

Macierze hamiltonianu $\mathbf{k}\mathbf{p}$

macierz H ma, dla wybranego \mathbf{k} , wymiar 4×4 lub 8×8

jeśli wybierzemy jako $u_{n0}(\mathbf{r})$ funkcje $|s\rangle; |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$,

czyli funkcje transformujące się według reprezentacji grypy wektora falowego Γ (tj. tworzące bazę takiej reprezentacji –
- to otrzymamy najbardziej odpowiednią reprezentację do opisu stanów energetycznych blisko $\mathbf{k} = 0$ (tj. Γ)!

ozn. repr. deg., ozn.fun. pasmo

Γ_1^+	1, $ s\rangle$	głębokie pasmo w obsz. walenc.
Γ_{25}^+	3, $ X\rangle, Y\rangle, Z\rangle$	pasmo walencyjne (ostatnie zapełnione)
Γ_2^-	1, $ s\rangle$	pasmo przewodnictwa (niebsadz.)
Γ_{15}^-	3, $ X\rangle, Y\rangle, Z\rangle$	wysokoleżące nieobs.pasmo w obsz.przew.

funkcje (czynniki Blocha) tworzą bazy małych reprezentacji nieprzywiedlnych grupy wektora falowego Γ (w O_h) ograniczając się do pasm walencyjnego i przewodnictwa, bez renormalizacji masy, macierz hamiltonianu:

(zero energii wybrane w szczycie pasma walencyjnego)

$$\begin{bmatrix} E_g + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 & iPk_x & iPk_y & iPk_z \\ -iPk_x & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 & 0 & 0 \\ -iPk_y & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 & 0 \\ -iPk_z & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \end{bmatrix}$$

gdzie $P = -2i\langle s|p_z|Z\rangle/\hbar$ szacuje się z danych doświadczalnych dotyczących przejść {prawdopodobieństwa przejść są $\sim P^2$ }

jeśli włączymy wpływ odległych pasm –
 - tylko najbliższych energetycznie i opisanych funkcjami bazowymi
 kolejnych reprezentacji Γ , dostaniemy:

$$\begin{bmatrix} E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2 & iPk_x & iPk_y & iPk_z \\ -iPk_x & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ -iPk_y & Nk_x k_y & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ -iPk_z & Nk_x k_z & Nk_y k_z & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}$$

- **bardzo podobne do macierzy EBOM – inaczej być nie może – chodziło nam o zależność H_{ij} od k**

m – masa spoczynkowa,

m^* - masa efektywna na dnie pasma przewodnictwa

L, M, N – parametry empiryczne wyznaczone ze znajomości mas efektywnych (w różnych kier.) w obrębie pasma walencyjnego

(z uwzględnieniem spinu i oddziaływania spin-orbita $H = 2 \times [4 \times 4]$
 baza: $|s\uparrow\rangle, |s\downarrow\rangle, |X\uparrow\rangle, \dots$)

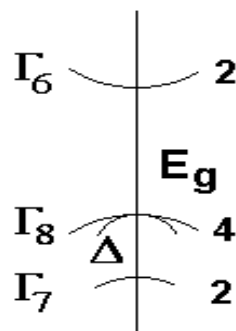
6-cio krotna degeneracja VB w Γ (ze spinem ale bez oddział. SO)
 (3x2 – krotnie zdegenerowane w Γ pasmo walencyjne)

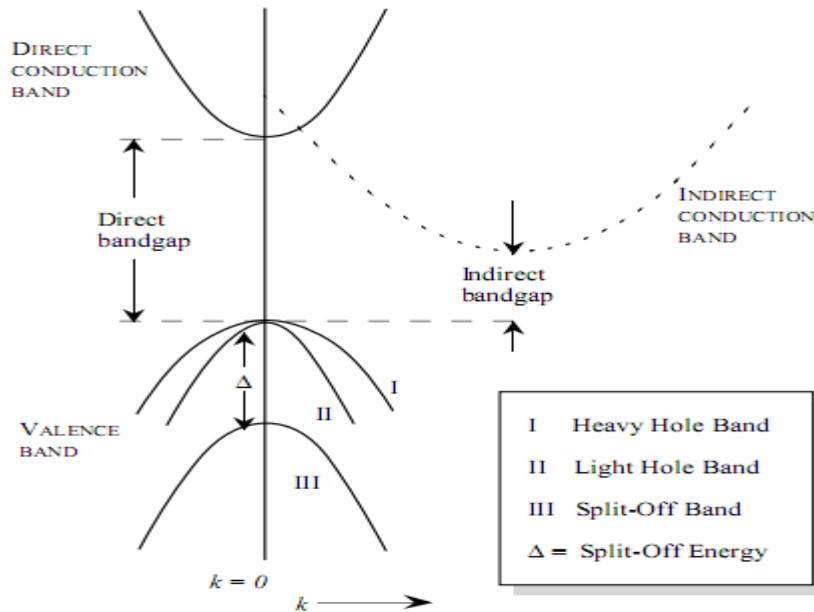
dodanie oddziaływania SO prowadzi do:

4-krotnie zdegenerowane pasmo walencyjne $J=3/2$

+

2-krotnie zdegenerowane tzw. pasmo od(sz)czepione $J=1/2$ (split-off)





bazę dla pasma walencyjnego można tak dobrać, żeby zdiagonalizować macierz \mathbf{kp} w Γ , i otrzymujemy dwa pasma o różnych krzywiznach $E(k)$: ciężkie dziury (hh) i lekkie dziury (lh)

Struktury 2D

1. Modele

- Jedno pasmo (a) (pasma przewodnictwa, E_g – duże)

w punkcie Γ równanie masy efektywnej przyjmuje postać

$$E^{(i)}(\vec{k}) = E^{(i)}(0) + \frac{\hbar^2}{2m_{(i)}^*} k^2$$

w obszarze każdego (litego) półprzewodnika (i)

odpowiednie równanie na funkcję obwiedni

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_{(i)}^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + E^{(i)}(0) - E \right) F(\vec{r}) = 0$$

jeżeli zaburzenie periodyczności tylko w kierunku Z to

$$F(\vec{r}) = e^{ik_t \rho} f(z)$$

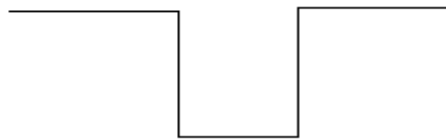
UWAGA: założenie $u_0^{(i)}(r) = u_0^{(i+1)}(r)$ (nie zawsze musi być spełnione)

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_{(i)}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E^{(i)}(0) + \frac{\hbar^2}{2m_{(i)}^*} k_t^2 - E \right) f(z) = 0 \quad (\times)$$

$E^{(i)}(0)$ - położenie brzegu pasma w kolejnej warstwie (i)

k_t - wektor falowy równoległy do pow. złącz

dla $k_t = 0$, jeśli $E^{(i)}(0)$ tworzą



równanie (x) **przypomina** równanie Schrödingera dla cząstki o zmieniającej się masie (w różnych obszarach) w jednym wymiarze i studni potencjału o skończonej głębokości; stąd nazwa:

studnia kwantowa.

elektron traktowany jest jak swobodna cząstka o masie m^* (przybliżenie masy efektywnej), dla której potencjałem ograniczającym ruch w kier. Z są różnice położenia brzegów pasm

w równ. (x) operator energii kinetycznej jest niehermitowski, ale

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z}$$

jest hermitowski (hamiltonian Ben Daniel-Duke'a)

warunki brzegowe (ciągłości) na złączu 2 ośrodków

- ciągłość funkcji obwiedni (m^*)
- czy pochodna musi być ciągła (jak w przypadku stałej masy)?

scalkujemy równanie (x) w granicach $Z_0-\varepsilon$ do $Z_0+\varepsilon$
i weźmy $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$; Z_0 - położenie płaszczyzny złącza

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\hbar^2}{2} \int_{z_0-\varepsilon}^{z_0+\varepsilon} \frac{1}{m} f''(z) dz - \int_{z_0-\varepsilon}^{z_0+\varepsilon} E(0) f(z) dz + \int_{z_0-\varepsilon}^{z_0+\varepsilon} E f(z) dz \right) = 0$$

z ciągłości funkcji znikają dwie ostatnie całki

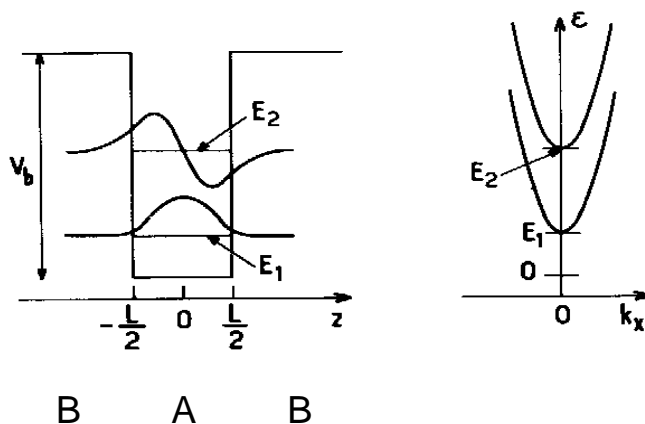
oznaczając masy efektywne w sąsiednich obszarach przez m_A^* i m_B^*

$$\frac{f'/(A)}{m_A^*} = \frac{f'/(B)}{m_B^*} \quad (m^{**})$$

plus ciągłość funkcji (m^*) (pochodne funkcji nie muszą być ciągłe!)

rozwiązania (parzyste i nieparzyste) trzeba znaleźć dla każdego k_t
numerujemy je kolejnymi liczbami naturalnymi „i”

jako funkcje k_t rozwiązania te tworzą PODPASMA $E_i(k_t)$

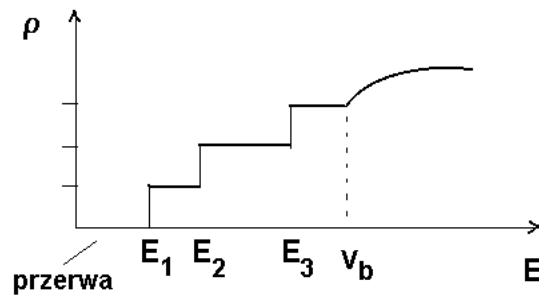


o 2-wymiarowej relacji dyspersyjnej $E_i(k_t)$

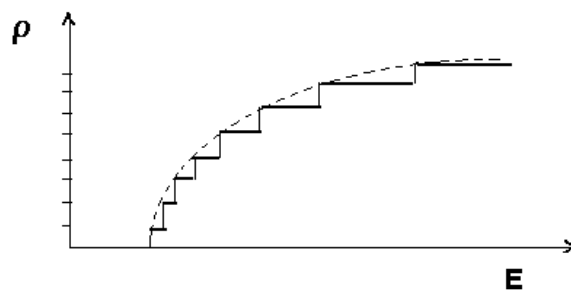
Gęstość stanów

dla bardzo cienkiej warstwy studni (*małe* L)

każde podpasmo dostarcza stany gazu 2D o stałej gęstości $m^*/(\pi\hbar)$



duże L – wiele E_i



gaz 2D --> 3D

rozwiązania parzyste: $f(z)=f(-z)$

$$f(z) = A \cos(kz) \quad |z| \leq L/2$$

$$f(z) = B \exp(-\kappa(z - L/2)) \quad z > L/2$$

nieparzyste:

$$f(z) = A \cos(kz) \quad |z| \leq L/2$$

$$f(z) = B \exp(-\kappa(z - L/2)) \quad z > L/2$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2}{2m_A} k_t^2 \right)},$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} \left(V_b - E + \frac{\hbar^2}{2m_B} k_t^2 \right)}$$

przyjmując $E=0$ na dnie studni (A)

A, B z równań (m^*) , (m^{**}) ; istnienie rozwiązań z $\det| |=0$

np. dla stanów parzystych

$$\cos\left(\frac{kL}{2}\right) - \frac{m_A k}{m_B \kappa} \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

$m_A = m_A^*$ i $m_B = m_B^*$ - przybliżone masy efektywne materiałów litych

uwaga:

zależność $E_i(k_t)$ nie musi być paraboliczna, ale dla $m_A \approx m_B^*$

$$E_i(k_t) \cong E_i(0) + \frac{\hbar^2}{2m_i^*} k_t^2$$

(i – numeruje kolejne podpasma)

a także:

masa efektywna w 2D-podpasmie może być różna dla różnych podpasem

dla każdego i powinna być znaleziona numerycznie,
tzn. przez wykonanie obliczeń dla wielu różnych k_t i zbadanie
zachowania się E_i w funkcji k_t

perturbacyjnie: (dla $k_t \rightarrow 0$) w równaniu (x) :

$$\frac{\hbar^2 k_t^2}{2m(z)} = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_i} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2} \left(\frac{1}{m(z)} - \frac{1}{m_i} \right)$$

(tu m_i oznacza poszukiwaną perturbacyjnie masę efektywną w podpasmie i
- jedną, wspólną dla wszystkich obszarów układu niskowymiarowego)

drugi wyraz można potraktować jako zaburzenie

w I rzędzie RZ poprawka do energii

$$\Delta E_i = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2} \left[\frac{1}{m_A} (1 - P_i^b) + \frac{1}{m_B} P_i^b - \frac{1}{m_i} \right]$$

gdzie

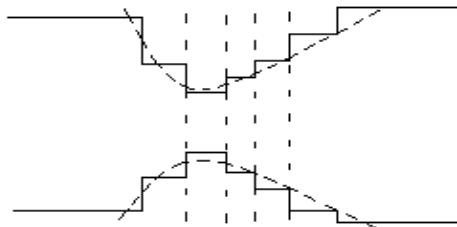
$$P_i^b = 2 \int_{L/2}^{\infty} f_i^2(z) dz = \frac{B^2}{\kappa}$$

z warunku $\Delta E_i = 0$

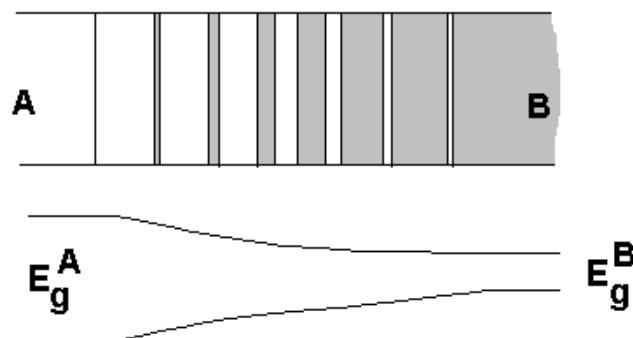
$$\frac{1}{m_i} = \left[\frac{1}{m_A} (1 - P_i^b) + \frac{1}{m_B} P_i^b \right]$$

Studnie kwantowe profilowane

- profile prostokątne o różnych wartościach V_b
- zmieniając w procesie epitaksji skład (kompozycję) x np. w $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$



- naprzemienne warstwy o składzie (x_1, x_2) o różnych grubościach



Uwaga:

- EFA nie może być **w zasadzie** stosowana do bardzo cienkich warstw
 - o $L \approx a$
- Jedno pasmo (b) (nieparaboliczność)
dla $k_t=(k_x, k_y)=0$ macierz kp

$$\begin{bmatrix} E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k_z^2 & iPk_z & 0 & 0 \\ -iPk_z & \left(\frac{\hbar^2}{2m} + L\right) k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{\hbar^2}{2m} + M\right) k_z^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left(\frac{\hbar^2}{2m} + M\right) k_z^2 \end{bmatrix} \quad (xx)$$

co w przybliżeniu izotropowych pasm odpowiada
tzw. modelowi 2-pasmowemu

$$\begin{bmatrix} \alpha k^2 + E_g & iPk \\ -iPk & \beta k^2 \end{bmatrix}$$

zakładając, że krzywizna pasm w $k=0$ jest spowodowana głównie silnym oddziaływaniem VB-CB, tzn. pomijając wyrazy kwadratowe w k dostajemy tzw. **model Kane'a** (dla studni kwantowej)

$$\begin{bmatrix} E_g - \varepsilon & iPk_z \\ -iPk_z & -\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_c(z) \\ f_v(z) \end{bmatrix} = 0$$

po sprowadzeniu do równania na $f_c(z)$
możemy wyznaczyć poprawkę na nieparaboliczność masy do
jednopasmowego równania na $f_c(z)$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left\{ 1 + \frac{2\tilde{P}^2 m}{\varepsilon + E_g / 2} \right\} \frac{d^2}{dz^2} f_c(z) = (\varepsilon - E_g / 2) f_c(z)$$

(ε - mierzone od środka przerwy, $\tilde{P} = P2\pi/\hbar$)

typowe wartości parametrów $E_P = 2P^2 m$ są rzędu 20 meV a

$E_g \approx 1$ eV to drugi wyraz może być istotny i może

wpływać na krzywiznę pasma i podpasm przewodnictwa

- **Wiele pasm**

układ N sprzężonych równań różniczkowych na składowe funkcje
obwiedni $f_n(z)$; dla każdego k_t + odpowiednie warunki
zszywania:

$$\left\{ \underline{A}(z) \frac{d^2}{dz^2} + \underline{B}(z) \frac{d}{dz} + \underline{C}(z) \right\} \underline{F}(z) = 0$$

A, B, C - macierze N x N; zależne od ośrodka

\underline{F} - wektor kolumnowy funkcji f_n

b. złożone warunki zszywania