

# Verallgemeinerung der $k \cdot p$ -Theorie für periodische Störungen

Ralf Stubner

März 1999



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Periodische Störungen im Rahmen der <math>k \cdot p</math>-Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Standard $k \cdot p$ -Theorie . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Anwendung auf geordnetes GaInP<sub>2</sub></b>	<b>5</b>
3.1	Allgemeines zum Materialsystem . . . . .	5
<b>4</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>7</b>
4.1	Diagonalisieren des Hamilton-Operators . . . . .	7
4.2	Entkopplung von Valenz- und Leitungsband . . . . .	7
	<b>Appendices</b>	<b>8</b>
	<b>Literatur</b>	<b>9</b>



# 1 Einleitung

Bei der Beschreibung der Eigenschaften von Festkörpern stehen wir vor der Schwierigkeit, daß es sich dabei um ein wechselwirkendes Vielteilchensystem handelt. Oft wird daher die Näherung verwendet, dieses Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem abzubilden und die Einteilchenzustände zu betrachten, die sich daraus ergeben. In Halbleitern werden die wesentlichen Eigenschaften von jenen effektiven Einteilchenzustände bestimmt, die in der Nähe der Bandkanten liegen. Die  $k \cdot p$ -Theorie (Kane 1966) beschreibt diese Zustände gut, weshalb sie sehr erfolgreich bei der Erklärung vieler Effekte in Halbleitern ist und breite Anwendung findet, insbesondere in Verbindung mit der Envelopefunktionsnäherung (Luttinger und Kohn 1955).

Allerdings ergeben sich Schwierigkeiten, wenn das betrachtete System sich auf einer der Gitterkonstante vergleichbaren Längenskala periodisch ändert. Beispiele für Systeme in denen dies untersucht wurde sind Halbleiterlegierungen in denen spontane Ordnung auftritt (Franceschetti, Wei, und Zunger 1995) und kurzperiodische Übergitter (Wood und Zunger 1996). Diese Schwierigkeiten können wir so verstehen, daß die  $k \cdot p$ -Theorie Bereiche der Brillouin-Zone schlecht beschreibt, die im reziproken Raum einen großen Abstand von den Bandkantenzuständen haben. Doch es sind diese weit entfernten Zustände, die in Systemen mit kurzperiodischer Störung entscheidend beitragen.

Aus diesem Grund konnten solche Systeme meist nur mit All-Elektronen-Rechnungen behandelt werden. Die Ergebnisse solcher einer Rechnung sind aber schwieriger zu interpretieren, als Ergebnisse von Rechnungen mit  $k \cdot p$ -Theorie. Deshalb wollen wir hier zeigen, wie sich die  $k \cdot p$ -Theorie so erweitern läßt, daß periodische Störungen effektiv beschrieben werden können. Als Beispiel für eine Anwendung dieser Verallgemeinerung soll die Ordnungsabhängigkeit der effektiven Masse im Leitungsband von spontan geordnetem GaInP<sub>2</sub> untersucht werden.

Diese Arbeit gliedert sich wie folgt.

Im zweiten Kapitel werden wir die Standard  $k \cdot p$ -Theorie skizzieren und die notwendigen Verallgemeinerungen für die Behandlung periodischer Störungen durchführen.

Das dritte Kapitel enthält eine Einführung in wichtige Eigenschaften des Materialsystems GaInP<sub>2</sub>. Danach zeigen wir mit welchem Hamilton-Operator die effektive Masse des Leitungsbandes in diesem Material beschrieben werden kann.

Im vierten Kapitel lösen wir diesen Hamilton-Operator und präsentieren die Ergebnisse dieser Rechnung.

Das letzte Kapitel enthält eine Zusammenfassung und einen kurzen Ausblick auf künftige Weiterentwicklungen.

## 2 Periodische Störungen im Rahmen der $k \cdot p$ -Theorie

In diesem Kapitel soll die allgemeine Theorie für die Verallgemeinerung der  $k \cdot p$ -Theorie auf periodische Störungen vorgestellt werden. Dazu wollen wir zunächst die Standard  $k \cdot p$ -Theorie skizzieren, wie sie etwa bei Kane (1966) zu finden ist, und danach die nötigen Verallgemeinerungen vornehmen.

### 2.1 Standard $k \cdot p$ -Theorie

Im Rahmen der  $k \cdot p$ -Theorie wird normalerweise das Problem eines Elektrons in einem periodischen Potential behandelt, d.h. die stationäre Schrödinger-Gleichung mit dem Hamilton-Operator

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}).$$





# 3 Anwendung auf geordnetes GaInP<sub>2</sub>

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, wie sich die in Kap. 2 abgeleitete Theorie auf ein konkretes Problem, die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband von (teil-)geordnetem GaInP<sub>2</sub>, anwenden läßt.

## 3.1 Allgemeines zum Materialsystem

Viele III–V-Halbleiterlegierungen  $A_xB_{1-x}C$  mit Kationen  $A$  und  $B$  zeigen spontane, langreichweitige CuPt-Ordnung, wenn sie mit metallorganischer Gasphasen-Epitaxie [*metalorganic vapour phase epitaxy* (MOVPE)] auf (001)-orientierten Substraten gewachsen werden (Zunger und Mahajan 1994). Die geordnete Phase besteht aus abwechselnden Monolagen  $A_{x+\eta/2}B_{1-x-\eta/2}C$  und  $A_{x-\eta/2}B_{1-x+\eta/2}C$ , die längs der [111]-Richtung angeordnet sind. Dabei ist  $0 \leq \eta \leq 1$  der Ordnungsgrad. Die [111]-Richtung wird als Ordnungsrichtung bezeichnet.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Im Prinzip wäre auch eine der drei Richtungen möglich, die zur [111]-Richtung äquivalent sind. Doch hat dies hier keinerlei Auswirkungen, so daß wir hier bei nur einer Richtung bleiben wollen.



## 4 Ergebnisse und Diskussion

### 4.1 Diagonalisieren des Hamilton-Operators

Die Diagonalisierung des  $k \cdot p$ -Hamilton-Operators (??) wollen wir in mehreren Schritten vornehmen. Die Idee dabei ist, daß wir zunächst Gl.~(??) für  $k = 0$  diagonalisieren. Dadurch erhalten wir neue Basisfunktionen, die sich als Linearkombination der alten Basisfunktionen darstellen lassen, so daß wir die  $k \cdot p$ -Wechselwirkungen zwischen diesen neuen Basisfunktionen angeben können. Danach können wir dann diese Kopplungen in zweiter Ordnung Störungstheorie behandeln, um die effektiven Massen zu erhalten.

### 4.2 Entkopplung von Valenz- und Leitungsband

In Gl.~(??) haben wir gesehen, daß  $V_{15}$ , verglichen mit den dazugehörigen Energienennern, das Matricelement mit dem geringsten Effekt ist. Wie wir noch sehen werden, gilt  $|V_{11}| \approx 200$  meV für die höchstgeordneten Proben, die im Experiment bisher gefunden wurden. Setzen wir aber nun die Werte aus Tab.~?? ein, so erhalten wir, daß auch  $|V_{15}| \approx 200$  meV ist und damit eine Größenordnung kleiner als der dazugehörige Energienenner. Dies rechtfertigt es, diese Kopplung störungstheoretisch zu behandeln.

Dabei wollen wir Löwdin-Störungstheorie (Löwdin 1951) verwenden, wie wir sie in Kap.~?? beschrieben haben. Da wir hier eine Entkopplung von Valenz- und Leitungsband durchführen möchten, bedeutet dies, daß wir einmal die Leitungsbänder als Gruppe A betrachten und die Valenzbänder als Gruppe B und dann diese Rollen vertauschen.

Führen wir dies für den Hamilton-Operator (??) durch, so müssen wir nur folgende Energien abändern, um die Kopplung zwischen Valenz- und Leitungsband in zweiter Ordnung zu beseitigen:

# Literatur

- Franceschetti, Alberto, Su-Hai Wei, und Alex Zunger, 1995, „Effects of ordering on the electron effective mass and strain deformation potential in GaInP?: Deficiencies of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model“, *Physical Review B* **52**, 13992–13997.
- Kane, E. O., 1966, „The  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  method“, in *Physics of III-V Compounds*, herausgegeben von R. K. Willardson und A. C. Beer, Semiconductors and Semimetals (Academic Press, New York), Bd. 1, S. 75.
- Löwdin, Per-Olov, 1951, „A note on the quantum-mechanical perturbation theory“, *The Journal of Chemical Physics* **19**, 1396–1401.
- Luttinger, J. M., und W. Kohn, 1955, „Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields“, *Physical Review* **97**, 869–883.
- Wood, D. M., und Alex Zunger, 1996, „Successes and failures of the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  method: A direct assessment for GaAs/AlAs quantum structures“, *Physical Review B* **53**, 7949–7963.
- Zunger, A., und S. Mahajan, 1994, „Atomic ordering and phase separation in epitaxial III-V alloys“, herausgegeben von S. Mahajan (North-Holland, Amsterdam), 2. Aufl., Bd. 3b, S. 1399.

