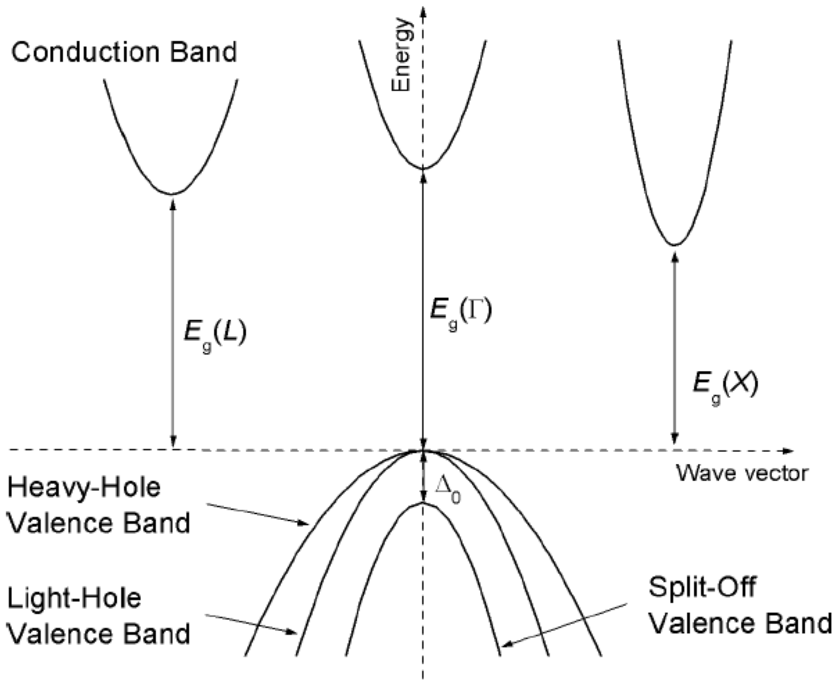
Metody kwantowe FCS – Program 4

1. Zagadnienie do rozwiązania

Celem ćwiczenia jest otrzymanie fragmentu struktury pasmowej GaAs dla punktów strefy Brillouina położonych w pobliżu punktu Γ. Jedną z najpopularniejszych (i wciąż stosowanych) metod wyznaczania struktury pasmowej wokół punktu Γ jest metoda kp. Pozwala ona otrzymać poprawną zależność dyspersyjną dla pasm położonych najbliżej przerwy energetycznej. Pasma te to pasmo ciężkich i lekkich dziur (*heavy hole* i *light hole*), pasmo rozszczepione ze względu na oddziaływanie spin-orbita (*split-off*) oraz pasmo przewodnictwa (*conduction band*). Pokazuje to poniższy schematyczny rysunek:



Funkcję falową elektronu w ciele stałym opisuje się funkcją Blocha postaci:

$$\psi_n(\vec{k},\vec{r}) = u_n(\vec{k},\vec{r})\exp(i\vec{k}\vec{r})$$

Wstawiając tę funkcję do jednocząstkowego równania Schroedingera otrzymuje się równanie postaci:

$$\Big[-\frac{\vec{\mathbf{p}}\cdot\vec{\mathbf{p}}}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{\mathbf{p}}\Big]u_n(\vec{k},\vec{r}) = \Big[E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\Big]u_n(\vec{k},\vec{r})$$

gdzie V jest potencjałem krystalicznym

Równanie to rozwiązuje się standardową metodą, posługując się posługując się odpowiednią bazą. Należy zatem zdiagonalizować pewną macierz:

$$\det\big[H_{ij} - \delta_{ij}E\big] = 0$$

Najprostszym z modeli kp jest model dwupasmowy, dający macierz 4x4 (z powodu degeneracji ze względu na spin). Pasmami tymi są pasma dziurowe, jako dobrze oddzielone zarówno od przewodnictwa jak i *split-off.* Można pokazać, że przy użyciu bazy będącej kombinacjami liniowymi funkcji Blocha dla k=0 oraz używając fenomenologicznego hamiltonianu Luttingera ogólnej postaci:

$$H=H(k_x, k_y, k_z; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$$

macierz H_{ij} ma postać:

$$\begin{bmatrix} P_k + Q_k & -S_k & R_k & 0 \\ -S_k^* & P_k - Q_k & 0 & R_k \\ R_k^* & 0 & P_k - Q_k & S_k \\ 0 & R_k^* & S_k^* & P_k + Q_k \end{bmatrix}$$

gdzie wyrazy są dane wzorami:

$$P_k = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - E_v^0$$

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

$$R_k = -\sqrt{3}\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0}(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0}k_x k_y$$

$$S_k = 2\sqrt{3}\frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0}(k_x - ik_y)k_z,$$

Stałe γ_1, γ_2, γ_3 są współczynnikami Luttingera, k_z wskazuje kierunek <100> a E_v^0 to energia brzegu pasma przewodnictwa. Diagonalizując powyższą macierz dla szeregu wartości wektora falowego (od 0 do ok. 0.2) można otrzymać zależność dyspersyjną pasm LH i HH.

2. Szczegóły zadania

Diagonalizacji macierzy można dokonać przy użyciu biblioteki numerycznej gsl. Wartości parametrów dla GaAs jakich należy użyć podaje poniższa tabela

Parametr	Wartość
E_v^0	-0.8 eV
γ_1	6.98
γ_2	2.06
γ_3	2.93

3. Opracowanie wyników

Należy wykonać wykres energii w funkcji wektora falowego.