

Эффективная масса в гетероструктурах

1. *Метод Кона-Латтинжера.*
2. *Метод эффективной массы.*
3. *Типы гетероструктур.*

Теорема Блоха

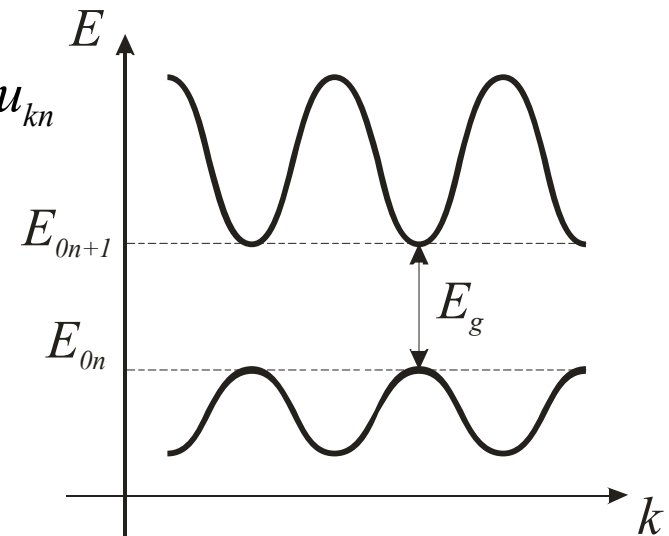
$$H\psi = \frac{p^2}{2m_0}\psi + U_{crystal}(\vec{r})\psi = E\psi \quad U_{crystal}(\vec{r} + \vec{a}) = U_{crystal}(\vec{r})$$

Теорема Блоха утверждает: $\psi = Ae^{ikr}u_{nk}(\vec{r}) = F(\vec{r})u_{nk}(\vec{r}) \quad u_{nk}(\vec{r} + \vec{a}) = u_{nk}(\vec{r})$

$F(\vec{r})$ - огибающая функция $u_{nk}(\vec{r})$ - блоховская функция

$$\frac{p^2}{2m_0}u_{kn} + \frac{\hbar\vec{p}\vec{k}}{m_0}u_{kn} + U_{crystal}(\vec{r})u_{kn} = \left(E_{kn} - \frac{\hbar^2k^2}{2m_0} \right) u_{kn}$$

$$\frac{p^2}{2m_0}u_{0n} + U_{crystal}(\vec{r})u_{0n} = \hat{H}_0u_{0n} = E_{0n}u_{0n}$$



Метод Кона-Латтинжера

$$\psi = \sum_n A_n \chi_{nk}(\vec{r}) = \sum_n A_n e^{ikr} u_{n0}(\vec{r}) \quad \sum_k \chi_{n'k}(\vec{r}) \chi_{nk}^*(\vec{r}) = \delta_{n'n}$$

$$\langle \chi_{nk} | H | \psi \rangle = E \langle \chi_{nk} | \psi \rangle \quad \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n'} \langle \chi_{nk} | \vec{p}\vec{k} | \chi_{n'k} \rangle A_{n'} + E_{n0} A_n = E A_n$$

В кристаллах с центральной симметрией: $\langle \chi_{nk} | \vec{p}\vec{k} | \chi_{nk} \rangle = 0$

Кроме того $\langle \chi_{nk} | \vec{p}\vec{k} | \chi_{n'k} \rangle \rightarrow 0$ при $|n - n'| \rightarrow \infty$

2-х зонная модель

kp-матрица \rightarrow

$$\begin{pmatrix} E_c & \frac{\hbar}{m_0} \langle \chi_{ck} | \vec{p}\vec{k} | \chi_{vk} \rangle \\ \frac{\hbar}{m_0} \langle \chi_{vk} | \vec{p}\vec{k} | \chi_{ck} \rangle & E_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_c \\ A_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A_c \\ A_v \end{pmatrix}$$

Аналогия с уравнением Дирака

В квантовой электродинамике Дирак, исходя из соображения инвариантности, уравнений относительно преобразования Лоренца вывел следующее уравнение электрона в свободном пространстве:

$$\begin{pmatrix} m_*c^2 & pc \\ pc & -m_*c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{-e} \\ A_{+e} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A_{-e} \\ A_{+e} \end{pmatrix}$$

Таким образом, постулирование скорости света как максимальной скорости электрона, привело к открытию позитрона, описывающегося функцией A_{+e}

следуя аналогии: $\frac{\hbar}{m_0} \langle \chi_{nk} | \vec{p} \vec{k} | \chi_{n'k} \rangle \leftrightarrow pc \Rightarrow \frac{1}{m_0} \langle \chi_{nk} | p_k | \chi_{n'k} \rangle = \frac{p_{knn'}}{m_0} = c_* \leftrightarrow c$

тогда, эффективная масса $m_* = \frac{m_0^2}{2p_{knn'}} E_g$

В физике полупроводников аналогом позитрона, является дырка, существование которой неизбежно приводит к наличию максимальной скорости электрона в зоне проводимости, что также выполняется и для дырки.

Данный вывод справедлив при $k \ll k_B$

Переход к классике

Следуя аналогии: $E = \sqrt{\hbar^2 k^2 c_*^2 + m_*^2 c_*^4} \approx m_* c_*^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*}$ при $\hbar k \ll m_* c_* = \frac{m_0 E_g}{P_{knn'}}$

Соответственно накладывается условие на потенциальную энергию $U \ll m_* c_*^2 = E_g$

Для получения правильного вида уравнения Шредингера в рамках приближения эффективной массы удобно положить: $E_c = 0$ $E_v = -E_g$ $E \ll E_g$ $\vec{k} = i\vec{\nabla}$

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{i\hbar(\vec{p}_{cv} \vec{\nabla})}{m_0} \\ \frac{i\hbar(\vec{p}_{cv} \vec{\nabla})}{m_0} & -E_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_c \\ A_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A_c \\ A_v \end{pmatrix}$$

Выражая A_v через A_c получаем:

$$\frac{i\hbar(\vec{p}_{cv} \vec{\nabla})}{m_0} \frac{1}{E_g} \frac{i\hbar(\vec{p}_{cv} \vec{\nabla})}{m_0} A_c = E A_c$$

Если спектр электронов в зоне проводимости изотропен уравнение Шредингера приобретает вид:

$$-\hbar^2 \vec{\nabla} \frac{1}{m_*(r)} \vec{\nabla} A_c + U(r) A_c = E A_c$$

Способы создания потенциала в кристалле

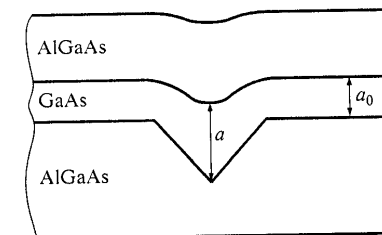
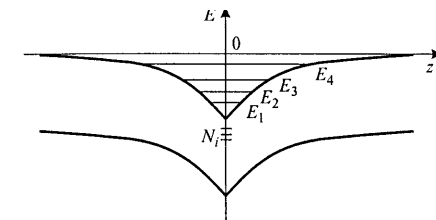
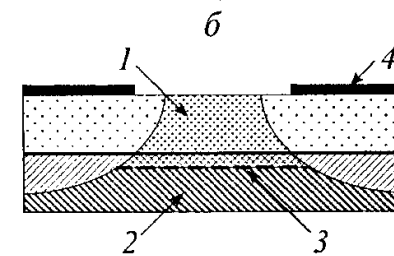
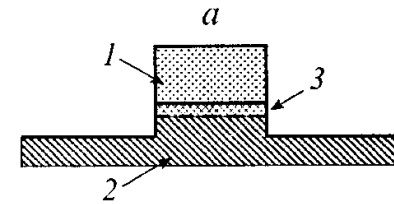
1. Внешний потенциал

а) Поверхностные наноструктуры.

Недостаток: плохо контролируемый поверхностный потенциал

б) Использование затворов

Недостаток: плавный потенциал



2. Внутренний потенциал

а) дефекты и легирование

Недостаток: плавный потенциал, низкая подвижность

б) Гетероструктуры

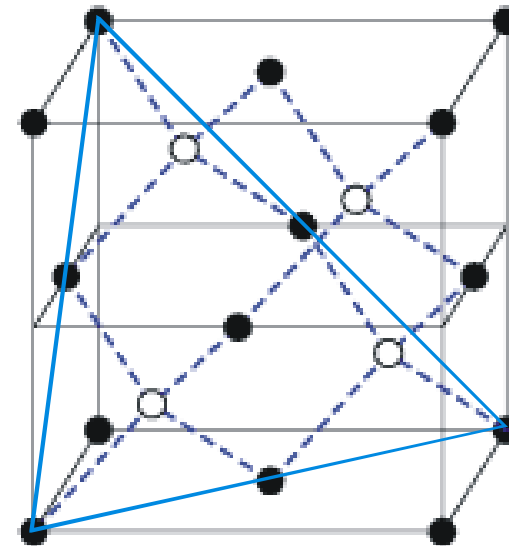
Возможно временный недостаток: необходимо легирование

Особенности получения гетероструктур

Наиболее воспроизводимые результаты были получены на полупроводниках со структурами типа алмаза и цинковой обманки. А наиболее значимые результаты были получены на гетероструктурах $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

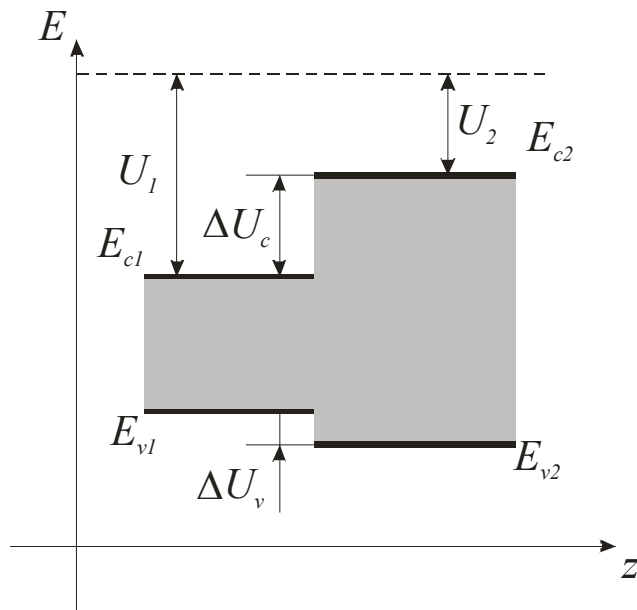
Успешный рост возможен:

1. При малом рассогласовании постоянных решеток;
2. При определенной ориентации поверхности с наименьшим дипольным моментом;
3. При химической нейтральности атомов;

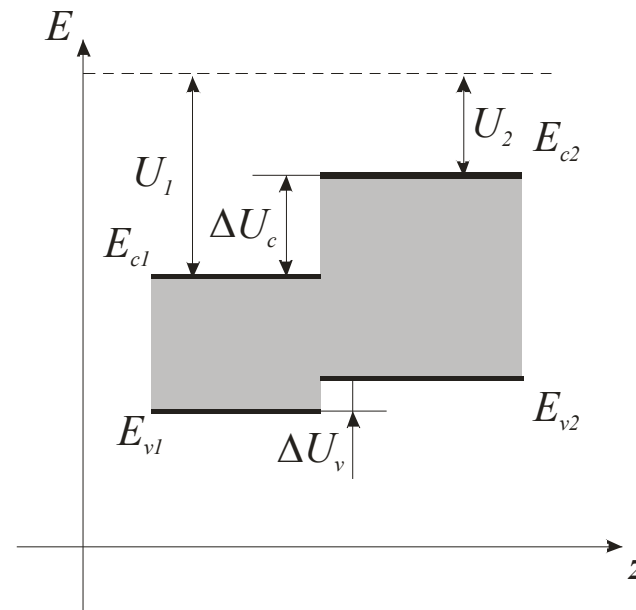


Разрывы зон и типы гетероструктур

I - тип



II - тип



Правило электронного сродства: $\Delta U_c = U_1 - U_2$

Правило справедливо в пренебрежении многочастичных эффектов и дипольного слоя на гетеропереходе.