

Heterostruktury półprzewodnikowe – studnie kwantowe (cd)



Studnia skończona

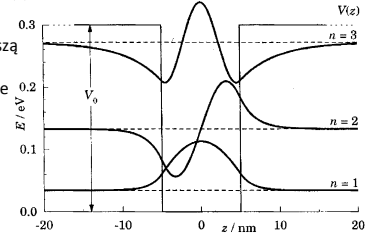
Heterostruktury mogą mieć różne masy efektywne w różnych obszarach:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) + V_0(z)\psi(z) = \epsilon\psi(z)$$

Okazuje się, że zamiana $m^* \rightarrow m(z)$ nie jest dobrym rozwiązaniem problemu (równanie przestaje być hermitowskie). Trzeba to zrobić inaczej, np.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \right] \psi(z) + V_0(z)\psi(z) = \epsilon\psi(z)$$

Warunki zszycia na granicy heterostruktur muszą być zmodyfikowane (z rozważań na temat zachowania ładunku prądy płynące przez złącze $I_W = I_B$ wtedy $v_W = v_B$):

$$\frac{1}{m_B} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_W} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=\frac{a}{2}}$$


2013-02-27 2

Studnia skończona

Obliczamy:

$$\begin{cases} \psi_B(z) \Big|_{z=\frac{a}{2}} = \psi_W(z) \Big|_{z=\frac{a}{2}} \\ \frac{1}{m_B} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_W} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=\frac{a}{2}} \end{cases} \quad \frac{Ck}{m_W} \begin{pmatrix} -\sin(k_n \frac{a}{2}) \\ \cos(k_n \frac{a}{2}) \end{pmatrix} = -\frac{D\kappa_n}{m_B} \exp(\kappa_n \frac{a}{2})$$

$$\begin{cases} \tan(k_n \frac{a}{2}) \\ -\cot(k_n \frac{a}{2}) \end{cases} = \frac{m_W \kappa_n}{m_B k_n} = \sqrt{\frac{m_W}{m_B} \left(\frac{2m_0 m_W V_0}{\hbar^2 k_n^2} - 1 \right)}$$

Oznaczamy $\theta = \frac{k_n a}{2}$, oraz $\theta_0^2 = \frac{m_0 m_W V_0 a^2}{2\hbar^2}$ (zależy tylko od m_W)

$$\begin{cases} \tan \theta \\ -\cot \theta \end{cases} = \sqrt{\frac{m_W}{m_B} \left(\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1 \right)}$$

2013-02-27 3

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:

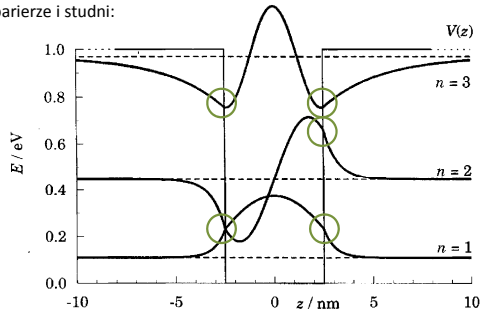


FIGURE 4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z , and effective masses $m_W = 0.067$ in the well and $m_B = 0.15$ in the barrier.

2013-02-27 4

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:



Za chwilę wrócimy do ruchu nośnika w poprzek studni

Fig. 4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z , and effective masses $m_w = 0.067$ in the well and $m_b = 0.15$ in the barrier.

2013-02-27

5

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

Nazywana też metodą LG (Liouville–Green) **lub** JWKB / WKBJ (od Jeffreys-WKB) **lub** *phase integral method* **lub** przybliżenie półklasyczne (*semi-classical approximation*).

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

Co to jest potencjał wolnozmienny? Na pewno $V(x) = V_0 = const$ jest. Rozwiązaniem dla tego potencjału jest fala płaska $\psi(x) = e^{ikx}$ - faza funkcji falowej $k(x) = k = const$ jest stała w całej przestrzeni $k^2 = \frac{2m}{\hbar} [E - V_0]$

Zdefiniujemy $k^2(x) = \frac{2m}{\hbar} [E - V(x)]$ - chcemy, by faza $k(x)$ powoli zmieniała się w przestrzeni, tzn.

$$\left| \frac{dk}{dx} \right| \ll k^2$$

(taki warunek).

Szukamy rozwiązania w postaci $\psi(x) = e^{i\chi(x)}$ gdzie $\chi(x)$ to faza funkcji falowej.

2013-02-27

6

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

Zwykle w metodzie WKB rozwija się dalej

$$[\chi'(x)]^2 = k^2(x) + i\chi''(x) = k^2(x) + i[\chi'(x)]' \approx k^2(x) \pm i[k(x)]'$$

Stąd:

$$\chi'(x) \approx \pm k(x) \sqrt{1 + \frac{ik'(x)}{k^2(x)}} \approx \pm k(x) + \frac{ik'(x)}{2k(x)}$$

a stąd:

$$\chi(x) = \pm \int^x k(x') dx' + \frac{i}{2} \ln k(x)$$

Dostajemy:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left[\pm i \int^x k(x') dx' \right]$$

Człon $1/\sqrt{k(x)}$ - gęstość prawdopodobieństwa szybko poruszającej się cząstki jest mała dla dużych k – dobrze!

2013-02-27

7

TU 2012-10-27

131

2013-02-27

8

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad V(z) = \frac{1}{2}Kz^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0$$

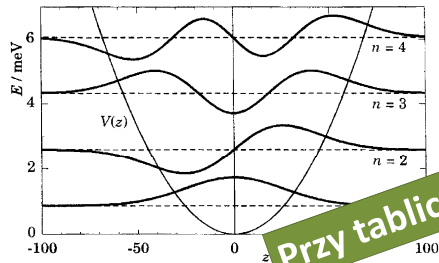


FIGURE 4.4. Potential well $V(z)$, energy levels, and wave functions of a harmonic oscillator. The potential is generated by a magnetic field of 1 T acting on electrons in GaAs.

Przy tablicy

2013-02-27

9

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} z$$

2013-02-27

10

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega_0}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \frac{\hbar}{m\omega_0} \xi^2 \right] \psi(\xi) = \hbar\omega_0 \varepsilon \psi(\xi)$$

2013-02-27

11

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega_0}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \frac{\hbar}{m\omega_0} \xi^2 \right] \psi(\xi) = \hbar\omega_0 \varepsilon \psi(\xi) \Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 \right] \psi(\xi) = -2\varepsilon \psi(\xi)$$

Tożsamości:

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \right] \psi_0(\xi) = \dots$$

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) \right] \psi_0(\xi) = \dots$$

Przy tablicy

2013-02-27

12

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m \omega_0}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \frac{\hbar}{m \omega_0} \xi^2\right] \psi(\xi) = \hbar \omega_0 \varepsilon \psi(\xi) \Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right] \psi(\xi) = -2\varepsilon \psi(\xi)$$

Tożsamości:

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\right] \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 + 1) \psi_0(\xi)$$

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\right] \psi_0(\xi) = 2\psi_0(\xi)$$

2013-02-27

13

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m \omega_0}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \frac{\hbar}{m \omega_0} \xi^2\right] \psi(\xi) = \hbar \omega_0 \varepsilon \psi(\xi) \Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2\right] \psi(\xi) = -2\varepsilon \psi(\xi)$$

Tożsamości:

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\right] \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 + 1) \psi_0(\xi)$$

$$\left[\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\right] \psi_0(\xi) = 2\psi_0(\xi)$$

$$(-2\varepsilon_0 + 1) \psi_0(\xi) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = 2\psi_0(\xi)$$

2013-02-27

14

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$(-2\varepsilon_0 + 1) \psi_0(\xi) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = 2\psi_0(\xi)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \psi_0(\xi) \quad \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) / \dots$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi)$$

2013-02-27

15

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$(-2\varepsilon_0 + 1) \psi_0(\xi) - \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = 2\psi_0(\xi)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \psi_0(\xi) \quad \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) / \dots$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_1(\xi)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_1(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \psi_1(\xi) = (-2\varepsilon_1 + 1) \psi_1(\xi)$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 1$$

2013-02-27

16

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_n(\xi) \quad \varepsilon_n = \varepsilon_0 + n$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_{-n}(\xi) \quad \varepsilon_{-n} = \varepsilon_0 - n$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_1(\xi)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_1(\xi) = (-2\varepsilon_0 - 1) \psi_1(\xi) = (-2\varepsilon_1 + 1) \psi_1(\xi)$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 1$$

2013-02-27

17

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_n(\xi) \quad \varepsilon_n = \varepsilon_0 + n$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_{-n}(\xi) \quad \varepsilon_{-n} = \varepsilon_0 - n$$

Potencjał jest ograniczony z dołu

Wystarczy teraz wybrać $\psi_0(\xi)$ czyli

$$\psi_{-1}(\xi) = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_{-1}(\xi) = 0$$

$$\psi_0(\xi) = A e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

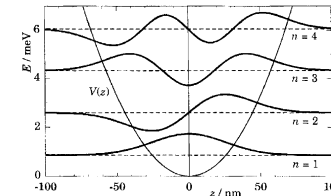


FIGURE 4.4. Potential well $V(z)$, energy levels, and wave functions of a harmonic oscillator. The potential is generated by a magnetic field of 1 T acting on electrons in GaAs.

2013-02-27

18

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) A e^{-\frac{\xi^2}{2}} = (-2\varepsilon_0 + 1) A e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0 \Rightarrow -2\varepsilon_0 + 1 = 0 \Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{1}{2}$$

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$$

Wystarczy teraz wybrać $\psi_0(\xi)$ czyli

$$\psi_{-1}(\xi) = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) \psi_0(\xi) = \psi_{-1}(\xi) = 0$$

$$\psi_0(\xi) = A e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

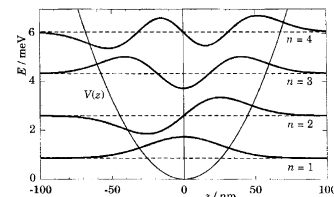


FIGURE 4.4. Potential well $V(z)$, energy levels, and wave functions of a harmonic oscillator. The potential is generated by a magnetic field of 1 T acting on electrons in GaAs.

2013-02-27

19

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2\right] \psi(z) = E \psi(z) \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \quad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) A e^{-\frac{\xi^2}{2}} = (-2\varepsilon_0 + 1) A e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0 \Rightarrow -2\varepsilon_0 + 1 = 0 \Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{1}{2}$$

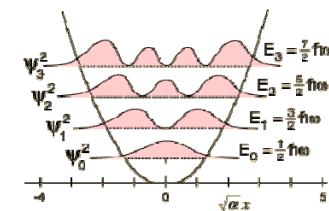
$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$$

$$E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\psi_n(z) = A_n H_n \left(\sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z\right) \exp\left(-\frac{m \omega_0}{2\hbar} z^2\right)$$

H_n - wielomiany Hermite'a

$$A_n = \left(2^n n! \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m \omega}}\right)^{-1/2}$$



2013-02-27

20

Potencjał kulombowski 2D

2013-02-27

21

Potencjał kulombowski 2D

NAJPIERW:

Potencjał kulombowski 3D w półprzewodniku o stałej dielektrycznej ϵ_r , masie efektywnej m^* :

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r}$$

$$Ry = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{m}{2\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = 13.6 \text{ eV}$$

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0.5 \text{ \AA}$$

$$E_n = -Ry \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\left(\frac{m^*}{m_0}\right) \frac{1}{\epsilon_r^2} Ry \frac{1}{n^2}$$

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} \left(\frac{m_0}{m^*}\right) = a_B \epsilon_r \left(\frac{m_0}{m^*}\right)$$

2013-02-27

22

Potencjał kulombowski 2D

Ładunek w potencjale kulombowskim poruszający się w jednej płaszczyźnie. UWAGA: nie chodzi o prawo Gaussa w 2D (dla którego zależność jest jak $(\ln r)$ ale o „atom wodoru” uwięziony w 2D.

$$V(r) = -\frac{1}{r}$$

$$x = r \sin \phi$$

$$y = r \cos \phi$$

Laplasjan:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Hamiltonian problemu w 2D:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V\right)\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad r \in [0, \infty)$$

$$\phi = \tan^{-1} \frac{x}{y}, \quad \phi \in [0, 2\pi].$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

2013-02-27

23

Potencjał kulombowski 2D

Ładunek w potencjale kulombowskim poruszający się w jednej płaszczyźnie.

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V\right)\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right) \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r}\right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\phi)$$

Operator kwadratu momentu pędu: $L_{2D}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

Operator rzutu momentu pędu: $L_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} + 2E\right) R(r) = -\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi(\phi) = m^2 \quad (\text{pewna liczba})$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

Z powodów fizycznych $e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)}$ zatem $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$

2013-02-27

24

Potencjał kulombowski 2D

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\phi)$$

Część radialna:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{2}{r} \right) R(r) = ER(r)$$

O! joj-joj-joj! (czyli kilka podstawień, wyprowadzeń i wzorów):

$$R_{n,m}(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{j=0}^{N(n)} a_j \frac{|m|+j-n}{j(2|m|+j)} \rho^{|m|+j}$$

Ostatecznie:

$$Ry^* = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \right)^2 \frac{m^*}{2\hbar^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r a_B^*} = \left(\frac{m^*}{m_0} \right) \frac{Ry}{\epsilon_r^2} \quad a_B^* = \epsilon_r \left(\frac{m_0}{m^*} \right)$$

$$E_n = -\frac{Ry^*}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} \quad \text{Dla wodoru } Ry = 13.6 \text{ eV i } a_B = 0.053 \text{ nm}$$

Dla półprzewodnika GaAs $Ry^* \approx 5 \text{ meV}$ i $a_B^* \approx 10 \text{ nm}$

2013-02-27

25

Potencjał kulombowski 2D

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\phi)$$

Część radialna:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{2}{r} \right) R(r) = ER(r)$$

O! joj-joj-joj! (czyli kilka podstawień, wyprowadzeń i wzorów):

$$R_{n,m}(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{j=0}^{N(n)} a_j \frac{|m|+j-n}{j(2|m|+j)} \rho^{|m|+j}$$

Ostatecznie:

$$Ry^* = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \right)^2 \frac{m^*}{2\hbar^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r a_B^*} = \left(\frac{m^*}{m_0} \right) \frac{Ry}{\epsilon_r^2} \quad a_B^* = \epsilon_r \left(\frac{m_0}{m^*} \right)$$

$$E_n = -\frac{Ry^*}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} \quad \text{Dla wodoru } Ry = 13.6 \text{ eV i } a_B = 0.053 \text{ nm}$$

Dla półprzewodnika GaAs $Ry^* \approx 5 \text{ meV}$ i $a_B^* \approx 10 \text{ nm}$

2013-02-27

Jaka jest energia wiązania w 2D?

26

Struktury niskowymiarowe

2013-02-27

27

Struktury niskowymiarowe

Pelny Hamiltonian w naszym wszechświecie ma 3 wymiary przestrzenne $(x, y, z, t) = (\vec{R}, t)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dla $V(\vec{R}) = V(z)$ mamy:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Wzdłuż kierunków x i y mamy ruch swobodny:

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u(z)$$

Można pokazać (przy tablicy!), że ostatecznie energie własne potencjału $V(z)$ są w postaci:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] u(z) = \epsilon u(z) \quad \epsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

131

2013-02-27

28

Struktury niskowymiarrowe

$$\psi_{k_x, k_y, n}(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u_n(z) = \psi_{k, n}(\mathbf{r}, z) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_n(z)$$

$$E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \quad E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

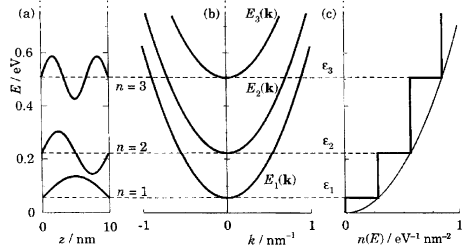


FIGURE 4.7. (a) Potential well with energy levels, (b) total energy including the transverse kinetic energy for each subband, and (c) step-like density of states of a quasi-two-dimensional system. The example is an infinitely deep square well in GaAs of width 10 nm. The thin curve in (c) is the parabolic density of states for unconfined three-dimensional electrons.

2013-02-27

29

Struktury niskowymiarrowe

$$\psi_{k_x, k_y, n}(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u_n(z) = \psi_{k, n}(\mathbf{r}, z) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_n(z)$$

$$E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \quad E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

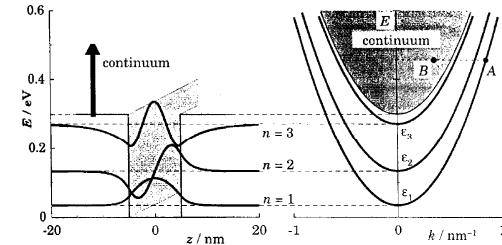


FIGURE 4.9. Quasi-two-dimensional system in a potential well of finite depth. Electrons with the same total energy can be bound in the well (A) or free (B).

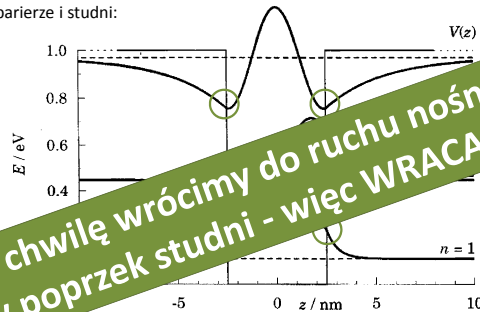
Cząstki A i B mają tę samą energię!

2013-02-27

30

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:



Za chwilę wrócimy do ruchu nośnika w poprzek studni - więc WRACAMY

FIGURE 4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z , and effective masses $m_W = 0.067$ in the well and $m_B = 0.15$ in the barrier.

2013-02-27

31

Struktury niskowymiarrowe

Masa efektywna w barierze m_B i w studni m_W

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_{W,B}} \nabla^2 + V(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dla rozseparowanej funkcji falowej: $\psi(\vec{R}) = \psi_{k, n}(\mathbf{r}, z) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_n(z)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_W} \nabla^2 + E_W \right] \psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_B} \nabla^2 + E_B \right] \psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dostajemy (przy tablicy!):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_W} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0 m_W} + E_W \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_B} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0 m_B} + E_B \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

2013-02-27

32

Struktury niskowymiarowe

Czyli cząstka porusza się w studni, której potencjał zależy od k , a właściwie $k = |k|$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_W} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_W} + E_W \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_B} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_B} + E_B \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$V_0(k) = (E_B - E_W) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_W} \right)$$

Cząstka „nabiera” częściowo masy efektywnej bariery:

$$E_n(k) = \varepsilon_n(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_W} \approx \varepsilon_n(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_{eff}}$$

bo potencjał studni zależy od k

$$m_{eff} \approx m_W P_W + m_B P_B$$

prawdopodobieństwo znalezienia cząstki

Np. w strukturze GaAs-AlGaAs $m_B > m_W$ więc studnia robi się „płyszczą”

2013-02-27

33

Struktury niskowymiarowe

Czyli cząstka porusza się w studni, której potencjał zależy od k , a właściwie $k = |k|$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_W} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_W} + E_W \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_B} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_B} + E_B \right] u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$V_0(k) = (E_B - E_W) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_W} \right)$$

TABLE 4.2 Dependence on transverse wave vector k_{\perp} of the energies of the states bound in a well 5 nm wide and 1 eV deep, with effective mass $m_W = 0.067$ inside the well and $m_B = 0.15$ outside.

k (nm ⁻¹)	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_W}$ (eV)	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_B}$ (eV)	$V_0(k)$ (eV)	ε_1 (eV)	ε_2 (eV)	ε_3 (eV)	m_{eff}
0.0	0.000	0.000	1.000	0.108	0.446	0.969	0.057
0.5	0.142	0.064	0.921	0.106	0.435	0.919	0.069
1.0	0.570	0.254	0.685	0.096	0.397	—	0.076

Np. w strukturze GaAs-AlGaAs $m_B > m_W$ więc studnia robi się „płyszczą”

2013-02-27

34

Studnie 2D i 3D

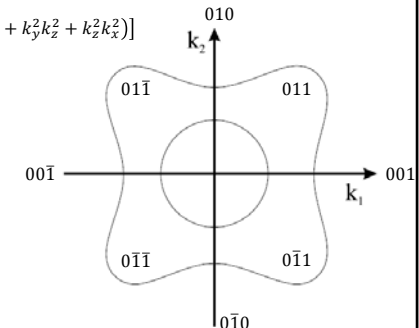
2013-02-27

35

Komentarz o paśmie walencyjnym

Z równania kp :

$$E_{3/2}(k) = Ak^2 \pm [B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)]$$



Przykładowe powierzchnie stałej energii w dwuwymiarowej przestrzeni k .

2013-02-27

36

Komentarz o paśmie walencyjnym

Z równania kp :

$$E_{3/2}(k) = Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]$$

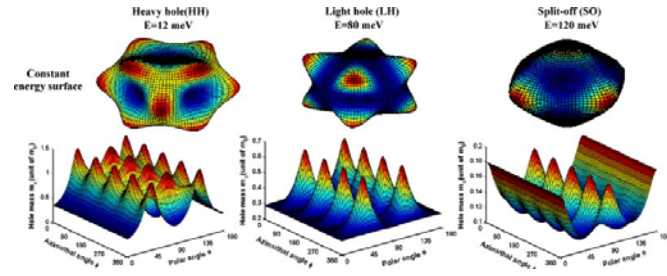


Fig. 7. The 3D constant-energy surfaces of the heavy hole (HH) band, the light hole (LH) band and the split-off (SO) band and their corresponding conductivity masses for unstrained silicon.

X.X. Wei, Y. Yu, Y. Bi; Int. J. of Mechanical Sciences Vol. 50, 1499-1509 (2008).

2013-02-27

37

Komentarz o paśmie walencyjnym

Z równania kp :

$$E_{3/2}(k) = Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]$$

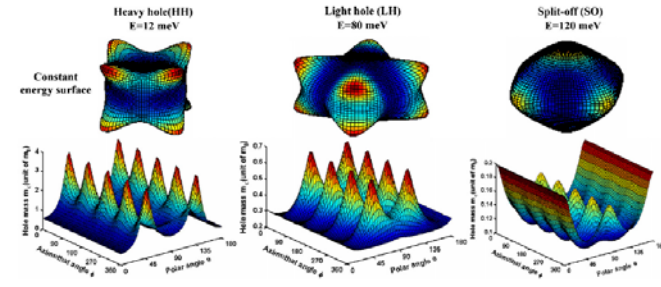


Fig. 8. The 3D constant-energy surfaces of the heavy hole (HH) band, the light hole (LH) band and the split-off (SO) band and the corresponding conductivity masses for silicon under the uniaxial compression $P \approx 500kN$.

X.X. Wei, Y. Yu, Y. Bi; Int. J. of Mechanical Sciences Vol. 50, 1499-1509 (2008).

2013-02-27

38

Komentarz o paśmie walencyjnym

Z równania kp :

$$E_{3/2}(k) = Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{1/2}$$

Bezwymiarowe parametry Luttingera:

$$\gamma_1 = -\frac{2m}{\hbar^2}A \quad \gamma_2 = -\frac{m}{\hbar^2}B \quad \gamma_3 = \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{1}{3}C^2 + B^2}$$

$$E_{l,h}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\gamma_1 k^2 \pm \sqrt{4\gamma_2^2 k^4 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)} \right] \begin{matrix} + \text{ciężkie dziury} \\ - \text{lekkie dziury} \end{matrix}$$

Rozwijając wokół $k = 0$

$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_y^2]$$

$$E_{lh}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_y^2]$$

Symetria

2013-02-27

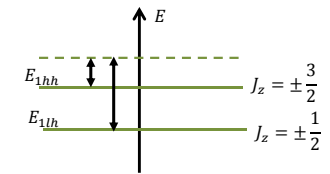
39

Komentarz o paśmie walencyjnym

Obecność studni zmienia symetrię kryształu (np. studnia kwantowa na kierunku [001] odpowiada ciśnieniu jednoosiowemu przyłożonemu prostopadle do warstwy). Trzeba rozwiązać równanie kp (Chemla 1983):

$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\gamma_1 + \gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_y^2]$$

$$E_{lh}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\gamma_1 - \gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_y^2]$$



Wynika z tego, że dziury ciężkie mają „lekką” masę $\frac{m}{(\gamma_1 + \gamma_2)}$ na płaszczyźnie $(x - y)$, natomiast dziury lekkie mają „ciężką” masę $\frac{m}{(\gamma_1 - \gamma_2)}$

2013-02-27

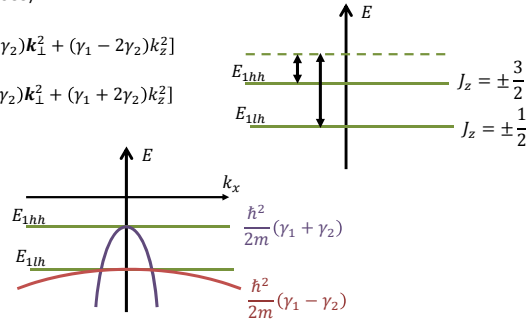
40

Komentarz o paśmie walencyjnym

Obecność studni zmiany a symetrię kryształu (np. studnia kwantowa na kierunku [001] odpowiada ciśnieniu jednoosiowemu przyłożonemu prostopadle do warstwy). Trzeba rozwiązać równanie kp (Chemla 1983):

$$E_{hh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m}[(\gamma_1 + \gamma_2)k_1^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_2^2]$$

$$E_{lh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m}[(\gamma_1 - \gamma_2)k_1^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_2^2]$$



2013-02-27

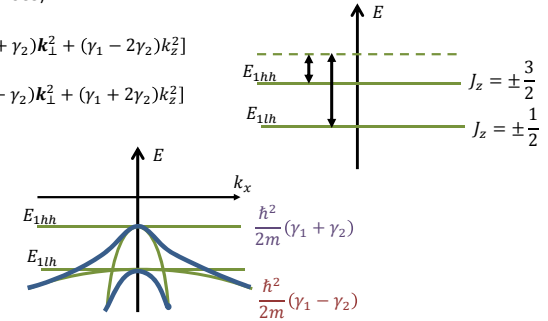
41

Komentarz o paśmie walencyjnym

Obecność studni zmiany a symetrię kryształu (np. studnia kwantowa na kierunku [001] odpowiada ciśnieniu jednoosiowemu przyłożonemu prostopadle do warstwy). Trzeba rozwiązać równanie kp (Chemla 1983):

$$E_{hh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m}[(\gamma_1 + \gamma_2)k_1^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_2^2]$$

$$E_{lh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m}[(\gamma_1 - \gamma_2)k_1^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_2^2]$$



PolDS 385

2013-02-27

42

Komentarz o paśmie przewodnictwa

W zależności od półprzewodnika dno pasma przewodnictwa może być zbudowane z różnych dolin – ta sama heterostruktura może być studnią w jednym paśmie (np. Γ) i barierą w innym (np. X)

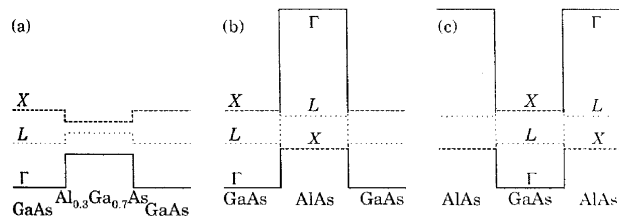


FIGURE 3.8. Barriers and wells in GaAs–Al_xGa_{1-x}As, showing the three lowest conduction bands. (a) Barrier of Al_{0.3}Ga_{0.7}As, where Γ is the lowest minimum throughout. (b) Barrier of AlAs, where X is the lowest minimum in the barrier. (c) Well of GaAs surrounded by AlAs.

2013-02-27

43