



دانشگاه تربیت معلم بزوآر

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

مطالعه تاثیر فاصله گیت-درین در خواص تراپردی

ترانزیستورهای اثر میدانی $AlGaN/GaN$

استاد راهنما :

دکتر اصغر عسگری

استاد مشاور :

دکتر جواد باعدی

نگارش :

سعیده محمدی

بهمن ۱۳۸۷

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
مقدمه.....	۱.....
فصل اول: ساختارهای نامتجانس	
۱-۱ مقدمه.....	۵.....
۲-۱: ساختارهای نامتجانس.....	۶.....
۱-۲-۱: چگالی حاملها در نیمه رساناها.....	۷.....
۲-۲-۱: ساختار نامتجانس منفرد با آرایش انتخابی.....	۹.....
۳-۱: بررسی نیمرخ باند انرژی و چاه پتانسیل در ساختارهای نامتجانس منفرد.....	۱۲.....
۴-۱: کنترل انتقال بار.....	۲۰.....
فصل دوم: ساختارهای نامتجانس نیتريدی و بررسی عملکرد ترانزیستورهای AlGaN/GaN	
HEMT	
۱-۲: فیزیک نیمه رساناهای نیتريدی.....	۲۹.....
۱-۱-۲: قطبش خود به خودی و قطبش پیزو الکتریکی.....	۳۰.....
۲-۱-۲: قطبش بلورهای نیتريدی.....	۳۷.....
۲-۲: تاثیر قطبش روی ساختارهای نامتجانس.....	۴۰.....
۱-۲-۲: ساختار ترانزیستورهای اثر میدان نامتجانس AlGaN/GaN.....	۴۱.....

- ۳-۲: تفاوت نیمه‌رساناهای نیتريدی III-V با ديگر نیمه‌رساناها ۴۸
- ۴-۲: ساختار HEMT نیتريدی و کلیاتی در مورد آن ۵۱
- ۱-۴-۲: پارامترهای هندسی مهم HEMT ۵۳
- ۲-۴-۲: زیرلایه‌ها ۵۳
- ۵-۲: مدل تحلیلی برای کنترل بار در قطعه HEMT ۵۵
- ۱-۵-۲: رژیم های معکوس ۵۷
- ۲-۵-۲: رژیم معکوس قوی ۵۹
- ۶-۲: مشخصات ولتاژ- جریان در HEMT ۵۹
- ۷-۲: تشکیل چاه کوانتومی در فصل مشترک ۶۳
- ۸-۲: بررسی پارامترهای سیگنال کوچک میکروویو ۷۶
- ۱-۸-۲: رسانندگی متقابل؛ $g_m(m)$ ۷۶
- ۲-۸-۲: رسانندگی درین؛ $g_d(m)$ ۷۷
- ۳-۸-۲: فرکانس قطع؛ f_t ۷۷
- ۹-۲: ساختار و عملکرد HEMT نیتريدی با مدل جدید تقریب تغییر تدریجی شیب کانال ۷۹
- ۱-۹-۲: تئوری مدل ۷۹
- ۲-۹-۲: مدل سازی مشخصات ولتاژ-جریان در HEMT ۸۰
- ۳-۹-۲: پتانسیل کانال بر حسب موقعیت x ؛ $V_{ch}(x)$ ۸۶

فصل سوم: نتایج و بحث

۱-۳: نتایج و بحث حاصل از مدل تحلیلی بخش ۲-۶..... ۹۱

۲-۳: نتایج حاصل از مدل جدید..... ۹۹

۳-۳: نتیجه گیری و پیشنهاد..... ۱۰۹

مراجع..... ۱۱۱

مقدمه

امروزه، ساختارهای کوانتومی (میکروساختارها، نانوساختارها و...) به علت خواص تراپردی، نوری و... بسیار جالبشان در مقایسه با اندازه آنها، مورد توجه بسیاری از محققان فیزیک حالت جامد و الکترونیک قرار گرفته‌اند. از این میان، ساختارهای نامتجانس، مخصوصاً ساختارهای نامتجانس نیتريدی کاربرد بسیار ارزنده‌ای در صنعت الکترونیک و مخابرات ماهواره‌ای (ساخت ترانزیستورهای با تحرک‌پذیری بالا و فرکانس بالا، دیودهای نوری آبی و سبز، نمایشگرهای رنگی، الکترونیک کهموج با دما و قدرت بالا و...) در صنعت نظامی (آشکارسازهای مختلف از مادون قرمز تا فرا بنفش و رادارهای نظامی و...) و در صنعت اپتیک (تولید لیزرهای آبی و بنفش و...) پیدا کرده‌اند.

از خواص مواد نیتريدی بخصوص GaN و AlGaN که ساختارهای نامتجانس مربوط به آنها (AlGaN/GaN) مورد توجه در این پایان‌نامه می‌باشد می‌توان به بزرگ و مستقیم بودن گاف انرژی، و رسانندگی حرارتی خوب و سرعت اشباع الکترونی بالای آنها اشاره کرد که این خواص باعث مزیت‌هایی چون ولتاژ شکست بالا، ایجاد نویز کمتر، پایداری حرارتی خوب، و کاربرد در دماهای بالا می‌گردد [۱-۵].

هدف این پایان‌نامه بررسی ساختارهای نامتجانس حاصل از مواد نیتريدی و رفتار گاز الکترونی موجود در فصل مشترک ساختار و خواص تراپردی آن و ارائه مدلی برای کنترل دقیق بار در قطعه HEMT و بدست آوردن یک رابطه‌ی تحلیلی جامع برای محاسبه جریان و پارامترهای سیگنال

کوچک مانند g_m و فرکانس قطع میکروویو برای قطعه HEMT و همچنین بررسی وابستگی این پارامترها به تغییرات فواصل گیت-درین و گیت-سورس است.

در فصل اول این پایان نامه گاز الکترونی دو بعدی تشکیل شده در ساختارهای نامتجانس ساده از جمله ساختارهای نامتجانس با آلایش انتخابی و تاریخچه ساختارهای نامتجانس مورد بررسی قرار گرفته و چگونگی تشکیل چاه کوانتومی در فصل مشترک این ساختارها و نحوه تولید گاز الکترونی دو بعدی و کنترل آن توضیح داده شده است.

فصل دوم، توضیح ساختارهای نامتجانس نیتزیدی می باشد که در آن به بررسی قطبش خودبخودی و پیزوالکتریکی ساختارهای نیتزیدی و خواص الکتریکی ترانزیستور HEMT می پردازیم و یک مدل تحلیلی جامع برای محاسبه مقدار چگالی گاز الکترونی دوبعدی و مشخصه های ولتاژ-جریان ارائه می دهیم و به بررسی علت تشکیل چاه کوانتومی در حالت های آلایش غیر عمدی و بدون آلایش می پردازیم که در مقایسه با سایر مدل های موجود بسیار دقیقتر و مطابق با حالت تجربی است و نتایج را برای ساختارهای نامتجانس با حالت های مختلف از جمله ساختارهایی با ضخامت لایه سد AlGaN مختلف، درصد آلومینیوم مختلف و برای ولتاژ اعمالی شاتکی گیت متفاوت مورد بررسی قرار می دهیم.

در این فصل همچنین عملکرد قطعه AlGaN/GaN HEMT و پارامترهای سیگنال کوچک در کاربردهای میکروویو و توان بالا با ارائه مدل جدید به نام مدل تقریب تدریجی پتانسیل کانال بررسی شده است. با در نظر گرفتن این مدل، همچنین اثرات فاصله های بین گیت-درین (LGD) و بین گیت-سورس (LGS) بر روی مشخصه های ترابردی ترانزیستورهای اثر میدان AlGaN/GaN HEMT مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است.

در فصل سوم هم نتایج حاصل از مدل‌های بکارگرفته در حالت‌های مختلف مورد بحث و بررسی

قرار گرفته‌اند.

فصل اول

ساختارهای نامتجانس

۱-۱: مقدمه

در مقدمه کمی در مورد ترانزیستورهای HFET^۱ (ترانزیستور اثر میدانی نامتجانس) توضیح می‌دهیم. به این منظور ابتدا در مورد FET^۲ بحث می‌کنیم که در حدود ۶۰ سال پیش طرح ریزی شده است. این قطعه یک وسیله سه پایانه می‌باشد که در آن جریان بین دو پایانه، توسط تغییرات ولتاژ پایه سوم کنترل می‌شود. در سال ۱۹۶۰ با پیشرفت تکنولوژی اکسید کردن سطح سیلیکون به منظور از بین بردن پیوندهای ناخواسته این ترانزیستورها کامل شدند [۶].

از جمله ترانزیستورهای اثر میدان، ترانزیستورهای MOSFET^۳، JFET^۴ و MESFET^۵ می‌باشند، اگر پیوند در JFET با یک سد شاتکی جایگزین شود قطعه بدست آمده MESFET می‌باشد، اصول عملکرد این ترانزیستورها بر پایه تشکیل کانال برای ترابرد حامل‌های آلاشی می‌باشد، پیشرفت اصلی این نوع ترانزیستورها با تولید ترانزیستورهای اثر میدان نامتجانس (HFET) توسط تکنیک رشد اپی-تکسی ساختارهای نامتجانس مانند AlGaAs/GaAs و AlGaN/GaN صورت گرفته است. تکنیک رشد اپی تکسی مانند (MOCVD^۶، MBE^۱) ته نشینی لایه‌های نیمه‌رسانا با گاف نوارهای

^۱ Hetero field effect transistor

^۲ Field effect transistor

^۳ Metal-oxide-semiconductor field effect transistor

^۴ Junction field effect transistor

^۵ Metal- semiconductor field effect transistor

^۶ Metal-organic chemical Vapor deposition

متفاوت را بر روی هم ممکن می‌سازد. در ترانزیستورهای اثر میدان نامتجانس کانال در امتداد فصل مشترک دو نیمه‌رسانای مختلف تشکیل می‌شود با این تفاوت که در این ساختارها، کانال یک سیستم دوبعدی است. خصوصیات اصلی ترانزیستورهای نامتجانس این است که حامل‌های آلاشی از یون-های ناخالصی جدا شده، وارد کانال می‌شوند و در کانال ترابرد می‌یابند، در نتیجه یک ترانزیستور با تحرک‌پذیری بالای الکترونی حاصل می‌شود، بنابراین به HFET عموماً HEMT^۱ (ترانزیستور با تحرک‌پذیری الکترونی بالا) اطلاق می‌شود. به الکترون‌های محدود شده در کانال (فصل مشترک) گاز الکترونی دو بعدی 2DEG^۲ گفته می‌شود. این الکترون‌ها به راحتی می‌توانند در امتداد طول کانال حرکت کنند.

در حال حاضر خواص فیزیکی این گاز دو بعدی و چگونگی کنترل و استفاده از آن مورد توجه بوده و عرصه‌های جدید را در صحنه تکنولوژی بوجود آورده است. اکنون ترانزیستورهایی با اندازه-های بسیار کوچک از این نوع قابل دسترسی است و برای تقویت سیگنال‌های بسیار ضعیف و کاربردهای مخصوص در دریافت سیگنال‌های تلوزیونی از فضا بکار می‌روند.

۱-۲: ساختارهای نامتجانس

در این بخش به بررسی فیزیک ساختارهای نامتجانس می‌پردازیم. از آنجا که ساختارهای نامتجانس از اتصال نیمه رساناهای متفاوت حاصل می‌شوند ابتدا نوار هدایت و روابط حاکم بر

^۱ Molecular beam epitaxy

^۲ High electron mobility Transistor

^۳ Two-Dimensional- Electron-Gas

چگالی حاملها در نیمه‌رساناها را بررسی می‌کنیم.

۱-۲-۱: چگالی حاملها در نیمه‌رساناها

چنانچه می‌دانیم، در نیمه‌رساناها نوار رسانش و نوار ظرفیت توسط گاف نواری از هم جدا می‌شوند و حداقل در دماهای خیلی پایین، نوار رسانش خالی می‌ماند، وقتی دما افزایش می‌یابد تعدادی از الکترون‌ها به طریق انرژی حرارتی تحریک شده و از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌روند. این حامل‌های ایجاد شده را، حامل‌های ذاتی، الکترون‌ها و حفره‌ها، گویند که می‌توانند حامل جریان الکتریکی باشند. چگالی ذاتی الکترون‌ها n_i و حفره‌ها p_i در چنین شرایطی با هم برابرند:

$$n_i = p_i \quad (1-1)$$

که در آن

$$n_i = \frac{2}{V} \sum_k \frac{1}{1 + e^{\frac{E_C(k) - E_F}{K_B T}}} \quad p_i = \frac{2}{V} \sum_k \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E_V(k)}{K_B T}}} \quad (2-1)$$

و در آن V حجم بلور و k بردار موج شبکه است.

اگر از تقریب الکترون آزاد برای نوارهای رسانش و ظرفیت استفاده شود، خواهیم داشت:

$$E_C(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad , \quad E_V(k) = E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (3-1)$$

که در آن E_C و E_V انرژی الکترون‌ها و حفره‌ها در $k = 0$ می‌باشند.

حال با جمع بستن روی بردار موج در رابطه (۲-۱) و قراردادن در رابطه‌ی (۳-۱) می‌توان چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها را بدست آورد.

$$n = 2 \left(\frac{m_e K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) \quad (۴-۱)$$

$$p = 2 \left(\frac{m_h K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right) = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right)$$

که در آن N_C و N_V چگالی مؤثر الکترون و حفره می‌باشند و در حالت کلی معادله چگالی حاملها را برای تمامی نیمه‌رساناها مشخص می‌کند به شرط آنکه تراز فرمی معلوم باشد. برای یک نیمه‌رسانای ذاتی تراز فرمی می‌تواند با قرار دادن معادله (۴-۱) در (۱-۱) بدست آید:

$$E_F = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} K_B T \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) \quad (۵-۱)$$

که در آن $E_g = E_C - E_V$ گاف انرژی می‌باشد. معمولاً تراز فرمی برای مواد ذاتی تقریباً در وسط گاف نوار قرار می‌گیرد. همچنین برای چگالی ذاتی داریم:

$$n_i = p_i = 2 \left(\frac{K_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e m_h)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{E_g}{2K_B T}\right) \quad (۶-۱)$$

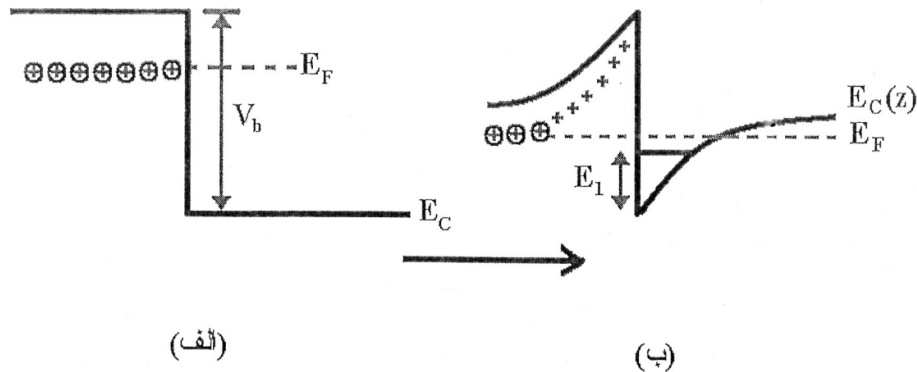
از معادله (۶-۱) معلوم است که چگالی ذاتی حاملها و در نتیجه جریان الکتریکی و سایر خواص الکتریکی و نوری وابسته به حاملهای ذاتی، شدیداً به دما وابسته است. در اغلب حالتها، آنها نمی‌توانند توسط یک میدان الکتریکی خارجی کنترل شوند، بنابراین نیمه‌رساناهای ذاتی برای ساخت

قطعات الکترونیکی مفید نیستند. یکی از روشهای ایجاد حامل‌های قابل کنترل، آرایش مواد بوسیله ناخالصی‌های پذیرنده و دهنده است که باعث ایجاد الکترون‌های آزاد (n-گونه) و حفره‌های آزاد (p-گونه) می‌شود. پس این ناکاملی‌ها و ناخالصی‌ها نه تنها ساختار نامتجانس را خراب نمی‌کند بلکه برای قطعات نیمه‌رسانا خیلی هم مهم می‌باشد. بدین منظور بحث خود را با مطالعه ساختارهای آلیشی شروع می‌کنیم و در ابتدا به ساختارهای نامتجانس با آلیش انتخابی^۱ می‌پردازیم [۷].

۱-۲-۲: ساختار نامتجانس منفرد با آلیش انتخابی

در این فصل به تحلیل کیفی یک ساختار نامتجانس نیمه‌رسانا می‌پردازیم و خواص الکترونیکی آن را در فصل دوم بررسی می‌کنیم. فرض می‌کنیم که یک اتصال بین دو نیمه‌رسانا با توابع کار و گاف-های نواری و گذردهی و تراوایی متفاوت داریم که در اثر این اتصال یک ناپیوستگی در نوار هدایت به وجود می‌آید (شکل ۱-۲)، فرض می‌شود که ماده نیمه‌رسانا با گاف بزرگتر به صورت آلیشی باشد. در صورتی که ماده با گاف باریکتر در طرف راست ساختار به صورت غیرآلیشی باشد. البته در حالت واقعی، ماده دوم معمولاً به صورت خیلی کم توسط پذیرنده‌ها، p-گونه، آلیش می‌گردد. رژیم آلیش سیستم، مکان تراز فرمی را تعیین می‌کند. از طرف دیگر در حالت تعادل، ترازهای انرژی زیر انرژی فرمی توسط الکترون‌ها اشغال می‌شوند.

^۱ Selective-Doped-heterostructures



شکل ۱-۲: اثر انتقال بار از یک ساختار نامتجانس با آرایش انتخابی. الف) بیانگر حالت غیر پایدار است، (ب) انتقال بار باعث یونیزه شدن یک لایه از ماده آلیشی، خمش نواری، هم تراز شدن انرژی فرمی و بالاخره تشکیل کانال در مجاورت فصل مشترک خواهد شد [۷].

الکترون‌ها بخاطر فزونی بار حاصل از آلیش، به طرف بلور غیر آلیش پخش خواهند شد که در اثر این جابجایی الکترون‌ها، یک میدان الکتروستاتیکی در امتداد طول قطعه ظاهر می‌گردد و لبه نوار هدایت را خم می‌کند تا تراز فرمی در دو سوی ماده هم تراز گردد. این خمش نواری یک ناپیوستگی در نوار هدایت ایجاد می‌کند که این ناپیوستگی مثل یک چاه کوانتومی رفتار می‌کند. این چاه به وسیله ناپیوستگی گاف نوارها در یک طرف و پتانسیل الکتروستاتیکی در طرف دیگر تشکیل می‌گردد که در این حالت در قسمت ماده آلیشی (ماده با گاف بزرگتر) ناخالصیهای یونیزه قرار دارد و الکترون‌های آزاد در چاه قرار می‌گیرند. بنابراین امکان تشکیل گاز الکترونی دوبعدی در این چاه وجود دارد. شکل (۱-۲ ب).

سه نتیجه مهم را می‌توان از این شرایط بوجود آمده، گرفت:

۱. اگر چه در ابتدا هر دو ماده عایق بودند (حداقل در دماهای پایین)، اما حالا در فصل مشترک

نزدیک صفحه اتصال، در یکی از دو ماده یک کانال الکترونی و تعدادی محدود الکترون در داخل آن

حتی در دمای $T = 0$ بدست می‌آید.

۲. حامل‌های بار به صورت فضائی از والدین خود (اتمهای ناخالصی) در طرف سد ساختار، جدا می‌شوند. بنابراین ناخالصی‌های باردار (یونهای باردار) که معمولاً عامل آهنگ‌های بزرگ پراکندگی و تحرک‌های الکترونی پایین هستند، فقط منبع تولید حاملها می‌باشند. چرا که پراکندگی الکترون‌ها به وسیله ناخالصی‌ها به خاطر جداسازی آنها عملاً از بین می‌روند.

۳. خمش نوار انرژی باعث ایجاد یک پتانسیل محدودکننده برای حاملها در یک جهت خاص (مثلاً در راستای Z ها) می‌شود. بنابراین در این راستا ترازهای انرژی الکترون‌ها کوانتیده شده و باعث بوجود آمدن گاز الکترونی دو بعدی، حداقل در دماهای پایین خواهند شد.

برای تکمیل بحث این مدل ساده، بهتر است فرض کنیم مثل حالت واقعی طرف راست ساختار (طرفی که نوار رسانش آن پایین تر از دیگری) به صورت خیلی ضعیف توسط ناخالصیهای پذیرنده به صورت سبک آرایش شده باشد. در این حالت، پله طرف راست چاه بالاتر از نصف گاف نواری قرار خواهد گرفت. اما پذیرنده‌های باقیمانده^۱ باعث تضعیف تحرک‌پذیری الکترون‌های داخل کانال خواهند شد البته این تضعیف خیلی جزئی است.

در اینجا حالتی بحث شد که در آن تراز فرمی بوسیله آرایش انتخابی تعیین می‌شود و غیر قابل کنترل است، که بعداً به این ساختار، ساختار نامتجانس بدون گیت^۲ گفته خواهد شد. ساختارهای نامتجانس با گیت از لحاظ فیزیکی با ساختارهای بدون گیت متفاوت است که در بخش بعدی به آن می‌پردازیم.

^۱ Residual acceptors

^۲ Ungated heterostructure

۳-۱: بررسی نیمرخ نوار انرژی و چاه پتانسیل در ساختارهای نامتجانس منفرد

در این بخش، مسئله ساختارهای نامتجانس نیمه‌رسانا با آرایش انتخابی را با دقت بیشتر مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در حقیقت در اینجا، با در نظر گرفتن ناپیوستگی پله‌ای گونه‌ی نوار انرژی، چاه پتانسیل ایجاد شده توسط بارهای انتقالی در فضا را پیدا می‌کنیم. پس شکل چاه پتانسیل بوسیله بارهای الکترونی و یون‌های ناخالصی مشخص خواهد شد. از طرف دیگر، این پتانسیل چند-جسمی حرکت هر یک از الکترون‌ها و تعداد کل یون‌های ناخالصی را معلوم خواهد کرد. پس در اینجا، با یک مسئله خود-سازگار^۱ روبرو هستیم: پتانسیل به وسیله چگالی الکترونی و یون‌های ناخالصی مشخص می‌گردد و بر عکس بر روی توزیع مجدد آنها اثر می‌گذارد. ساده ترین تقریب برای این مسئله خودسازگار، استفاده از مدل هارتری^۲ در بحث کوانتس الکترونی می‌باشد که در آن پتانسیل تنها بخاطر میدان الکتروستاتیکی خود سازگار الکترون‌ها بوجود می‌آید. بنابراین اصلی ترین مسئله در بدست آوردن نیمرخ نواری، حل خودسازگار معادله شرودینگر و پواسون می‌باشد. معادله پواسون برای پتانسیل الکترواستاتیکی Φ چنین نوشته می‌شود:

$$\nabla^2 \Phi(\vec{r}) = \frac{4\pi e}{k} \left[\sum_{(acc)} \delta(\vec{r} - \vec{R}_A) - \sum_{(don)} \delta(\vec{r} - \vec{R}_D) + \sum_v |\Psi_v(\vec{r})|^2 \right] \quad (7-1)$$

که e بار الکترون، k ثابت دی الکترونیک و R_A و R_D به ترتیب بیانگر موقعیت پذیرنده‌ها و دهنده‌ها می‌باشند. دو جمع اول در رابطه بالا، اثر تمامی پذیرنده‌ها و دهنده‌ها را مشخص می‌کنند. عبارت آخر

^۱ Self consistent
^۲ hartree

بیانگر توزیع الکترونی بارهای الکتریکی است. اندیس v بیانگر تمامی حالت‌های اشغال شده می‌باشد. اما چنانچه می‌دانیم $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ بیانگر احتمال وجود الکترون در حالت v و در نقطه \mathbf{r} می‌باشد. بنابراین جمع روی تمامی حالت‌های اشغال شده، تعداد الکترون‌های بوجود آمده در این نقطه را به ما خواهد داد. در مسئله خودسازگار، برای پیدا کردن تابع موج، $\Psi_v(\mathbf{r})$ ، باید معادله شرودینگر هم حل گردد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_b(z) - e\Phi(\vec{r})\right] \psi_v(\vec{r}) = E_v \psi_v(\vec{r}) \quad (8-1)$$

که در اینجا پتانسیل دارای دو قسمت است: پتانسیل درونی¹ ساختار نامتجانس $V_b(z)$ و پتانسیل الکترواستاتیکی خودسازگار $e\Phi(\mathbf{r})$ ، که در اینجا $V_b(z)$ برابر ناپیوستگی نوار انرژی است و چنانچه در شکل (۲-۱) نشان داده شده است، فقط به راستای z بستگی دارد:

$$V_b(z) = -V_b \theta(z) \quad (9-1)$$

که $\theta(z)$ تابع پله‌ای می‌باشد.

در اینجا لازم است یک سری توضیحات اضافی برای پتانسیل الکترواستاتیکی خودسازگار داده شود: مطابق معادله‌ی پواسون (۷-۱)، پتانسیل الکترواستاتیکی به وسیله الکترون‌ها و ناخالصی‌های باردار معلوم می‌گردد. این ناخالصی‌ها به صورت اتفاقی در فضا پخش شده‌اند، پس در حالت کلی پتانسیل یک تابع احتمالی از مختصات خواهد بود. اما می‌توان سهم پذیرنده‌ها و گیرنده‌های باردار را در پتانسیل به دو بخش تقسیم کرد؛ سهم منظم و سهم اتفاقی؛ و پتانسیل را به صورت

¹ Build-in potential

نوشته $\phi(r) = \phi(r) + \tilde{\phi}(r)$ ، میدان افت و خیزکننده است که تقارن انتقالی بلور را در صفحه اتصال در هم می‌شکند و این میدان به عنوان عامل پراکندگی الکترون‌ها در نظر گرفته می‌شود و می‌توان آن را به عنوان ترم اختلالی که باعث پراکندگی الکترون‌ها می‌شود در نظر گرفت و در محاسبات از آن صرف‌نظر کرد، بنابراین فقط پتانسیل $\phi(z)$ را که مستقل از مختصات x و y می‌باشد خواهیم داشت. بنابراین تابع موج را می‌توان چنین نوشت:

$$\psi_v(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \chi_i(z), \quad v = \{i, k_x, k_y\} \quad (10-1)$$

که S سطح اتصال می‌باشد. حال بلافاصله می‌توان معادله شرودینگر یک بعدی (عمود بر صفحه اتصال) را بدست آورد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_b(z) - e\Phi(z) \right] \chi_i(z) = \varepsilon_i \chi_i(z) \quad (11-1)$$

بنابراین انرژی کل سیستم برابر با:

$$E(i, k_x, k_y) = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)$$

خواهد بود. حال اگر معادله پواسون (۷-۱) با متوسط گیری از تمامی قسمت‌ها بر حسب موقعیت-های ممکن پذیرنده‌ها و دهنده‌ها، بازنویسی شود خواهیم داشت:

$$\frac{d^2 \Phi(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{k} \left[\sum_v |\psi_v(z)|^2 - N_D(z) + N_A(z) \right]. \quad (12-1)$$

لازم بذکر است که $\Phi(z)$ به عنوان مقدار میانگین بخش غیر افت و خیزی پتانسیل الکترواستاتیک می‌باشد.

برای محاسبه سهم الکترون‌ها، ابتدا تابع توزیع الکترونی وابسته به انرژی، $f(E_v)$ ، را معرفی می‌کنیم. با توجه به تفکیک تابع موج الکترون‌ها به دو قسمت موازی و عمودی در بحث بالا، می‌توان سهم الکترون‌ها را در فضای بار که در طرف راست معادله پواسون (۱۲-۱) قرار دارد تا حد ممکن ساده کرد. با بکاربردن سهم عمودی تابع موج (۱۰-۱) می‌توان سهم الکترون‌ها را چنین بازنویسی کرد:

$$\begin{aligned} \sum_v |\psi_v|^2 f(E_v) &= \frac{1}{S} \sum_{S,i,k_x,k_y} |\chi_i(z)|^2 f\left[\varepsilon_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)\right] \\ &= \sum_v |\chi_i(z)|^2 n_i \end{aligned} \quad (13-1)$$

که در این معادله جمع روی تمام اعداد کوانتومی ممکن صورت گرفته است که به ترتیب عبارتند از: S اسپین، k بردار موج در صفحه حرکت و همچنین در این رابطه تعداد کل الکترون‌ها در تراز i به صورت n_i نمایش داده شده است.

حال برای محاسبه n_i در چاه پتانسیل (سیستم دوبعدی) به روش زیر عمل می‌کنیم. چاه پتانسیل یک سیستم دوبعدی است که تعداد کل الکترون‌ها در آن از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$n^{2D} = \int g^{2D}(E) f_{FD}(E) dE \quad (14-1)$$

$f_{FD}(E)$ تابع توزیع فرمی دیراک است که تحت شرایط تعادل، احتمال اشغال شدن حالتها را بدست

می‌دهد و برابر است با:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{K_B T}\right)} \quad (15-1)$$

اگر $g^{2D}(E)$ چگالی حالتها در یک سیستم دو بعدی را نشان می‌دهد که بصورت زیر محاسبه می‌شود. اگر

فرض کنیم که سیستم دوبعدی در صفحه k_x, k_y محدود شده باشد و ابعاد اتصال راستای y و x برابر

L_x, L_y باشد، داریم:

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y}, k_x = \frac{2\pi}{L_x}$$

اگر فرض کنیم: $L_x = L_y = L$ آنگاه داریم: $k = \frac{2\pi}{L}$

تعداد کل حالتها بر واحد سطح مقطع برابر است با مساحت فضای k تقسیم بر مساحت سلول واحد

در فضای k و تقسیم بر مساحت فضای حقیقی که به صورت زیر بدست می‌آید:

$$N^{2D} = 2\pi k^2 \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \cdot \frac{1}{L^2} = \frac{k^2}{2\pi} \quad (16-1)$$

$$g^{2D}(E) = \frac{\partial N^{2D}}{\partial E} = \frac{\partial N^{2D}}{\partial k} \cdot \frac{\partial k}{\partial E}, E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (17-1)$$

$$g^{2D}(E) = \left(\frac{k}{\pi}\right) \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{E}} = \frac{m^*}{\pi\hbar}$$

با جمع روی همه زیر حالتی که زیر انرژی ویژه E_j قرار دارند می‌توان چگالی حالتها را به صورت