



Faculteit Wetenschappen  
Departement Fysica

## THEORETISCHE BACHELORPROEF

---

# De Elektronische Structuur Van Gaten In Halfgeleider Nanostructuren

---

Auteur:  
Andy Martinez

Promotor:  
Prof. Dr. B. Partoens

## Voorwoord

Ik wil mijn promotor Prof. Dr. Bart Partoens bedanken die bijna letterlijk 24/7 bereid was om mijn e-mails te beantwoorden en om af te spreken om eventuele problemen te discussieren en om ervoor te zorgen dat ik begreep wat ik aan het doen was i.p.v. dat ik simpelweg wat opdrachtjes moest uitvoeren.

Ook wil ik mijn klasgenoten bedanken voor de hulp die ze me boden wanneer ik vast zat met een opdracht of wanneer ik iets niet begreep.

## Abstract

The research of the electronic structure of holes in semiconductor nanostructures was done using the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  perturbative method. With this method the 4 and 6 band Luttinger-Kohn model was deduced. These models were used to calculate the bulk band structure around the  $\Gamma$ -point for GaAs and Si. The bulk band structure was examined for different directions in  $\mathbf{k}$ -space. We concluded that the effective mass of the holes in the band structure did not vary with direction of  $\mathbf{k}$  even though our Luttinger-Kohn Hamiltonian changed.

Next nanostructured GaAs and Si quantum wells were considered and the confined hole states were investigated based on these  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  modes. This was done numerically using a central difference method on a grid. The effects of the extra Split-off band in the 6 band model was compared to the 4 band model. The confinement also leads to mixing between Heavy Hole's and Light Hole's. This mixing character of the wavefunctions were calculated numerically for different  $\mathbf{k}$ -points.

The mixing characters were found to be different dependent on which confinement direction was observed. By rotating the wavefunctions we calculated the mixing character for confinement in one direction out of the mixing character for confinement in a direction perpendicular to this one. The electronic band structures stayed the same. This result was expected because an arbitrary label for the observed direction shouldn't change the physical properties of a material.

# Contents

<b>1</b>	<b>Inleiding</b>	<b>4</b>
1.1	Nanostructuren . . . . .	4
1.1.1	Kwantum Opsluiting . . . . .	4
1.1.2	Productie . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Bandenstructuur</b>	<b>5</b>
2.1	$k \cdot p$ Methode . . . . .	5
2.1.1	Periodische Potentiaal . . . . .	6
2.1.2	Spin-baan interactie . . . . .	7
2.1.3	Symmetrie overwegingen voor het bepalen van de basisfuncties . . . . .	8
2.1.4	Luttinger-Kohn Hamiltoniaan . . . . .	8
2.1.5	Effectieve Massa . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Gallium Arsenide (GaAs)</b>	<b>10</b>
3.1	Bulk . . . . .	10
3.2	Opsluiting . . . . .	14
3.3	Mengkarakter . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Silicium (Si)</b>	<b>24</b>
4.1	Bulk . . . . .	24
4.2	Opsluiting . . . . .	25
4.3	Mengkarakter . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Besluit</b>	<b>27</b>
<b>6</b>	<b>Bijlagen</b>	<b>28</b>
6.1	Luttinger-Kohn Hamiltoniaan . . . . .	28
6.2	Rotatie Operator . . . . .	30

# 1 Inleiding

## 1.1 Nanostructuren

Nanostructuren zijn structuren waarvan één van hun dimensies tussen 1 en 100 nm ligt. Deze structuren hebben andere eigenschappen dan hun bulk tegenpolen en zijn door hun grootte interessant om te onderzoeken voor o.a. compactere data opslag, LEDs etc..

In deze thesis wordt er dieper in gegaan op een specifieke soort nanostructuur, de halfgeleider nanostructuur. De structuur die werd onderzocht is een nanostructuur gemaakt uit halfgeleidend materiaal en waarvan de atomen zich in een kristal structuur bevinden. Het belangrijkste aan deze halfgeleider structuren is dat kwantum opsluiting optreedt door de kleine afmetingen van de structuren.

Kwantum opsluiting treedt op wanneer de afmetingen van het opgesloten materiaal kleiner zijn dan de effectieve Bohr straal van de beschouwde deeltjes in de halfgeleider (kunnen zowel elektronen als gaten zijn). Als de opsluitings dimensies groot zijn t.o.v. de effectieve Bohr straal, dan gedraagt het zich als een vrij deeltje. Hierdoor blijft de bandgap van de halfgeleider even groot en verandert er niets aan de eigenschappen van de halfgeleider.

Als de dimensies van het materiaal naar de nanoschaal gaan, dan wordt het energie spectrum discreet en wordt de bandgap afhankelijk van de dimensies van het materiaal. Door deze grootte afhankelijkheid van de bandgap, kunnen de eigenschappen van de nanostructuur worden veranderd door de dimensies van de nanostructuur te veranderen (zolang er nog opsluiting optreedt). Dit is een gewenst effect omdat de eigenschappen van het materiaal nu nauwkeurig aan te passen zijn.

Bij kwantum dots treedt opsluiting op in 3 dimensies, bij kwantum draden in 2 dimensies en bij kwantum putten in 1 dimensie. Voor al de numerieke berekeningen in deze thesis werden kwantum putten beschouwd.

De elektronische eigenschappen van deze kwantum dots liggen tussen de eigenschappen van bulk halfgeleiders en die van discrete moleculen. Kwantum dots worden onder andere onderzocht voor applicaties in zonnecellen, transistors, diode lasers en LEDs.

### 1.1.1 Kwantum Opsluiting

De Bohr straal is de gemiddelde afstand tussen het elektron en het proton in een waterstof atoom in de grondtoestand. Deze wordt berekend uit volgende formule:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \quad (1.1.1)$$

met  $\epsilon_0$  de permittiviteit van het vacuum,  $m_e$  de massa van het elektron en  $e$  de lading van het elektron.

In een halfgeleider kristal zijn de ladingsdragers (elektronen of gaten) toegevoegd aan het materiaal door dopering. Het zijn deze zwakgebonden deeltjes (of quasi deeltjes in het geval van de gaten) die de opsluiting van de put zullen voelen.

Als de breedte van de put kleiner wordt dan de effectieve Bohr straal van de ladingsdragers dan zullen deze deeltjes opgesloten zijn in de put. Dit zorgt voor de discretizatie van energieniveaus en zorgt ervoor dat het probleem zich reduceert tot een deeltje-in-een-put probleem dat bekend is in de kwantum mechanica.

Voor de berekening van de effectieve Bohr straal zal de effectieve massa van de ladingsdragers gebruikt moeten worden. De effectieve massa zal in een volgend hoofdstuk uitgebreider aan bod komen.

De effectieve Bohr straal heeft volgende formule:

$$a_0^{eff} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2\epsilon}{m_{eff}e^2} \quad (1.1.2)$$

$$= a_0 \frac{\epsilon}{\frac{m_{eff}}{m_e}} \quad (1.1.3)$$

met  $\epsilon$  de dieëlektrische constante van het beschouwde materiaal en  $m_{eff}$  de effectieve massa van het beschouwde deeltje in het materiaal.

Voor GaAs hebben we  $\epsilon = 13.1$  en  $m_{eff} = 0.067m_e$ . Dit geeft een effectieve bohr straal van  $103 \text{ \AA}$ . De effectieve Bohr straal is anders voor heavy hole's en light hole's, maar het zal dezelfde grote orde hebben. De berekende effectieve Bohr straal zal de breedte van de potentiaal put bepalen.

### 1.1.2 Productie

Om het gewenste opsluitingseffect te krijgen moet een materiaal zoals GalliumArsenide (GaAs) gesandwicht worden tussen twee lagen van een materiaal met een grotere bandgap zoals AluminiumGalliumArsenide (AlGaAs). Door de grotere bandgap aans weerszijden, zitten de deeltjes (elektronen en gaten) in het middelste materiaal opgesloten.

Deze structuren worden in de praktijk gemaakt door gebruik te maken van epitaxie. Epitaxie is een methode om een monokristallijne laag aan te brengen op een monokristallijn substraat. Bij deze methode zal de afgezette kristallijne laag dezelfde kristalstructuur krijgen als het substraat. AlGaAs en GaAs hebben nagenoeg dezelfde kristalstructuur (Zincblende) en AlGaAs heeft een grotere bandgap dan GaAs dus is AlGaAs een goede kandidaat om als substraat te dienen voor GaAs. Met deze techniek kan de breedte van de GaAs laag zeer nauwkeurig worden bepaald, waardoor de eigenschappen van de halfgeleider nanostructuur nauwkeurig kunnen worden afgestemd.

Gallium en Arseen worden opgewarmd totdat ze beginnen te sublimeren. De gasvormige elementen zullen hierna condenseren op het AlGaAs substraat. Hierdoor worden er GaAs kristallen gevormd bovenop het AlGaAs substraat.

## 2 Bandenstructuur

In de vastestof fysica beschrijft de banden structuur de energiewaarden dat een elektron (of gat) kan hebben.

Kennis over de bandenstructuur laat toe om eigenschappen (zoals resistiviteit en optische absorptie) van het materiaal te verklaren. Met deze kennis kunnen er materialen gemaakt worden die de gewenste eigenschappen vertonen voor onder andere transistoren en zonnecellen.

Het berekenen van de bandenstructuur is een belangrijk onderzoeksgebied en er bestaan verschillende methoden om dit te doen. De methode die werd gebruikt in deze thesis is de  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  methode.

### 2.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Methode

De  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  methode ("k dot p") is een benaderingsmethode om de bandenstructuur te bepalen van een materiaal rond een punt in de Brillouinzone gebruik makende van een paar parameters. Deze parameters worden bepaald uit experimenten of uit ab initio berekeningen.

De afleiding van deze methode kan gedaan worden door de Schrödinger vergelijking op te lossen van een deeltje in een periodische potentiaal. Een periodische potentiaal is voor ons logisch om te gebruiken aangezien de besproken halfgeleider structuren, periodische kristalstructuren zijn.

### 2.1.1 Periodische Potentiaal

De Schrödinger vergelijking voor een deeltje in een periodische potentiaal wordt gegeven door:

$$H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

Waarbij  $m$  de massa is van het deeltje en  $V$  de potentiaal waarbij:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.1.2)$$

met:  $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  waarbij  $\mathbf{a}_i$  de rooster basisvectoren zijn en  $n_i$  gehele getallen.

Merk op dat de hamiltoniaan hierdoor ook invariant is onder een translatie met vector  $\mathbf{R}$ . Dit wordt beschreven door het Bloch theorema wat zegt dat de golffunctie van een deeltje in een periodische potentiaal eruit ziet als volgt:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.3)$$

waarbij  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  dezelfde periodiciteit heeft als het kristalrooster.

Als de Bloch golffunctie wordt gesubstitueerd in de Schrödinger vergelijking wordt het volgende verkregen:

$$\begin{aligned} \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})) &= E(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

Voor de eerste term krijgen we:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})) &= \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \nabla \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) i\mathbf{k}) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \nabla^2 u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) (i\mathbf{k})^2 \right) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) (\nabla + i\mathbf{k})^2 u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Dus wordt de Schrödinger vergelijking nu:

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\nabla}{i} + \mathbf{k} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.5)$$

Herschrijven geeft:

$$\left( \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.6)$$

Als dit wordt uitgewerkt voor  $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$  wordt het volgende verkregen:

$$\left( \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) u_0(\mathbf{r}) = E(0) u_0(\mathbf{r}) \quad (2.1.7)$$

Deze vergelijking is gemakkelijker uit te werken dan (2.1.1) omdat  $u_0(\mathbf{r})$  periodisch is. Als  $u_0(\mathbf{r})$  en  $E(0)$  geweten zijn dan kan de overige term  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  als een perturbatie worden beschouwd. Door de term  $\frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  wordt dit de  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  methode genoemd.

Voor meerdere banden wordt (2.1.6):

$$\left( \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.8)$$

met  $n$  de bandindex.

Door gebruik te maken van storingsrekening kunnen volgende uitdrukkingen verkregen worden:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{n' \neq n} \left[ \frac{\hbar}{m_0} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{n'n}}{E_n(0) - E_{n'}'(0)} \right] u_{n'0}(\mathbf{r}) \quad (2.1.9)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{n'n}|^2}{E_n(0) - E_{n'}'(0)} \quad (2.1.10)$$

Dit zal de werkwijze zijn om de bandenstructuur te bepalen. Wat nodig is zijn de  $u_{n0}(\mathbf{r})$  om storingsrekening te kunnen toepassen.

### 2.1.2 Spin-baan interactie

In het vorige hoofdstuk werd er nergens spin vermeld, hoewel de halfgeleider bandenstructuur de mogelijke energieën van elektronen (en gaten) bespreekt die beide spin- $\frac{1}{2}$  deeltjes zijn. Bovendien kan ook het spin-baan effect in rekening gebracht worden.

De Hamiltoniaan wordt dan:

$$H = H_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \nabla V \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + H' \quad (2.1.11)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \quad (2.1.12)$$

$$H' = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\Pi} \quad (2.1.13)$$

$$\boldsymbol{\Pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \quad (2.1.14)$$

waarbij de termen van  $H$  met  $\boldsymbol{\sigma}$  de spin-baan interacties voorstellen en  $\boldsymbol{\sigma}$  de Pauli spin matrices zijn.

Gebruikmakende van deze Hamiltoniaan zal het Luttinger-Kohn model worden afgeleid, het is een adaptatie van het  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model waarbij de spin-baan interactie mee wordt genomen in de berekeningen. In dit model worden enkel de 3 valentie banden (Heavy Hole, Light Hole en Split Off) in rekening gebracht, de conductie band wordt in dit model niet beschouwd. Doordat de spin mee beschouwd wordt, zal elke band tweevoudig ontaard zijn (zowel  $\uparrow$  als  $\downarrow$ ) waardoor we een totaal van 6 beschouwde banden hebben.

Door gebruik te maken van de Bloch functies en de Hamiltoniaan met de spin-baan interactie wordt volgende Schrödinger vergelijking verkregen:

$$H u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.15)$$

Om dit te kunnen oplossen zijn de eigenfuncties  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  nodig die gehaald kunnen worden uit :



$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j^A a_j(\mathbf{k})u_{j0}(\mathbf{r}) + \sum_\gamma^B a_\gamma(\mathbf{k})u_{\gamma0}(\mathbf{r}) \quad (2.1.16)$$

waarbij index  $j$  sommeert over de valentie banden en index  $\gamma$  sommeert over de conductie banden. Aangezien in dit model enkel de valentie banden worden beschouwd wordt volgende uitdrukking voor de basisfuncties verkregen:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n^A a_j(\mathbf{k})u_{j0}(\mathbf{r}) \quad (2.1.17)$$

Hiervoor zijn de basisfuncties  $u_{j0}(\mathbf{r})$  nodig die gehaald kunnen worden uit de symmetrie van het probleem.

### 2.1.3 Symmetrie overwegingen voor het bepalen van de basisfuncties

In III-V halfgeleiders met zinblendende structuur zullen de valentie elektronen s karakter hebben en de gaten p karakter. Deze gaten vormen de top van de valentie band en de elektronen het minimum van de conductie band.

Doordat ze dit s en p karakter hebben kunnen de basisfuncties als volgt gekozen worden:

$$\begin{aligned} u_{10}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\ u_{20}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \\ u_{30}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \\ u_{40}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\ u_{50}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \\ u_{60}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

waarbij dat  $u_{10}(\mathbf{r})$  en  $u_{40}(\mathbf{r})$  de basisfuncties zijn van de Heavy Hole toestanden,  $u_{20}(\mathbf{r})$  en  $u_{30}(\mathbf{r})$  die van de Light Hole toestanden en  $u_{50}(\mathbf{r})$  en  $u_{60}(\mathbf{r})$  die van de Split-off band. De Heavy Hole en Light Hole banden worden zo genoemd doordat de ladingsdragers in deze energiebanden een verschillende effectieve massa hebben, een uitgebreidere uitleg volgt in een later hoofdstuk.

### 2.1.4 Luttinger-Kohn Hamiltoniaan

Nu dat de basisfuncties in het  $\Gamma$ -punt zijn gevonden uit de symmetrie van het halfgeleider probleem kan de Luttinger-Kohn Hamiltoniaan worden opgesteld. Deze afleiding is wiskundig zwaar en staat in de bijlagen. De Luttinger-Kohn Hamiltoniaan is:

Voor het 6-banden model (2 Heavy Hole, 2 Light Hole en 2 Split Off):

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & \frac{-S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & \frac{-S^\dagger}{\sqrt{2}} \\ \frac{-S^\dagger}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q^\dagger & \frac{-S}{\sqrt{2}} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (2.1.19)$$

Voor het 4-banden model (2 Heavy Hole en 2 Light Hole):

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q \end{bmatrix} \quad (2.1.20)$$

met:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\sqrt{3}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y \right] \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3}(k_x - ik_y)k_z \end{aligned}$$

Vooraf werd er gesproken over de enige 3 parameters die nodig zijn in het  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  namelijk:  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  en  $\gamma_3$ .  $\gamma_1$  en  $\gamma_2$  beschrijven de koppeling van de  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  en  $|Z\rangle$  toestanden met de andere toestanden. De derde parameter  $\gamma_3$  is gerelateerd aan de anisotropie van de bandenstructuur rond het  $\Gamma$ -punt.

### 2.1.5 Effectieve Massa

De effectieve massa van een deeltje is de massa die het deeltje lijkt te hebben wanneer er een kracht op inwerkt zoals een elektrisch veld. In halfgeleiders gebeurt de geleiding zowel met elektronen als met gaten (dit laatste zijn quasi deeltjes die de afwezigheid van een elektron zijn die zich propageren door het kristal).

Zowel de elektronen als de gaten hebben een andere effectieve massa dan de rustmassa van het elektron door interactie met het kristal. Zoals vooraf al gezegd zijn er ook Heavy holes en Light holes, dit zijn gaten die ook t.o.v. elkaar een andere effectieve massa hebben en dus anders gaan reageren op krachten, ook al zijn ze hetzelfde quasi deeltje.

Voor een vrij deeltje is de totale energie enkel kinetisch:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.1.21)$$

De snelheid van het deeltje is de fase snelheid van de envelope van het golfpakket. Dit wordt de groep snelheid genoemd en zijn relatie met de energie en impuls is de volgende:

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (2.1.22)$$

Als er nu een kracht inwerkt op het golfpakket dan zal de arbeid gegeven worden door:

$$dE = Fdx = Fv_g dt \quad (2.1.23)$$

Hieruit volgt dat:

$$F = \frac{1}{v_g} \frac{dE}{dt} = \frac{1}{v_g} \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt} \quad (2.1.24)$$

of:

$$F = \frac{d(\hbar k)}{dt} \quad (2.1.25)$$

De versnelling wordt dan gevonden door de afgeleide te nemen van de groep snelheid:

$$\begin{aligned} a &= \frac{dv_g}{dt} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right) \frac{d(\hbar k)}{dt} \end{aligned}$$

Hieruit wordt een uitdrukking voor de effectieve massa gehaald:

$$F = m^* \frac{dv_g}{dt} \quad (2.1.26)$$

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (2.1.27)$$

Wat de uitdrukking van de effectieve massa ons verteld is dat hoe sterker de kromming is van de parabool  $E(\mathbf{k})$  hoe kleiner de effectieve massa. Dit zal ook zichtbaar zijn wanneer de Heavy Hole en Light Hole banden berekend worden. Er kan dan zeer duidelijk worden opgemerkt dat de Heavy Hole band een minder sterke kromming heeft dan de Light Hole band.

### 3 Gallium Arsenide (GaAs)

Gallium Arsenide (GaAs) is een kristal opgebouwd uit Gallium en Arseen. Het kristal heeft een zinctblende structuur en het is een direct-gap halfgeleider.

#### 3.1 Bulk

Om de bulk bandenstructuur van GaAs te onderzoeken wordt er gebruik gemaakt van de vooraf afgeleide Luttinger-Kohn Hamiltoniaan. Zoals werd vermeld in de afleiding van de  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  theorie hebben we 3 parameters nodig die uit het experiment of uit ab initio berekeningen komen, de  $\gamma$  waarden. Voor GaAs zijn dit:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 6.85 \\ \gamma_2 &= 2.1 \\ \gamma_3 &= 2.9 \\ \Delta &= 341 \text{ meV} \end{aligned}$$

De laatste parameter ( $\Delta$ ) is nodig als we het 6-banden model onderzoeken. Deze parameter geeft weer op welke energie de top van de split-off band zich bevindt. Het effect hierop wordt duidelijk gemaakt wanneer er opsluiting optreedt in volgende hoofdstukken.

Als er enkel naar het 4 banden model gezien wordt in de  $k_z$  richting en waarbij dus  $k_x = k_y = 0$  wordt gesteld dan wordt volgende Hamiltoniaan verkregen:

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P-Q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P-Q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P+Q \end{bmatrix} \quad (3.1.1)$$

met:

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_z^2)$$

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

$$P+Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} k_z^2 (\gamma_1 - 2\gamma_2) \quad (3.1.2)$$

$$P-Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} k_z^2 (\gamma_1 + 2\gamma_2) \quad (3.1.3)$$

In deze diagonaal matrix zien we duidelijk de dubbelvoudige ontaarding van de 2 banden. Hieruit kan ook de effectieve massa berekend worden. Herinner dat :

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (3.1.4)$$

Dit geeft:

$$m_{P+Q}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad (3.1.5)$$

$$m_{P-Q}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \quad (3.1.6)$$

Dit toont dat de effectieve massa van de P+Q band groter is dan die van de P-Q band. Hieruit kan de P+Q band de naam Heavy Hole band krijgen en P-Q de naam Light Hole band.

Als het energieverloop wordt geplot in functie van de  $k_z$  waarde wordt volgende figuur verkregen:

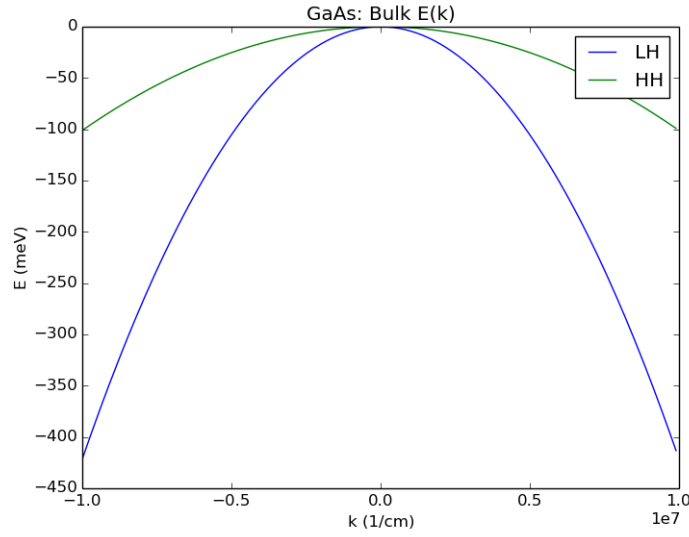


Figure 1: GaAs: Bulk voor 4-banden model in de  $k_z$  richting

Hierop is duidelijk te zien dat de Light Hole band een sterkere kromming vertoont dan de Heavy Hole band.

Wat als de Hamiltoniaan nu bekeken wordt in de  $k_x$  richting waarbij dus  $k_z = k_y = 0$  wordt gesteld. Dan wordt de volgende Hamiltoniaan verkregen:

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & 0 & R & 0 \\ 0 & P-Q & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q & 0 \\ 0 & R^\dagger & 0 & P+Q \end{bmatrix} \quad (3.1.7)$$

met:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0}(k_x^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0}(k_x^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2) \right] \end{aligned}$$

Als de effectieve massa van de Heavy Hole en de Light Hole nu wordt bepaald op dezelfde manier als (3.1.5) dan worden volgende uitdrukking verkregen:

$$m_{HH}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (3.1.8)$$

$$m_{LH}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad (3.1.9)$$

Als (3.1.8) vergeleken wordt met (3.1.5) dan kan er worden opgemerkt dat deze uitdrukkingen verschillen van elkaar. Naïef zou men dan denken dat er andere effectieve massas zouden zijn wanneer de  $k_x$  richting wordt beschouwd en hierdoor een andere kromming te zien zal zijn op de  $E(k_x)$  plot.

Let op dat in de definitie van de effectieve massa er een tweede afgeleide staat van de energie naar  $k$ . Doordat de Hamiltoniaan een diagonaalmatrix is wanneer de  $k_z$  richting werd beschouwd, dan konden inderdaad de elementen op de diagonaal worden afgeleid omdat deze corresponderden met de energie. De Hamiltoniaan wanneer de  $k_x$  richting wordt beschouwd is niet meer diagonaal waardoor niet simpelweg de diagonaal elementen afgeleid mogen worden omdat deze niet meer corresponderen met de energie.

Als het energie verloop in functie van  $k_x$  wordt geplot wordt het volgende verkregen:

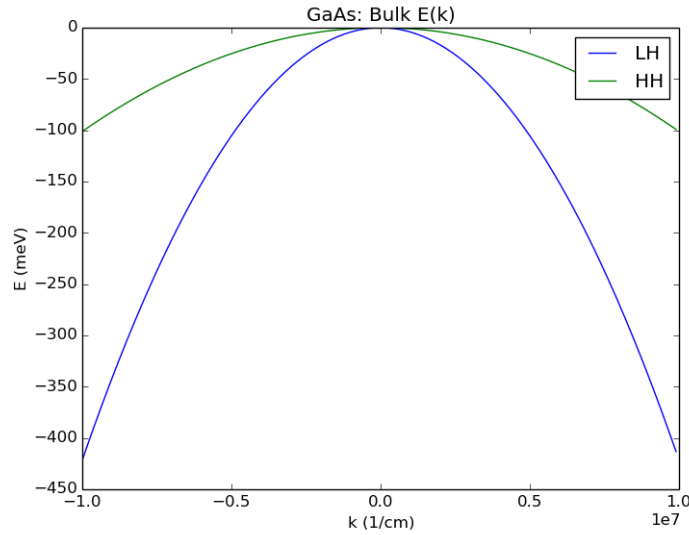


Figure 2: GaAs: Bulk voor 4-banden model in de  $k_x$  richting

Merk op dat deze figuur identiek is aan de figuur gemaakt met de  $k$  waarden in de  $z$ -richting.

Als er wordt gekeken naar de gebruikte Hamiltoniaan, kan er worden opgemerkt dat het deze keer geen diagonaal matrix is en dat er nog een extra niet 0 term staat. Deze  $R$  term was 0 voor de  $k$  waarden in de  $z$ -richting, maar niet in de  $x$ -richting. Deze term is een interactie term en is de reden waarom de effectieve massa's niet berekend kunnen worden uit de diagonaal elementen.

Als nu ook de Split-Off band wordt meegenomen wanneer de  $k_x = k_y = 0$  dan wordt volgende 6-banden Luttinger-Kohn Hamiltoniaan verkregen:

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P-Q & 0 & 0 & -\sqrt{2}Q & 0 \\ 0 & 0 & P-Q & 0 & 0 & \sqrt{2}Q \\ 0 & 0 & 0 & P+Q & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}Q^\dagger & 0 & 0 & P+\Delta & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}Q^\dagger & 0 & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (3.1.10)$$

met:

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_z^2)$$

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

Als het energieverloop in functie van  $k_z$  wordt geplot wordt volgende figuur bekomen:

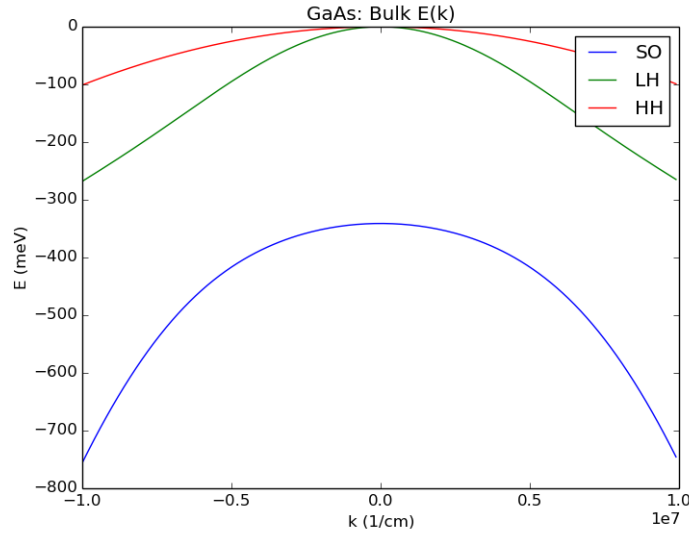


Figure 3: GaAs: Bulk voor 6-banden model in de  $k_z$  richting

Hierop is te zien dat de split-off band op een afstand  $\Delta$  ligt van de Heavy Hole en Light Hole banden in het  $\Gamma$ -punt. Waarom dit interessant is zal worden uitgelegd wanneer het 4-band model en het 6-band model worden vergeleken in het geval dat opsluiting wordt opgelegd.

### 3.2 Opsluiting

Als GaAs gesandwichd wordt tussen een materiaal met een grotere bandgap (zoals  $Al_xGa_{1-x}As$ ) dan zal in deze richting opsluiting optreden. Dit betekent dat in deze richting het probleem kan worden beschouwd als het 'particle-in-a-box' probleem van de kwantummechanica met een eindig diepe put. Hierdoor wordt het energiespectrum discreet. Omdat de opsluiting in 1-dimensie optreedt wordt dit een kwantum put genoemd.

We kunnen nu de Hamiltoniaan uit vorige sectie gebruiken als beschrijving van de kinetische energie waarop we de effectieve massa benadering toepassen. Deze benadering wordt toegepast door:  $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ .

De diepte van de put voor ons model wordt gehaald uit het verschil tussen de valentie banden in het  $\Gamma$  punt aan de interface van de gesandwichde materialen. Dit verschil wordt gegeven door:

$$\Delta E_v = 0.35\Delta E_g(x) \quad (3.2.1)$$

$\Delta E_g(x)$  is het verschil in bandgaps tussen GaAs en  $Al_xGa_{1-x}As$  in het  $\Gamma$ -punt. Voor ons model werd er gewerkt met  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  dus is  $x = 0.3$ . Voor  $x < 0.45$  wordt er gebruik gemaakt van volgende formule voor het verschil in bandgaps:

$$\Delta E_g(x) = 1247x \text{ meV} \quad (3.2.2)$$

Gebruikmakende van de x-waarde van ons beschouwde mengsel wordt een putdiepte van  $\Delta E_v = 130\text{meV}$  verkregen.

Als breedte van de put kiezen we  $100 \text{ \AA}$ , deze afstand werd gekozen omdat het ongeveer gelijk is aan de uitgereken effectieve Bohr straal voor de elektronen in een eerder hoofdstuk. Deze breedte zal ook voor opsluiting zorgen voor de gaten.

Het uitrekenen van de Hamiltoniaan zal op een grid gebeuren waardoor de Hamiltoniaan nog eerst gediscrètiseerd moet worden.

De Luttinger-Kohn hamiltoniaan voor het 6-banden model ziet er als volgt uit:

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & \frac{-S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & \frac{-S^\dagger}{\sqrt{2}} \\ \frac{-S^\dagger}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q^\dagger & \frac{-S}{\sqrt{2}} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (3.2.3)$$

met:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\sqrt{3}\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y \right] \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z \end{aligned}$$

Met de effectieve massa benadering zal  $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ . In dit geval zal enkel opsluiting optreden in de x-richting en dus wordt enkel  $k_x \rightarrow -i\frac{d}{dx}$

Om het probleem eenvoudiger te maken tijdens de verwerking zal alles dimensieloos worden gemaakt waarna de uiteindelijke resultaten terug worden omgezet naar de juiste eenheid.

Volgende eenheden worden gekozen:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 L^2} \quad , \quad r_n = L \quad (3.2.4)$$

Dit zorgt ervoor dat onze termen in de Hamiltoniaan de volgende uitdrukking krijgen:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\gamma_1}{\pi^2} \left( k_y^2 + k_z^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \\ Q &= \frac{\gamma_2}{\pi^2} \left( k_y^2 - 2k_z^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \\ R &= \frac{1}{\pi^2} \left[ -\sqrt{3}\gamma_2 \left( -\frac{d^2}{dx^2} - k_y^2 \right) + 2\sqrt{3}\gamma_3 \frac{d}{dx} k_y \right] \\ S &= \frac{2\gamma_3}{\pi^2} \sqrt{3} \left( -i\frac{d}{dx} - ik_y \right) k_z \end{aligned}$$

Nadat het probleem dimensieloos is gemaakt zal er een discretizatie methode worden opgesteld. Het probleem zal op een grid worden opgelost waarvan de gridelementen op gelijke afstand staan van elkaar, deze afstand wordt  $h$  genoemd. Hierdoor zullen de afgeleides moeten worden gediscrètiseerd, dit wordt gedaan met de central-difference methode:



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \quad (3.2.5)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h} \quad (3.2.6)$$

waar de index  $i$  slaat op het  $i$ -de gridelement.

Dit geeft:

$$P\psi = \frac{\gamma_1}{\pi^2} \left( k_y^2 + k_z^2 + \frac{2}{h^2} \right) \psi_i - \frac{\gamma_1}{\pi^2 h^2} \psi_{i+1} - \frac{\gamma_1}{\pi^2 h^2} \psi_{i-1} \quad (3.2.7)$$

$$Q\psi = \frac{\gamma_2}{\pi^2} \left( k_y^2 - 2k_z^2 + \frac{2}{h^2} \right) \psi_i - \frac{\gamma_2}{\pi^2 h^2} \psi_{i+1} - \frac{\gamma_2}{\pi^2 h^2} \psi_{i-1} \quad (3.2.8)$$

$$R\psi = \frac{\sqrt{3}\gamma_2}{\pi^2} \left( -\frac{2}{h^2} + k_y^2 \right) \psi_i + \frac{\sqrt{3}}{\pi^2} \left( \frac{\gamma_2}{h^2} + \frac{k_y\gamma_3}{h} \right) \psi_{i+1} + \frac{\sqrt{3}}{\pi^2} \left( \frac{\gamma_2}{h^2} - \frac{k_y\gamma_3}{h} \right) \psi_{i-1} \quad (3.2.9)$$

$$S\psi = -\frac{2\sqrt{3}\gamma_3}{\pi^2} i k_z k_y \psi_i - \frac{\sqrt{3}\gamma_3}{\pi^2 h} i k_z \psi_{i+1} + \frac{\sqrt{3}\gamma_3}{\pi^2 h} i k_z \psi_{i-1} \quad (3.2.10)$$

Volledig analoog als de opsluiting in de  $z$  of  $y$  richting is.

Om het verschil te zien tussen het 4-banden model en het 6-banden model zullen de laagste 4 energiewaarden voor beide modellen worden geplot in volgende figuur:

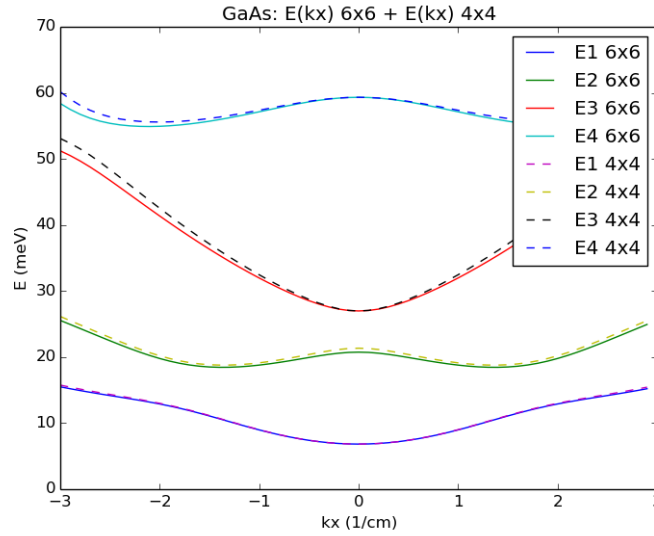


Figure 4: GaAs: 4 kleinste energieën voor 4-banden model (gestreept) & 6-banden model (vol) voor opsluiting in  $z$ -richting

Dit werd berekend met opsluiting in de  $z$ -richting en  $k_y = 0$ .

Voor opsluiting in de x-richting wordt volgende figuur verkregen:

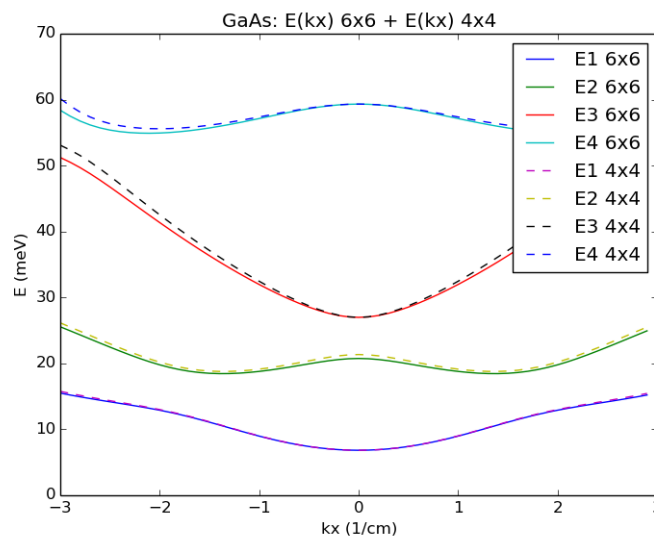


Figure 5: GaAs: 4 kleinste energieën voor 4-banden model (gestreept) & 6-banden model (vol) voor opsluiting in x-richting

Het is duidelijk dat de bandenstructuur identiek is voor opsluiting in de x-richting of in de z-richting. Dit is ook wat er verwacht werd aangezien de  $x$  of  $z$  richting maar een arbitraire keuze en naamgeving is. Ze moeten allebei dezelfde fysica opleveren.

Op deze figuren zijn in stippellijn de 4 laagste energieën te zien van het 4-banden model en in volle lijn de 4 laagste energieën in het 6-banden model. Merk op dat de banden bijna identiek zijn. Merk op dat het enige verschil tussen het 4-banden model en het 6-banden model de interactie van de Split-off band is.

Het is nu duidelijk waarom dat de banden van beide modellen zo hard op elkaar lijken. De split-off band van GaAs ligt vrij ver van de andere banden, hierdoor is de interactie tussen de split-off band en de andere banden zeer klein en is er dus nauwelijks een verschil te zien. Dit komt doordat de energieën veel kleiner zijn dan  $\Delta$ . Als de breedte van de put kleiner wordt dan zullen de energieën groter worden en zullen ze meer invloed ondergaan van de Split-Off band.

De golffuncties voor opsluiting in de z-richting met  $k_x = 0$  en voor het 4-banden model zien er als volgt uit:

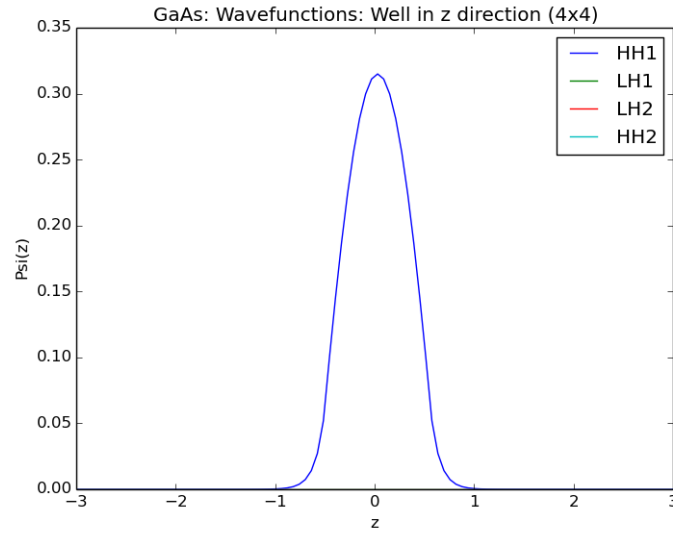


Figure 6: GaAs: Golffunctie in het  $\Gamma$ -punt voor opsluiting in z-richting

Merk op dat voor  $k_x = 0$  er enkel een Heavy Hole bijdrage is. Als de golffuncties worden geplott voor  $k_x = 2$  dan wordt het volgende verkregen:

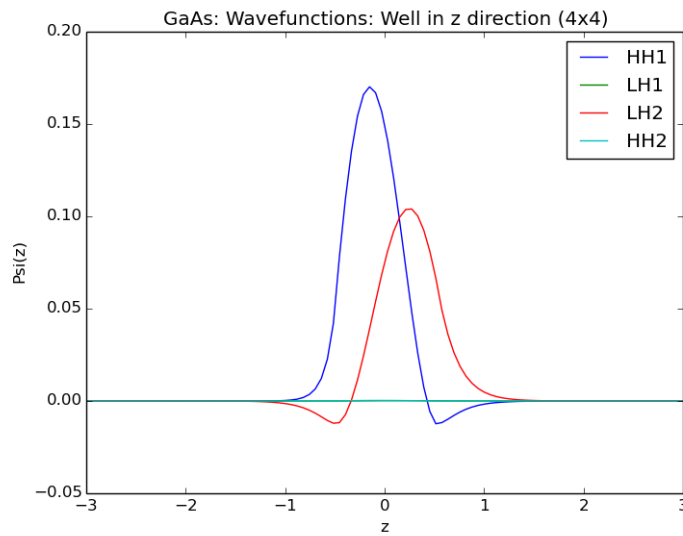


Figure 7: GaAs: Golffunctie voor  $k_x = 2$  voor opsluiting in z-richting

Merk op dat er verder van het  $\Gamma$ -punt zowel Heavy Hole bijdrage is als Light Hole. Deze mixing zal in het volgende hoofdstuk verder worden onderzocht.

Voor opsluiting in de x-richting zien de golffuncties er in het  $\Gamma$ -punt als volgt uit:

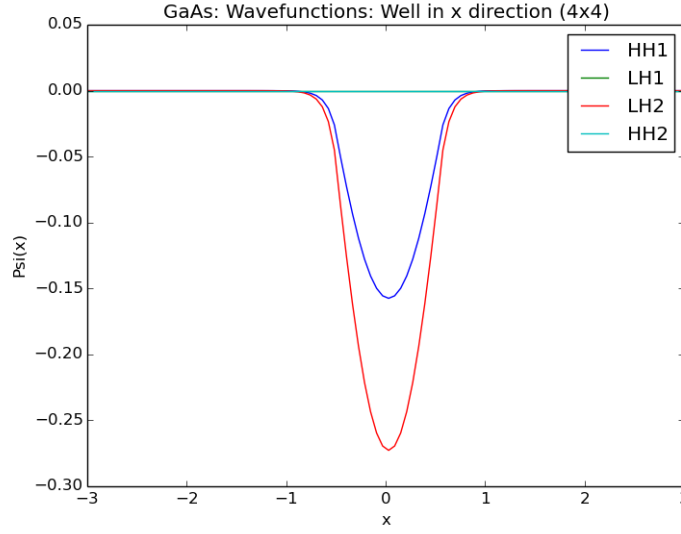


Figure 8: GaAs: Golffunctie in het  $\Gamma$ -punt voor opsluiting in x-richting

Merk op dat voor opsluiting in de x-richting er al mixing optreedt in het  $\Gamma$ -punt. Dit komt doordat de Hamiltoniaan interactie termen bevat zelfs in het  $\Gamma$ -punt in tegenstelling tot de Hamiltoniaan voor de opsluiting in de z-richting waarvoor de interactie termen wegvielen in het  $\Gamma$ -punt.

Wanneer Si wordt onderzocht, waar dat de Split-off band niet zo ver ligt van de andere banden, zal het effect beter te zien zijn van het 6-banden model.

### 3.3 Mengkarakter

In het vorige hoofdstuk werd het gemengde karakter van de golffunctie getoond door de golffuncties voor verschillende opsluitingsrichtingen en k-punten te berekenen. Dit karakter zal in dit hoofdstuk in detail worden onderzocht. Het karakter wordt onderzocht door na te gaan hoe groot de verhouding van de verschillende banden (Heavy Hole, Light Hole en Split-Off) is t.o.v. de golffunctie.

De golffunctie heeft de volgende vorm:

$$|\Psi\rangle = F_{HH1}(\mathbf{r})|HH1\rangle + F_{LH1}(\mathbf{r})|LH1\rangle + F_{LH2}(\mathbf{r})|LH2\rangle + F_{HH2}(\mathbf{r})|HH2\rangle + F_{SO1}(\mathbf{r})|SO1\rangle + F_{SO2}(\mathbf{r})|SO2\rangle \quad (3.3.1)$$

Waarbij de banden beschreven worden door:

$$|HH\rangle = F_{HH1}(\mathbf{r})|HH1\rangle + F_{HH2}(\mathbf{r})|HH2\rangle \quad (3.3.2)$$

$$|LH\rangle = F_{LH1}(\mathbf{r})|LH1\rangle + F_{LH2}(\mathbf{r})|LH2\rangle \quad (3.3.3)$$

$$|SO\rangle = F_{SO1}(\mathbf{r})|SO1\rangle + F_{SO2}(\mathbf{r})|SO2\rangle \quad (3.3.4)$$

De verhouding van de verschillende banden t.o.v. de golffunctie wordt berekend uit volgende formules:

$$\text{Heavy Hole fractie} = \frac{\langle HH | HH \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.3.5)$$

$$\text{Light Hole fractie} = \frac{\langle LH | LH \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.3.6)$$

$$\text{Split-Off fractie} = \frac{\langle SO | SO \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.3.7)$$

Als dit wordt uitgerekend voor opsluiting in de z-richting voor het 6-banden model wordt de volgende figuur verkregen:

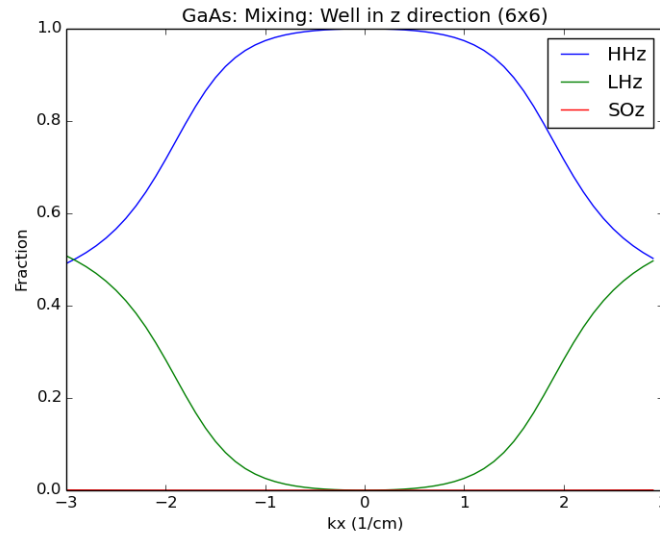


Figure 9: GaAs: Mengkarakter voor opsluiting langs z-richting

Merk op dat de Split-off band praktisch geen deel uitmaakt van de totale golffunctie, wat ook te zien was op de energiebanden figuren.

Deze berekening kan volledig analoog worden gedaan voor de opsluiting in de x-richting. Hierdoor wordt volgende figuur bekomen:

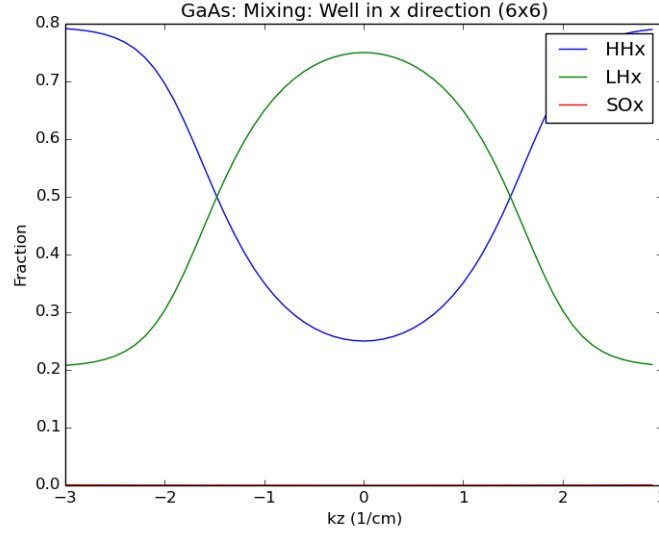


Figure 10: GaAs: Mengkarakter voor opsluiting langs x-richting

Dit is een eigenaardig resultaat. Door simpelweg een andere richting te beschouwen worden de fracties van deze banden volledig anders. Uit de bandenstructuur is duidelijk te zien dat de z en x-richting opsluiting dezelfde fysica moeten geven. Deze mengkarakter figuren stellen iets anders voor. Merk op dat wat er de x-richting en wat er de z-richting genoemd wordt arbitrair is en dat het enige absolute is dat beide richtingen loodrecht op elkaar staan en wiskundig door een rotatie van  $90^\circ$  in elkaar kunnen worden omgezet.

Om dit na te gaan kan er een rotatie uitgevoerd worden op de gehele golf functie waarbij de opsluiting in de x-richting wordt aangelegd. Uit deze gerooteerde golf functie kan dan het mengkarakter worden berekend om te zien of deze overeenstemmen met de ongeroteerde golf functie waarbij de opsluiting in de z-richting ligt.

Het uitrekenen van de rotatie operator staat in de bijlage.

De rotatie operator om een toestand met  $J = \frac{3}{2}$  te roteren rond de y-as met  $\frac{\pi}{2}$  is de volgende:

$$\hat{R}_y\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \end{bmatrix} \quad (3.3.8)$$

De golf functie met opsluiting in de x-richting is:

$$|\Psi\rangle_x = F_{HH1}(x) |HH1\rangle_x + F_{LH1}(x) |LH1\rangle_x + F_{LH2}(x) |LH2\rangle_x + F_{HH2}(x) |HH2\rangle_x \quad (3.3.9)$$

Hierbij wordt enkel het 4-banden model beschouwd.

De basisvectoren in de x-richting zijn de geroteerde basisvectoren van de z-richting. Dit kan worden geschreven als:

$$\begin{pmatrix} |HH1\rangle_x \\ |LH1\rangle_x \\ |LH2\rangle_x \\ |HH2\rangle_x \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |HH1\rangle_z \\ |LH1\rangle_z \\ |LH2\rangle_z \\ |HH2\rangle_z \end{pmatrix} \quad (3.3.10)$$

Dit geeft:

$$\begin{aligned} |HH1\rangle_x &= \frac{\sqrt{2}}{4} |HH1\rangle_z - \frac{\sqrt{6}}{4} |LH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH2\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |HH2\rangle_z \\ |LH1\rangle_x &= \frac{\sqrt{6}}{4} |HH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH2\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |HH2\rangle_z \\ |LH2\rangle_x &= \frac{\sqrt{6}}{4} |HH1\rangle_z + \frac{\sqrt{2}}{4} |LH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH2\rangle_z - \frac{\sqrt{6}}{4} |HH2\rangle_z \\ |HH2\rangle_x &= \frac{\sqrt{2}}{4} |HH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH2\rangle_z + \frac{\sqrt{2}}{4} |HH2\rangle_z \end{aligned}$$

As dit wordt ingevuld in (3.3.9) dan krijgen we het volgende:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_z &= F_{HH1}(x) \left( \frac{\sqrt{2}}{4} |HH1\rangle_z - \frac{\sqrt{6}}{4} |LH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH2\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |HH2\rangle_z \right) \\ &+ F_{LH1}(x) \left( \frac{\sqrt{6}}{4} |HH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH2\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |HH2\rangle_z \right) \\ &+ F_{LH2}(x) \left( \frac{\sqrt{6}}{4} |HH1\rangle_z + \frac{\sqrt{2}}{4} |LH1\rangle_z - \frac{\sqrt{2}}{4} |LH2\rangle_z - \frac{\sqrt{6}}{4} |HH2\rangle_z \right) \\ &+ F_{HH2}(x) \left( \frac{\sqrt{2}}{4} |HH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH1\rangle_z + \frac{\sqrt{6}}{4} |LH2\rangle_z + \frac{\sqrt{2}}{4} |HH2\rangle_z \right) \end{aligned}$$

Dit geeft herschreven:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_z &= \left( \frac{\sqrt{2}}{4} (F_{HH1}(x) + F_{HH2}(x)) + \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{LH1}(x) + F_{LH2}(x)) \right) |HH1\rangle_z \\ &+ \left( \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{HH2}(x) - F_{HH1}(x)) + \frac{\sqrt{2}}{4} (F_{LH2}(x) - F_{LH1}(x)) \right) |LH1\rangle_z \\ &+ \left( \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{HH1}(x) + F_{HH2}(x)) + \frac{\sqrt{2}}{4} (-F_{LH1}(x) - F_{LH2}(x)) \right) |LH2\rangle_z \\ &+ \left( \frac{\sqrt{2}}{4} (F_{HH2}(x) - F_{HH1}(x)) + \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{LH1}(x) - F_{LH2}(x)) \right) |HH2\rangle_z \end{aligned}$$

Hieruit kan de Heavy Hole en de Light Hole bijdrage uitgehaald worden:

$$\begin{aligned} |HH\rangle_z &= \left( \frac{\sqrt{2}}{4} (F_{HH1}(x) + F_{HH2}(x)) + \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{LH1}(x) + F_{LH2}(x)) \right) |HH1\rangle_z \\ &+ \left( \frac{\sqrt{2}}{4} (F_{HH2}(x) - F_{HH1}(x)) + \frac{\sqrt{6}}{4} (F_{LH1}(x) - F_{LH2}(x)) \right) |HH2\rangle_z \end{aligned}$$

$$|LH\rangle_z = \left( \frac{\sqrt{6}}{4}(F_{HH2}(x) - F_{HH1}(x)) + \frac{\sqrt{2}}{4}(F_{LH2}(x) - F_{LH1}(x)) \right) |LH1\rangle_z \quad (3.3.11)$$

$$+ \left( \frac{\sqrt{6}}{4}(F_{HH1}(x) + F_{HH2}(x)) + \frac{\sqrt{2}}{4}(-F_{LH1}(x) - F_{LH2}(x)) \right) |LH2\rangle_z \quad (3.3.12)$$

Met deze uitdrukkingen zal zoals hiervoor het karakter van de golf functie worden uitgerekend. Deze zal dan vergeleken worden met de golf functie waarbij de opsluiting in de z-richting wordt aangelegd om na te gaan of deze golf functies inderdaad maar een rotatie verschillen. Het resultaat ziet er als volgt uit:

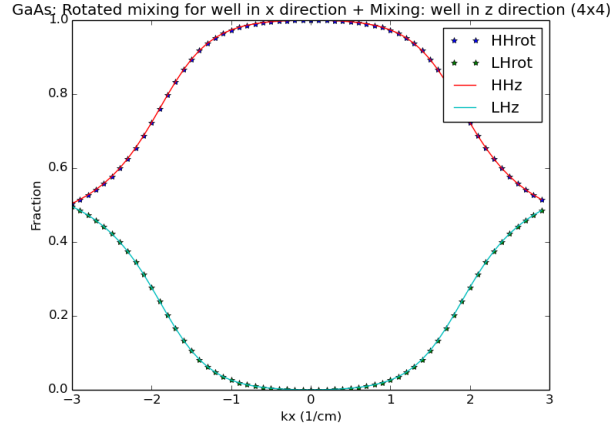


Figure 11: GaAs: Geroteerd mengkarakter voor opsluiting langs x-richting (ster) en Mengkarakter voor opsluiting langs z-richting (vol)

Als de inverse rotatie nu wordt uitgevoerd om de situatie met opsluiting in x-richting te vergelijken met de geroteerde golf functie met opsluiting in de z-richting dan wordt volgende grafiek verkregen:

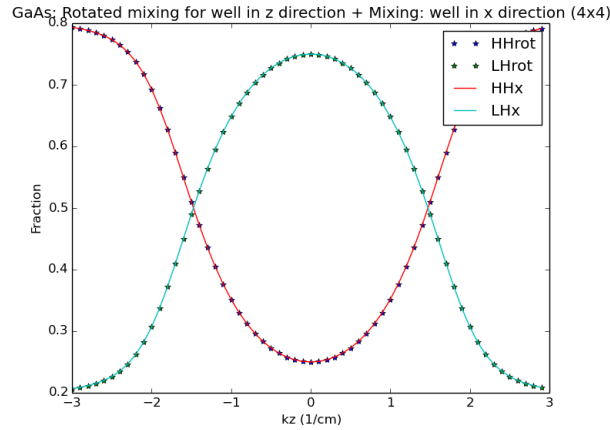


Figure 12: GaAs: Geroteerd mengkarakter voor opsluiting langs z-richting (ster) en Mengkarakter voor opsluiting langs x-richting (vol)

Uit deze figuren is te besluiten dat de golf functies inderdaad rotaties zijn van elkaar en er dus geen andere energiebanden worden verkregen naargelang de opsluitingsrichting.



## 4 Silicium (Si)

Silicium halfgeleiders hebben een diamant structuur. Deze structuur is bijna identiek aan de zincblende structuur, waardoor dezelfde  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Hamiltoniaan kan gebruikt worden.

In tegenstelling tot GaAs, hebben Si halfgeleiders een indirecte bandgap. Wat wilt zeggen dat het maximum van de valentieband niet op hetzelfde k-punt valt als het minimum van de conductieband.

We zullen ons ook bij Si beperken tot het bestuderen van de gaten en zullen de conductieband niet beschouwen.

### 4.1 Bulk

Zoals bij GaAs zijn er een aantal parameters nodig om de Luttinger-Kohn Hamiltoniaan uit te kunnen rekenen. Voor Si zijn deze parameters de volgende:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 4.26 \\ \gamma_2 &= 0.38 \\ \gamma_3 &= 1.56 \\ \Delta &= 44 \text{ meV}\end{aligned}$$

Al meteen valt op dat  $\Delta$  voor Si veel kleiner is dan de  $\Delta$  voor GaAs, wat wilt zeggen dat de Split-off band dichterbij de Heavy Hole en Light Hole banden zal liggen. Het effect hiervan zal duidelijk zichtbaar zijn wanneer er naar de energieën gekeken wordt voor het 4-banden model en het 6-banden model.

De bulk bandenstructuur voor de gaten rond het  $\Gamma$ -punt in Si ziet er als volgt uit:

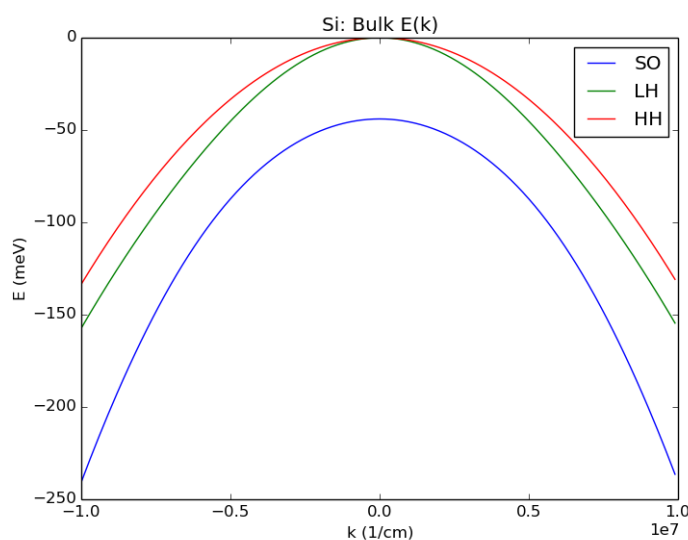


Figure 13: Si: Bulk voor 6-banden model

Als dit wordt vergeleken met de bulk bandenstructuur van GaAs, dan is duidelijk zichtbaar dat de Split-Off band bij Si veel dichterbij de andere banden ligt dan bij GaAs.

## 4.2 Opsluiting

Om opsluiting te laten optreden moet zoals bij GaAs, Si tussen 2 materialen gezet worden waarvan de bandgaps groter zijn dan die van Si. In de praktijk wordt dit gedaan met  $\text{SiO}_2$ .

Om de resultaten van de banden te kunnen vergelijken met die van GaAs, zal de diepte van de put ook hier op  $\Delta E_v = 130\text{meV}$  worden genomen. Dit is niet fysisch omdat dit een andere waarde zou hebben in de praktijk wanneer  $\text{SiO}_2$  wordt gebruikt.

Als de opsluiting in de z-richting ligt dan wordt volgende figuur verkregen als de 4 kleinste energie waarden worden geplot voor zowel het 4-banden model als het 6-banden model:

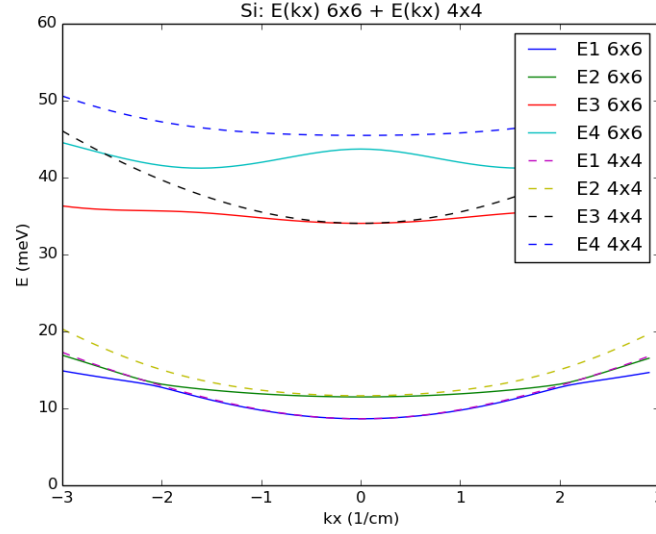


Figure 14: Si: 4 kleinste energieën voor 4-banden model (gestreept) & 6-banden model (vol) voor opsluiting in z-richting

Merk op dat de invloed van de Split-Off band nu zeer merkbaar is in vergelijking met GaAs. Dit komt doordat de Split-Off band veel dichterbij ligt bij de andere banden, waardoor de interactie sterker is.

### 4.3 Mengkarakter

Het mengkarakter voor Si wordt op dezelfde manier berekend als voor GaAs. Als de opsluiting in de z-richting ligt dan wordt volgende figuur verkregen:

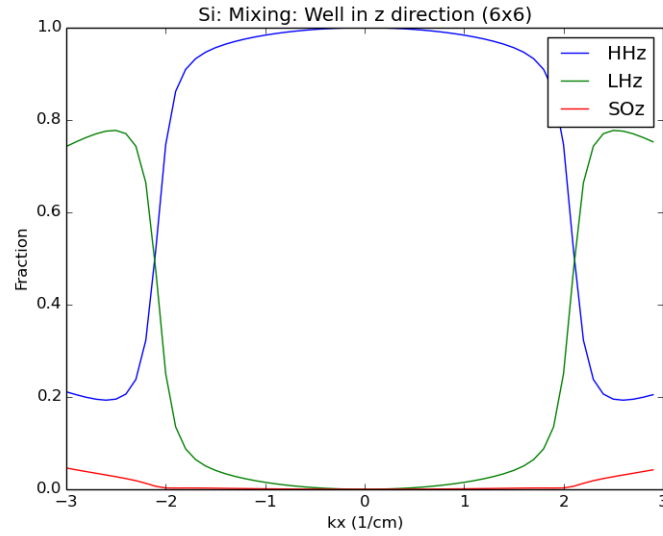


Figure 15: Si: Mengkarakter voor opsluiting langs z-richting

En voor opsluiting in de x-richting:

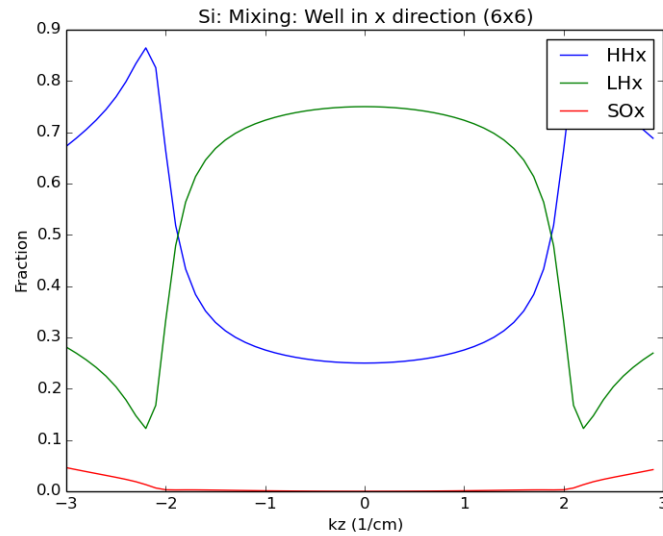


Figure 16: Si: Mengkarakter voor opsluiting langs x-richting

Wat ook hier merkbaar is, is dat de Split-Off band wel een deel uitmaakt van de totale golf functie, wat bij GaAs nauwelijks het geval was.

## 5 Besluit

In deze thesis werd de structuur van gaten in halfgeleider nanostructuren onderzocht. Om dit te doen moest allereerst een methode worden beheerst voor het uitwerken van de bandenstructuur. De methode dat in deze thesis hiervoor werd gebruikt was het  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model. Dit is een perturbatieve methode waar rond een k-punt de bandenstructuur kan worden uitgerekend gebruikmakende van storingsrekening. Dit model kon worden afgeleid uit de Schrödinger vergelijking voor een deeltje in een periodische potentiaal. De periodische potentiaal werd gekozen omdat kristallen (zoals de door ons onderzochte zinctblende structuren) periodische structuren zijn.

Door het in rekening brengen van de spin-baan interactie in de Hamiltoniaan en door een gepaste basis te vinden uit de symmetrie van het probleem kon het Luttinger-Kohn model worden opgesteld. Dit model liet ons toe om de bulk bandenstructuur van GaAs en Si uit te rekenen. Hierbij werd er opgemerkt dat hoewel de Luttinger-Kohn Hamiltoniaan verschilde wanneer we twee verschillende richtingen beschouwde, de effectieve massa's hetzelfde bleven.

Hierna werd er opsluiting in 1 dimensie aangelegd waardoor we een kwantum put realiseerden. Om de elektronische structuur uit te rekenen met de Luttinger-Kohn Hamiltoniaan voor de kwantum put, moest de Hamiltoniaan worden gediscrètiseerd zodat de Schrödinger vergelijking numeriek op een grid kon worden uitgerekend. Hierbij werd opgemerkt dat de elektronische structuur zoals verwacht niet verschilde wanneer de opsluiting in twee verschillende richtingen werd beschouwd.

Het karakter van de golffunctie was wel verschillend voor beide richtingen. Hierbij werd getracht om het karakter van de golffunctie bij opsluiting in de x-richting te halen uit de golffunctie bij opsluiting in de z-richting en vice-versa. Dit werd gedaan door de golffuncties te roteren over een hoek van  $90^\circ$ .

Een volgende stap in dit onderzoek zou het onderzoeken van de conductiebanden zijn, of om een uitgebreider bandenmodel te gebruiken waarbij gebruik wordt gemaakt van meer dan 6 banden.

## 6 Bijlagen

### 6.1 Luttinger-Kohn Hamiltoniaan

Op  $\mathbf{k} = 0$  voldoen de Bloch functies aan:

$$H(\mathbf{k} = 0)u_{j0}(\mathbf{r}) = E_j(0)u_{j0}(\mathbf{r}) \quad (6.1.1)$$

Waarbij dat:

$$E_j(0) = 0 \quad \text{voor } j = 1, 2, 3, 4 \quad (6.1.2)$$

$$E_j(0) = -\Delta \quad \text{voor } j = 5, 6 \quad (6.1.3)$$

De oplossing van de Hamiltoniaan volgt uit de volgende eigenvergelijking:

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'}^A - E\delta_{jj'}) a_{j'}(\mathbf{k}) = 0 \quad (6.1.4)$$

waar:

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H_{j\gamma} H_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H'_{j\gamma} H'_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} \quad (6.1.5)$$

$$H_{jj'} = \langle u_{j0} | H | u_{j'0} \rangle = \left[ E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} \quad (j, j' \in A) \quad (6.1.6)$$

$$H'_{j\gamma} = \langle u_{j0} | \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{\gamma 0} \rangle \approx \sum_{\alpha} \frac{\hbar k_{\alpha}}{m_0} p_{j\gamma}^{\alpha} \quad (j \in A, \gamma \notin A) \quad (6.1.7)$$

waar we opmerken dat  $\prod_{jj'} = 0$  voor  $j, j' \in A$  en  $\prod_{j\gamma}^{\alpha} \approx p_{j\gamma}^{\alpha}$  voor  $j \in A$  en  $\gamma \notin A$ . Hierdoor wordt volgende uitdrukking verkregen:

$$U_{jj'}^A = \left[ E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta} p_{j\gamma}^{\alpha} p_{\gamma j'}^{\beta}}{E_0 - E_{\gamma}} \quad (6.1.8)$$

Laat  $U_{jj'}^A \equiv D_{jj'}$  dan krijgen we de matrix van de vorm  $D_{jj'}$ :

$$D_{jj'} = E_j(0)\delta_{jj'} + \sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_{\alpha} k_{\beta} \quad (6.1.9)$$

waar:

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} \frac{p_{j\gamma}^{\alpha} p_{\gamma j'}^{\beta} + p_{j\gamma}^{\beta} p_{\gamma j'}^{\alpha}}{m_0(E_0 - E_{\gamma})} \right] \quad (6.1.10)$$

Om de matrix elementen  $D_{jj'}$  expliciet uit te schrijven definiëren we:

$$A_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma x}^x}{E_0 - E_{\gamma}} \quad (6.1.11)$$

$$B_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^y p_{\gamma x}^y}{E_0 - E_{\gamma}} \quad (6.1.12)$$

$$C_0 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{p_{x\gamma}^x p_{\gamma y}^y + p_{x\gamma}^y p_{\gamma y}^x}{E_0 - E_{\gamma}} \quad (6.1.13)$$

en definiëren we de band structuur paramaters  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  als:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 = \frac{1}{3}(A_0 + 2B_0) \quad (6.1.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 = \frac{1}{6}(A_0 - B_0) \quad (6.1.15)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 = \frac{C_0}{6} \quad (6.1.16)$$

We krijgen dan de Luttinger-Kohn Hamiltoniaan  $\bar{\bar{U}}^A \equiv \bar{\bar{D}}$  genoteerd als  $\bar{\bar{H}}^{LK}$

$$\bar{\bar{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & \frac{-S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^{\dagger} & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^{\dagger} & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^{\dagger} & S^{\dagger} & P+Q & -\sqrt{2}R^{\dagger} & \frac{-S^{\dagger}}{\sqrt{2}} \\ \frac{-S^{\dagger}}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q^{\dagger} & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^{\dagger} & \sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q^{\dagger} & \frac{-S}{\sqrt{2}} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (6.1.17)$$

waar:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ -\sqrt{3}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y \right] \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3}(k_x - ik_y)k_z \end{aligned}$$

## 6.2 Rotatie Operator

De rotatie operator heeft de volgende vorm:

$$\hat{R}(\theta_x, \theta_y, \theta_z) = \exp \left( \frac{i}{\hbar} (\hat{J}_x \theta_x + \hat{J}_y \theta_y + \hat{J}_z \theta_z) \right) \quad (6.2.1)$$

De rotatie die moet worden uitgevoerd is een rotatie rond de y-as. Dus krijgt de rotatie operator de volgende vorm:

$$\hat{R}(\theta_y) = \exp \left( \frac{i}{\hbar} (\hat{J}_y \theta_y) \right) \quad (6.2.2)$$

Om deze operator uit te rekenen is er eerst een uitdrukking nodig voor:  $\hat{J}_y$ . Deze wordt berekend uit volgende vergelijking:

$$\hat{J}_y = \frac{i}{2} (\hat{J}_- - \hat{J}_+) \quad (6.2.3)$$

waar:

$$\hat{J}_+ |J, M\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} |J, M+1\rangle \quad (6.2.4)$$

$$\hat{J}_- |J, M\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} |J, M-1\rangle \quad (6.2.5)$$

Voor  $\hat{J}_+$  zal enkel de bovenste nevendagonaal verschillend zijn van 0 en voor  $\hat{J}_-$  zal enkel de onderste nevendagonaal verschillend zijn van 0.

Voor  $J = \frac{3}{2}$  worden volgende matrix elementen verkregen:

$$\hat{J}_{+12} = \sqrt{3}\hbar$$

$$\hat{J}_{+23} = 2\hbar$$

$$\hat{J}_{+34} = \sqrt{3}\hbar$$

$$\hat{J}_{-21} = \sqrt{3}\hbar$$

$$\hat{J}_{-32} = 2\hbar$$

$$\hat{J}_{-43} = \sqrt{3}\hbar$$

Dus wordt het volgende verkregen voor  $\hat{J}_y$ :

$$\hat{J}_y = \frac{i\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (6.2.6)$$

Als (6.2.6) wordt ingevuld in (6.2.2) dan wordt de volgende matrix gevonden:

$$\hat{R}_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos^3(\frac{\theta}{2}) & \frac{\sqrt{3}}{4} \sin^2(\theta) \csc(\frac{\theta}{2}) & \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\frac{\theta}{2}) \sin(\theta) & \sin^3(\frac{\theta}{2}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} \sin^2(\theta) \csc(\frac{\theta}{2}) & \frac{1}{4} \cos(\frac{\theta}{2}) + \frac{3}{4} \cos(\frac{3\theta}{2}) & -\frac{1}{4} \sin(\frac{\theta}{2}) - \frac{3}{4} \sin(\frac{3\theta}{2}) & \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\frac{\theta}{2}) \sin(\theta) \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\frac{\theta}{2}) \sin(\theta) & \frac{1}{4} \sin(\frac{\theta}{2}) - \frac{3}{4} \sin(\frac{3\theta}{2}) & \frac{1}{4} \cos(\frac{\theta}{2}) + \frac{3}{4} \cos(\frac{3\theta}{2}) & \frac{\sqrt{3}}{4} \sin^2(\theta) \csc(\frac{\theta}{2}) \\ -\sin^3(\frac{\theta}{2}) & \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\frac{\theta}{2}) \sin(\theta) & -\frac{\sqrt{3}}{4} \sin^2(\theta) \csc(\frac{\theta}{2}) & \cos^3(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix} \quad (6.2.7)$$

De rotatie die wordt uitgevoerd om de z-as naar de x-as te roteren is een rotatie van  $\frac{\pi}{2}$  rond de y-as, als dit wordt ingevuld wordt de rotatie operator:

$$\hat{R}_y\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{6}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \end{bmatrix} \quad (6.2.8)$$



## References

- [1] Y. Xia et al, *One Dimensional Nanostructures*, Advanced Materials No. 5 March 4 2003.
- [2] J. Depdeep,  *$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  theory of semiconductors*, EE 698D Advanced Semiconductor Physics, Department of Electrical Engineering, University of Notre Dame.
- [3] G. Ozgur, *The Effective Mass Theory*, Electrical Engineering, SMU-2003.
- [4] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Eight Edition, p167-173 & p197-198.
- [5] F. B. Pedersen & Yia-Chung Chang, *Energy Levels of One and Two Holes in Parabolic Quantum Dots*, Physical Review B Vol. 53 No. 3 January 15 1996.
- [6] F. Peeters, *Physics of Low-Dimensional Systems*, Department of Physics, Condensed Matter Theory, p24-28.
- [7] Chuang, *Theory of Electronic Band Structures in Semiconductors*, p125-145.
- [8] J. Tempere, *Kwantummechanica*, Departement Fysica, p23-33.
- [9] D. Rideau et al, *Strained Si, Ge, and  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  alloys modeled with a first principles-optimized full-zone  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  method*, 10.1103/PhysRevB.74.195208.
- [10] F. Michelini & I. Ouerghi, *Interband optical properties of silicon [001] quantum wells using a two conduction-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model*, Appl. Phys. Lett. 99, 221912 (2011).