base alla sezione d'urto differenziale relativa al meccanismo di scattering selezionato ⁵.

⁵Per maggiori dettagli si consulti il capitolo quinto

Capitolo 4

Fenomeni di trasporto in superreticoli

Come si è visto nei primi capitoli, un superreticolo presenta una struttura a bande molto particolare: il ripiegamento lungo la direzione k_z dà origine a minibande con andamento sinusoidale, la cui dispersione è molto piatta, dell'ordine dei pochi meV; contemporaneamente la zona di Brillouin viene ridotta di un fattore $d/a \gg 1$. Queste caratteristiche hanno conseguenze notevoli sulle proprietà di trasporto e danno origine a fenomeni nuovi rispetto ai reticoli cristallini omogenei.

4.1 Oscillazioni di Bloch

Consideriamo un elettrone in una minibanda n , che si muova accelerato dal campo elettrico lungo la direzione z del superreticolo; la sua energia sarà data in ogni momento dalla funzione¹ $\epsilon(k)$ e il vettore d'onda sarà espresso secondo la legge del moto semiclassica (3.1)

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE , \quad (4.1)$$

¹Considero per semplicità un caso unidimensionale con $\mathbf{k} = k_z = k$.

e la velocità di gruppo è data da

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(k)}{dk} . \quad (4.2)$$

La soluzione della (4.1), per un campo elettrico costante è:

$$k(t) = k_0 + \frac{eE}{\hbar} t , \quad (4.3)$$

cioè il vettore d'onda aumenta linearmente nel tempo. Ne segue che l'elettrone, nel caso in cui non subisca scattering, attraversa la zona di Brillouin in un tempo

$$T_B = \frac{2\pi/d}{eE/\hbar} \quad (4.4)$$

e ogni volta che arriva bordo zona, ricompare all'estremità opposta della minizona. Si ricordi che la velocità dell'elettrone (4.2), in virtù della forma analitica della minibanda, è positiva se k è positivo, negativa se k è negativo, se ne deduce che il moto nello spazio sarà oscillante con periodo T_B : tale moto si chiama *oscillazione di Bloch* [28]. Con queste premesse si ricava la frequenza dell'oscillazione di Bloch

$$\omega_B = \frac{2\pi}{T_B} = \frac{eFd}{\hbar} \quad (4.5)$$

che caratterizza la periodicità del moto dell'elettrone nello spazio e nella zona di Brillouin. Durante tutto il moto l'energia della particella è limitata all'ampiezza della minibanda.

Se calcoliamo la legge del moto utilizzando la dispersione ottenuta dal metodo tight-binding (2.12), unitamente alle equazioni (4.2) e (4.3) si ricava:

$$\begin{aligned} z(t) &= \int_0^t v(t') dt' \\ &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(k(t'))}{dk} dt' \\ &= \frac{\tilde{t}_\beta d}{\hbar} \int_0^t \sin\left(\frac{eE}{\hbar} dt'\right) dt' \\ &= \frac{\tilde{t}_\beta}{eE} [1 - \cos(\omega_B t)] . \end{aligned} \quad (4.6)$$

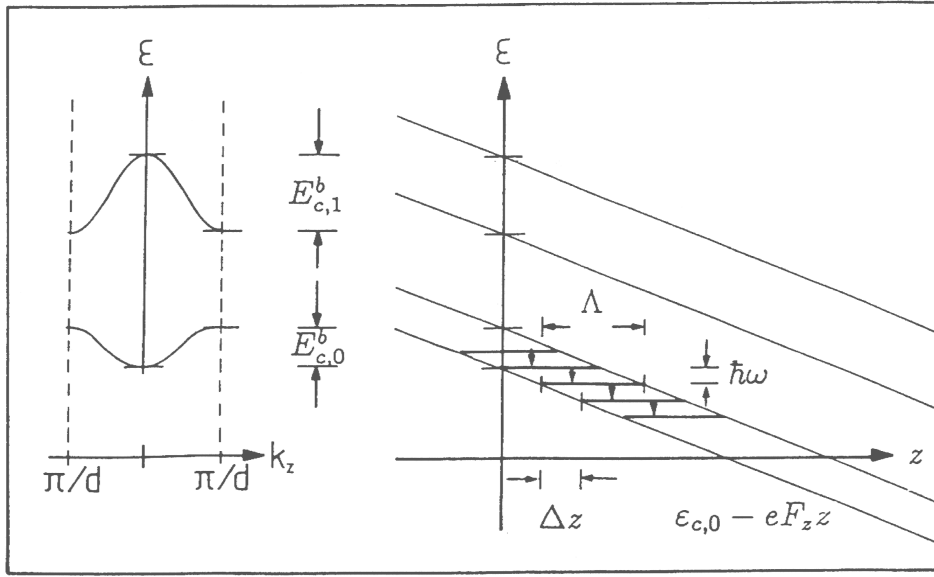


Figura 4.1: *Oscillazioni di Bloch nello spazio: l'ampiezza dell'oscillazione è legata all'ampiezza della banda e al campo elettrico.*[27]

L'oscillazione lungo l'asse z è di tipo armonico e la sua ampiezza è

$$\Lambda = \frac{\tilde{t}_\beta}{eE}, \quad (4.7)$$

con $\tilde{t}_\beta$ semiampiezza della minibanda definita al cap. 2. È evidente che l'oscillazione di Bloch è dipendente dal campo elettrico: quanto più quest'ultimo è intenso, tanto più l'oscillazione è spazialmente (eq. 4.7) e temporalmente (eq. 4.4) breve. Per capire il meccanismo di tale oscillazione conviene pensare la banda nello spazio diretto che si inclina sotto l'azione del campo elettrico (fig. 4.1): il moto dell'elettrone rimane confinato nella zona spaziale delimitata dall'ampiezza $\tilde{t}_\beta$ della minibanda e dall'intensità del campo elettrico, come risulta evidente nella (4.7): aumentando il campo si riduce l'ampiezza dell'oscillazione.

Come ho già detto il fenomeno delle oscillazioni di Bloch si verifica se gli elettroni riescono ad attraversare la zona di Brillouin senza subire scattering:

se si considera il tempo medio di scattering $\bar{\tau}$, allora la condizione richiesta si traduce matematicamente in

$$\omega_B \bar{\tau} \gg 1 . \quad (4.8)$$

Già nel 1928 Bloch [28] ipotizzò il fenomeno descritto. Tali oscillazioni però non furono mai osservate in un cristallo bulk, infatti, a causa del passo reticolare a di pochi Å, il periodo dell'oscillazione di Bloch diventa molto maggiore dei tempi di scattering. La situazione cambiò quando si cominciarono a sviluppare i superreticoli, a causa della struttura elettronica particolare, viene diminuito il periodo dell'oscillazione e diminuito il rate di scattering medio. La dimensione della supercella $d \gg a$ rende la minizona molto piccola e le minibande molto strette. Il fatto che le minibande siano strette contribuisce a diminuire l'intensità dei meccanismi di scattering. A causa di queste caratteristiche la condizione (4.8) si può verificare anche per bassi campi elettrici applicati. La prima osservazione sperimentale delle oscillazioni di Bloch in superreticoli si ebbe nel 1992 [29].

4.2 Scala di Wannier-Stark

Quando si applica un campo elettrico E al superreticolo, l'equazione di Schrödinger (1.15) lungo la direzione del superreticolo, si può riscrivere, nell'approssimazione a una sola banda, come segue (cap.2):

$$\left[\widehat{H}_{cr}(z) + \widehat{U}_{sr}(z) - eEz \right] \psi(z) = \epsilon \psi(z) . \quad (4.9)$$

L'introduzione del campo elettrico impone di aggiungere nell'hamiltoniano un termine di energia potenziale elettrostatica, in questo modo il superreticolo non è più invariante per traslazioni e lo spettro di energie non è più continuo. Infatti, da un'analisi più accurata [9], si deduce che se la funzione d'onda $\psi(z)$ è soluzione della (4.9) con un'energia ϵ_0 , allora la funzione $\psi(z - nd)$

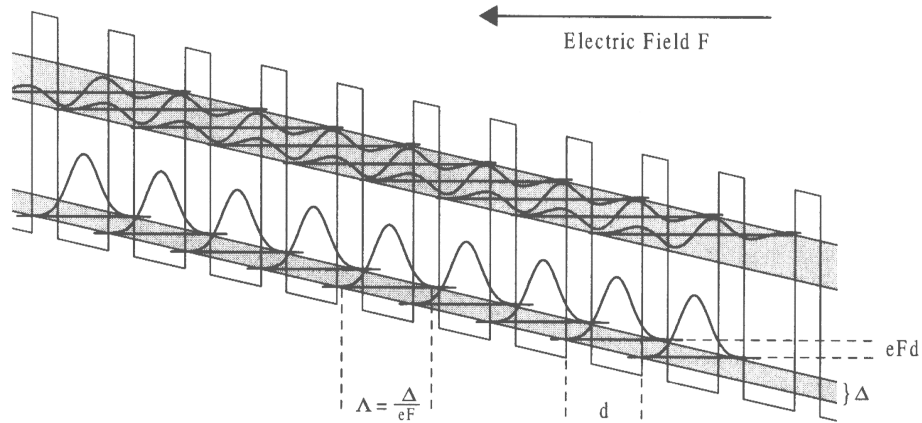


Figura 4.2: *Grafico esemplificativo degli stati localizzati di Wannier-Stark corrispondenti alle prime due minibande di un superreticolo. [33]*

relativa alla buca n -esima, è ancora soluzione della stessa equazione, ma con autovalore

$$\epsilon = \epsilon_0 - neEd , \quad (4.10)$$

con n indice di posizione della buca e d periodo del superreticolo. Lo spettro di autovalori, che nel superreticolo in assenza di campo elettrico è continuo, si divide in una serie di livelli separati e la loro separazione in energia è proporzionale al campo elettrico. Il set di queste soluzioni costituisce la cosiddetta *scala di Wannier-Stark* (4.2). I “gradini” della scala sono infiniti e la spaziatura in energia tra i livelli è $\Delta\epsilon = eEd$; tale quantità può essere facilmente espressa in termini della frequenza di oscillazione di Bloch (4.5)

$$\Delta\epsilon = \hbar\omega_B . \quad (4.11)$$

Si può pensare che ogni livello, di ciascuna delle N buche del superreticolo, dia origine a un livello delocalizzato di Wannier-Stark, infatti ognuno di questi stati è spostato di una distanza d rispetto a quello precedente. Poiché

per ogni stato l'elettrone percorre tutta la minizona, l'autofunzione sarà una combinazione lineare degli stati di Bloch [33].

Come anticipato nel paragrafo precedente, in caso di campo elettrico nullo l'autofunzione $\psi(z)$ è soddisfatta il teorema di Bloch e si estende per tutto lo spazio. Se il campo elettrico è diverso da zero, si verificano le oscillazioni di Bloch e la funzione d'onda che descrive l'elettrone, la cui estensione spaziale corrisponde all'ampiezza dell'oscillazione di Bloch, è localizzata in una regione di dimensione inversamente proporzionale all'intensità del campo elettrico applicato; nel caso di alti campi l'elettrone può rimanere confinato in una singola buca. La scala delle energie di Wannier-Stark fu osservata sperimentalmente nel 1988 [30].

4.3 Conducibilità differenziale negativa

Fino ad ora si sono discussi i principali fenomeni che possono avvenire in un superreticolo sottoposto a campi elettrici, in assenza di agenti di scattering; ora è necessario prendere in considerazione i meccanismi di scattering: essi intervengono interrompendo il regime oscillatorio che l'elettrone avrebbe in loro assenza. La prima teoria per il trasporto in minibanda venne proposta da Esaki e Tsu nel 1970 [31]. Nel loro modello unidimensionale essi assumevano che l'elettrone nella minibanda alla fine del volo fosse diffuso ogni volta al centro della minizona ($k_z = 0$), dissipando completamente nella collisione il suo impulso e la sua energia (fig 4.3), con un tempo medio di scattering τ_{ET} costante, indipendente dalla temperatura e dal campo elettrico applicato.

Si possono ora trarre le prime conclusioni qualitative. Se il campo elettrico è tale che durante il tempo τ_{ET} il momento dell'elettrone raggiunge una zona della minibanda compresa tra 0 e π/d , dove la velocità cresce all'aumentare di k_z , allora un aumento del campo elettrico genera un aumento della velocità di deriva; quando invece il campo elettrico diventa più intenso,

il momento dell'elettrone a fine volo può trovarsi nella parte negativa della zona di Brillouin, in questo modo la velocità di deriva diminuisce: si parla di *conducibilità differenziale negativa (NDC)*. Se poi il campo elettrico è molto intenso, i portatori compiono molte oscillazioni di Bloch prima di subire uno scattering e la velocità media tende a 0.

Con l'ipotesi di un tempo medio di scattering costante, si deduce che, in un punto dello spazio $\mathbf{k}$, la popolazione elettronica decresce nel tempo con una legge esponenziale² del tipo $\exp\left(-\frac{t}{\tau_{ET}}\right)$, a causa dello scattering che riporta gli elettroni in $k_z = 0$; si può dunque ottenere la velocità di deriva integrando la velocità di gruppo dell'elettrone in un punto dello spazio $\mathbf{k}$ moltiplicata per la probabilità che quell'elettrone non abbia subito scattering fino a quell'istante:

$$\begin{aligned}
 v_{ET} &= \int_0^\infty e^{-\frac{t}{\tau_{ET}}} dv \\
 &= \int_0^\infty e^{-\frac{t}{\tau_{ET}}} \frac{dk}{dt} \frac{d^2\epsilon}{dk^2} dt \\
 &= v_{max} \frac{eEd\hbar/\tau_{ET}}{(eEd)^2 + (\hbar/\tau_{ET})^2} \\
 &= \frac{v_{max}}{\omega_B\tau_{ET} + (\omega_B\tau_{ET})^{-1}} , \tag{4.12}
 \end{aligned}$$

dove si è indicato $v_{max} = \frac{t_B d}{\hbar}$. Per bassi campi elettrici ($\omega_B\tau_{ET} \ll 1$) il primo termine a denominatore può essere trascurato per cui la velocità a bassi campi elettrici è approssimabile con

$$v_{ET\downarrow} = v_{max}\omega_B\tau_{ET} \tag{4.13}$$

mentre per alti campi elettrici ($\omega_B\tau_{ET} \gg 1$)

$$v_{ET\uparrow} = \frac{v_{max}}{\omega_B\tau_{ET}} . \tag{4.14}$$

Il massimo nella velocità di deriva, secondo il presente modello, si ottiene

²La probabilità di scattering è $P_0 = \tau_{ET}^{-1}$, quindi in un tempo dt la ci sarà una variazione di particelle $deN = n(t')P_0dt$, e integrando si ottiene la legge di $N(t)$.

quando $\omega_B \tau_{ET} = 1$ a cui corrispondono il campo elettrico critico $E_c = \frac{\hbar}{e\tau_{ET}}$ e la massima velocità di deriva $\bar{v} = \frac{v_{max}}{2}$. È interessante notare che la velocità di deriva si può scrivere come

$$\frac{1}{v_{ET}} = \frac{1}{v_{ET\downarrow}} + \frac{1}{v_{ET\uparrow}}. \quad (4.15)$$

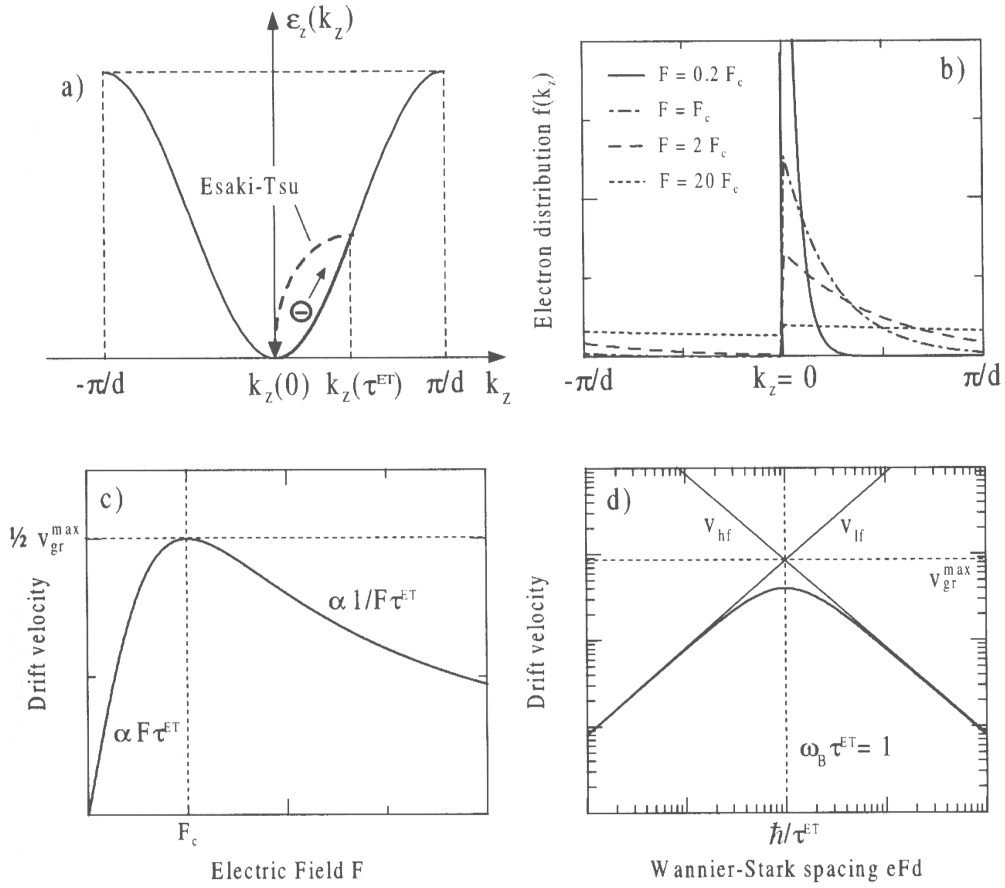


Figura 4.3: Rappresentazione del modello di Esaki-Tsu [33]. (a) Il meccanismo di scattering; (b) distribuzione nello spazio degli impulsi; (c,d) velocità di deriva in funzione del campo elettrico. Nella (d) in particolare è evidente la legge (4.15). La figura è tratta da [33].

Una rappresentazione grafica del modello di Esaki-Tsu è riportata in figura (4.3).

Anche se il modello appena descritto rende evidenti i più fondamentali fenomeni di trasporto che si verificano nei superreticoli, esso rimane una forte semplificazione del caso fisico. Esistono modelli teorici più articolati che includono tempi di rilassamento sia per l'energia, che per l'impulso [32]. I risultati di questi calcoli, comunque, ricalcano quelli ottenuti con il modello di Esaki-Tsu.

4.4 Regimi di trasporto

Nel paragrafo (4.2) si sono studiati gli stati elettronici di un superreticolo sottoposto a un campo elettrico lungo la direzione z di crescita nel caso in cui non fosse presente alcun agente di scattering. In questo caso gli elettroni sarebbero confinati negli stati di Wannier-Stark, compiendo oscillazioni di Bloch, e non ci sarebbe trasporto di carica. A causa delle imperfezioni e delle vibrazioni del reticolo, gli elettroni interrompono il loro moto libero; tali interazioni vengono trattate in modo perturbativo come agenti di scattering che provocano il “salto” di un elettrone tra diversi stati di Wannier-Stark. In questo modo il superreticolo conduce lungo la direzione del campo elettrico. Questo modello di trasporto è noto come *Hopping Transport* [33]. Da tutto questo si deduce che tale regime di trasporto si instaura se il campo elettrico è abbastanza elevato da permettere la localizzazione dell'elettrone negli stati di Wannier-Stark, ovvero:

$$\omega_B \tau \geq 1 \quad (4.16)$$

che, ricordando la definizione di ω_B , si trasforma in

$$eEd \geq \frac{\hbar}{\tau} \quad (4.17)$$

Nel caso in cui il campo elettrico sia più basso la pendenza della mini-

banda nello spazio reale avviene in misura ridotta, lo splitting negli stati di Wannier-Stark è poco evidente e si può considerare il campo elettrico in maniera semiclassica secondo l'equazione (3.1). In questo caso si parla di *Trasporto in minibanda*. Dunque è possibile applicare il metodo Monte Carlo per studiare il trasporto di carica. Come nel caso precedente si può individuare qualitativamente un limite entro cui vale questo regime di trasporto: è necessario che gli elettroni subiscano eventi di scattering prima di compiere un ciclo della minibanda (che corrisponde a un'oscillazione di Bloch), cioè $\omega_B \tau \leq 1$, che significa

$$eEd \leq \frac{\hbar}{\tau} . \quad (4.18)$$

Se però si deve studiare il trasporto in superreticoli con minibande molto piatte (in regime quasi di buche isolate), con bassi campi elettrici applicati, allora il rate di scattering è molto maggiore della probabilità di tunneling tra buche adiacenti, si intuisce quindi che l'elettrone subirà numerose transizioni all'interno della stessa buca prima di passare a una buca vicina. In questo caso si parla *Sequential Tunnelling* tra buche limitrofe.

Una rappresentazione grafica dei diversi regimi di trasporto e i rispettivi range di validità è riportata in fig. (4.4), tratta da [10]. È ovvio che i limiti fino ad ora discussi non sono netti, ma servono comunque per descrivere delle regioni di validità di un dato meccanismo di trasporto. In figura (4.5) invece si distinguono schematicamente gli eventi che si verificano in regime di trasporto lineare (ben descritto dalla approssimazione semiclassica), e in regime di condicibilità differenziale negativa (descrivibile in maniera semiclassica, ma anche in termini di hopping).

Il sistema Si/SiO₂ di interesse per questo lavoro di tesi è, alla luce di queste considerazioni, descrivibile in approssimazione semiclassica, infatti l'ampiezza delle minibande è $\Delta \approx 10^{-3}$ eV, la probabilità di media scattering è $\frac{1}{\tau} \approx 10^{-13} \text{ s}^{-1}$, mentre i campi elettrici sono dell'ordine di $10^5 - 10^6 \text{ V/m}$. Risulta interessante anche fare un calcolo del fattore $\omega_B \tau$, e si verifica (cap.6)

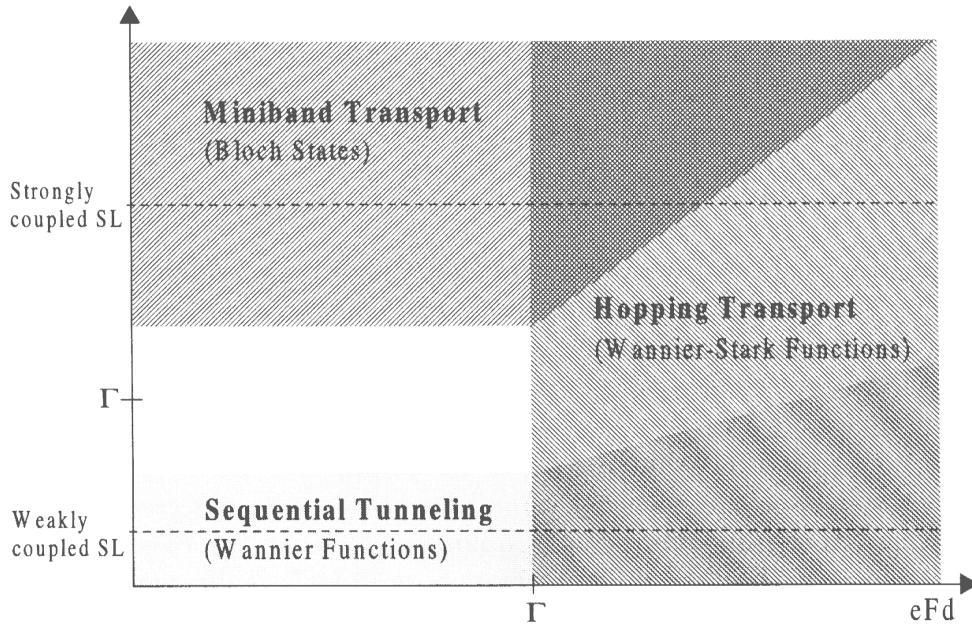
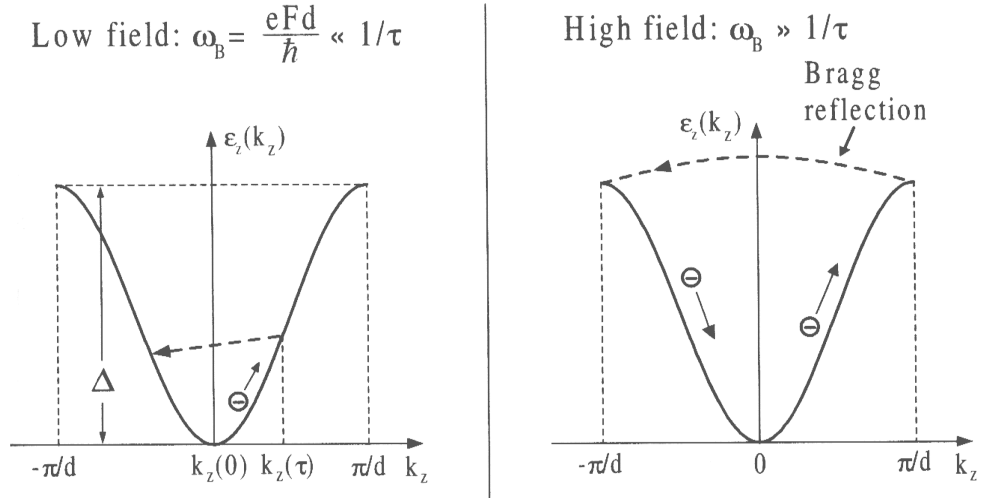


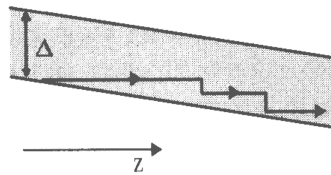
Figura 4.4: *Limiti di validità dei regimi di trasporto in superreticoli [10]. Sulle scale compare il valore $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$*

che nella regione di campi elettrici di interesse esso varia da 0.03 a 13. L'ampiezza Λ dell'oscillazione di Bloch, nello stesso range di energie, è compresa in un intervallo tra 10^5 e $10 \text{ \AA}$. Si verificano quindi, anche nel nostro caso, oscillazioni di Bloch per alti campi elettrici. Come si vedrà nel capitolo successivo, e come alcuni studi dimostrano [33], il modello semiclassico sotto forma di metodo Monte Carlo fornisce un'affidabile descrizione dei fenomeni di trasporto, fino ai regimi di conducibilità differenziale negativa.

Momentum space

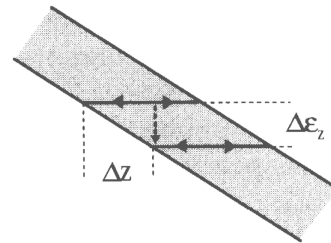


Real space



Ohmic transport regime:

$$v_{dr} = \mu F$$



Negative differential conductivity (NDC):

$$v_{dr} \propto 1/F$$

Figura 4.5: Rappresentazione del trasporto a bassi campi elettrici, in cui si ha una risposta lineare del mezzo, e ad alti campi, in cui compare la NDC. Rappresentazioni nella zona di Brillouin (in alto) e nello spazio reale (in basso). [33]

Capitolo 5

Il modello di trasporto verticale in Si/SiO₂

5.1 Modello Many-Valley

Nel secondo capitolo si è studiata la struttura elettronica di un superreticolo Si/SiO₂, sono state ricavate le minibande in forma analitica e quindi la loro disposizione nella zona di Brillouin. La struttura a bande su cui sono state eseguite le simulazioni di trasporto è stata descritta nel par. (2.3). Con l'inclusione, nei calcoli, di più minibande si possono descrivere con più accuratezza i fenomeni di trasporto che si verificano nel superreticolo. Nel sistema di nostro interesse è necessario includere le minibande che, nascendo (secondo il modello della funzione involuppo (cap. 1)) per ripiegamento delle sei bande equivalenti del silicio, si trovano al di fuori del punto Γ lungo le direzioni k_x e k_y . In realtà, poiché il campo elettrico è applicato lungo la direzione z , ortogonale ai layers del superreticolo, e poiché gli elettroni nel loro moto percorrono tutta la minizona lungo questa direzione, è fondamentale conoscere la dispersione lungo l'asse k_z , ma non è altrettanto importante conoscerla completamente lungo le altre due direzioni.

Da tutto questo si deduce che, nel modello per il trasporto, occorre introdurre meccanismi di scattering “interminibanda”, che consentano all'elettro-

ne di occupare tutte le minibande: questa è la caratteristica fondamentale di un modello *Many-Valley*. In realtà, come verrà illustrato nel paragrafo successivo, le probabilità di scattering da fononi ottici, dipenderanno solamente dall'energia dell'elettrone prima dello scattering e dalla minibanda in cui si verrà a trovare a collisione avvenuta. Solo la scelta del meccanismo di scattering, in base alle rispettive probabilità (par. 3.5), consente ai portatori di popolare tutte le minibande.

In sintesi, secondo il modello di cui fanno utilizzo le simulazioni di trasporto, l'elettrone, che si trova in principio in uno stato $(n, \mathbf{r}, \mathbf{k})^1$, viene accelerato dal campo elettrico lungo la direzione z fino a che il moto non viene interrotto da un evento di scattering. Tale evento porta l'elettrone in uno stato $(n', \mathbf{r}, \mathbf{k}')$. Successivamente l'elettrone viene sottoposto a un'altra accelerazione sulla minibanda n' fino a che non incorre in un'altra collisione.

Il resto del capitolo descrive in dettaglio il modello utilizzato per il trasporto: le probabilità di scattering da fononi ottici da potenziale di deformazione e polari.

5.2 Modello per i fononi

Per uno studio Monte Carlo del sistema Si/SiO₂ occorre prima analizzare i meccanismi di scattering che interferiscono significativamente sul moto degli elettroni sottoposti a un campo elettrico.

Si è supposto che le interfacce tra Si e SiO₂ siano idelmente lisce, in questo modo si elimina completamente lo scattering dovuto alla rugosità delle interfacce e si può concentrare l'attenzione allo studio di meccanismi di scattering più efficaci.

¹ n è l'indice della minibanda, $\mathbf{r}$ la posizione nello spazio, $\mathbf{k}$ lo pseudoimpulso dell'elettrone.

Inoltre, poichè si suppone il superreticolo puro, vengono trascurate anche le probabilità di scattering da impurezze (neutre o ionizzate).

Altri eventi che possono subire gli elettroni durante il volo sono gli scattering con altri elettroni, ma, come già discusso nel cap. 3, essi sono efficaci solo per elevate densità di portatori. Nel caso in questione, tale meccanismo viene escluso.

Rimangono, come unico meccanismo di scattering efficace, i fononi; in particolare sono stati utilizzati, nelle simulazioni, i soli fononi ottici. I fononi acustici infatti, alle temperature a cui saranno eseguite le simulazioni (da 150 K a 300 K), hanno un rate di scattering più basso rispetto ai fononi ottici; inoltre inserire, in un codice Monte Carlo, un modello soddisfacente per i fononi acustici è un compito che va al di là degli obiettivi e dei tempi di questa tesi. In ogni caso, come si potrà dedurre dai prossimi risultati, il raggiungimento dell'equilibrio termico si ottiene anche con i soli fononi ottici.

I fononi ottici in superreticoli sono generalmente confinati nei singoli layer. Nel nostro caso significa che un layer di Si presenterà i modi ottici tipici del Si di bulk, nel layer di SiO₂ saranno confinati fononi ottici con la stessa energia di quelli nell'ossido bulk. La spiegazione del confinamento dei fononi è da ricercare nel fatto che la dispersione dei fononi ottici è tipicamente quasi piatta, e nel fatto che materiali diversi presentano frequenze ottiche diverse. Di conseguenza, accostando i layer di materiali diversi, le frequenze che si propagano nel primo materiale, non si propagano nel secondo (e viceversa), originando in esso modi evanescenti la cui ampiezza decade esponenzialmente con la distanza dall'interfaccia. Questa caratteristica si esprime dicendo che esiste una *condizione al contorno meccanica* per i fononi ottici. Una rappresentazione di quanto detto è riportata in fig. (5.1) per il superreticolo (Si)₆/(Ge)₆, in particolare si nota il confinamento dei fononi ottici del Silicio e il loro decadimento all'interfaccia. Per una teoria più dettagliata dei fononi in eterostrutture si veda ad esempio [9]. Da questa semplice descrizione ab-

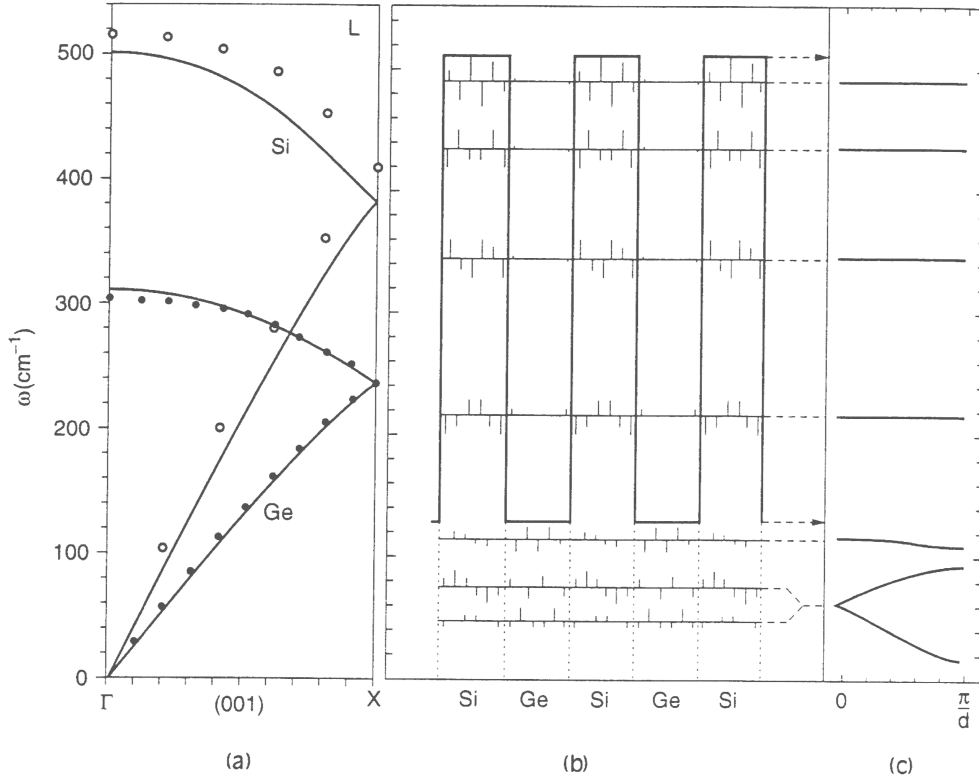


Figura 5.1: *Fononi in $(\text{Si})_6/(\text{Ge})_6$ [34]. (a) dispersione dei singoli materiali bulk; (b) ampiezza delle vibrazioni dei singoli atomi a diverse energie, in funzione di z , nella parte bassa si notano i fononi acustici estesi a tutto il materiale ; (c) dispersione fononica del superreticolo.*

biamo ricavato il modello per i fononi acustici nel superreticolo: durante la simulazione si tiene conto della posizione dell'elettrone e viene fatto interagire con i fononi del materiale in cui esso si trova al momento dello scattering.

È inoltre di fondamentale importanza ricordare che il Si è un materiale non polare, dunque presenterà solamente fononi da potenziale di deformazione, mentre l'ossido di Silicio, essendo un materiale formato da due specie atomiche, presenta fononi ottici polari. Il problema verrà trattato con

maggior dettaglio nelle sezioni che seguono.

5.2.1 Fononi in Si

Il silicio è un materiale monospecie e quindi l'elettrone interagisce con i fononi solamente attraverso il potenziale di deformazione. Per derivare la probabilità di scattering, da uno stato $\mathbf{k}$ a uno stato $\mathbf{k}'$, si utilizza la regola d'oro di Fermi (3.6), che viene integrata rispetto alla variabile $\mathbf{k}'$ per ottenere la probabilità di scattering totale di un elettrone che si trova nello stato $\mathbf{k}$, in questo modo si ottiene la (3.11). Per la particolare struttura elettronica del superreticolo, occorre tenere conto del fatto che gli autostati sono caratterizzati anche dal numero quantico α che indica la minibanda, dunque gli stati iniziale e finale sono rispettivamente $(\alpha, \mathbf{k})$ e $(\beta, \mathbf{k}')$. Così la (3.11) viene riscritta come:

$$\Gamma_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\beta \frac{V}{(2\pi)^3} \int |M_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(E_\alpha(\mathbf{k}) - E_\beta(\mathbf{k}') \pm \hbar\omega_{\pm(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}) d\mathbf{k}' . \quad (5.1)$$

Tale forma vale in generale per tutti i meccanismi di scattering, in particolare ogni meccanismo è descritto dall'elemento di matrice $M(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ che compare nell'equazione precedente. In questo studio ci limiteremo ad includere le interazioni con fononi ottici, dunque per i fononi ottici del Silicio si ha [23]:

$$|M_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = \frac{\hbar(D_t K)^2}{2\rho V \omega_{op}} \begin{bmatrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{bmatrix} , \quad (5.2)$$

dove ρ è la densità del materiale; $D_t K$ è la costante di accoppiamento; N_{op} la popolazione fononica all'equilibrio secondo la distribuzione di Bose-Einstein. Si noti che tale elemento di matrice è indipendente dallo stato finale $\mathbf{k}'$, in questo caso lo scattering è tale che tutti gli stati finali che soddisfano la conservazione dell'energia (condizione insita nell'argomento della funzione δ) sono ugualmente probabili. Questo ci permette di estrarre l'elemento di matrice

(5.2) all'esterno dell'integrale nella (5.1). A questo punto, l'integrazione sulla funzione δ dà come risultato un termine proporzionale alla DOS secondo l'equazione (2.20); utilizzando quest'ultima equazione si ottiene:

$$\Gamma_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{(D_t k)^2}{2\rho V \omega_{op}} \left[\begin{array}{c} N_q \\ N_q + 1 \end{array} \right] \text{DOS}(E_\alpha(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{op}) , \quad (5.3)$$

che, sostituendo la forma esplicita della DOS, si trasforma in:

$$P_\alpha(E_\alpha) = \sum_\beta n_\beta P_{\alpha\beta}(E_\alpha) \quad (5.4)$$

dove

$$P_{\alpha\beta}(E_\alpha) = \frac{(D_t k)^2}{2\rho\omega_{op}\hbar^2 d} \sqrt{m_x^\beta m_y^\beta} \left[\begin{array}{c} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ \frac{1}{\pi} \arccos \left(\frac{E_\beta - E_\alpha \mp \hbar\omega}{|t_\beta|} \right) \\ 1 \end{array} \right. , \quad (5.5)$$

n_β è la molteplicità delle singole minibande e le m_i^β sono le masse efficaci lungo gli assi principali della banda del Silicio che ha generato la minibanda β -esima. Dall'equazione (5.5) si deduce che la probabilità di scattering totale per l'elettrone nello stato (α, E_α) non dipende dalla minibanda di partenza α -esima, ma solo dall'energia che l'elettrone possiede prima della collisione. Un'altra importante caratteristica che emerge è che possiamo suddividere la probabilità totale, nelle probabilità $P_{\alpha\beta}(E)$ che un elettrone dopo lo scattering abbia uno stato finale nella minibanda β -esima. Quest'ultima caratteristica consente di implementare agevolmente un modello a moltebande, in quanto, come richiesto precedentemente, gli scattering inducono transizioni interminibanda dell'elettrone.

Le costanti e la dispersione dei fononi nel Silicio sono facilmente reperibili in letteratura (si veda ad esempio [19]), si trova

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{op} &= 60 \text{ meV} , \\ (D_t k)^2 &= 8 \cdot 10^8 \text{ eV/cm} . \end{aligned}$$

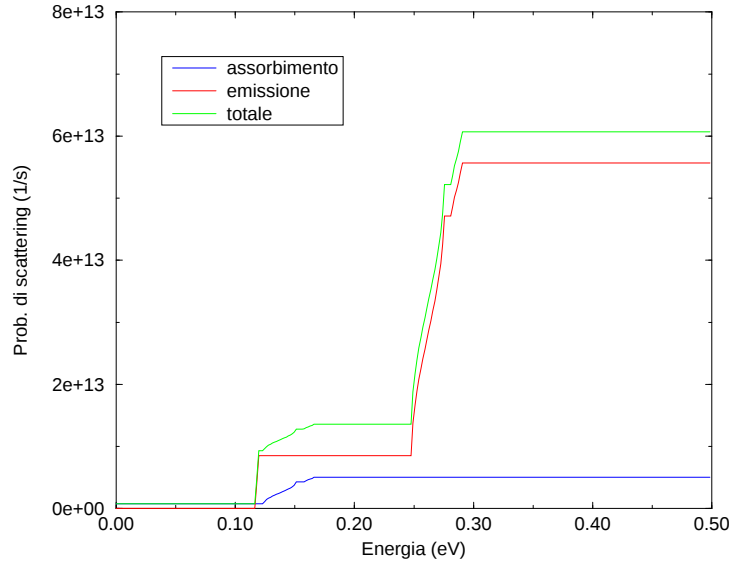


Figura 5.2: *Probabilità di scattering ad fonone ottico in S a 300 K, in funzione dell'energia. Sono rappresentate le probabilità di emissione, di assorbimento e totale.*

Tali dati inseriti nella (5.4) permettono di ottenere le probabilità di scattering da fononi ottici in Silicio, riportate nelle figure (5.2, 5.3), nelle quali si nota l'andamento tipico che ricalca le densità degli stati del superreticolo (fig. 2.25): i “gradini” nelle probabilità di scattering sono quindi dovuti ai contributi delle minibande alle varie energie, in particolare il secondo deriva dalle quattro minibande fuori da Γ , degeneri in energia. Si nota inoltre che per basse temperature la probabilità di assorbimento è molto bassa, circa 2 ordini di grandezza rispetto all'emissione. Lo spettro fononico del Si viene riportato in figura (3.1). Si ricorda che tutti le scale di energia sono spostate verso l'alto di 55 meV, valore che corrisponde al fondo della prima minibanda.

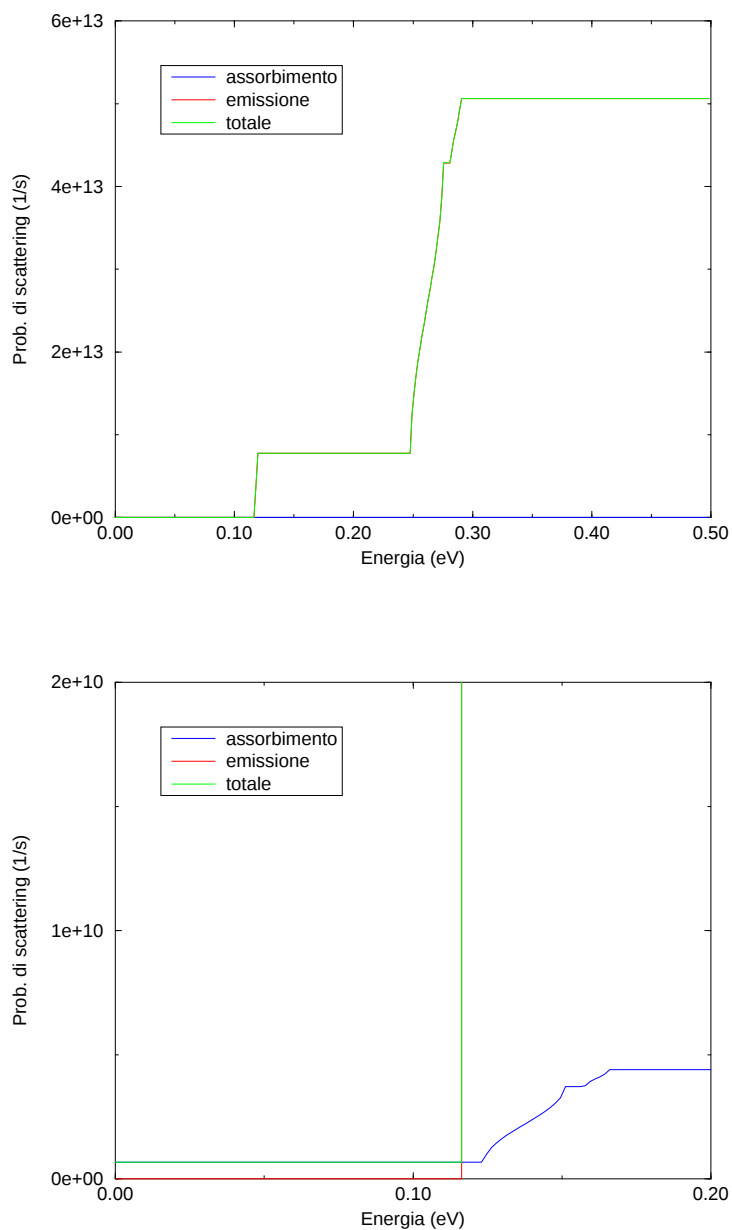


Figura 5.3: *Probabilità di scattering da fonone ottico in Silicio a 77 K , in funzione dell'energia. Sono rappresentate le probabilità di emissione, di assorbimento e totale Nella figura ingrandita in basso si osserva la componente di assorbimento.*

5.2.2 Fononi in SiO₂

L'ossido di Silicio ha numerose forme di cristallizzazione, tuttavia la più usata per le simulazioni di trasporto elettronico è senza dubbio la forma α -quarzo [35]. L'ossido di silicio è un materiale polare, dunque presenterà fononi ottici polari, il che significa che gli elettroni interagiscono con il campo elettrico associato alle vibrazioni reticolari. Esistono in realtà 2 modi ottici polari, le cui energie sono riportate in tabella (5.1). Lo spettro fononico del SiO₂ è riportato in figura (5.4). Inoltre in SiO₂ gli elettroni possono interagire tramite potenziale di deformazione, con un altro fonone ottico.

I fononi ottici polari presentano un diverso elemento di matrice rispetto ai fononi ottici da potenziale di deformazione [36]:

$$|M_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = \frac{2\pi e^2 E_{op}}{V_0 |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \left(\frac{1}{\epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon_-} \right) \begin{bmatrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{bmatrix}, \quad (5.6)$$

dove E_{op} è l'energia del fonone ottico polare, le costanti ϵ_+ e ϵ_- sono le costanti dielettriche del mezzo in questione, per frequenze rispettivamente molto maggiori e molto minori della frequenza del fonone, V_0 è il volume del cristallo e N_{op} è la popolazione fononica secondo la distribuzione di Bose-Einstein.

Modo fononico	Energia (meV)	Costanti
ottico/deformazione	132	$D_t k = 2 \cdot 10^9 \text{ eV/cm}$
ottico polare	63	$\frac{1}{\epsilon_{r+}} - \frac{1}{\epsilon_{r-}} = 0.063$
ottico polare	153	$\frac{1}{\epsilon_{r+}} - \frac{1}{\epsilon_{r-}} = 0.143$
ottico polare medio	108	$\frac{1}{\epsilon_{r+}} - \frac{1}{\epsilon_{r-}} = 0.1$

Tabella 5.1: *Caratteristiche dei fononi ottici (polari e non polari) in SiO₂; nell'ultima riga compare il modo polare fittizio, inserito nella simulazione, che media i due modi reali. Si ricorda che la costante dielettrica relativa è $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$.*

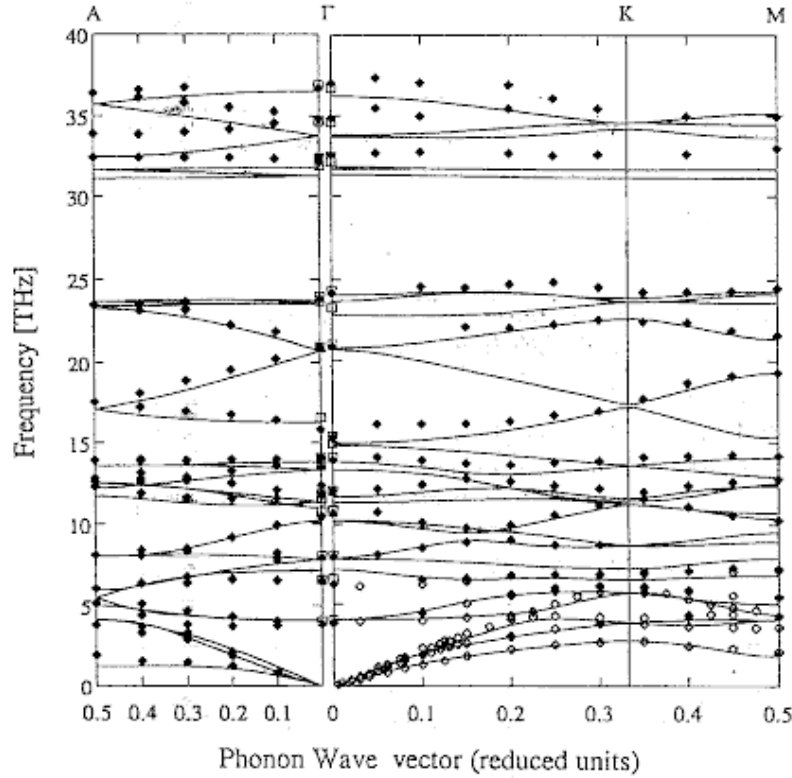


Figura 5.4: *Spettro fononico del SiO₂ in cristallizzazione α -quarzo [37].*

Il problema che si pone in questo caso è che l'elemento di matrice non è indipendente da $\mathbf{k}'$, per cui non si può, durante la derivazione della probabilità di scattering, estrarre questo termine al di fuori della integrazione su $\mathbf{k}'$ in equazione (3.11). Ricavare la probabilità di scattering totale relativa a un certo stato iniziale $\mathbf{k}$, diventa un problema non solubile analiticamente. Inoltre si verifica facilmente che il termine $M_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ è divergente per $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Per risolvere quest'ultimo problema si inserisce al denominatore della (5.6) un termine aggiuntivo di schermo

$$|\mathbf{k}_D|^2 = \frac{1}{\lambda_D^2} \quad (5.7)$$

che teoricamente dovrebbe rendere conto dello schermo (secondo la teoria

di Debye-Hückel) al potenziale dei fononi, da parte degli elettroni di conduzione. Tuttavia l'ossido di Silicio è un isolante, e, per come è costruito il superreticolo Si/SiO₂, le barriere sono molto alte e la densità elettronica nello strato di ossido è, in linea di principio, molto bassa. Dunque l'intensità dello schermo sarebbe molto bassa. In ogni si è inserito il termine $\lambda_D = 10 \text{ \AA}$, per eliminare la divergenza in $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. In questo modo l'elemento di matrice dello scattering diventa:

$$|M_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = \frac{2\pi e^2 E_{op}}{V_0 (|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 + |\mathbf{k}_D|^2)} \left(\frac{1}{\epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon_-} \right) \begin{bmatrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

Per eliminare invece il problema della non integrabilità del fattore M , si procede a massimizzare, rispetto a $\mathbf{k}'$, l'elemento di matrice appena scritto:

$$\begin{aligned} |\bar{M}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})|^2 &= \max_{\mathbf{k}'} |M_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \\ &= \frac{2\pi e^2 E_{op}}{V_0 |\mathbf{k}_D|^2} \left(\frac{1}{\epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon_-} \right) \begin{bmatrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

in questo modo lo si può estrarre dall'integrale (3.11), e procedere al calcolo della probabilità di scattering così modificata. Il calcolo è formalmente identico a quello svolto per i fononi ottici da potenziale di deformazione, quindi con il procedimento già descritto si ottiene:

$$\bar{P}_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{2\pi^2 e^2 E_{op}}{d \hbar^3 k_D^2} \left(\frac{1}{\epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon_-} \right) \sqrt{m_x^\beta m_y^\beta} \begin{bmatrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{bmatrix} \begin{cases} 0 \\ \frac{1}{\pi} \arccos \left(\frac{E_\beta - E_\alpha \mp \hbar\omega}{|t_\beta|} \right) \\ 1 \end{cases}, \quad (5.10)$$

dove d è il passo del superreticolo. In questo modo le scelte dello scattering e dello stato finale avvengono in modo analogo per tutti i fononi, sia polari che non. Per rispettare il fatto che l'elemento di matrice dello scattering polare dipende da $\mathbf{k}'$, lo stato finale scelto verrà conteggiato come scattering vero, o come self-scattering, tramite la procedura del rigetto interno, che descriverò al paragrafo successivo.

Il modello utilizzato per le simulazioni non prevede entrambi i fononi polari, ma un solo fonone con energia media, tra quelle dei due fononi veri, e costante $\left(\frac{1}{\epsilon_+} - \frac{1}{\epsilon_-}\right)$ media tra le due. La probabilità di scattering di questo fonone ottico polare fittizio è riportata in figura (5.5).

Gli elettroni in ossido di Silicio possono interagire anche con un modo ottico trasversale, attraverso il potenziale di deformazione. La derivazione del rate di scattering è identica a quella discussa nel paragrafo precedente, e le caratteristiche di tale modo sono riportate in tabella (5.1). Le costanti per i fononi e le loro energie sono state tratte da lavori in cui si descrivono simulazioni Monte Carlo del trasporto in SiO₂[38]. Le probabilità di interazione con fononi ottici da potenziale di deformazione sono riportate in figura (5.6). Si può notare che la probabilità di assorbimento è molto bassa anche per $T = 300$ K, questo è dovuto alla funzione di distribuzione di Bose-Einstein che assume valori bassi se calcolata per l'energia del fonone ottico non polare. La probabilità totale di scattering in SiO₂ invece viene riportata in figura (5.7). Per la simulazione è molto sconveniente, in termini di tempo di calcolo, che la probabilità di scattering totale abbia un forte dislivello tra la regione ad energia attorno a 0.1 eV e la regione attorno a 0.4 eV. Un notevole dislivello è presente inoltre tra la probabilità di scattering totale del Silicio e quella dell'ossido. Successivamente si descriverà come questo problema è stato superato.

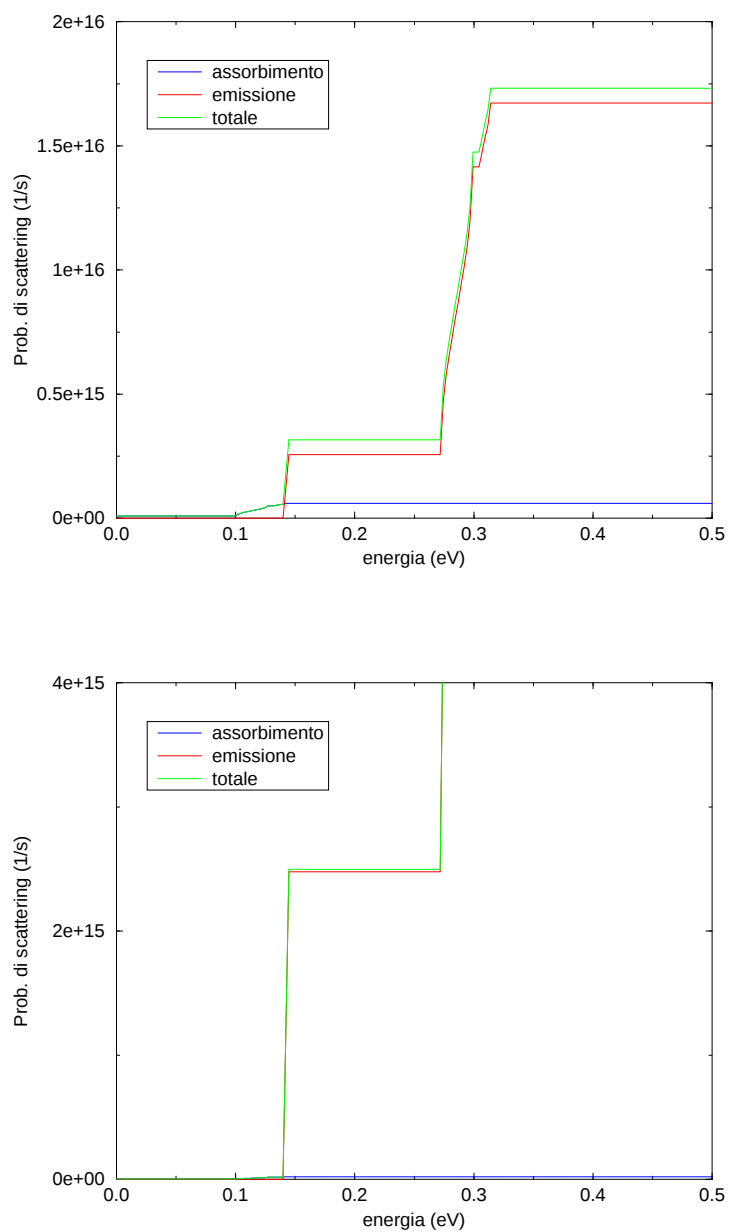


Figura 5.5: *Probabilità di scattering da fonone ottico polare in SiO_2 a 300 K (in alto) e a 150 K (in basso). Si tenga conto che questa probabilità è quella massimizzata nell'equazione (5.10.)*

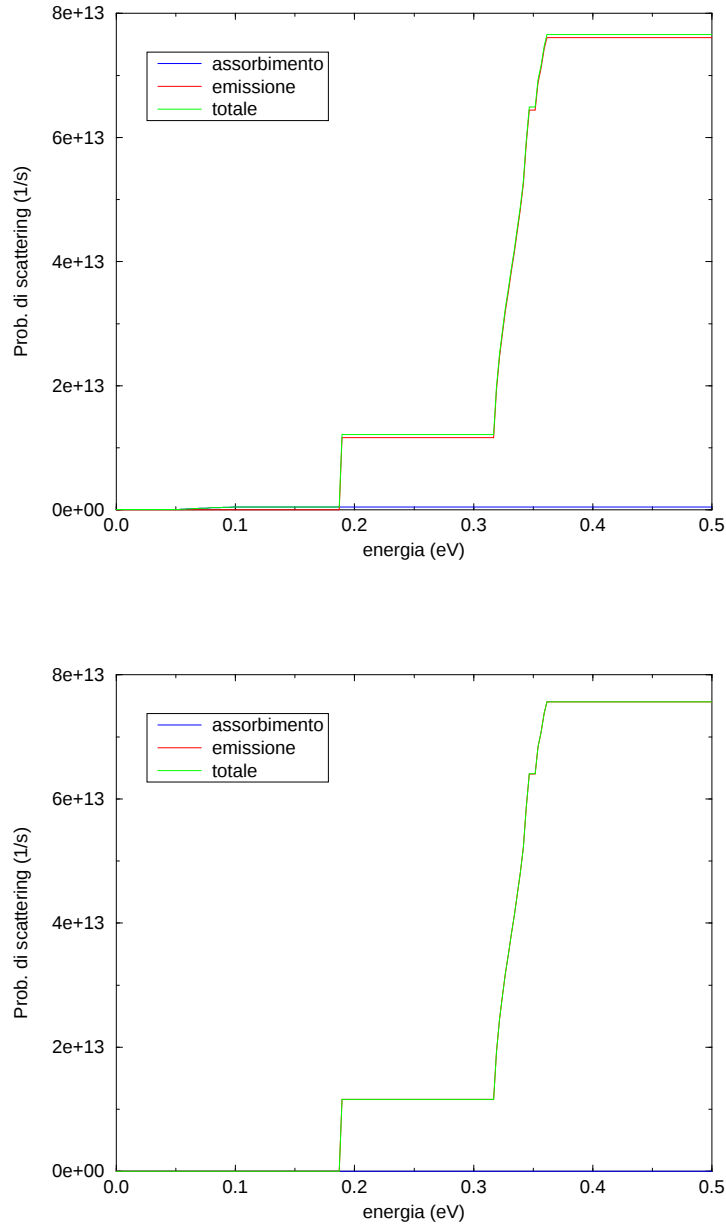


Figura 5.6: *Probabilità di scattering da fonone ottico da potenziale di deformazione in SiO₂ a 300 K (in alto) e a 150 K (in basso). Per basse temperature viene abbattuta la probabilità di assorbimento.*

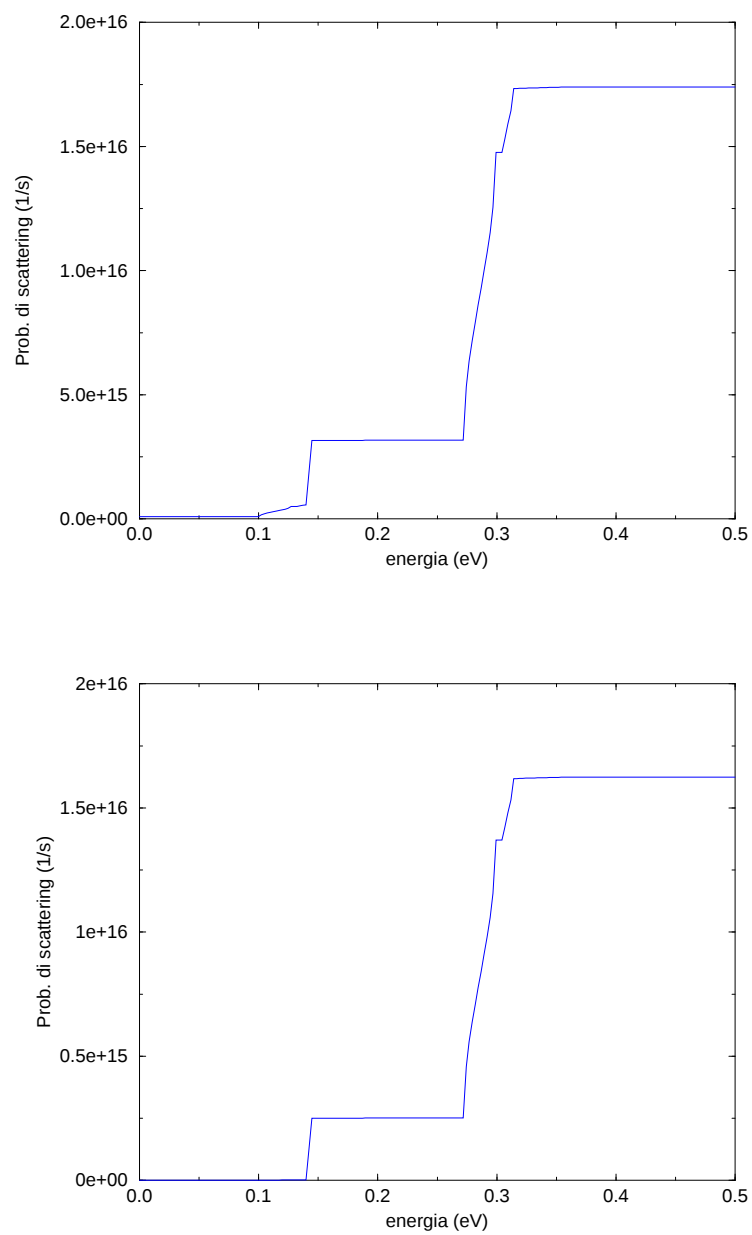


Figura 5.7: *Probabilità di scattering totale da fononi ottici SiO₂ a 300 K (in alto) e a 150 K (in basso). E' evidente il prevalere dello scattering da fonone polare.*

5.3 Scelta dello scattering fononico

Come discusso nel paragrafo precedente, i fononi ottici sono confinati nei rispettivi layers, quindi l'elettrone interagisce separatamente con i fononi del Silicio e con quelli dell'ossido di Silicio. Dunque bisogna, nella simulazione, tenere conto della posizione dell'elettrone in funzione del tempo, per sapere in ogni momento in quale dei due materiali, che si alternano nel superreticolo, è confinato l'elettrone.

Lo spazio, lungo la direzione di interesse z , percorso dall'elettrone durante il volo libero, si può calcolare facilmente dall'espressione:

$$\delta z = \int_0^{\delta t} v_g dt \quad (5.11)$$

dove v_g è la velocità di gruppo dell'elettrone e δt è il tempo di volo. Utilizzando l'espressione per la velocità di gruppo solamente per la terza componente, $v_{gz} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(\mathbf{k})}{dk_z}$, e la formula dell'accelerazione $k_z(\delta t) = k_z(0) + \frac{eE_z}{\hbar} \delta t$, si ottiene lo spazio percorso nel tempo di volo δt :

$$\begin{aligned} \delta z &= \int_{k_{zi}}^{k_{zf}} \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon(\mathbf{k})}{dk_z} \left(\frac{dk_z}{dt} \right)^{-1} dk_z \\ &= \frac{1}{eE_z} \int_{k_{zi}}^{k_{zf}} \frac{d\epsilon(\mathbf{k})}{dk_z} dk_z \\ &= \frac{1}{eE_z} \int_{\epsilon_i}^{\epsilon_f} d\epsilon \\ &= \frac{1}{eE_z} (\epsilon_f - \epsilon_i) , \end{aligned} \quad (5.12)$$

dove tutti i termini contrassegnanti dagli indici i e f indicano le grandezze calcolate rispettivamente a inizio ($t = 0$) e a fine ($t = \delta t$) volo. Sommando lo spazio (componente z) percorso ad ogni volo, si riesce a sapere in quale layer si trova l'elettrone al momento dello scattering.

Una volta nota la posizione dell'elettrone a fine volo, si possono i meccanismi di scattering di quel materiale, secondo le somme successive delle loro probabilità, come indicato nell'equazione (3.25). In questo modo viene

selezionato un meccanismo di scattering caratteristico del layer in cui si trova l'elettrone.

5.3.1 Meccanismo del rigetto interno

Per i fononi ottici polari è stato introdotto un artificio che permetteva il calcolo delle probabilità di scattering: la probabilità $P_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ è stata sostituita dalla $\bar{P}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k})$ ottenuta massimizzando la P rispetto alla variabile $\mathbf{k}'$. In questo modo però, tramite la scelta casuale del meccanismo di scattering, viene selezionato un numero di fononi ottici polari nettamente maggiore rispetto a quanto accadrebbe nella realtà fisica: è necessario rimuovere tutte le collisioni selezionate dalla massimizzazione della probabilità. Tale operazione viene eseguita utilizzando un metodo, simile al self-scattering di Rees (par. 3.5), che viene chiamato *rigetto interno* al meccanismo di scattering.

Una volta selezionato il meccanismo di scattering, si sceglie lo stato finale $(\beta, \mathbf{k}')$ tramite il metodo descritto nel prossimo capitolo. In questo modo è possibile costruirsi “a posteriori” la probabilità di scattering corretta $P_0 = P_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Viene successivamente generato un nuovo numero casuale r' distribuito uniformemente tra 0 e il valore $\bar{P}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \max_{\mathbf{k}'} P_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ottenuto massimizzando la probabilità vera. Se

$$r' \leq \bar{P}_0 , \quad (5.13)$$

allora lo scattering è effettivamente avvenuto e ha dato come stato finale $(\beta, \mathbf{k}')$, se invece

$$r' \geq \bar{P}_0 , \quad (5.14)$$

significa che lo scattering da fonone polare è avvenuto a causa della sovrastima introdotta, dunque l'evento viene classificato come self-scattering e l'elettrone viene fatto proseguire dallo stato iniziale $(\alpha, \mathbf{k})$.

Purtroppo, l'introduzione del self-scattering interno, comporta un notevole spreco in tempo di calcolo. Lo scattering polare infatti, nella forma

massimizzata, è di gran lunga il meccanismo più probabile nel SiO₂, questo significa che molte volte tale meccanismo viene selezionato, e, per il rigetto interno, si risolve in un self-scattering. Le simulazioni indicano che il numero di questi eventi, in una prova a campo elettrico $E = 500 \text{ KV/m}$, risulta essere 2.3 volte maggiore rispetto agli scattering veri da fononi ottici polari.

Capitolo 6

Le simulazioni

6.1 Il programma simulativo

Nel presente paragrafo verrà descritto in dettaglio il programma simulativo. In particolare verranno discussi gli artifici introdotti per diminuire il tempo di calcolo e le ripercussioni che essi hanno sulla raccolta degli stimatori per le grandezze fisiche. Altre peculiarità, di questo codice monte Carlo, sono la particolare struttura a bande del materiale simulato (ampiamente discussa nei primi capitoli) e il modello implementato per descrivere i fononi e la scelta dello scattering, discusso nel capitolo precedente. Infine occorre discutere la modalità di scelta dello stato dopo lo scattering.

6.1.1 Fast self-scattering

Come si è visto nel capitolo precedente, le probabilità di scattering hanno notevoli variazioni man mano che l'energia dell'elettrone aumenta, ne consegue che, utilizzando il self-scattering con una probabilità massima Γ_0 come descritto nel paragrafo (3.5), una simulazione con elettroni a basse energie, comporta un gran numero di self-scattering. Poiché ad ogni volo libero bisogna scegliere il meccanismo di scattering, è necessario calcolare tutte le

volte le probabilità di scattering per l'elettrone a fine volo, e successivamente scegliere, modo stocastico, lo scattering. Ne segue che anche per ogni self-scattering vanno calcolate tutte le probabilità relative ai vari meccanismi, con notevole dispendio di tempo di calcolo.

Tale processo può essere abbreviato utilizzando la tecnica del *fast self-scattering* [19]. Essa consiste nell'impostare, all'inizio della simulazione, una mesh sull'intervallo energetico di interesse, e memorizzare in un vettore la probabilità massima $P^{(l)}$ relativa ad ogni intervallino $\delta\epsilon^{(l)}$ delle mesh. In questo modo, alla fine del volo, se l'energia dell'elettrone si trova nell'intervallino $\delta\epsilon^{(n)}$ della mesh, prima di confrontare tutte le probabilità di scattering relative ai vari meccanismi, si confronta $r\Gamma_0$ con il valore $P^{(n)}$ (r è il numero casuale generato per la scelta dello scattering). In questo modo se

$$r\Gamma_0 > P^{(n)} \quad (6.1)$$

significa che è avvenuto un self-scattering e si evita di calcolare tutte le probabilità, se invece

$$r\Gamma_0 < P^{(n)} \quad (6.2)$$

occorre valutare le probabilità di scattering di quell'intervallo di energia.

Le simulazioni eseguite indicano che con l'introduzione del fast self-scattering, il tempo di calcolo diminuisce di circa un fattore 2.

6.1.2 Doppio tetto di probabilità

Come descritto nel capitolo precedente, la probabilità di scattering totale in ossido di Silicio, è circa 2-3 ordini di grandezza maggiore di quella nel Silicio. Questo significa che, imponendo un massimo Γ_0 per la probabilità di scattering, nel silicio tale massimo sarà ordini di grandezza più basso che nell'ossido, dunque aumenterà notevolmente il numero dei self-scattering, il che implica simulazioni molto più lunghe con spreco di tempo di calcolo.

Per risolvere questo problema la scelta naturale è stata imporre due massimi di probabilità: uno per ogni materiale in cui si trova l'elettrone. Si ha così un massimo di probabilità Γ_{Si} per i meccanismi di scattering del Silicio, e un massimo Γ_{SiO_2} per i meccanismi nell'ossido di Silicio. In questo modo si è introdotta una probabilità di scattering dipendente dalla posizione:

$$\Gamma(z) = \begin{cases} \Gamma_{\text{Si}} & , z \text{ interna al Si} \\ \Gamma_{\text{SiO}_2} & , z \text{ interna al SiO}_2 \end{cases} . \quad (6.3)$$

In questo modo può capitare spesso (se si tiene conto del gran numero di voli liberi di una simulazione) che l'elettrone, durante un volo libero generato con l'equazione (3.24) $t_r = -\tau_0 \ln(r)$, attraversi un'interfaccia tra Si e SiO₂. In generale il tempo di volo generato in questo modo non è più valido perchè l'elettrone durante il volo entra in un materiale dove la probabilità stessa usata per generare il volo è diversa. Lo stesso numero casuale r viene dunque utilizzato per generare un nuovo volo come segue. Se consideriamo il caso in cui la particella passa dal Si (a più bassa probabilità) all'ossido (con probabilità più alta), allora la durata dei voli liberi segue la distribuzione:

$$P(t) = \begin{cases} \Gamma_{\text{Si}} e^{-\Gamma_{\text{Si}} t} & , t < \tilde{t} \\ \Gamma_{\text{SiO}_2} e^{\Gamma_{\text{SiO}_2} t} & , t > \tilde{t} \end{cases} , \quad (6.4)$$

dove $\tilde{t}$ è il tempo impiegato dall'elettrone a raggiungere l'interfaccia. Utilizzando la tecnica diretta per la generazione del tempo di volo [19] si ottiene:

$$t_r = -\tau_{\text{SiO}_2} \ln(r) + \tilde{t} \left(1 - \frac{\tau_{\text{SiO}_2}}{\tau_{\text{Si}}} \right) . \quad (6.5)$$

Per un elettrone che comincia il volo nell'ossido e lo termina nel silicio, si può continuare a generare il tempo di volo con la (3.24), infatti in questo caso si può considerare il valore Γ_{SiO_2} esteso anche al Silicio. Non sono stati considerati i casi in cui il portatore attraversa due interfacce (o due volte la stessa in sensi opposti); tali casi sono comunque estremamente rari e comportano un errore trascurabile.

Per il calcolo del tempo $\tilde{t}$ si è proceduto nel modo seguente. Poiché nella simulazione si tiene conto della posizione dell'elettrone, è nota in ogni momento la sua distanza dalle interfacce, conoscendo tutte le grandezze fisiche del moto al momento di inizio volo, si è utilizzata la (5.12) per ricavare l'energia dell'elettrone all'interfaccia tra i 2 materiali

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_i + eE_z \delta \tilde{z} \quad (6.6)$$

dove le grandezze segnate con la tilde indicano i valori all'interfaccia, mentre ϵ_i è l'energia di inizio volo. Inoltre il campo elettrico interviene accelerando solo la componente k_z , quindi noti k_x e k_y , che non cambiano durante il volo, e l'energia $\tilde{\epsilon}$, si può ricavare $\tilde{k}_z$, nel momento in cui l'elettrone si trova all'interfaccia, invertendo l'equazione della banda $\epsilon(\mathbf{k})$ (2.17). Infine si ricava $\tilde{t}$ utilizzando la regola dell'accelerazione (3.1).

Un ulteriore risparmio di tempo di calcolo si può ottenere introducendo anche (per ogni materiale) una probabilità massima, in funzione dell'energia, a due livelli.

6.1.3 Stimatori e funzione di distribuzione

Nel caso in cui si usa una probabilità di scattering costante (compreso il self-scattering) la raccolta degli stimatori per una qualsiasi grandezza fisica $\mathcal{A}$, può essere fatta alla fine di ogni volo secondo la legge [19]

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{A}_i \quad (6.7)$$

dove $\mathcal{A}_i$ è il valore della grandezza fisica di interesse a fine volo e la somma è fatta su tutti i voli N compresi quelli che si concludono con un self-scattering. Le grandezze da valutare in una simulazione del trasporto sono la velocità di deriva e l'energia media. Per quanto riguarda l'energia media, essa si calcola facilmente, noto lo stato $(\alpha, \mathbf{k})$ di fine volo, utilizzando la forma analitica della banda: la velocità di fine volo si calcola con la ben nota relazione $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$.

Tuttavia, in caso di probabilità massima non costante, la legge precedente (6.7) deve essere modificata. Per capire come modificare tale relazione osserviamo che si possono effettuare stime delle grandezze fisiche nella sola regione del Si o del SiO₂, ottenendo rispettivamente:

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\text{Si}} = \frac{1}{N_{\text{Si}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Si}}} \mathcal{A}_i \quad (6.8)$$

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\text{SiO}_2} = \frac{1}{N_{\text{SiO}_2}} \sum_{i=1}^{N_{\text{SiO}_2}} \mathcal{A}_i \quad (6.9)$$

dopo di che il valore medio per su tutto il materiale si ottiene utilizzando le regole della statistica [39]:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\tau_{\text{Si}} \langle \mathcal{A} \rangle_{\text{Si}} + \tau_{\text{SiO}_2} \langle \mathcal{A} \rangle_{\text{SiO}_2}}{\tau_{\text{Si}} + \tau_{\text{SiO}_2}} \quad (6.10)$$

che significa pesare ogni volo, conclusosi nel materiale X_i ¹, con la probabilità

$$\gamma_{X_i} = \frac{\tau_{X_i}}{\tau_{\text{Si}} + \tau_{\text{SiO}_2}} \quad (6.11)$$

e ottenere quindi l'equazione (6.7) modificata come segue:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \gamma_{X_i} \mathcal{A}_i . \quad (6.12)$$

La funzione di distribuzione viene raccolta impostando una mesh nello spazio $\mathbf{k}$ (o sull'energia) e andando a conteggiare quante volte lo stato dellelettrone cade all'interno di ogni intervallo della suddivisione; successivamente si divide per il numero totale di voli per normalizzare a 1. Anche il calcolo della funzione di distribuzione deve essere modificato in virtù del doppio tetto di probabilità introdotto. In generale, per una probabilità di scattering non costante, la funzione di distribuzione dipende dalla distribuzione elettronica prima dello scattering $n_b(\mathbf{k})$ secondo la relazione seguente [19]

$$n(\mathbf{k}) = c n_b(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \quad (6.13)$$

¹Tale indice rappresenta il materiale: Silicio od ossido di silicio.

dove c è un'opportuna costante di normalizzazione. Poiché nel nostro caso si sono assunti due tempi di scattering a seconda del materiale, l'equazione precedente diventa

$$n(\mathbf{k}, X) = cn_b(\mathbf{k}, X)\tau(\mathbf{k}, X) . \quad (6.14)$$

Per trovare la costante di normalizzazione c è sufficiente imporre che la somma su $\mathbf{k}$ e su X sia 1. In questo modo la funzione di distribuzione totale diventa:

$$n(\mathbf{k}) = c [n_{b\text{Si}}(\mathbf{k})\tau_{\text{Si}}(\mathbf{k}) + n_{b\text{SiO}_2}(\mathbf{k})\tau_{\text{SiO}_2}(\mathbf{k})] , \quad (6.15)$$

che è la somma delle funzioni di distribuzione calcolate per ogni materiale, opportunamente normalizzata a 1 tramite la costante c .

6.1.4 Scelta dello stato finale

Dopo ogni scattering è necessario scegliere lo stato finale in base alla sezione d'urto differenziale dell'evento che ha causato la transizione, nel nostro caso le probabilità $P_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ relative a ciascun meccanismo di scattering. Per i fononi ottici da potenziale di deformazione la dipendenza da $\mathbf{k}'$ è presente solo nella δ di conservazione dell'energia (3.11); nel caso di fononi ottici polari la dipendenza da $\mathbf{k}'$ al di fuori della funzione δ è stata eliminata con la massimizzazione, per poi utilizzare il rigetto interno. In ogni caso, vale la relazione

$$P_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \int P_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')d\mathbf{k}' ; \quad (6.16)$$

si ricordi che non ho eseguito la somma sulle minibanda β perché nel codice si utilizzano le probabilità interminibanda, di conseguenza la minibanda β , in cui si troverà la particella a transizione avvenuta, è determinata dalla scelta del meccanismo di scattering. Durante lo svolgimento di questa integrazione si riesce a stabilire qual'è la distribuzione di probabilità per lo stato finale. Poiché le probabilità integrate sono state ottenute utilizzando il

calcolo della DOS nel secondo capitolo, ad esso, e in particolare alle equazioni (2.23, 2.24), faremo riferimento anche per questa discussione. Ricordiamo che in tale calcolo è stata applicata la trasformazione in coordinate cilindriche $(k'_x, k'_y, k'_z) \rightarrow (k'_z, k'_\parallel, \vartheta)$.

Per applicazione della già citata tecnica diretta per la generazione di numeri casuali, si ottiene immediatamente dalla (2.23) che l'angolo ϑ deve essere scelto uniformemente tra 0 e 2π , l'integrando infatti è la costante 1. Nell'integrazione di $k'_\perp = k'_z$ la funzione integranda è la funzione gradino Θ , quindi anche in questo caso è possibile integrare una costante, a patto di scegliere gli estremi di integrazione tali che l'argomento della funzione gradino sia positivo, ne consegue che anche k_z viene scelto uniformemente all'interno di questi estremi di integrazione. Infine il termine radiale è scrivibile in funzione delle altre due componenti

$$k'_\parallel = k'_\parallel(k'_z, \vartheta) \quad (6.17)$$

utilizzando la conservazione dell'energia.

6.2 Risultati

Nelle sezioni e nei capitoli precedenti sono stati descritti in dettaglio i modelli su cui è costruita la simulazione, e i procedimenti numerici per il codice Monte Carlo. Nel presente paragrafo verranno presentati e discussi i risultati ottenuti dalle simulazioni. In particolare sono state eseguite le simulazioni per molti valori di campo elettrico con l'intento di ottenere come risultati le grandezze fisiche (nella fattispecie velocità di deriva ed energia media) in funzione del campo elettrico; tuttavia è stato simulato il trasporto anche a singoli valori di campo elettrico. Le simulazioni per singolo valore di campo sono state utili per osservare l'evoluzione e la convergenza delle grandezze fisiche di interesse con il progredire della simulazione, si è potuto in questo modo

constatare il corretto funzionamento dei programmi. Non solo, con l'aiuto delle simulazioni a singolo campo, analizzando in particolare le funzioni di distribuzione $f(E)$ e $f(k_z)$, si sono potuti studiare in dettaglio e spiegare i fenomeni di trasporto che si osservano.

6.2.1 Simulazioni a singolo campo elettrico

Per prima cosa saranno riportati e discussi alcuni risultati ottenuti con simulazioni a singolo campo elettrico. Si premette che non abbiamo eseguito simulazioni a bassissime temperature (4 K) perché, mancando i fononi acustici nella simulazione, gli elettroni a basse energie interagiscono pochissimo con i fononi ottici, la cui popolazione è molto ridotta; tutti i risultati sarebbero stati inconsistenti in quanto i fononi ottici sono un meccanismo di scattering secondario a temperature così basse.

La prime due figure (6.1,6.2) riportate rappresentano l'andamento di velocità di deriva ed energia media in funzione del tempo di simulazione, per campi elettrici e temperature diverse (si vedano le didascalie). Si nota l'andamento tipico delle simulazioni Monte Carlo: la precisione della misura aumenta con il progredire della simulazione; una stima dell'errore (calcolato durante la simulazione) viene riportata dal file di uscita del programma (per un esempio del file di uscita si veda l'appendice A) e, per quanto riguarda le simulazioni discusse in questo paragrafo, i risultati sono trascritti in tabella (6.1). Le velocità di deriva sono molto basse, dell'ordine di 10^3 cm/s, circa 2 ordini di grandezza in meno rispetto ad altri superreticoli [33]; in effetti le bande del sistema allo studio, in particolar modo quella più bassa, sono molto piatte: questo significa che le buche del superreticolo sono poco accoppiate, quindi la mobilità sarà bassa.

Per l'interpretazione dei dati, si ricordi che le energie, sono calcolate rispetto al fondo della banda del silicio e non del minimo della minibanda; tuttavia nei risultati riportati in questo paragrafo sono state ricalcolate ri-

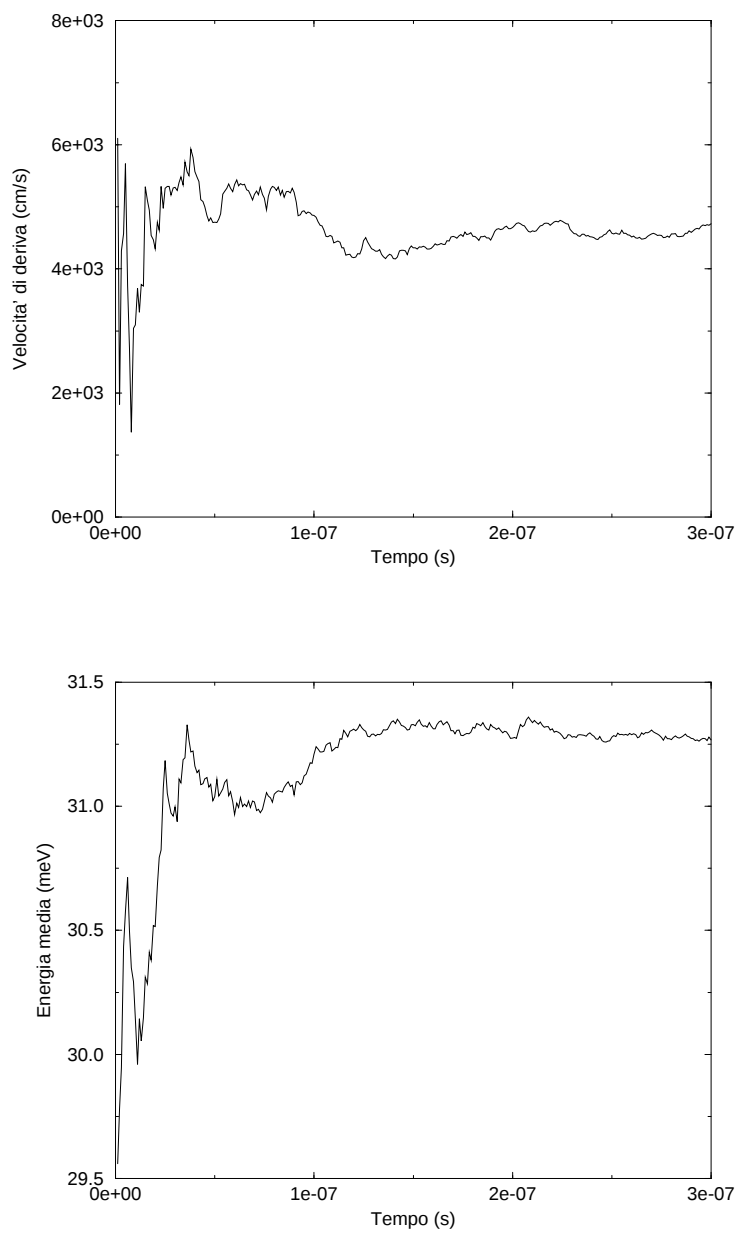


Figura 6.1: *Velocità di deriva ed energia media, in funzione del tempo di simulazione, per il superreticolo a $T=300K$ e campo applicato $E_z=500$ kV/m.*

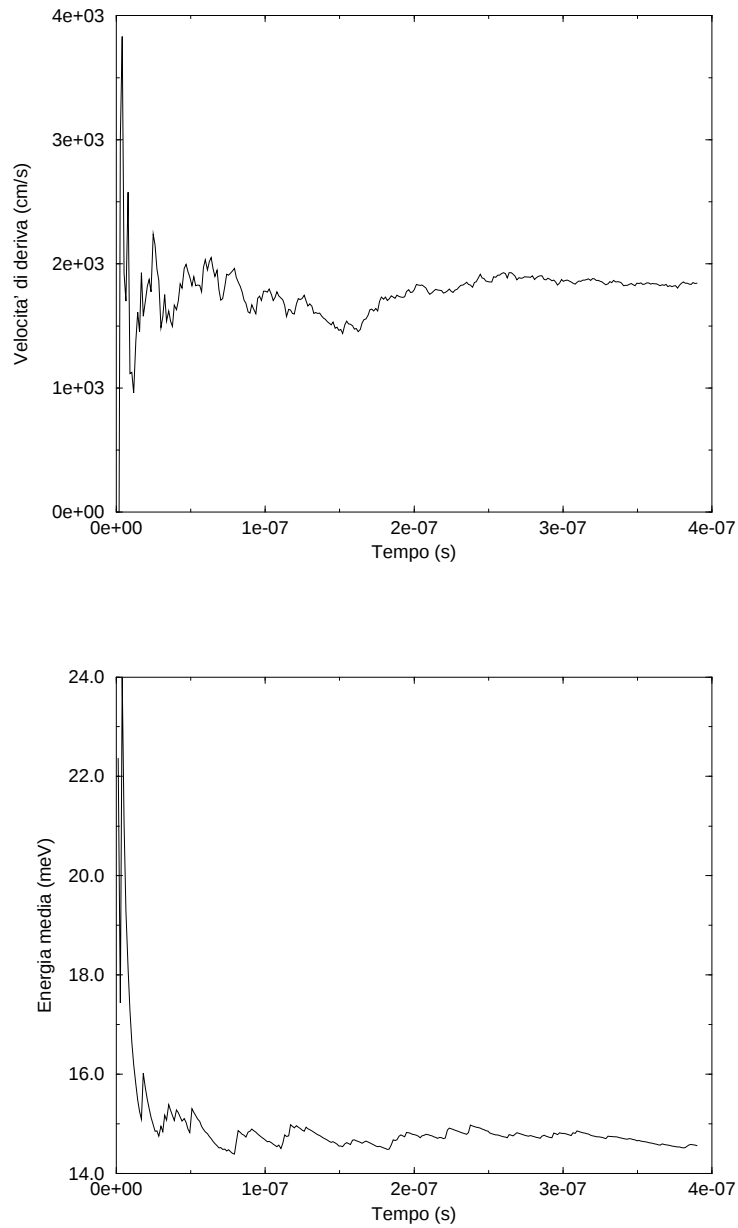


Figura 6.2: *Velocità di deriva ed energia media, in funzione del tempo di simulazione, per il superreticolo a $T=150K$ e campo applicato $E_z = 300 \text{ kV/m}$.*

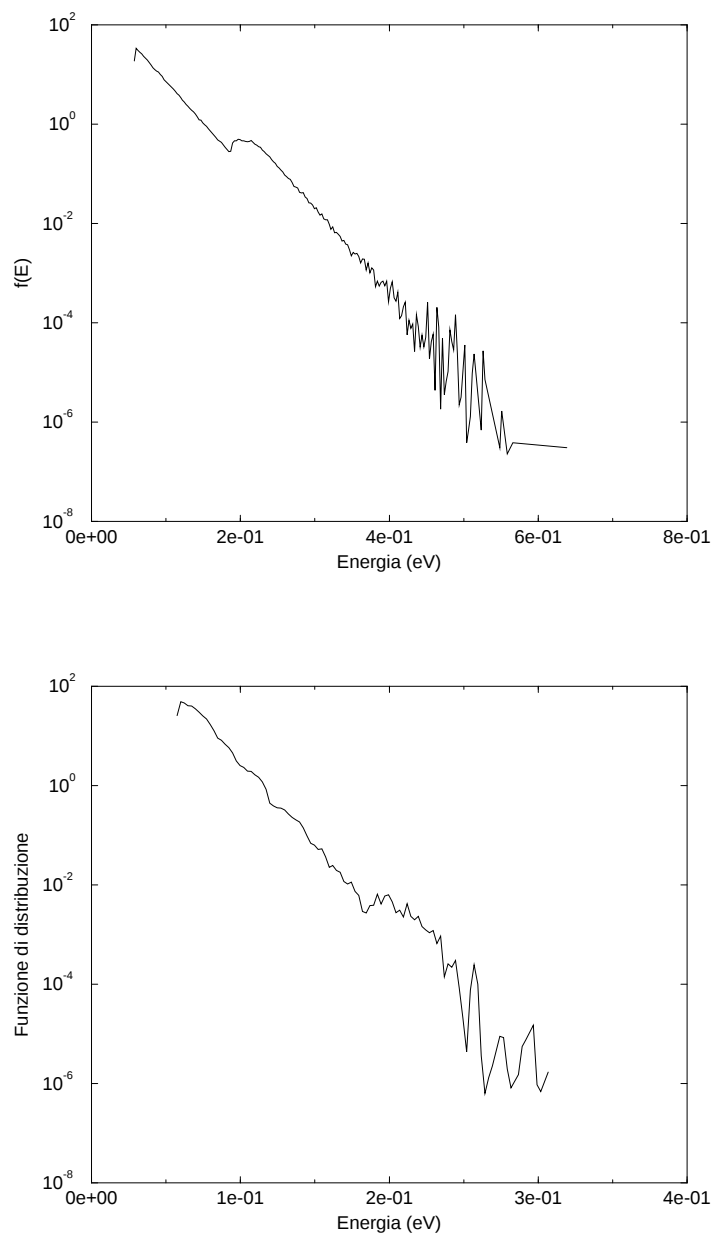


Figura 6.3: Funzioni di distribuzione a 300 K $E_z = 300 \text{ kV/m}$ (in alto) e a 150 K $E_z = 500 \text{ kV/m}$ (in basso). È evidente lo scalino dovuto alla densità degli stati. Si noti inoltre la differenza nelle scale di energia: la pendenza a 150 K è doppia, per cui la temperatura elettronica è circa la metà, come si vede in tabella (6.1)

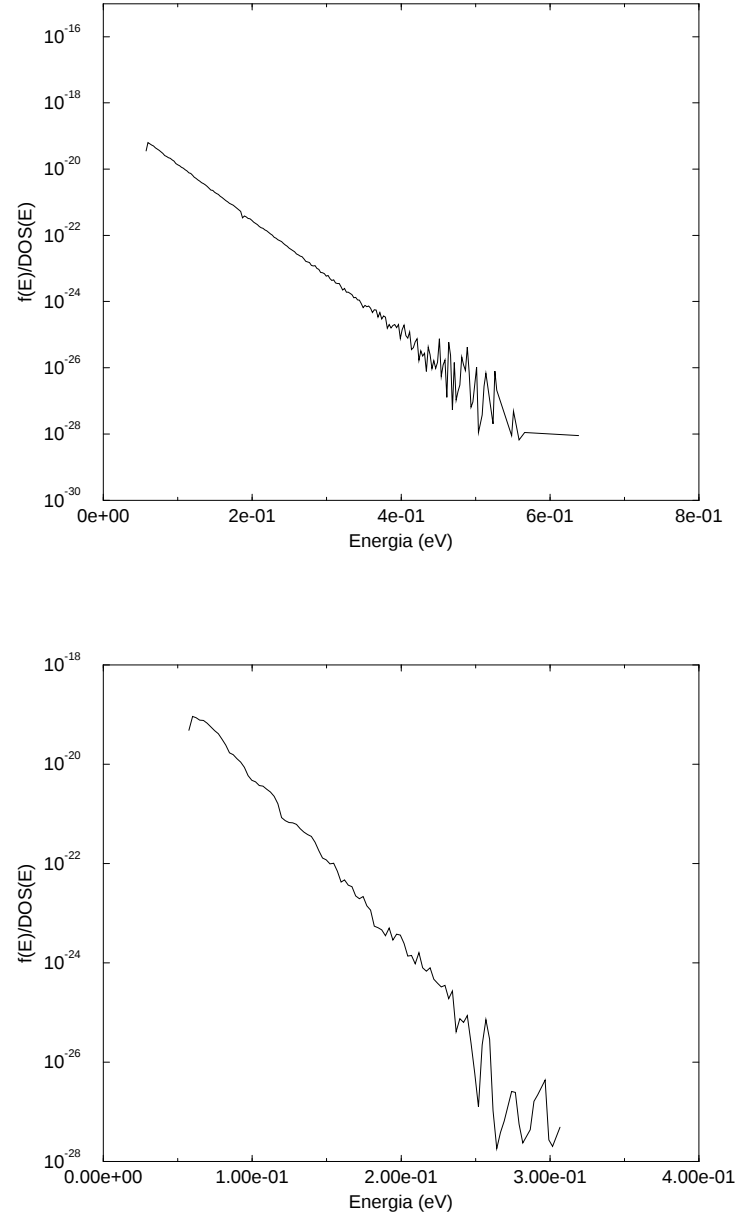


Figura 6.4: Funzioni di distribuzione divise per la DOS a 300 K $E_z = 300\text{ kV/m}$ (in alto) e a 150 K $E_z = 500\text{ kV/m}$ (in basso).

T=150 K, $E_z = 300$ kV/m	
$v_d = 18.4$ m/s	$\sigma v_d = 10$ %
$\bar{\epsilon} = 14.8$ meV	$\sigma \epsilon = 0.4$ %
T=300 K, $E_z = 500$ kV/m	
$v_d = 47.2$ m/s	$\sigma v_d = 8$ %
$\bar{\epsilon} = 31.2$ meV	$\sigma \epsilon = 0.1$ %

Tabella 6.1: *Risultati delle simulazioni per singolo valore di campo elettrico: grandezza fisiche e incertezze statistiche associate.*

spetto al fondo della prima minibanda che è di 55 meV, dunque le energie riportate sono effettivamente energie cinetiche. Tali energie risultano leggermente superiori dei valori calcolati al cap. 2, per l'energia termica di un elettrone in minibanda: tale sovrastima è dovuta al fatto che la simulazione include anche minibande ad energie superiori, mentre il calcolo era stato svolto considerando una sola minibanda. Si nota che l'energia media ha una minore incertezza associata: in tutte le simulazioni Monte Carlo del trasporto infatti, essa converge molto rapidamente.

Le funzioni di distribuzione in scala semilogaritmica (fig. 6.3), mostrano uno scalino che è dovuto alla densità degli stati del superreticolo; se infatti si divide la funzione di distribuzione per la DOS (fig. 6.4), si ottiene una retta. Tale grafico è la funzione di distribuzione classica di Maxwell-Boltzmann

$$f(\epsilon) = C e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (6.18)$$

dove C è un'opportuna costante di normalizzazione e T la temperatura degli elettroni. Dalla pendenza della retta si deduce la temperatura degli elettroni, che nel caso in esame corrisponde a quella del reticolo. Si osserva che numericamente la funzione di distribuzione calcolata per $T = 150$ K è più irregolare di quella calcolata a $T = 300$ K, fenomeno dovuto al fatto che a

basse temperature avvengono meno eventi di scattering, quindi la statistica delle grandezze fisiche è minore.

6.2.2 Simulazioni in funzione del campo elettrico: energia media

In questo paragrafo verranno esposti i risultati delle simulazioni effettuate per più valori di campo elettrico, in particolare compariranno i risultati ottenuti per la velocità di deriva e per l'energia media, in funzione del campo elettrico applicato, e a due temperature diverse.

Per primi riportiamo i risultati relativi all'energia media in figura (6.5). Si nota che ad alte temperature esiste una prima regione di campo elettrico dove l'energia media degli elettroni è costante ed è circa $\bar{\epsilon} = 31.5$ meV. poi c'è una zona in cui l'energia aumenta di 1 meV, e infine, nella zona tra 1000 kV/m e 4000 kV/m, si osserva una saturazione dell'energia media. La variazione massima che si osserva è $\Delta\epsilon = 1$ meV, quindi considerevolmente bassa rispetto alle energie degli elettroni.

Per quanto riguarda l'energia media a $T = 150$ K, invece si osserva che essa rimane pressapoco costante, considerando l'incertezza statistica. In effetti, la simulazione a basse temperature risente della mancanza dei fononi acustici: più si abbassa la temperatura, più i fononi ottici intervengono in bassa misura e la statistica peggiora. Inoltre il campo elettrico, anche se alto, non è sufficiente per scaldare gli elettroni che si muovono lungo una banda quasi piatta, quindi durante il volo, per quanto esso possa essere lungo, la variazione massima di energia dell'elettrone è pari all'ampiezza della minibanda, ovvero pochi meV. Il fatto che le energie degli elettroni siano pressapoco le stesse a diversi valori del campo elettrico è confermato anche dal fatto che la funzione di distribuzione, calcolata a diversi valori di campo elettrico (fig. 6.6), sia praticamente sempre una copia di se stessa e, poiché

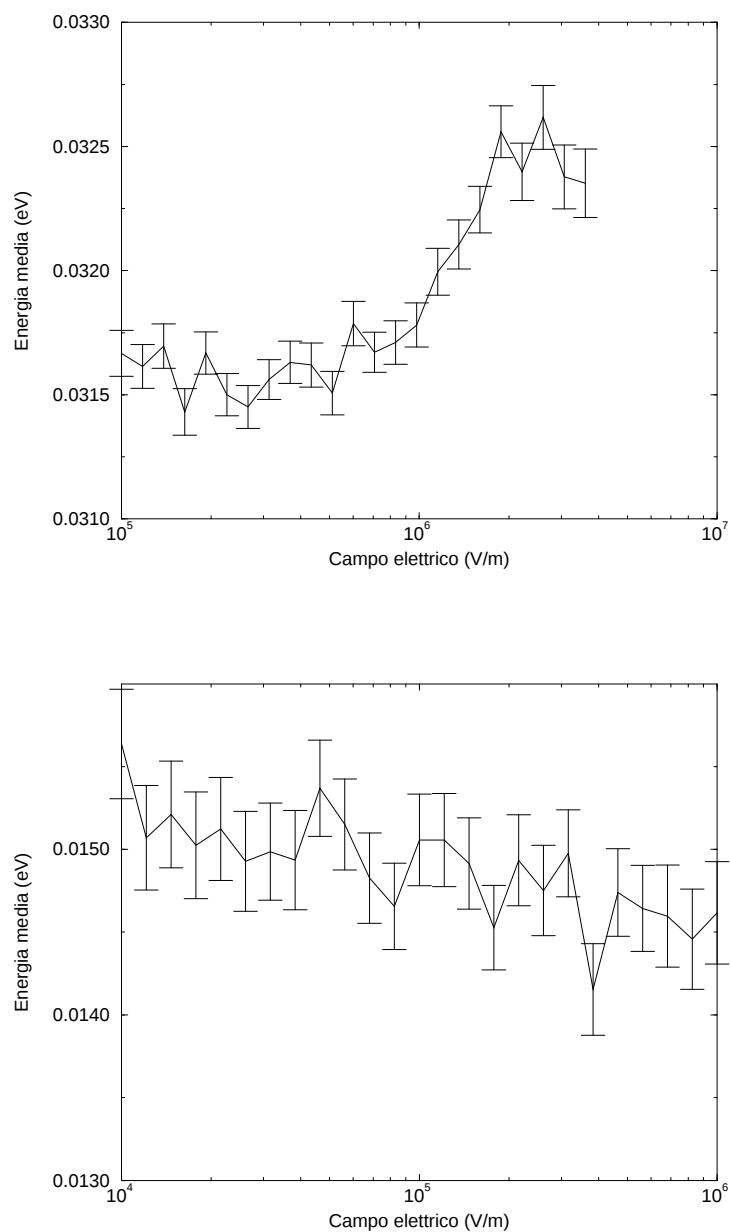


Figura 6.5: *Energia media in funzione del campo elettrico applicato, a temperatura $T=300$ K (in alto) e $T=150$ K (in basso). Insieme alle grandezze fisiche è riportato anche l'errore statistico associato.*

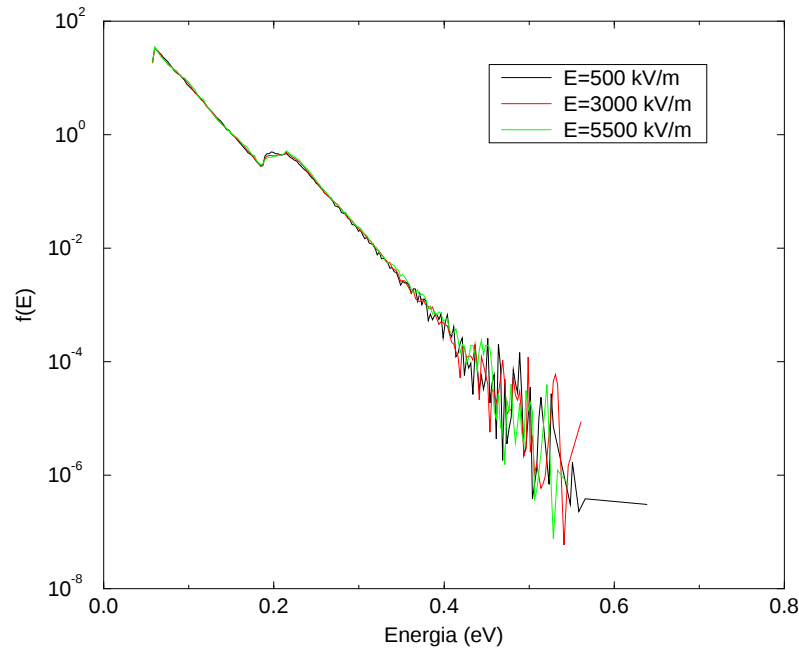


Figura 6.6: *Funzioni di distribuzione in funzione dell'energia, calcolate a 300 K per diversi valori di campo elettrico.*

dalla funzione di distribuzione si può ricavare la temperatura degli elettroni, si deduce che anche la temperatura rimane invariata.

6.2.3 Simulazioni in funzione del campo elettrico: velocità di deriva

Se si grafica la velocità di deriva in funzione del campo elettrico, si nota immediatamente che esiste il regime di conducibilità differenziale negativa (fig. 6.7) descritto nel quarto capitolo. Esistono due regioni di campi elettrico: nella prima, al di sotto di 10^6 V/m la velocità di deriva è crescente, nella seconda regione, per valori di campo elettrico superiori a circa 10^6 V/m, abbiamo conducibilità differenziale negativa. Il modello di Esaki e Tsu [31]

prevede che tale fenomeno avvenga per popolamento graduale di zone dello spazio $\mathbf{k}$ dove la velocità di gruppo, intesa come derivata della banda, è negativa.

Per verificare se effettivamente la popolazione elettronica si sposta in zone della banda a velocità negativa, si possono interpretare le funzioni di distribuzione in funzione di k_z . Osservando la funzione di distribuzione (fig. 6.8) si vede che procedendo verso campi più alti, la funzione si appiattisce e si sposta verso destra superando il bordo della minizona e favorendo quindi lo spopolamento della parte positiva della zona di Brillouin, e il popolamento della parte negativa. Poiché il modello è costituito da sei minibande (fig. 2.3) di cui cinque rivolgono la concavità verso l'alto e l'unica che la rivolge verso il basso è quella più alta in energia (quindi meno visitata), si deduce che aumenta la probabilità che l'elettrone abbia velocità negativa, e diminuisce la probabilità che abbia velocità positiva. Ancora più in dettaglio si possono graficare le funzioni di distribuzione $f_\alpha(k_z)$ per ogni minibanda α (figure 6.9,6.10,6.11): si nota che avviene il fenomeno descritto per ognuna delle minibande, ma solo quella più bassa in Γ partecipa alla distribuzione totale con il maggior contributo, la seconda minibanda in Γ e le minibande laterali danno un contributo che è inferiore rispettivamente di 3 e 2 ordini di grandezza.

Ad ulteriore conferma di quanto detto, si possono calcolare i tempi medi di scattering, ossia i tempi medi dei voli liberi, a campi bassi e a campi alti, per poi confrontarli con il periodo di un'oscillazione di Bloch. Tale calcolo è riportato in tabella (6.2), e mostra che per alti campi si ottiene $\omega_B \bar{\tau} > 1$ ed è quindi valido il regime di conducibilità differenziale negativa. Il tempo medio di scattering è calcolato come rapporto tra il tempo di simulazione e il numero di collisioni vere avvenute durante la simulazione.

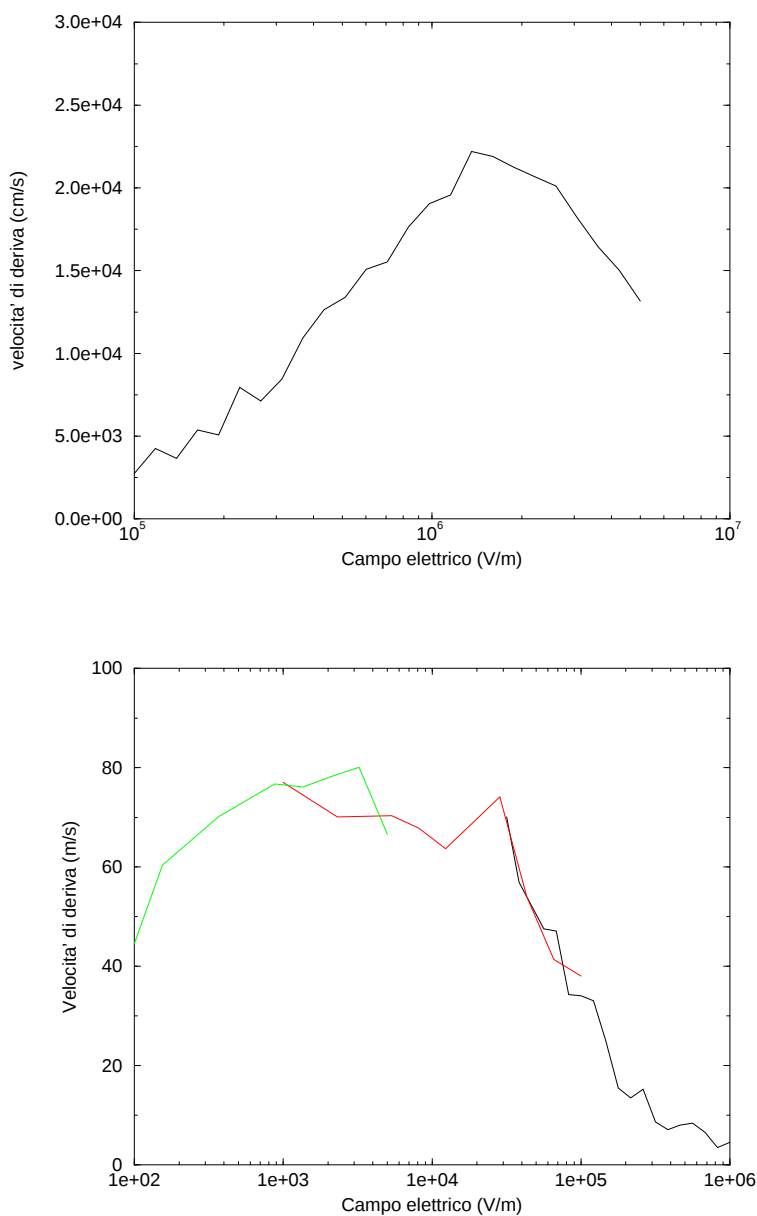


Figura 6.7: Velocità di deriva in funzione del campo elettrico applicato, a temperatura $T=300$ K (in alto) e $T=150$ K (in basso). Si noti il regime di conducibilità negativa per entrambe le temperature.

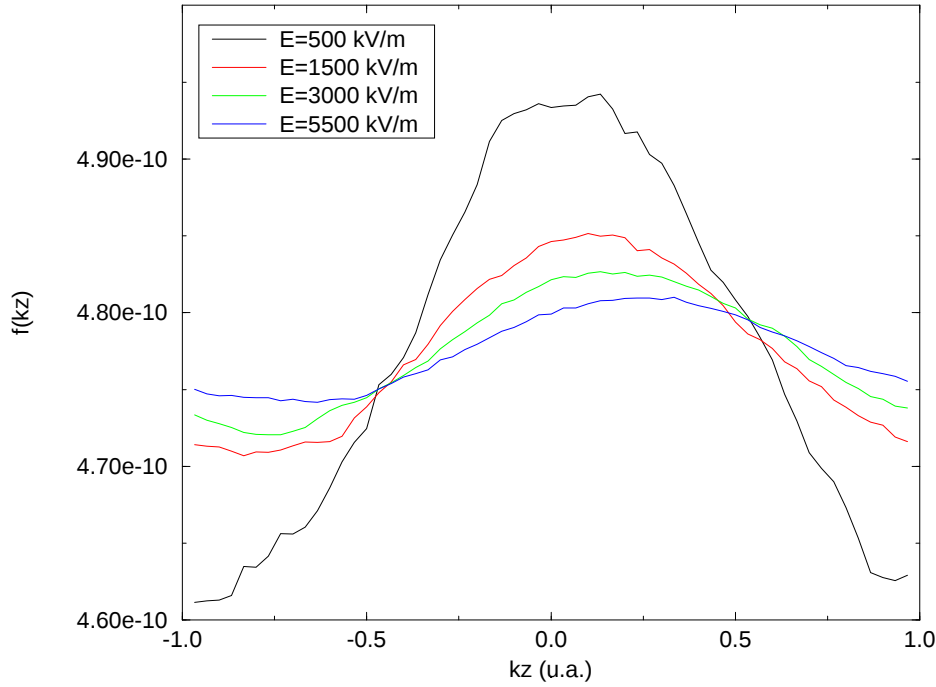


Figura 6.8: Confronto delle funzioni di distribuzione $f(k_z)$, sommate su tutte le minibande, a $T=300$ K per diversi valori di campo elettrico. È evidente il popolamento della parte sinistra della minizona, e lo spopolamento della parte destra.

Campo elettrico (V/m)	ω_B (s^{-1})	$\bar{\tau}$ (s)	$\omega_B \bar{\tau}$
100	$4.6 \cdot 10^8$	$0.5 \cdot 10^{-12}$	0.002
10^6	$4.6 \cdot 10^{12}$	$0.7 \cdot 10^{-13}$	0.3
$1.5 \cdot 10^6$	$6.9 \cdot 10^{12}$	$0.7 \cdot 10^{-13}$	0.5
$5.5 \cdot 10^6$	$2.1 \cdot 10^{13}$	$0.6 \cdot 10^{-13}$	1.3

Tabella 6.2: Calcolo del fattore $\omega_B \bar{\tau}$ per diversi valori di campo elettrico. Come previsto tale fattore diventa maggiore di 1 per campi alti in cui si ha conducibilità differenziale negativa.

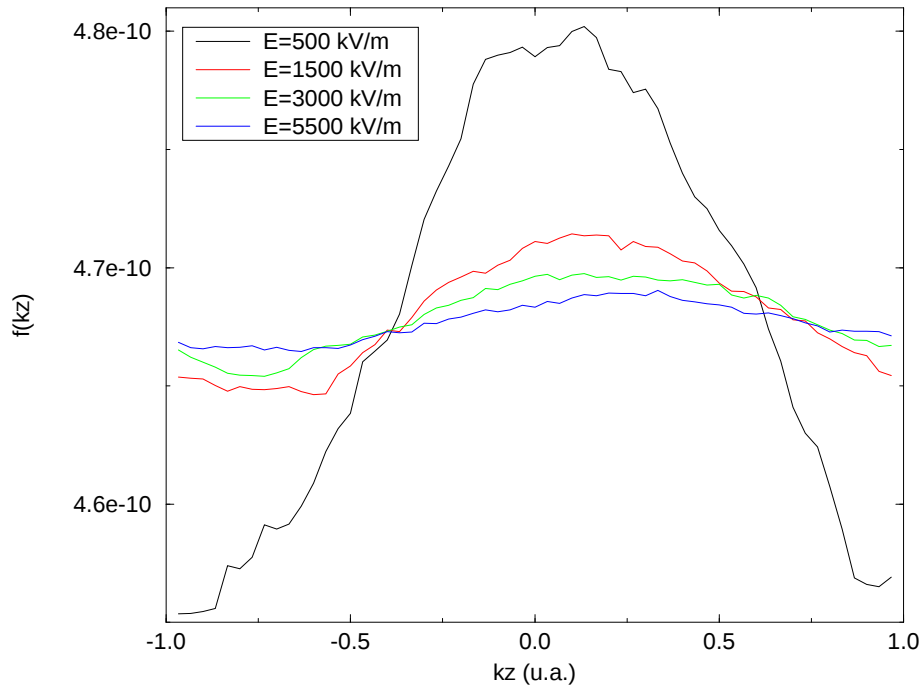


Figura 6.9: Confronto delle funzioni di distribuzione $f_\alpha(k_z)$, per la prima minibanda nel punto Γ , a $T=300$ K per diversi valori di campo elettrico.

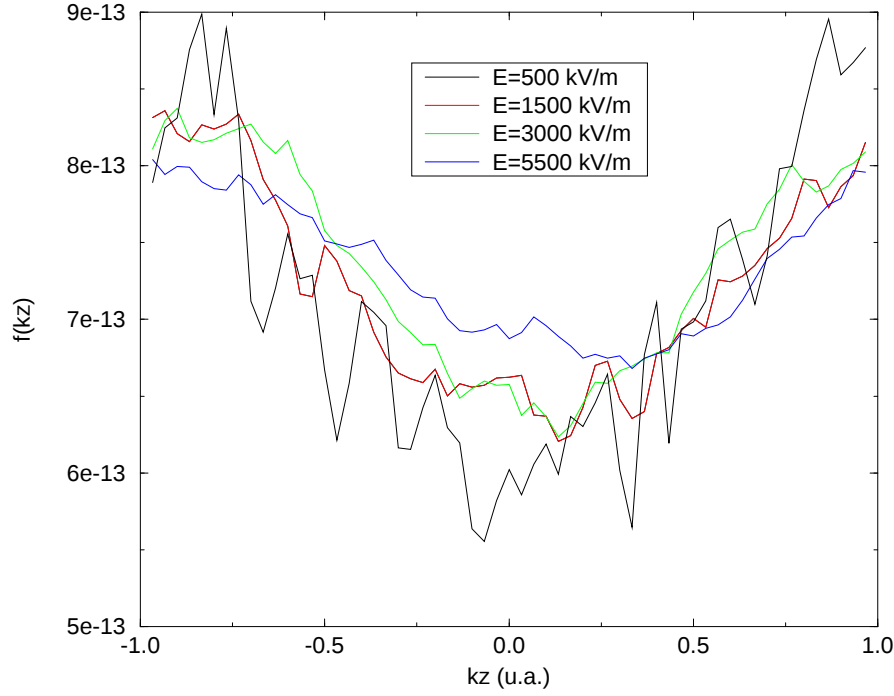


Figura 6.10: *Confronto delle funzioni di distribuzione $f_{\alpha}(k_z)$, per la seconda minibanda nel punto Γ , a $T=300$ K per diversi valori di campo elettrico. Tale minibanda volge la concavità verso il basso, dunque la funzione di distribuzione è più alta ai lati che al centro. Poiché tale minibanda è la meno visitata la statistica è più bassa, da qui la forma poco regolare delle funzioni di distribuzione.*

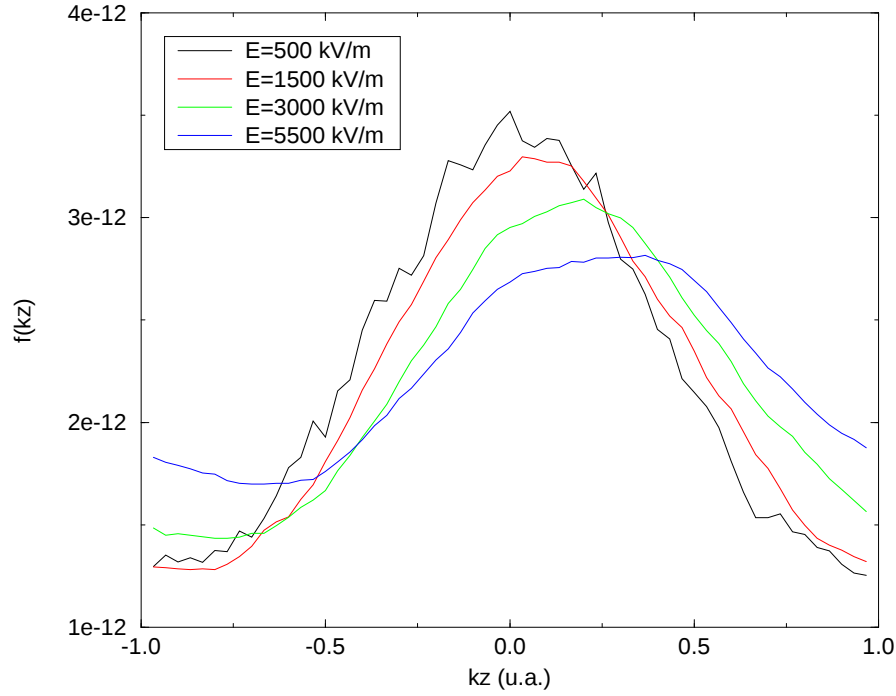


Figura 6.11: Confronto delle funzioni di distribuzione $f_{\alpha}(k_z)$, per una delle quattro minibande fuori da Γ in direzione k_x parallela ai piani di crescita, a $T=300$ K per diversi valori di campo elettrico. Sostanzialmente la funzione di distribuzione si comporta come per la prima minibanda in Γ , ma ha valori molto più bassi.

Conclusioni

Per studiare il trasporto di carica in superreticoli, si è dovuto innanzitutto studiare la struttura a bande del Si/SiO₂. Tale lavoro ha richiesto l'applicazione combinata di varie tecniche di calcolo e ha dato come risultato un modello di minibande per la struttura fisica di interesse. Utilizzando la struttura a bande ottenuta si è potuto calcolare analiticamente il contributo di energia cinetica media di un elettrone in minibanda.

Nella seconda parte della tesi, utilizzando la struttura a bande calcolata nei primi capitoli, la teoria del trasporto semiclassica e il metodo Monte Carlo, si è prodotto un simulatore Monte Carlo, a singola particella, per il trasporto in Si/SiO₂. Elementi originali del modello di trasporto sono, in particolare, la struttura elettronica del sistema fisico simulato, e il modello per i fononi confinati: fononi ottici da potenziale di deformazione in Silicio, fononi ottici polari e non polari in ossido di Silicio. Si è inoltre rivelato interessante il calcolo delle probabilità di scattering da fononi, sia perché la struttura a bande, diversa da quella di un bulk, influenza necessariamente le probabilità di transizione, sia perché è necessario avere probabilità di tipo “interminibanda” poiché i portatori sono in grado di visitare tutte le minibande. Tramite tale codice, si sono studiati i regimi di trasporto nel sistema fisico di interesse, e in particolare si è osservato il regime di conducibilità differenziale negativa, previsto dai modelli teorici e simulato in superreticoli di altro tipo (GaAs/Al_xGa_{1-x}As). Inoltre, come prevedibile, data la strut-

tura elettronica, si sono riscontrate che le velocità di deriva molto basse, dell'ordine dei $10^3 - 10^4$ cm/s.

Un problema incontrato, riguarda il confronto con i dati sperimentali: in effetti tutta la letteratura riporta calcoli di trasporto in altri tipi di superreticoli, e sperimentalmente non è stato possibile trovare alcun risultato riguardante il Si/SiO₂. L'unico confronto possibile è stato fatto utilizzando le previsioni teoriche: il trasporto in Si/SiO₂ rientra qualitativamente nelle previsioni del modello di Esaki e Tsu, già utilizzato per spiegare le proprietà di trasporto in altri superreticoli.

Possibili sviluppi futuri, del lavoro di questa tesi, si possono avere dall'introduzione nel modello dei fononi acustici, per ottenere in questo modo buone simulazioni anche a basse temperature. Inoltre sarebbe utile sviluppare algoritmi più efficienti al fine di ridurre i tempi di calcolo a parità di intervallo di tempo simulato: in questo modo si potrebbe raccogliere una statistica maggiore ottenendo quindi risultati più precisi. Infine, nonostante il metodo Monte Carlo sia un metodo di calcolo ottimo e versatile per il trasporto elettronico, non è possibile applicarlo con successo allo studio di tutti i regimi di trasporto in superreticoli. Sarebbe quindi auspicabile in futuro, l'utilizzo di teorie quantistiche per il trasporto ed il confronto dei risultati con quelli ottenuti da simulazioni Monte Carlo.

Appendice A

File di uscita del programma Monte Carlo

I dati riportati all'interno della tesi sono generalmente grafici generati da files numerici. Tuttavia molti dati non possono essere graficati e sono trascritti dal programma di simulazione, in un file di output. I valori presenti in tali files sono stati più volte utilizzati per confronti o discussioni. Di seguito viene quindi riportato un file di uscita, non numerico, del programma di simulazione.

```
=====
----- DATI DI INGRESSO -----
campo elettrico  0.0000000E+00  0.0000000E+00  500000.0  V/m
sottostorie      300 di  9.9999997E-10 secondi
temp reticolo   300.0000
energia fononi deform. Si,SiO2  6.2045194E-02  0.1319322
energia fononi polari Si,SiO2  0.0000000E+00  8.6173877E-02
probabilita' max Gamma=  3.0356397E+13  1.7400190E+16 s^-1
```

----- EVENTI SIMULAZIONE -----

```

num di voli = 5219996908.00000
tempo totale= 2.999999915154206E-007
num self sc = 5215102664.00000    -->    99.9062404808612    %

```

PERMANENZA NELLE BANDE

```

banda      1    5115941269.00000
banda      2    7812673.00000000
banda      3    24209306.0000000
banda      4    24039133.0000000
banda      5    24340960.0000000
banda      6    23653568.0000000

```

TEMPO di PERMANENZA nei MATERIALI

```

silicio  2.499944657332867E-007 s
ossido   5.000554212923071E-008 s

```

FONONI OTTICI da POTENZIALE di DEFORMAZIONE

	emissione	%
banda G bassa	132171.000000000	2.532012994058272E-003
banda G alta	934.000000000000	1.789273090504290E-005
bande laterali	12068.0000000000	2.311878764047728E-004
	assorbimento	%
banda G bassa	100846.000000000	1.931916853158412E-003
banda G alta	4486.00000000000	8.593874822272213E-005
bande laterali	39586.0000000000	7.583529396220861E-004

FONONI OTTICI POLARI (solo ossido)

	emissione	%
--	-----------	---

banda G bassa	2259428.00000000	4.328408694145533E-002
banda G alta	6048.000000000000	1.158621375949673E-004
bande laterali	36511.0000000000	6.994448587516290E-004
assorbimento		%
banda G bassa	2142767.00000000	4.104920056017780E-002
banda G alta	96638.0000000000	1.851303778588368E-003
bande laterali	62461.0000000000	1.196571589999877E-003

TOTALE FONONI= 4893944.00000000

uscite anticipate, nflag= 300
itrop= 0

----- RISULTATI -----

ENERGIA MEDIA E= 8.6266890E-02 eV +- 0.1317460 %
VEL di DERIVA V= 47.28486 m/s +- 8.089518 %
1.418831604259828E-005 47.29439

----> INIZIO DELLA SIMULAZIONE ORE 204607.349

----> FINE DELLA SIMULAZIONE ORE 064043.113

Bibliografia

- [1] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures* (Les Editions de Physique, Paris, 1990).
- [2] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Les Editions de Physique, Paris, 1990).
- [3] T. Ando, B. Fowler, F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [4] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
- [5] L. J. Sham, *Electronic Properties in Semiconductor Heterostructures* in *Physics of low dimensional semiconductor structures* (Plenum Press, New York, 1993).
- [6] J. B. Xia, K. W. Cheah, Phys. Rev. B **56**, 14925 (1997).
- [7] R. F. Pierret, G. W. Neudeck, *Modular Series on Solid State Devices* vol.IV (Addison Wesley, 1989).
- [8] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders, Tokio, 1981).
- [9] V. Mitin, V. Kochelap, M. Strosio, *Quantum Heterostructures* (Cambridge University Press, 1999).
- [10] A. Wacker, *Semiconductor Superlattices: A model system for nonlinear transport* (tesi di abilitazione, Technischen Universität Berlin, 2000).

-
- [11] C. Rauch, G. Strasser, K. Unterrainer, Phys. Rev. Lett. **81**, 3495 (1998).
- [12] A Dargys, J. Kundrotas, *Handbook of physical properties of Ge, Si, GaAs and InP* (Science and Encyclopedia Publishers, Vilnius, 1994).
- [13] J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 (1963).
- [14] M. Hirose, Mat. Sci. Eng. B **41**, 35 (1996).
- [15] B. Brar, G. D. Wilk, A. C. Seabaugh, Appl. Phys. Lett. **69**, 2728 (1996).
- [16] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (Mc Graw-Hill, 1965).
- [17] Si veda come riferimento per le ricerche di quel periodo:
E. M. Conwell, *High Field Transport in semiconductors* (Sol. St. Phys. Suppl.9, 1967).
- [18] H. Budd, in *Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors*, J. Phys. Soc. Japan suppl. **21**, 420.
- [19] C. Jacoboni, L. Reggiani, Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).
- [20] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (John Wiley & Sons, New York, 1963).
- [21] W. A. Harrison, Phys. Rev. **104**, 1281 (1956).
- [22] D. Pines, D. Böhm, Phys. Rev. **85**, 338 (1952).
- [23] D. K. Ferry, *Semiconductors* (Macmillan, New York, 1991).
- [24] H. D. Rees, Phys. Lett. A, **26**, 416 (1968).
- [25] H. D. Rees, Phys. Chem. Sol. **30**, 643 (1969).

-
- [26] I. S. Gradstein, I. M. Ryzhik *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, 1993).
- [27] G. H. Döhler, *Electrons in Superlattices* in *Physics of low dimensional semiconductor structures* (Plenum Press, New York, 1993).
- [28] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928).
- [29] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah et. al., Phys. Rev. B **46**, 7252 (1992).
- [30] E. E. Mendez, F. Agullo-Rueda, J. M. Hong, Phys. Rev. Lett. **60**, 2426 (1988).
- [31] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [32] S. A. Ktitorov, G. S. Simin et al., Sov. Phys. Sol. St. **13**, 1872 (1972).
- [33] S. Rott, *Theory of Electronic Transport in Semiconductor Superlattices* (Lehrthul für Mikrocharakterisierung, Erlangen, 1999).
- [34] E. Molinari, A. Fasolino, *Fonons of ideal (001) superlattice: application to Si/Ge* in *Spectroscopy of Semiconductor Microstructures* (Plenum Press, New York, 1989).
- [35] M. V. Fischetti, D. J. Di Maria et. al., Phys. Rev. B **31**, 8124 (1985).
- [36] L. Reggiani, *Hot-Electron Transport in Semiconductors* (Springer, Berlin, 1985).
- [37] X. Gonze, J. C. Charlier, Phys. Rev. B **50**, 13035 (1994).
- [38] M. V. Fischetti, D. J. Di Maria, Sol. St. El. **31**, 629 (1988).
- [39] J. R. Taylor, *Introduzione all'analisi degli errori* (University Science Books, 1982).

Ringraziamenti

Vorrei ringraziare tutti coloro che hanno contribuito alla realizzazione di questo lavoro di tesi: il prof. Carlo Jacoboni, la prof. Rossella Brunetti, Paolo, Andrea, Annalisa. Tutti voi siete grandi, sia come fisici che come amici.

Un pensiero va anche a tutti i miei compagni di università di cui ho il piacere di essere amico, e che hanno contribuito a rendere più belli questi cinque anni della mia vita: non vi nomino tutti perché siete veramente molti, e ho paura di dimenticarmi di scrivere uno dei vostri nomi, ma voi lo sapete anche senza il nome.

Infine, grazie alla mia famiglia, che per tanti anni mi ha seguito e sostenuto nel cammino scolastico e universitario.

Questa tesi è anche un po' vostra.

Grazie di cuore a tutti.