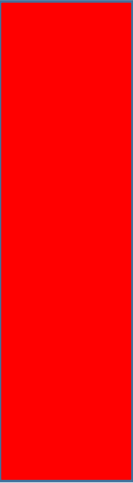


Materiały i przyrządy półprzewodnikowe



Wykład 3: Wstęp o obliczania struktury pasmowej (cz. 2)

Paweł Wójcik

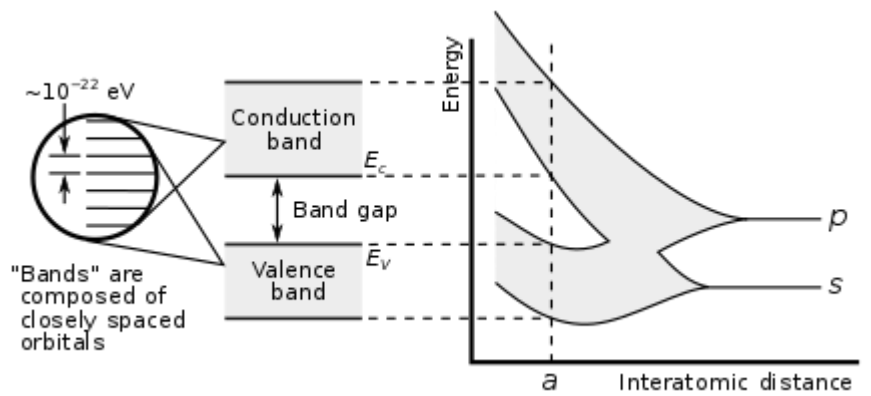


Plan wykładu:

1. Rachunek zaburzeń
2. Metoda **k.p**
3. Przybliżenie masy efektywnej
4. Spin elektronu, efekt Zeemana i oddziaływanie spin-orbita
5. Model Kane
6. Rachunek zaburzeń Löwdina
7. Model Lütingera-Kohna
8. Inne metody obliczania struktury pasmowej
9. Struktury pasmowe materiałów półprzewodnikowych

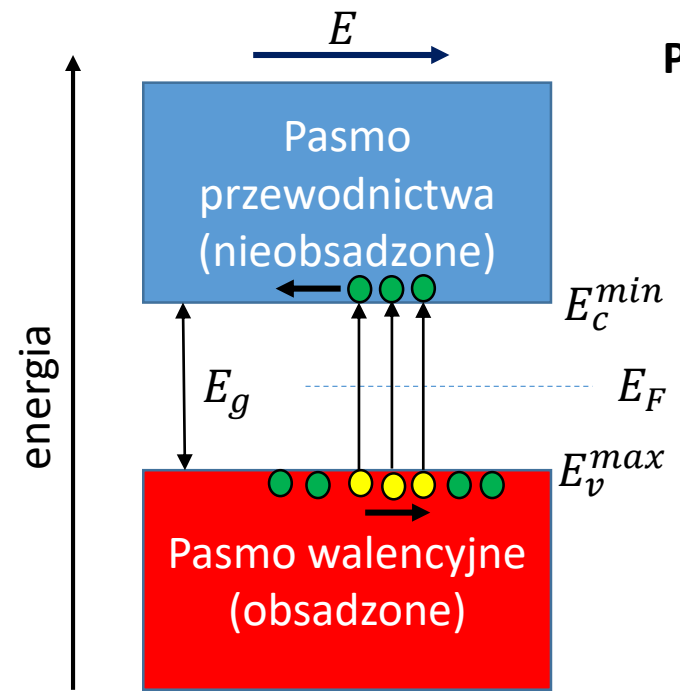
Struktura pasmowa – ilustracja pogładowa (z poprzedniego wykładu)

Co się dzieje jak zbliżamy atomy ?



Schematyczna struktura pasmowa w półprzewodniku

Stany elektronów walencyjnych w atomach tworzą w kryształach elektrony **pasmo walencyjne**. Kolejne wzbudzone stany atomowe (nieobsadzone w stanie podstawowym) tworzą **pasmo przewodnictwa**

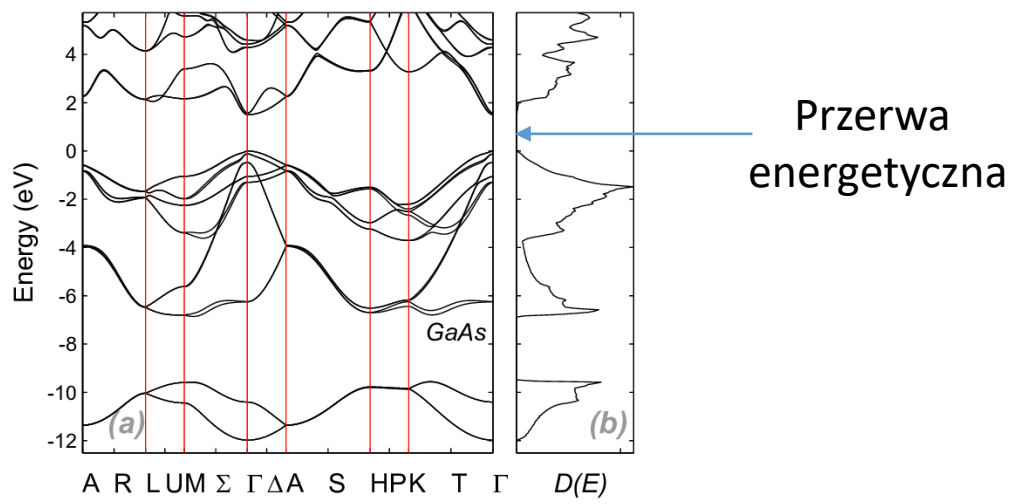


Półprzewodnik samoistny

Co to tłumaczy:

1. Wykładniczy wzrost oporu od temperatury. Gdy $E_g \approx k_B T$ następują przeskoki
2. Nośnikami prądu są zarówno ładunki dodatnie, jak i ujemne.

Obliczona struktura pasmowa GaAs



Energie Fermiego E_F definiuje się jako maksymalną energię stanu jednoelektronowego obsadzonego w temperaturze $T=0$

Rachunek zaburzeń niezależny od czasu - przypomnienie

Problem – mamy układ dany Hamiltonianem składającym się z części którą umiemy rozwiązać H_0 oraz niewielkiego zaburzenia H'

$$(H_0 + \lambda H')|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

To co znamy

$$H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Sztuczka polega na rozwinięciu w szereg nieznanej energii własnej E_n oraz funkcji własnej ψ_n

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

I wstawiamy to do pierwszego równania

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H')(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned}$$

Rachunek zaburzeń niezależny od czasu - przypomnienie

Porównujemy wyrazy przy tych samych potęgach λ

$$\begin{aligned} H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + H' |\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ H_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + H' |\psi_n^{(1)}\rangle &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

- Pierwsze równanie już znamy i mamy rozwiązane
- Drugie równanie przemnażamy przez $\langle \psi_m^{(0)} |$ i wykonujemy przekształcenia

$$\langle \psi_m^{(0)} | H_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_m^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Zakładając

$$\langle \psi_n^{(i)} | \psi_n^{(j)} \rangle = 0 \quad \text{dla } i \neq j$$

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Pierwsza poprawka do energii

- Z trzeciego równania można uzyskać drugą poprawkę do energii

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Druga poprawka do energii

Metoda k.p

W przybliżeniu jednoelektronowym w potencjale periodycznym

$$H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Zgodnie z twierdzeniem Blocha

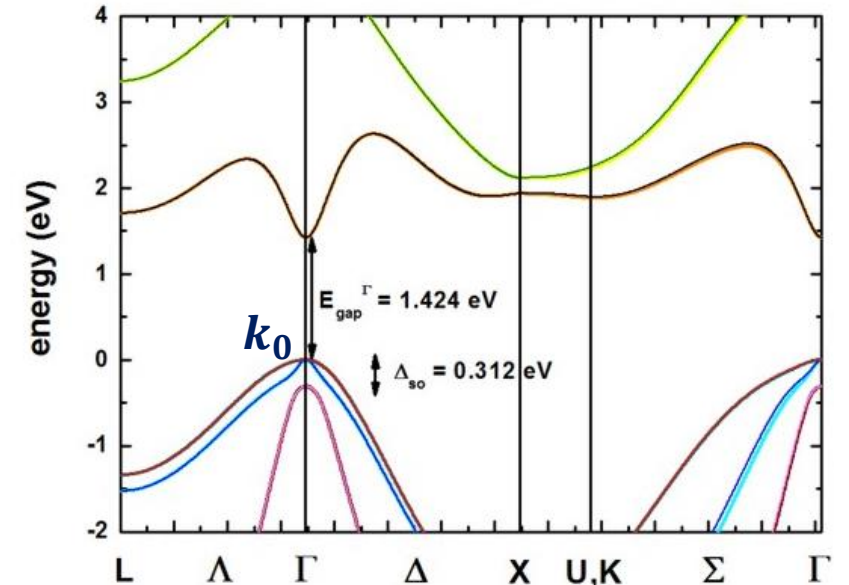
$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Wstawiając funkcje Blocha do równania powyżej otrzymujemy

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}\hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Idea metody k.p – znamy rozwiązanie w punkcie k_0 wysokiej symetrii, np. Γ i rozwijamy funkcje $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dla dowolnego $k - k_0$ w bazie funkcji $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} C_{nn'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$



Metoda k.p

Równanie dla $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$

$$\left[H_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

gdzie

$$H_{\mathbf{k}_0} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\mathbf{r})$$

Zakładając ortogonalizację

$$\int_{cell} d^3r u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'}$$

I wstawiając funkcje falowe

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right\} C_{nn'} = E_n(\mathbf{k})C_{nn'}$$

gdzie

$$\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) = \langle u_{n\mathbf{k}_0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n'\mathbf{k}_0} \rangle = \int_{cell} d^3r u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

Metoda k.p

Równanie sekularne

$$\det \left| \left[E_n(\mathbf{k}_0) - E_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right| = 0$$

- Równanie sekularne służy do znalezienia relacji dyspersji $E_n(\mathbf{k})$
- Trzeba znać energie $E_n(\mathbf{k}_0)$ i elementy macierzowe $\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0)$
- Wielkości te zmuszeni jesteśmy brać z danych doświadczalnych dlatego metoda **k.p** jest metodą półempiryczną
- **Powyższe równanie jest prawdziwe dla dowolnego \mathbf{k} , jednak najbardziej użyteczne jest ono przy obliczeniach kształtu pasm energetycznych w bezpośrednim otoczeniu punktu k_0**

Metoda k.p

Jeżeli $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ jest niewielkie to

$$\left[H_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

możemy traktować jak zaburzenie

Zakładając jedno pasmo zależność $E_n(\mathbf{k})$ można obliczyć z rachunku zaburzeń

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{n'n}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}$$

Ale w \mathbf{k}_0 jest ekstremum, a zatem

$$\left. \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0 \quad \text{co daje} \quad \hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) + \hbar\mathbf{k}_0 = 0$$

Metoda k.p

Wtedy wokół \mathbf{k}_0 energię można zapisać w postaci

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^3 \left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta})$$

gdzie

$$\left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\hat{\mathbf{p}}_{nn'}^\alpha(\mathbf{k}_0) \hat{\mathbf{p}}_{n'n}^\beta(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}$$

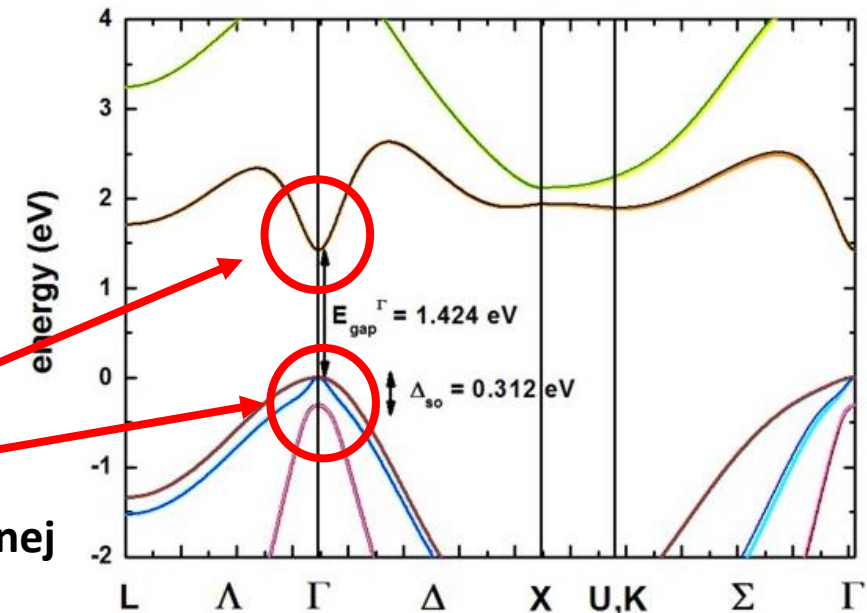
Tensor masy efektywnej

$$(m_{\alpha\beta}^{-1})_n = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right)_{\mathbf{k}_0}$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{2m}$$

Prawie paraboliczne pasma - podobne do cząstki swobodnej

PRZYBLIŻENIE MASY EFEKTYWNEJ



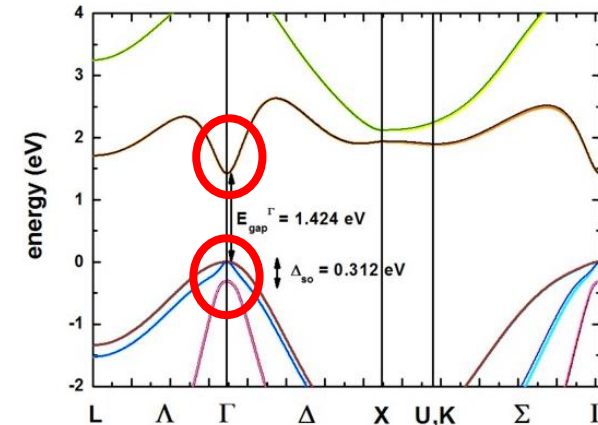
Przybliżenie masy efektywnej

Przybliżenie masy efektywnej pozwala nam traktować ładunki (elektrony i dziury) jak cząstki swobodne o zmienionej masie, która często jest inna w różnych kierunkach krystalograficznych (anizotropia). Przybliżenie to jest często wykorzystywane w symulacjach układów nano i mezoskopowych.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(k_x - k_x^0)^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2(k_y - k_y^0)^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2(k_z - k_z^0)^2}{2m_z}$$

$$(m_{\alpha\beta}^{-1})_n = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right)_{\mathbf{k}_0}$$

| Semiconductors | m_e | m_h |
|-------------------|-------------|------------|
| InSb | $0.015 m_0$ | $0.39 m_0$ |
| InAs | $0.026 m_0$ | $0.4 m_0$ |
| GaAs | $0.067 m_0$ | $0.5 m_0$ |
| Cu ₂ O | $0.99 m_0$ | $0.5 m_0$ |
| Si | $1.08 m_0$ | $0.54 m_0$ |

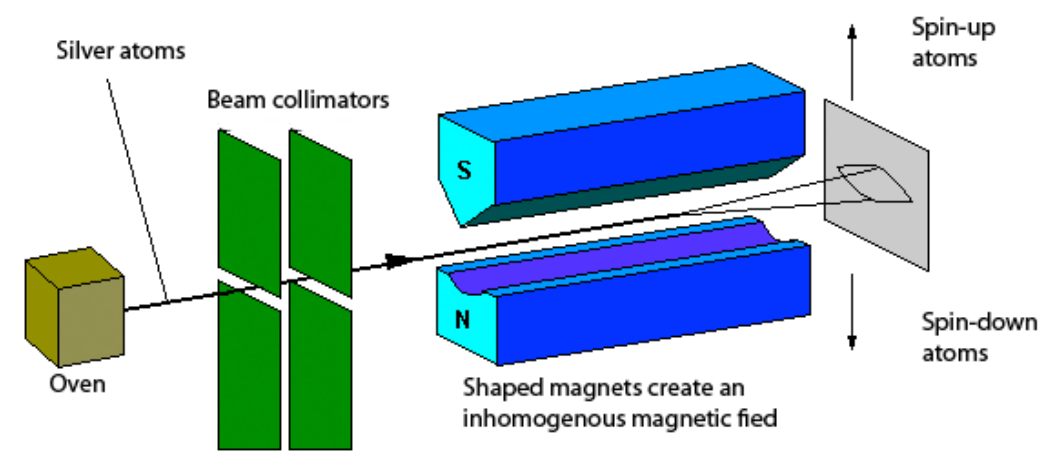


Krzem i german mają elipsoidalną elektronową relacje dyspersji z różnymi masami efektywnymi w różnych kierunkach. Dla krzemu

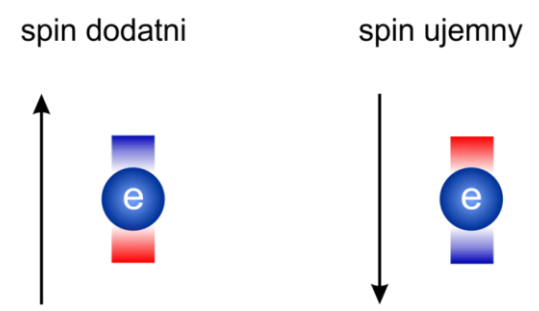
| | |
|--------------------|--------------------|
| elektrony | dziury |
| $m_{le} = 0.92m_0$ | $m_{lh} = 0.16m_0$ |
| $m_{te} = 0.19m_0$ | $m_{hh} = 0.52m_0$ |

Spin elektronu – równanie Pauliego

Doświadczenie Sterna-Gerlacha



George Uhlenbeck i Samuel Goudsmit proponują istnienie spinu elektronu



Relatywistyczna mechanika kwantowa oparta jest na **równaniu Diraca** i zawiera ona spin elektronu. Jeśli dokonamy rozwinięcia równania Diraca otrzymujemy **równanie Pauliego** z poprawkami relatywistycznymi

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V + \frac{e\hbar}{2m_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V) - \frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \nabla \cdot \nabla V + \dots$$

↓ spinowe rozszczepienie Zeemana
↓ oddziaływanie spin-orbita
↓ wyraz Darwina

Spin elektronu – równanie Pauliego

Operatory spinu – macierze Pauliego

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Równanie własne s_z

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = s_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{rozwiązanie}$$

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{spin up}$$

$$s_z = -\frac{\hbar}{2} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{spin down}$$

Efekt Zeemana

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \mu_B (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z)$$

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \mu_B B_z & \frac{1}{2} g \mu_B (B_x - i B_y) \\ \frac{1}{2} g \mu_B (B_x + i B_y) & \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} g \mu_B B_z \end{pmatrix}$$

Spin elektronu – równanie Pauliego

Równanie Pauliego

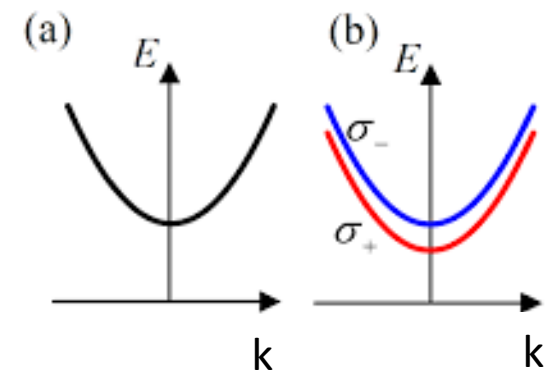
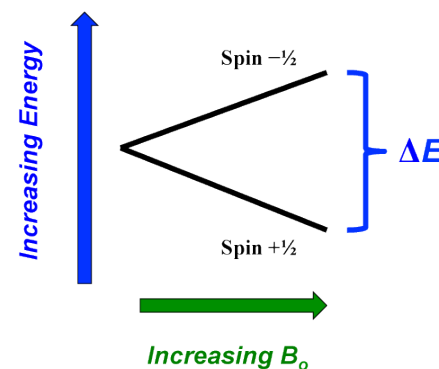
$$\begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g\mu_B B_z & \frac{1}{2}g\mu_B(B_x - iB_y) \\ \frac{1}{2}g\mu_B(B_x + iB_y) & \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}g\mu_B B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Dla cząstki swobodnej w polu $\mathbf{B}=(0,0,B)$

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2}g\mu_B B_z - E & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{2}g\mu_B B_z - E \end{pmatrix} = 0$$

Rozszczepienie Zeemana

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \frac{1}{2}g\mu_B B_z$$



Oddziaływanie spin-orbita

Hamiltonian oddziaływania SO w wersji atomowej

Wektor macierzy Pauliego (spin)

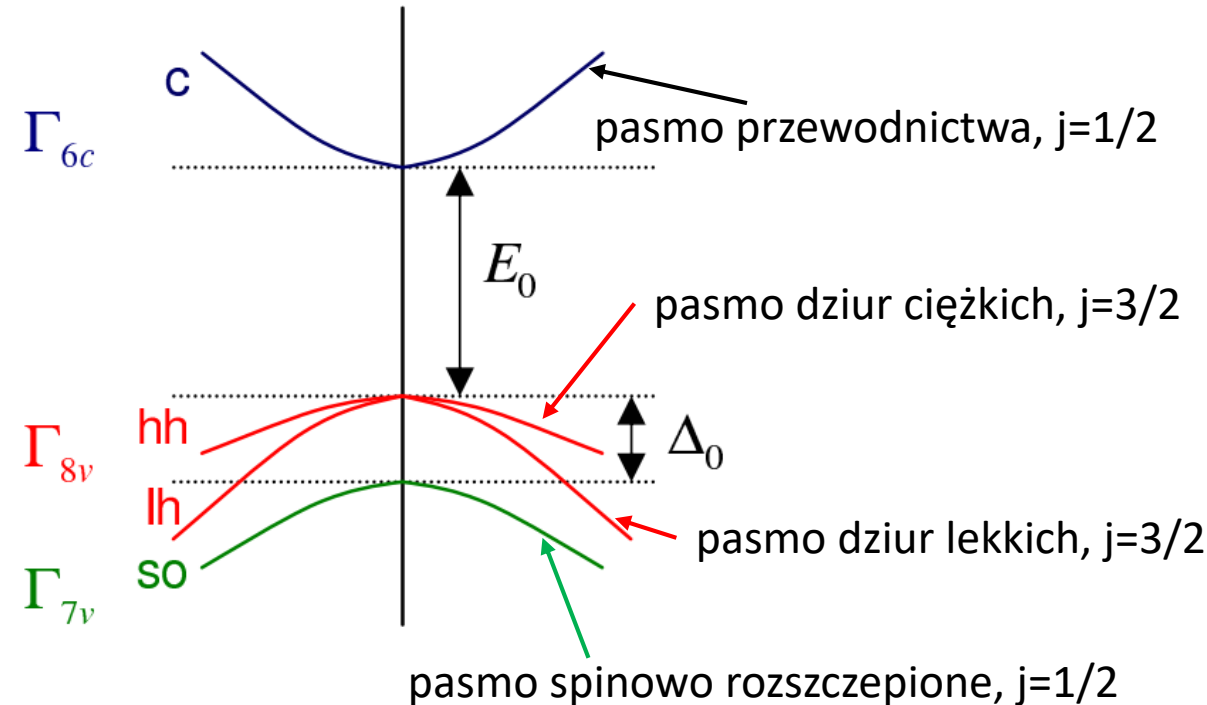
$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{p})$$

Pole elektryczne = gradient potencjału

operator pędu

SOC – oddziaływanie momentów magnetycznych orbitalnego oraz spinowego

- Odgrywa szczególną rolę w spintronice
- Duże dla półprzewodników z małą przerwą InSb, InAs



Metoda Löwdina

Równanie Schrödingera

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

rozwiązujemy w bazie funkcji ortogonalnych

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$$

Otrzymujemy układ równań

$$\sum_n (H_{mn} - E\delta_{mn})c_n = 0$$

$$\begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Nieskończony układ równań

Idea metody Löwdina – spośród nieskończonej (skończonej) ilości stanów interesują nas jedynie stany należące do pewnego zbioru A. Chcemy zapisać Hamiltonian dla stanów A z poprawkami pochodzącymi od pozostałych stanów.

$$(H_{mm} - E)c_m + \sum_{n \in A, n \neq m} H_{mn}c_n + \sum_{n \notin A, n \neq m} H_{mn}c_n = 0$$

$$(H_{mm} - E)c_m + \sum_{n \in A} H_{mn}(1 - \delta_{mn})c_n + \sum_{n \notin A} H_{mn}(1 - \delta_{mn})c_n = 0$$

Metoda Löwdina

Kolejne przekształcenia dają

$$h_{mn} = \frac{H_{mn}(1 - \delta_{mn})}{E - H_{mm}}$$

$$c_m = \sum_{n \in A} h_{mn} c_n + \sum_{n \notin A} h_{mn} c_n$$

Chcemy wyeliminować stany nienależące do zbioru A

$$\begin{aligned} c_m &= \sum_{n \in A} h_{mn} c_n + \sum_{n \notin A} h_{mn} \left[\sum_{k \in A} h_{nk} c_k + \sum_{k \notin A} h_{nk} \left(\sum_{p \in A} h_{kp} c_p + \dots \right) \right] \\ &= \sum_{n \in A} h_{mn} c_n + \sum_{n \notin A} h_{mn} \sum_{k \in A} h_{nk} c_k + \sum_{n \notin A} h_{mn} \sum_{k \notin A} h_{nk} \sum_{p \in A} h_{kp} c_p + \dots \\ &= \sum_{n \in A} c_n \left(h_{mn} + \sum_{k \notin A} h_{mk} h_{kn} + \dots \right) \\ &= \sum_{n \in A} \frac{c_n}{E - H_{mm}} \left(-H_{mn} \delta_{mn} + \underbrace{H_{mn} + \sum_{k \notin A} \frac{H_{mk} H_{kn} (1 - \delta_{mk})(1 - \delta_{kn})}{E - H_{kk}}}_{U_{mn}} \right) \end{aligned}$$

Metoda Löwdina

Otrzymujemy

$$c_m = \sum_{n \in A} \frac{U_{mn} - H_{mn} \delta_{mn}}{E - H_{mm}} c_n$$

$$\sum_{n \in A} (U_{mn} - H_{mn} \delta_{mn}) c_n = c_m (E - H_{mm}) = \sum_{n \in A} c_n \delta_{nm} (E - H_{mm})$$

$$\sum_{n \in A} (U_{mn} - E \delta_{mn}) c_n = 0$$

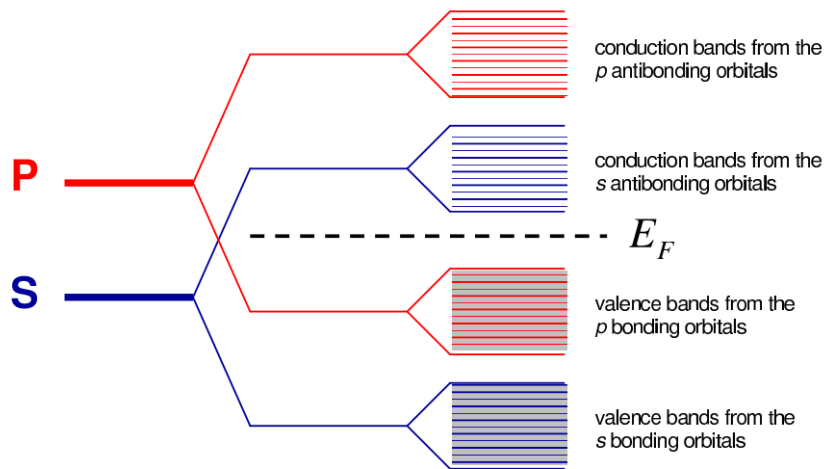
Skończony układ równań

Metoda Löwdina jest wykorzystywana do wyprowadzania Hamiltonianów opisujących jedynie skończony zbiór pasm (orbitali) w metodzie TBA. Tak dla przykładu możemy wyprowadzić Hamiltonian pasm walencyjnych (dziury ciężkiej i lekkiej) z poprawkami pochodzącymi od pozostałych pasm.

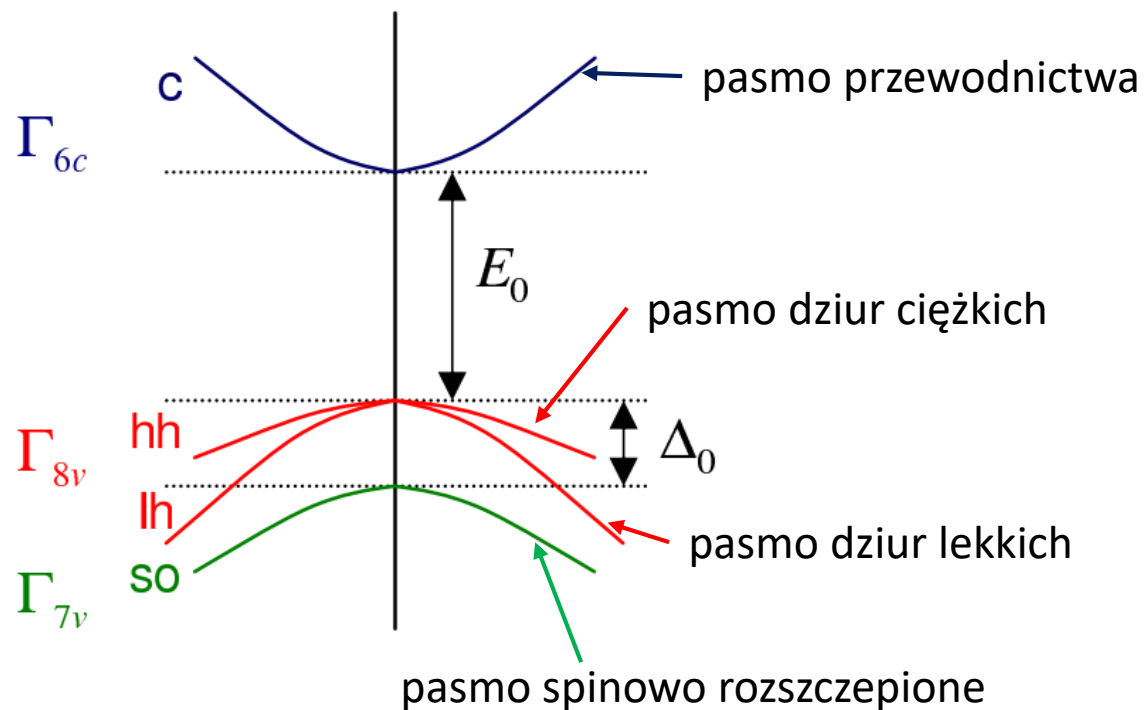
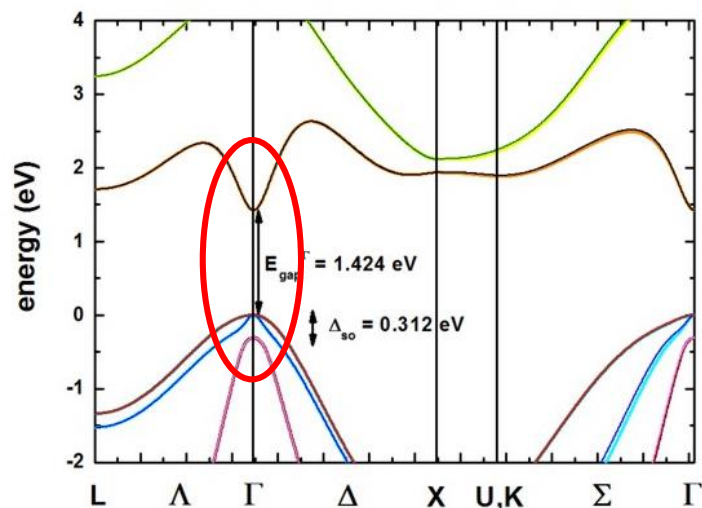
Model Luttingera-Kohna i model Kane

Dla struktury blendy cynkowej np. GaAs.

UWAGA: dla Si (struktura diamentu) jest inaczej



GaAs

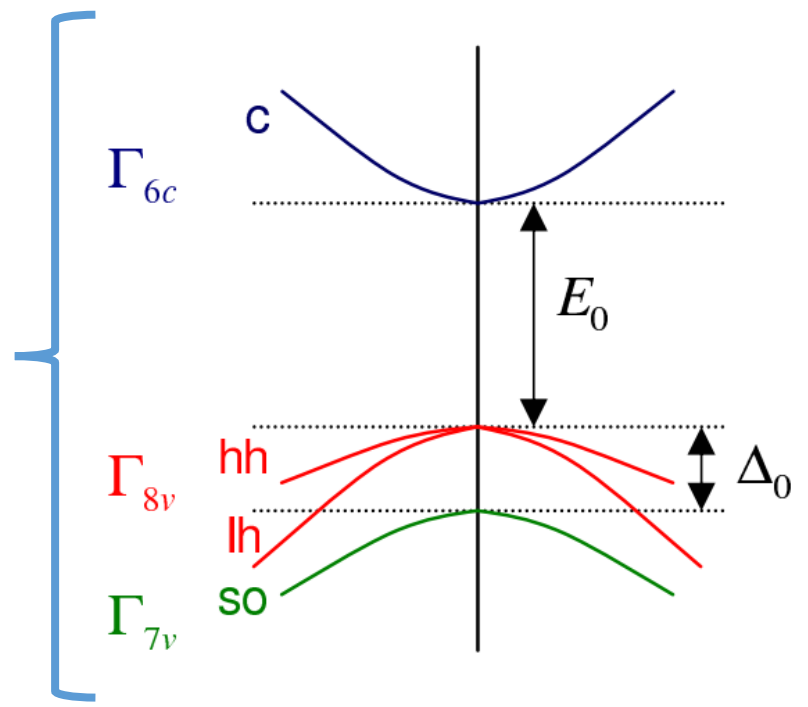


Pod uwagę możemy wziąć jedynie orbitale antywiążące $|S\rangle$ oraz wiążące typu p , trzy zdegenerowane $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$

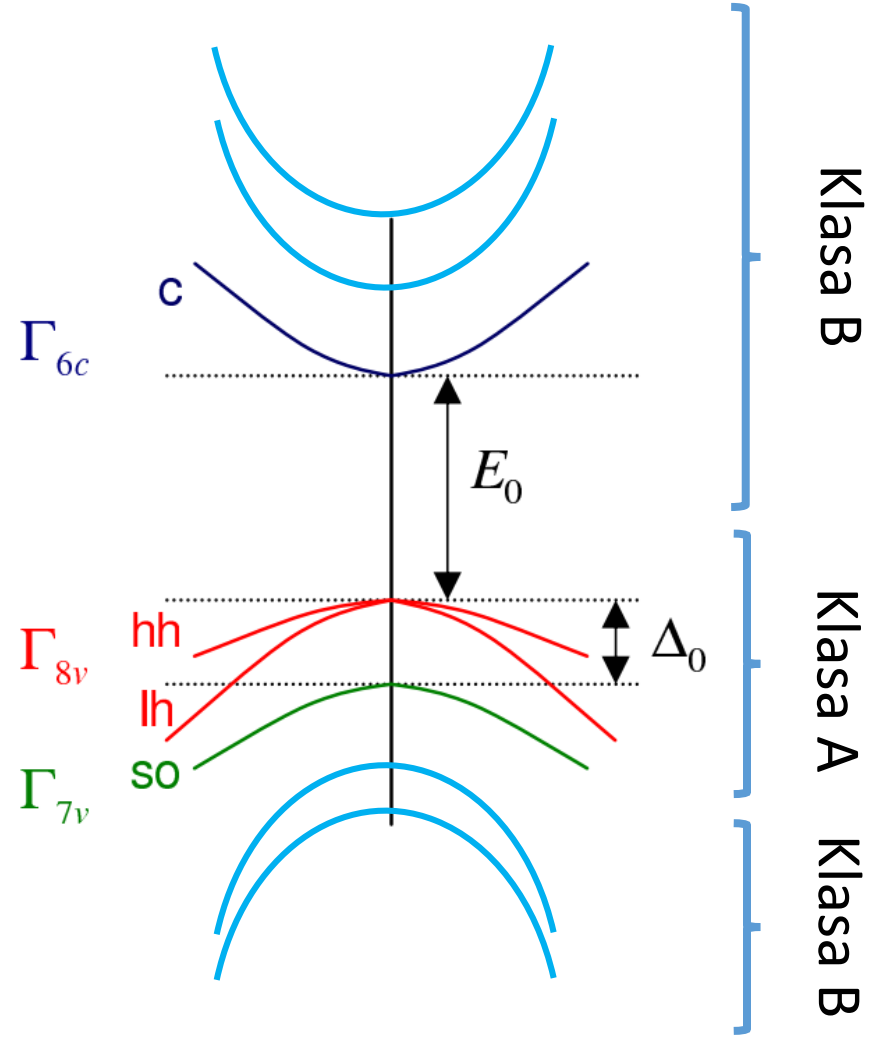
Hamiltonian Luttingera-Kohna vs Kane

Rozpatrujemy jedynie tych osiem stanów (pasm) i sprężenie pomiędzy nimi (8 pasmowy model Kane). Wpływ reszty pasm pomijamy.

MODEL KANE



MODEL LUTTINGERA-KOHN



Rozpatrujemy 8 stanów (pasm) lub mniej ograniczając się do pasm walencyjnych ale uwzględniamy istnienie innych pasm – metoda perturbacyjna Löwdina

Model Kane bez SOC

MODEL KANE – nadal pracujemy w przybliżeniu k.p zakładając, że rozwijamy stany wokół punktu wysokiej symetrii Γ , a zatem $\mathbf{k}_0 = 0$.

Hamiltonian k.p

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Rozwinięcie w bazie

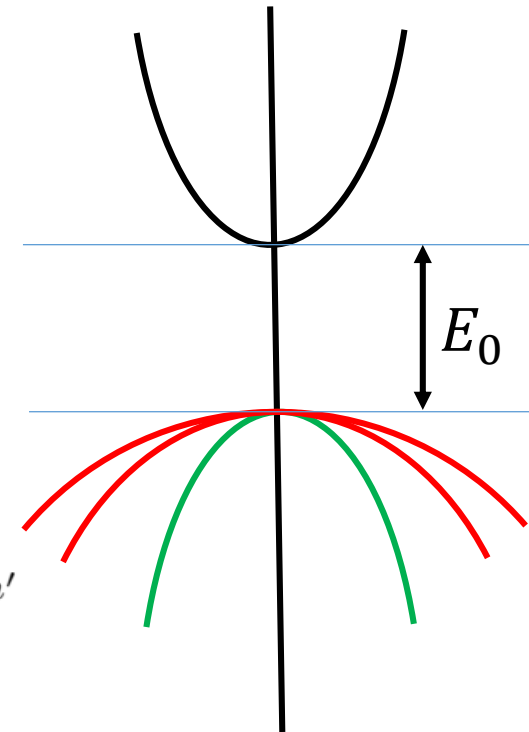
$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} C_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'0}(\mathbf{r})$$

Postać macierzowa

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \hat{\mathbf{p}}_{nn'}(0) \right\} C_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) C_{nn'}$$

gdzie

$$\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(0) = \langle u_{n0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n'0} \rangle$$



Model Kane bez SOC

Pod uwagę bierzemy jedynie orbitalne antywiązące $|S\rangle$ oraz wiążące typu p , trzy zdegenerowane $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$

$$|S\rangle = \phi_{0,0}; |X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{1,-1} - \phi_{1,1}); |Y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(\phi_{1,-1} + \phi_{1,1}); |Z\rangle = \phi_{1,0}.$$

Funkcje własne orbitalnego momentu pędu ϕ_{l,m_l} (harmonijki sferyczne)

W rzeczywistości jeszcze powinna być skomplikowana funkcja radiana

$$E_p(0) = E_x(0) = E_y(0) = E_z(0)$$

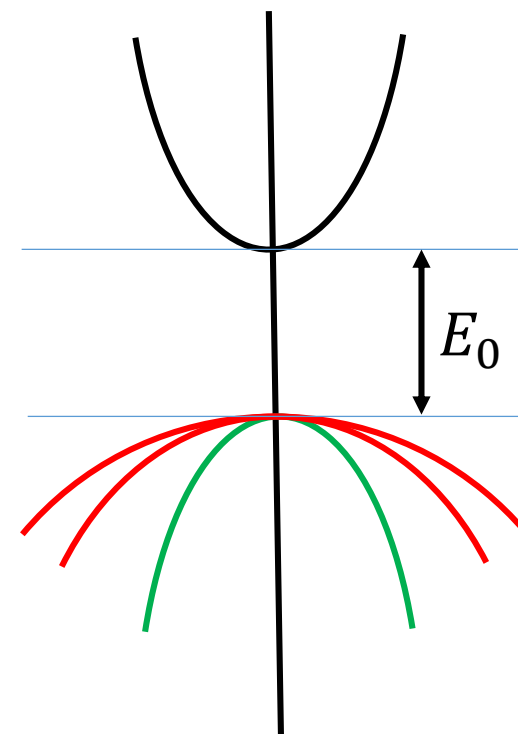
$$\underline{E_0 = E_p(0) - E_s(0)}$$

Elementy macierzowe operatora pędu (niezerowe)

Z równanie Liouville $[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H} = \frac{i\hbar}{m_0}\hat{\mathbf{p}}$

$$\frac{\hbar}{m_0} \langle u_{n0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n'0} \rangle = i[E_{n'}(0) - E_n(0)] \langle u_{n0} | \hat{\mathbf{r}} | u_{n'0} \rangle \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$P_0 = \frac{\hbar}{m_0} \langle S\sigma | p_x | X\sigma \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S\sigma | p_y | Y\sigma \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S\sigma | p_z | Z\sigma \rangle.$$



Model Kane bez SOC

Ostatecznie Hamiltonian ma formę macierzy 8x8

$$H = \begin{pmatrix}
 |S \uparrow\rangle & |S \downarrow\rangle & |X \uparrow\rangle & |X \downarrow\rangle & |Y \uparrow\rangle & |Y \downarrow\rangle & |Z \uparrow\rangle & |Z \downarrow\rangle \\
 E_p(0) + E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & P_0 k_x & 0 & P_0 k_y & 0 & P_0 k_z & 0 \\
 0 & E_p(0) + E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & P_0 k_x & 0 & P_0 k_y & 0 & P_0 k_z \\
 P_0 k_x & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & P_0 k_x & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 P_0 k_y & 0 & 0 & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & P_0 k_y & 0 & 0 & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\
 P_0 k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\
 0 & P_0 k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_p(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
 \end{pmatrix}$$

- Diagonalizacja Hamiltonianu dla danego \mathbf{k} daje relacje dyspersji $E(\mathbf{k})$
- Parametry P_0 i $E_p(0)$ i E_0 dopasowuje się do krzywych eksperymentalnych

Model Luttingera-Kohna z SOC

Hamiltonian k.p

$$Hu_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{\Pi} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m_0^2 c^2} \nabla V \times \mathbf{p} \cdot \bar{\sigma} \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \bar{\sigma} \times \nabla V$$

„Inteligentna” baza związana z funkcjami własnymi całkowitego momentu pędu $j = l + s$. **SOC w tej bazie diagonalne.**

$$u_{hh}(\mathbf{r}) = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle$$

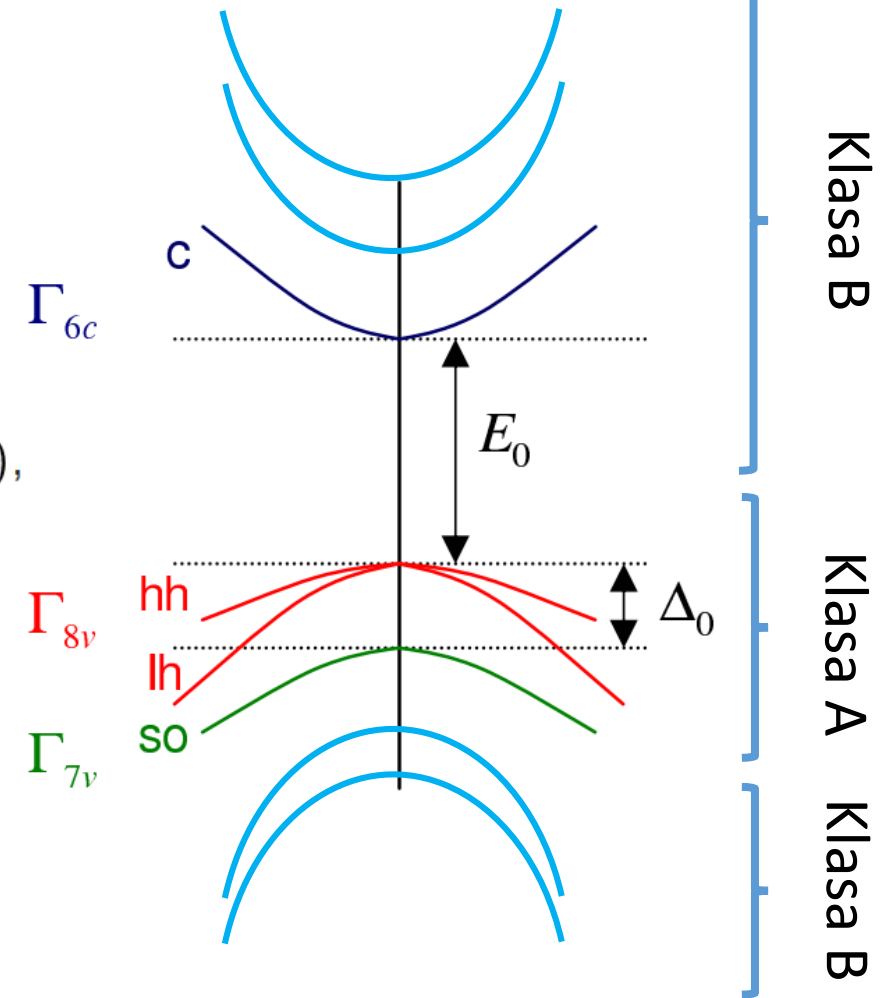
$$u_{lv}(\mathbf{r}) = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$\bar{u}_{lh}(\mathbf{r}) = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle$$

$$\bar{u}_{lv}(\mathbf{r}) = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$u_{SO}(\mathbf{r}) = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$\bar{u}_{SO}(\mathbf{r}) = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle$$



Model Luttingera-Kohna

Metoda perturbacyjna Löwdina

$$\sum_{j' \in A} (U_{jj'}^A - E\delta_{jj'})c_{j'} = 0$$

gdzie macierz $U_{jj'}$

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H_{j\gamma}H_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma}$$

$$\langle u_{j0} | \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \right) | u_{\gamma 0} \rangle \approx \sum_{\alpha} \frac{\hbar k_{\alpha}}{m_0} p_{j\gamma}^{\alpha}$$

$$D_{jj'} \equiv U_{jj'}^A = E_j(0)\delta_{jj'} + \sum_{\alpha\beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_{\alpha}k_{\beta},$$

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{jj'}\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma}^B \frac{p_{j\gamma}^{\alpha}p_{\gamma j'}^{\beta} + p_{j\gamma}^{\beta}p_{\gamma j'}^{\alpha}}{m_0(E_0 - E_{\gamma})} \right].$$

Model Luttingera-Kohna

Wprowadzamy zmienne

$$A_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma x}^x}{E_0 - E_{\gamma}},$$

$$B_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^y p_{\gamma x}^y}{E_0 - E_{\gamma}},$$

$$C_0 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma y}^y + p_{x\gamma}^y p_{\gamma y}^x}{E_0 - E_{\gamma}},$$

$$\gamma_1 = -\frac{1}{3} \frac{2m_0}{\hbar^2} (A_0 + 2B_0),$$

$$\gamma_2 = -\frac{1}{6} \frac{2m_0}{\hbar^2} (A_0 - B_0),$$

$$\gamma_3 = -\frac{1}{6} \frac{2m_0}{\hbar^2} C_0,$$

$$H^{LK} = \begin{pmatrix} P + Q & S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & -\sqrt{2}R \\ S^* & P - Q & 0 & R & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P - Q & -S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & -S^* & P + Q & \sqrt{2}R^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & P - \Delta_{SO} & 0 \\ -\sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P - \Delta_{SO} \end{pmatrix}$$

$$P = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \mathbf{k}^2, \quad \text{Parametry } \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \text{ z eksperymentu !!!}$$

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - k_z^2),$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{-\sqrt{3}}{2} [(\gamma_2 + \gamma_3)k_-^2 + (\gamma_2 - \gamma_3)k_+^2],$$

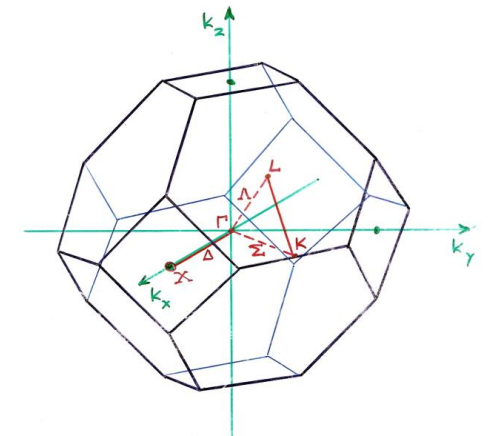
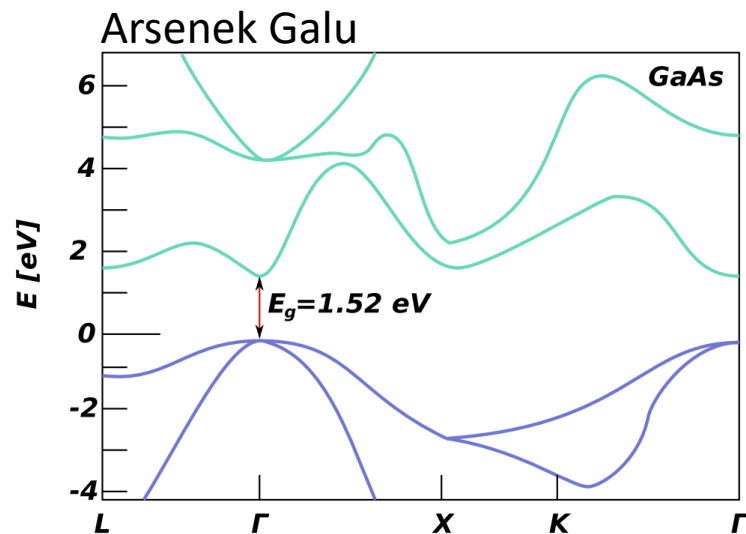
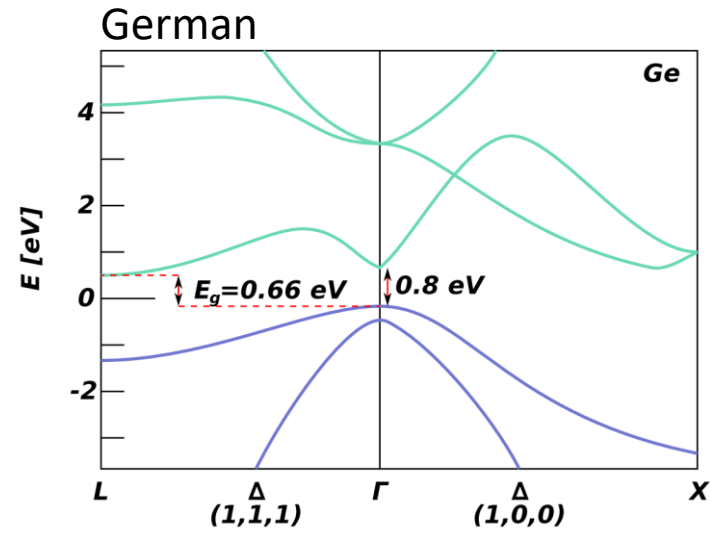
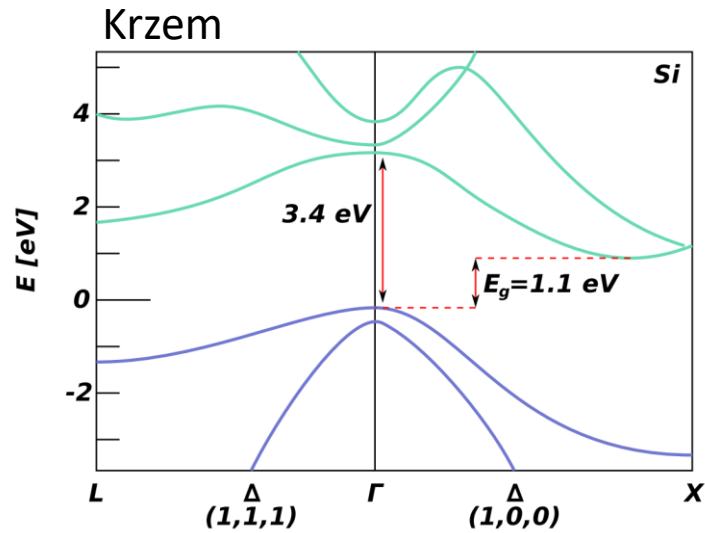
$$S = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (-2\sqrt{3}) \gamma_3 k_- k_z,$$

$$\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y.$$

Inne metody obliczania struktury elektronowej

- Metody DFT – dedykowana do stanu podstawowego, dlatego niezbyt skutecznie potrafi obliczyć przerwę energetyczną. Uwzględnia oddziaływanie elektronowe i oddziaływanie z jonami (np. metoda pseudopotencjałów).
- OPW – ortogonalized wave method. Uwzględnienie oddziaływania z jonami, które prowadzi do metody pseudopotencjałów
- Metoda Hartree – próba uwzględnienia oddziaływania elektron-elektron.
- Metoda Hartree-Focka – próba uwzględnienia oddziaływania elektron-elektron z włączonym zakazem Pauliego, co prowadzi do oddziaływania wymiennego

Struktury pasmowe niektórych półprzewodników



Pierwsza strefa Brillouina dla fcc

Najważniejsze informacje z wykładu - podsumowanie

- Metoda k.p to półempiryczna metoda obliczania struktury pasmowej blisko punktów wysokiej symetrii
- W punktach wysokiej symetrii pasma są prawie paraboliczne, a zatem możemy elektrony traktować jak cząstki swobodne z masą efektywną
- Zastosowanie metody k.p dla punktu Γ przy zastosowaniu 8 (6) pasm prowadzi do modelu Kane lub Hamiltonianu Luttingera-Kohna (pasma walencyjne)
- Hamiltonian Luttingera zawiera wpływ pozostałych pasm uwzględniony poprzez metodę Löwdina
- Uwzględnienie spinu elektronu prowadzi do równania Pauliego z efektem Zeemana oraz oddziaływaniem spin-orbita. Oddziaływanie SO skutkuje zniesieniem degeneracji pasm walencyjnych – powstaje pasmo spin-orbitalnie rozszczepione