

MỘT SỐ YẾU TỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN NĂNG LƯỢNG TRONG HỆ GIẾNG LƯỢNG TỬ

Bùi Trung Thành, Lê Khắc Bình

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 01 tháng 04 năm 2007)

TÓM TẮT: Giải phương trình Schrödinger cho một vài hệ giếng lượng tử bằng phương pháp sai phân hữu hạn (finite difference) trong đó có tính đến khối lượng hiệu dụng của hạt dẫn trong lớp giếng khác với khối lượng hiệu dụng của hạt dẫn trong lớp rào. Phương pháp này được dùng để nghiên cứu sự ảnh hưởng của các yếu tố như số giếng, độ rộng rào, độ rộng giếng, điện trường ngoài đến năng lượng trong hệ giếng lượng tử.

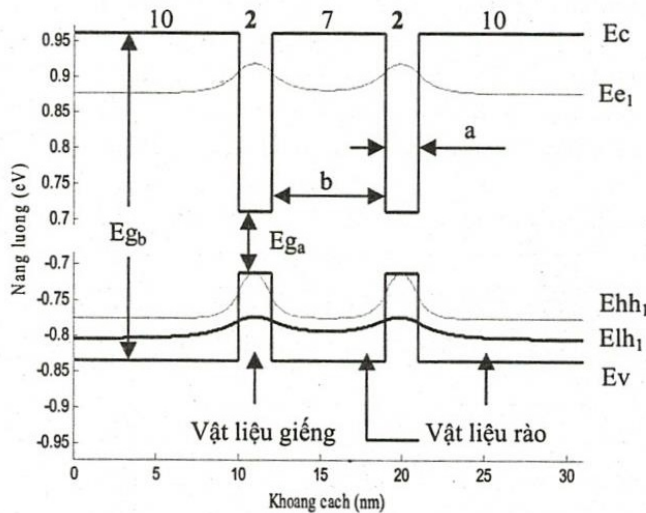
1. GIỚI THIỆU

Giếng lượng tử đang được quan tâm nhiều và được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực nhất là quang điện tử như diode phát sáng (LED), diode laser, quantum cascade laser... do phổ năng lượng của giếng lượng tử là gián đoạn và có thể thay đổi được.

Trong bài "Năng lượng và hàm sóng của giếng lượng tử", chúng tôi sử dụng phương pháp sai phân hữu hạn (FD) để tìm năng lượng và hàm sóng của hệ giếng lượng tử bằng cách giải phương trình Schrödinger trong đó có tính đến khối lượng hiệu dụng của hạt dẫn thay đổi khi đi qua các vật liệu khác nhau

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right] + V\psi = E\psi \quad (1)$$

Trong bài này, chúng tôi tìm hiểu ảnh hưởng của những yếu tố như số giếng, độ rộng rào, độ rộng giếng, điện trường ngoài đến năng lượng của hệ giếng lượng tử.



Hình 1 Năng lượng và hàm sóng của electron E_{e_1} , lỗ trống nặng E_{hh_1} , lỗ trống nhẹ E_{lh_1} trong hệ hai giếng lượng tử.

2. KẾT QUẢ VÀ NHẬN XÉT

Cấu trúc của hệ giếng lượng tử được xét đến là cấu trúc nhiều giếng với hai vật liệu (vật liệu làm rào và vật liệu làm giếng). Trên Hình 1 hệ gồm hai giếng, trong đó a là độ rộng giếng, b là độ rộng rào, E_{g_a} , E_{g_b} lần lượt là độ rộng vùng cấm của giếng và rào, mức năng lượng thứ nhất E_{e_1} của electron ở vùng dẫn, mức năng lượng thứ nhất E_{hh_1} , E_{lh_1} của lỗ trống nặng và lỗ trống nhẹ ở vùng hóa trị. Trong bài này các dữ kiện dùng để tính toán được cho ở Bảng 1 [1][3][4][5][9], độ rộng giếng, rào được tính bằng nm, năng lượng được tính bằng eV.

Từ phương trình (1) ta nhận thấy khi thay đổi điện trường ngoài, độ rộng rào, độ rộng giếng... được thể hiện qua thay đổi thế V, thay đổi tổng chiều rộng rào và giếng [8] dẫn đến năng lượng E và hàm sóng ψ trong phương trình (1) sẽ thay đổi.

Bảng 1. Độ rộng vùng cấm, khối lượng hiệu dụng và độ dịch vùng dẫn của một số vật liệu.

Vật liệu	E_g (eV)	m_e^*	m_{hh}^*	m_{lh}^*	ΔE_c (eV)
GaAs	1.424	0.0637	0.5	0.087	0.67 ΔE_g
$Al_xGa_{1-x}As$ ($x < 0.45$)	$1.424 + 1.247x$	$0.0637 + 0.083x$	$0.50 + 0.29x$	$0.087 + 0.063x$	
$In_{0.53}Ga_{0.47}As$		0.044			0.52
$In_{0.52}Al_{0.48}As$		0.076			
$In_{0.15}Ga_{0.85}N$	2.767	0.178	0.172		0.4256
GaN	3.4	0.19	0.6		

m^* nhân với $m_0 = 9.1 \cdot 10^{-31} kg$.

Chúng tôi sẽ lần lượt xem xét đến những yếu tố kể trên và bắt đầu từ việc thay đổi số giếng.

2.1 Số giếng

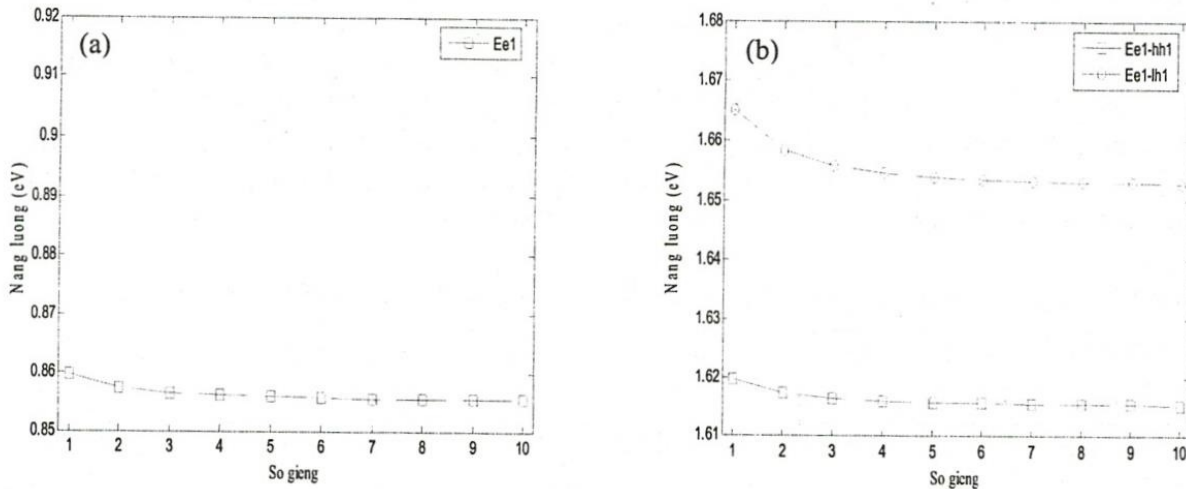
Do hệ giếng được xét là hệ nhiều giếng có cấu trúc tuần hoàn nên các mức năng lượng sẽ tập trung thành các dải năng lượng [8]. Ở đây chúng tôi chỉ xét mức năng lượng dưới cùng ở vùng dẫn mức E_{e_1} và mức trên cùng ở vùng hóa trị mức E_{hh_1} , E_{lh_1} của dải một. Xét hệ có cấu trúc nhiều giếng tuần hoàn 10 / 3 / 5 / 3 / 5... / 10, phần in đậm là độ rộng giếng GaAs, in thường là độ rộng rào $Al_{0.42}Ga_{0.58}As$, xem sự thay đổi của các mức năng lượng E_{e_1} , E_{hh_1} , E_{lh_1} ở vùng dẫn và ở vùng hóa trị thay đổi như thế nào khi số giếng được thay đổi từ 1 cho đến 10.

Bảng 2 Sự thay đổi các mức năng lượng khi thay đổi số giếng.

Số giếng	1	2	3	4	5	7	10
E_{e_1} (eV)	0.8596	0.8574	0.8565	0.8560	0.8558	0.8556	0.8555
$E_{e_1_hh_1}$ (eV)	1.6197	1.6174	1.6165	1.6160	1.6158	1.6155	1.6154
$E_{e_1_lh_1}$ (eV)	1.6651	1.6585	1.6559	1.6547	1.6540	1.6533	1.6530

Kết quả được thể hiện trên Hình 2 và từ Bảng 2 cho thấy, độ chênh lệch của mức năng lượng của electron ở vùng dẫn trong trường hợp 1 giếng và 10 giếng là $\Delta E_e = E_{e_1}(1) - E_{e_1}(10) = 0.0041 eV$. Tương tự cho năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 của electron - lỗ trống nặng, electron - lỗ trống nhẹ $\Delta E_{e_hh} = E_{e_1_hh_1}(1) - E_{e_1_hh_1}(10) = 0.0043 eV$, $\Delta E_{e_lh} = E_{e_1_lh_1}(1) - E_{e_1_lh_1}(10) = 0.0121 eV$. Như vậy việc thay đổi số giếng không làm ảnh

hường đáng kể đến mức năng lượng E_{e_1} , E_{hh_1} , E_{lh_1} trong vùng dẫn và trong vùng hóa trị. Do các mức năng lượng tập trung thành các dải và các mức trong mỗi dải gần như trùng nhau (Hình 6a) [8], nên thay đổi số giếng không làm thay đổi đáng kể các mức năng lượng trong dải một ở vùng dẫn và ở vùng hóa trị.



Hình 2. Sự phụ thuộc của năng lượng vào số giếng. (a) Mức năng lượng thứ nhất của electron ở vùng dẫn (E_{e_1}). (b) Năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 của electron - lỗ trống nặng (E_{e_1, hh_1}) và của electron - lỗ trống nhẹ (E_{e_1, lh_1}).

2.2 Độ rộng rào

Khi hệ là nhiều giếng thì phải xét đến khoảng cách giữa các giếng và gọi khoảng cách ấy là độ rộng của rào. Độ rộng rào làm tăng hoặc giảm khả năng xuyên hầm giữa các giếng. Trong phần này tìm hiểu ảnh hưởng của sự thay đổi độ rộng rào đến các mức năng lượng.

Cơ học lượng tử đã dẫn được biểu thức gần đúng của hệ số truyền qua [2]

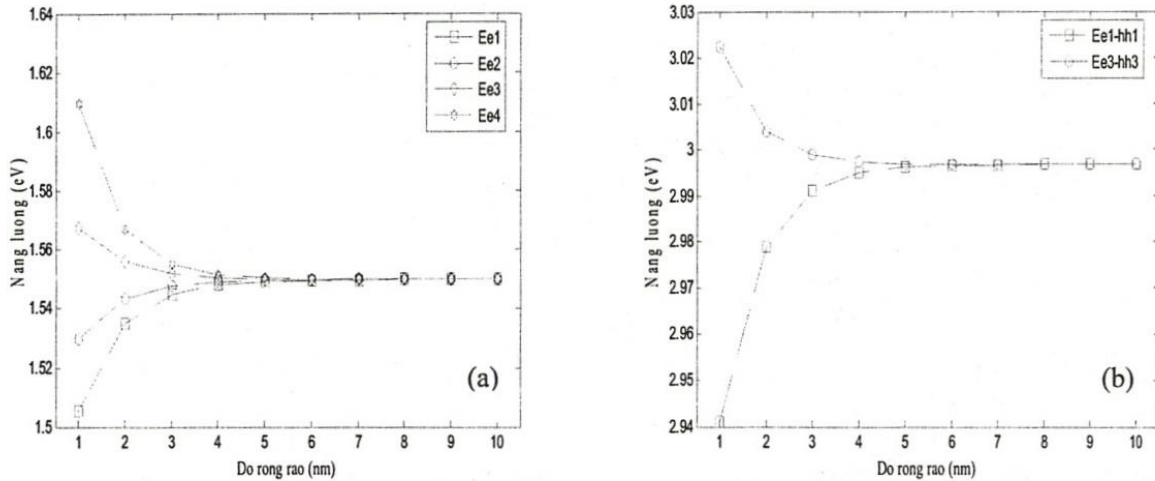
$$T \approx T_0 \exp \left\{ -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right\} \quad (2)$$

trong đó T là hệ số truyền qua, d độ rộng rào, V_0 độ sâu giếng, E năng lượng tới. Công thức (2) cho thấy hệ số truyền qua T giảm rất nhanh theo quy luật hàm số mũ khi d tăng.

Vì vậy nếu độ rộng rào lớn khả năng xuyên hầm giữa các giếng là rất bé và các giếng được xem như độc lập với nhau [3][6], nhưng khi độ rộng rào đủ nhỏ thì có sự xuyên hầm giữa các giếng và có sự tương tác năng lượng giữa các mức định xứ bên trong giếng [4].

Xét hệ giếng lượng tử có cấu trúc bốn giếng tuần hoàn 10nmGaN / 2 / ... / 2 / 10nmGaN, độ rộng giếng $In_{0.15}Ga_{0.85}N$ không đổi và bằng 2nm, thay đổi độ rộng của rào GaN (khoảng cách giữa hai giếng) từ 1nm đến 10nm. Kết quả tính được thể hiện ở Hình 3 và Bảng 3. Kết quả cho thấy với vật liệu đã chọn khi độ rộng rào trong khoảng từ 1nm đến 5nm các mức năng lượng tương ứng với độ rộng rào ấy khác nhau đáng kể. Với năng lượng của electron ở vùng dẫn (Hình 3a) độ chênh lệch giữa mức thứ nhất và mức thứ bốn khi rào rộng 1nm là $\Delta E_e = E_{e_4}(1) - E_{e_1}(1) = 0.1047eV$, và khi rào rộng 5nm là $\Delta E_e = E_{e_4}(5) - E_{e_1}(5) = 0.001eV$. Tương tự, độ chênh lệch năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 và mức 3-3 (Hình 3b) ứng với độ rộng rào 1nm và 5nm lần lượt là 0.0816eV và 0.0008eV. Nếu như độ rộng rào lớn hơn 5nm

các mức năng lượng gần như trùng nhau và khi độ rộng rào bé hơn 5nm các mức năng lượng trong giếng thay đổi đáng kể.



Hình 3. Sự thay đổi các mức năng lượng khi độ rộng rào thay đổi, các mức tách ra khi độ rộng rào nhỏ hơn 5nm. (a) Các mức năng lượng của electron ở vùng dẫn. (b) Năng lượng dịch chuyển vùng vùng của electron - lỗ trống nặng ở mức 1-1 và mức 3-3 ($E_{e_1_hh_1}$ và $E_{e_3_hh_3}$).

Bảng 3. Sự phụ thuộc năng lượng vùng dẫn và năng lượng dịch chuyển vùng vùng vào độ rộng rào.

Độ rộng rào (nm)	1	2	3	4	5	6	8	10
E_{e_1} (eV)	1.5053	1.5346	1.5445	1.5479	1.5490	1.5493	1.5495	1.5495
E_{e_4} (eV)	1.6100	1.5671	1.5549	1.5512	1.5500	1.5497	1.5495	1.5495
$E_{e_1_hh_1}$ (eV)	2.9409	2.9789	2.9911	2.9950	2.9962	2.9966	2.9967	2.9967
$E_{e_3_hh_3}$ (eV)	3.0225	3.0042	2.9990	2.9974	2.9970	2.9968	2.9967	2.9967

Vì vậy thay đổi độ rộng rào là một trong những cách làm thay đổi các mức năng lượng trong hệ giếng lượng tử và đặc biệt là có thể làm cho các mức năng lượng trở thành gián đoạn hoặc tạo thành dải năng lượng.

2.3 Độ rộng giếng

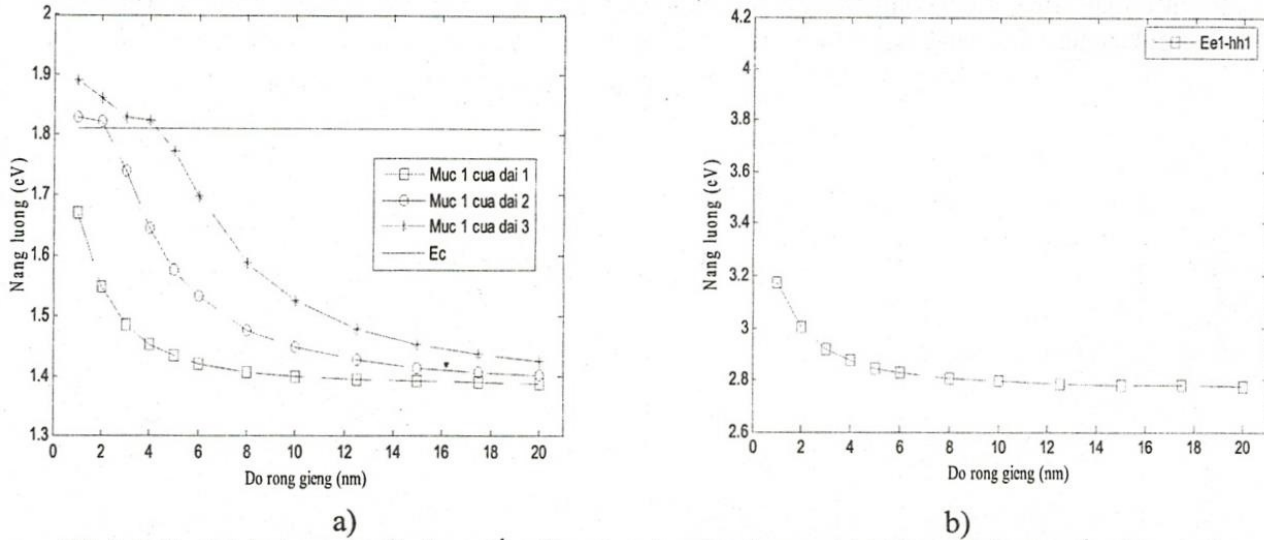
Cơ học lượng tử đã suy được công thức tính các mức năng lượng trong giếng chữ nhật sâu vô hạn [2]

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3) \text{ trong đó}$$

a là độ rộng giếng.

Vậy đối với giếng chữ nhật sâu vô hạn, năng lượng trong giếng tỉ lệ nghịch với bình phương độ rộng giếng. Tuy công thức này không còn chính xác đối với giếng chữ nhật sâu hữu hạn nhưng cũng cho thấy sự phụ thuộc của các mức năng lượng vào độ rộng giếng.

Xét hệ giếng lượng tử có cấu trúc năm giếng tuần hoàn, độ rộng rào GaN được giữ không đổi và bằng 5nm, độ rộng giếng $In_{0.15}Ga_{0.85}N$ thay đổi từ 1nm đến 20nm. Kết quả cho ở Hình 4 và Bảng 4, trong Hình 4a mức năng lượng đầu tiên của ba dải ở vùng dẫn, trong Hình 4b năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 của electron - lỗ trống nặng.



Hình 4. Sự ảnh hưởng của độ rộng giếng lên các mức năng lượng. (a) Mức năng lượng đầu tiên của ba dải ở vùng dẫn. (b) Năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 của electron - lỗ trống nặng ($e_1_hh_1$).

Kết quả tính ở Bảng 4 cho thấy các mức năng lượng thay đổi đáng kể khi thay đổi độ rộng giếng. Sự chênh lệch mức năng lượng đầu tiên của dải một ở vùng dẫn trong trường hợp giếng rộng 1nm và 15nm là $\Delta E_e = E_{e_1}(1) - E_{e_1}(15) = 0.2789\text{eV}$, tương tự với năng lượng dịch chuyển vùng vùng ở mức 1-1 của electron - lỗ trống nặng là $\Delta E_{e_hh} = E_{e_1_hh_1}(1) - E_{e_1_hh_1}(15) = 0.394\text{eV}$. Với vật liệu này năng lượng thay đổi đáng kể nhất trong khoảng thay đổi của độ rộng giếng từ 1nm đến 5nm. Khi độ rộng giếng lớn các mức năng lượng sát lại và tạo thành các mức liên tục. Độ rộng giếng giảm làm các mức năng lượng tăng. Như vậy độ rộng giếng làm thay đổi rất mạnh đến các mức năng lượng trong giếng và nó là một yếu tố chính để điều chỉnh các mức năng lượng trong hệ giếng lượng tử.

Bảng 4. Sự thay đổi các mức năng lượng khi thay đổi độ rộng giếng.

Độ rộng giếng (nm)	1	2	3	5	8	10	15
Mức 1 ở dải 1(eV)	1.6702	1.5483	1.4862	1.4335	1.4070	1.3995	1.3913
Mức 1 ở dải 2(eV)	1.8281*	1.8213*	1.7404	1.577	1.4766	1.4473	1.4146
$E_{e_1_hh_1}$ (eV)	3.1748	3.0047	2.9194	2.845	2.8057	2.7942	2.7808

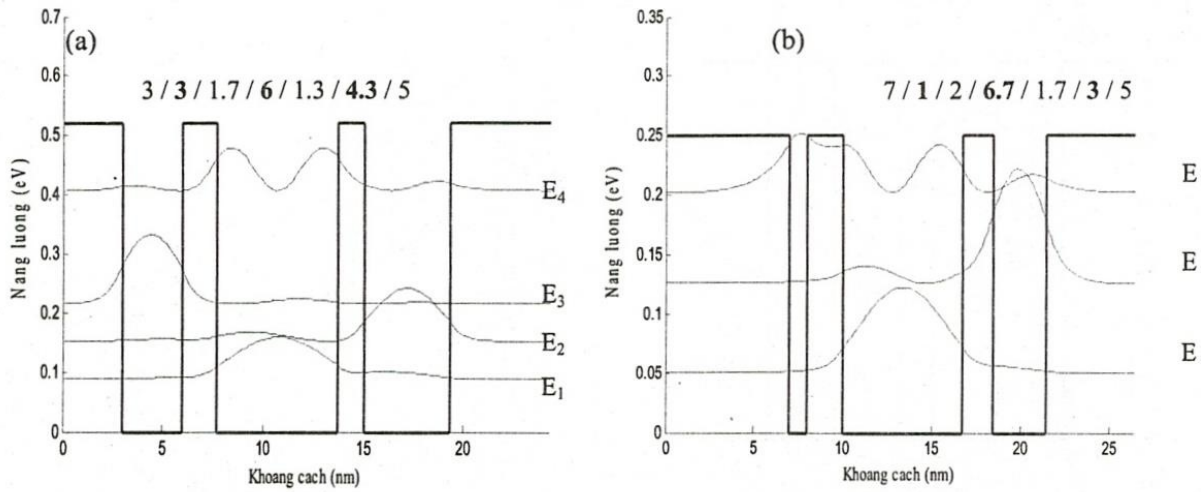
(*) Electron vượt ra khỏi giếng.

2.4 Số giếng, độ rộng rào và độ rộng giếng

Ở những phần trên đã xét đến cấu trúc giếng là tuần hoàn và lần lượt khảo sát từng yếu tố số giếng, độ rộng rào, độ rộng giếng. Trong phần này chúng tôi sẽ thay đổi đồng thời cả ba yếu tố số giếng, độ rộng rào và độ rộng giếng trong cấu trúc không tuần hoàn.

Số giếng không làm thay đổi đáng kể các mức năng lượng trong hệ giếng có cấu trúc tuần hoàn nhưng nó có vai trò quan trọng trong việc điều chỉnh các mức năng lượng trong hệ giếng không tuần hoàn. Từ công thức (3) cho thấy nếu hệ là một giếng chữ nhật và độ rộng giếng đủ nhỏ thì khoảng cách giữa các mức năng lượng không thể bằng nhau. Khi hệ là nhiều giếng với cấu trúc tuần hoàn các mức sẽ tập trung thành dải năng lượng (Hình 6a) [8], nhưng trong trường hợp hệ có cấu trúc không tuần hoàn các mức sẽ tách ra. Bằng cách chọn độ rộng giếng, độ rộng rào, số giếng có thể điều chỉnh được khoảng cách giữa các mức năng lượng. Ở đây chúng tôi chọn độ rộng giếng, độ rộng rào, số giếng (Bảng 5) để khoảng cách giữa ba mức

năng lượng E_1, E_2, E_3 là bằng nhau ($E_2 - E_1 \approx E_3 - E_2$). Kết quả tính được trình bày ở Hình 5. Từ kết quả này cho thấy việc thay đổi độ rộng giếng, độ rộng rào, số giếng đã có thể điều chỉnh được khoảng cách giữa các mức năng lượng trong giếng như mong muốn.



Hình 5. Hệ ba giếng có cấu trúc không tuần hoàn, phần in đậm là độ rộng giếng. Chọn độ rộng giếng, độ rộng rào, số giếng để khoảng cách giữa ba mức E_1, E_2, E_3 là như nhau. (a) Vật liệu $Al_{0.48}In_{0.52}As$ (rào) / $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ (giếng). (b) Vật liệu $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (rào) / $GaAs$ (giếng).

Bảng 5. Thay đổi độ rộng giếng, độ rộng rào và số giếng để khoảng cách giữa các mức năng lượng là bằng nhau.

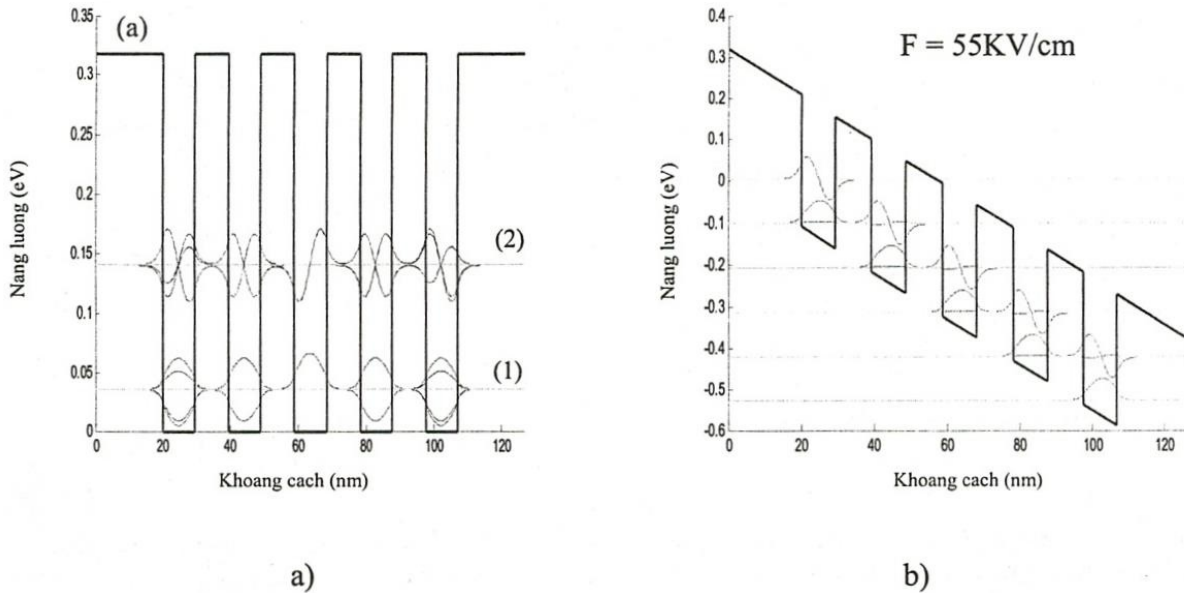
Năng lượng (eV)	E_1	E_2	E_3	$E_2 - E_1$	$E_3 - E_2$
Hình 5a	0.088036	0.15218	0.21579	0.0641	0.0636
Hình 5b	0.05066	0.126	0.20188	0.0753	0.0759

2.5 Điện trường ngoài

Trong một hệ giếng với cấu trúc nhiều giếng tuần hoàn, khi chưa có điện trường ngoài các mức năng lượng tạo thành các dải năng lượng, khi có điện trường ngoài nó làm mở rộng các dải năng lượng và khi điện trường đủ mạnh các mức năng lượng trong dải được tách thành các mức riêng biệt, khi ấy mức thứ nhất của giếng này có thể sẽ trùng với mức thứ hai của giếng kế cận và điều này tạo nên sự cộng hưởng.

Xét một hệ gồm năm giếng với cấu trúc tuần hoàn $20 / 9.4 / 10 / 9.4 / 10... / 20$, phần in đậm là độ rộng giếng $GaAs$, in thường là độ rộng rào $Al_{0.38}Ga_{0.62}As$. Điện trường $F = 55KV/cm$ sẽ tạo nên cộng hưởng giữa mức thứ nhất của giếng này với mức thứ hai của giếng kế cận. Trong Hình 6a mỗi dải gồm năm mức, độ rộng dải thứ nhất, thứ hai lần lượt là $\Delta E_1 = 0.00001eV$, $\Delta E_2 = 0.00018eV$, ở Hình 6b từ bên phải qua, mức thứ hai của giếng thứ nhất $E_{12} = -0.42167eV$, mức thứ nhất của giếng thứ hai $E_{21} = -0.42145eV$, hai mức này được xem như trùng nhau và gây nên sự cộng hưởng. Tương tự cho mức thứ hai của giếng thứ hai $E_{22} = -0.31497eV$ trùng với mức thứ nhất của giếng thứ ba $E_{31} = -0.31475eV...$ Nếu như có sự chuyển dời electron từ mức thứ hai về mức thứ nhất và phát ra một photon mang năng lượng $E_2 - E_1 = 0.1065eV$, electron này lại xuyên hầm qua giếng kế cận, quá trình này được lặp lại nhiều lần và như vậy một electron có thể phát ra nhiều photon có cùng một năng lượng. Đây là nguyên lý cơ bản của Quantum Cascade Laser.

Qua kết quả tính toán cho thấy, nếu giữ $F = 55\text{KV/cm}$ và thay đổi độ rộng của hệ giếng trên thì không còn cộng hưởng. Để có cộng hưởng, điện trường phải đủ lớn và độ rộng rào, giếng phải thích hợp với điện trường đó.



Hình 6. (a) Xuyên hầm giữa các giếng trên cùng một dải năng lượng. (b) Điện trường mạnh có thể gây ra cộng hưởng giữa mức năng lượng của giếng này với mức năng lượng của giếng kế cận.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã sử dụng hệ giếng lượng tử có cấu trúc nhiều giếng với những cặp vật liệu khác nhau và dùng phương pháp FD để khảo sát các yếu tố ảnh hưởng đến các mức năng lượng trong hệ giếng lượng tử như : số giếng, độ rộng rào, độ rộng giếng, điện trường ngoài và rút được những kết luận sau

+) Trong số các yếu tố làm thay đổi các mức các mức năng lượng trong hệ giếng thì yếu tố độ rộng giếng làm thay đổi nhiều nhất. Tuy nhiên, những yếu tố còn lại cũng giữ một vai trò rất quan trọng. Nếu độ rộng rào nhỏ thì khả năng xuyên hầm giữa các giếng sẽ lớn các mức năng lượng trong hệ giếng thay đổi đáng kể. Điện trường ngoài làm mở rộng các dải năng lượng và có thể làm cho mức năng lượng của giếng này trùng với mức năng lượng của giếng kế cận và tạo nên sự cộng hưởng.

+) Nếu muốn thu được dải năng lượng có n mức gần như trùng nhau thì sử dụng hệ n giếng với cấu trúc tuần hoàn.

+) Hệ nhiều giếng lượng tử có cấu trúc không tuần hoàn cho ta phổ năng lượng gián đoạn và có thể điều chỉnh được các mức năng lượng.

Như vậy tùy theo mục đích khác nhau mà người sử dụng có thể điều chỉnh các yếu tố nêu trên để có được các mức năng lượng như mong muốn đối với loại vật liệu mà người sử dụng đã chọn.

**THE EFFECT OF SOME CONSTITUENT
ON THE ENERGIES IN QUANTUM WELL SYSTEMS**

Bui Trung Thanh, Le Khắc Bình
University of Natural Sciences, VNU-HCM

ABSTRACT: *By finite difference method, the Schrödinger equation with different effective masses in different layers of some quantum well systems is solved. From this, the effect of number of wells, barrier width, well width, electric field on energies in quantum well systems are investigated.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Jasprit Singh, *Semiconductor Optoelectronics*, McGRAW-Hill, New York (1995).
- [2]. Hoàng Dũng, *Cơ học lượng tử*, NXB Giáo Dục, Tp Hồ Chí Minh (1999).
- [3]. John H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*, Cambridge University Press, England (1998).
- [4]. http://www.wsi.tum.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_DoubleQW.htm
- [5]. <http://rleweb.mit.edu/sclaser>
- [6]. A.Ya. Shik, *Hố lượng tử-Vật lý và điện tử học của các hệ hai chiều*, NXB Khoa học và kỹ thuật, Hà Nội (2002).
- [7]. Lê Khắc Bình, Nguyễn Nhật Khanh, *Vật lý chất rắn*, NXB Đại học quốc gia Tp Hồ Chí Minh, (2002).
- [8]. http://www.wsi.tum.de/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_InGaAs_MQWs.htm