Obtenció del paràmetres k·p 8 bandes a partir dels d'una banda de conducció i 4 bandes de forats

Josep Planelles

December 4, 2017

L'Hamiltonià kp de 8 bandes per al bulk (on no incloem l'acció de la resta de bandes sobre aquest Hamiltonià) el podem trobar e.g. en pag. 43 de Bastard.[1] La seua diagonalització en termes de l'autovalor $\epsilon(k) = \lambda(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$, on $\epsilon(0)$ representa la solució en el punt Γ(k=0), és a dir, $\epsilon(0) = 0, (-\epsilon_0), (-\epsilon_0 - \Delta)$ per a conducció, valencià i spplit-off, dóna lloc a l'equació:

$$\lambda(k)[\lambda(k) + \epsilon_0][\lambda(k) + \epsilon_0 + \Delta] = \hbar^2 k^2 P^2 [\lambda(k) + \epsilon_0 + 2\Delta/3] \tag{1}$$

Per determinar com la valència canvia la massa de l'electró de conducció, ens centrem en el fons de la banda de conducció $\epsilon(0) = 0$, cosa que implica $\lambda(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Substituïnt en l'eq. 1 trobem

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \epsilon_0][-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \epsilon_0 + \Delta] = \hbar^2 k^2 P^2 [-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \epsilon_0 + 2\Delta/3] \tag{2}$$

rebutjant els termes en una potencia de k superior a k^2 ens quedem amb:

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}[\epsilon_0][\epsilon_0 + \Delta] = \hbar^2 k^2 P^2 [\epsilon_0 + 2\Delta/3] \tag{3}$$

per tant,

$$\frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\epsilon_0} + \frac{2P^2}{3(\epsilon_0 + \Delta)} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{1}{m_e} = \frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\epsilon_0} + \frac{2P^2}{3(\epsilon_0 + \Delta)} \tag{4}$$

Anàlogament, per a $\lambda(k) = -\epsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ i $\lambda(k) = -\epsilon_0 - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$, trobem:

$$\frac{1}{m_{LH}} = \frac{1}{m_0} - \frac{4P^2}{3\epsilon_0} \tag{5}$$

$$\frac{1}{m_{SO}} = \frac{1}{m_0} - \frac{2P^2}{3(\epsilon_0 + \Delta)}, \tag{6}$$

mentre que el HH, com està desacoblat en aquest Hamitonià, no veu alterada la seua massa, $\frac{1}{m_{HH}} = \frac{1}{m_0}$.

Generalment, hom usa un model 1B per a conducció, on canvia la massa m_0 per la massa m_e resultat de la inclusió pertorbacional de la resta de bandes:

$$\frac{1}{m_e} = \frac{\alpha}{m_0} \tag{7}$$

i també 4B per a valència, on canvia la massa m_0 per les masses m_{HH}, m_{LH} resultat de la inclusió pertorbacional de la resta de bandes

$$\frac{1}{m_{HH}} = \frac{1}{m_0}[\gamma_1^L - 2\gamma_2^L] \tag{8}$$

$$\frac{1}{m_{LH}} = \frac{1}{m_0}[\gamma_1^L + 2\gamma_2^L] \tag{9}$$

Si considerem que γ_i^L, $i = 1, 2$, és suma de la contribució de la conducció més la resta de bandes que anomenem remotes, escrivim $\gamma_i^L = \gamma_i^R + \gamma_i^{CV}$, on R representa interacció amb les bandes remotes i CV entre conducció i valència. Aleshores,

$$
\begin{aligned}
\gamma_1^L + 2\gamma_2^L &= (\gamma_1^R + 2\gamma_2^R) + (\gamma_1^{CV} + 2\gamma_2^{CV}) && (10)\\
\gamma_1^L - 2\gamma_2^L &= (\gamma_1^R - 2\gamma_2^R) + (\gamma_1^{CV} - 2\gamma_2^{CV}) && (11)
\end{aligned}
$$

Just adés havíem vist que el HH no alterava la seua massa per interacció amb la conducció:

$$\gamma_1^{CV} - 2\gamma_2^{CV} = 0 \tag{12}$$

mentre que el LH si:

$$\gamma_1^{CV} + 2\gamma_2^{CV} = -\frac{4P^2}{3\epsilon_0} = -\frac{2E_p}{3E_g} \tag{13}$$

on hem emprat que $E_p = 2m_0P^2$ i $E_g = \epsilon_0$. De les dues equacions anteriors trobem que

$$
\begin{aligned}
\gamma_1^R &= \gamma_1^L - \gamma_1^{CV} = \gamma_1^L + \frac{E_p}{3E_g} && (14)\\
\gamma_2^R &= \gamma_2^L - \gamma_2^{CV} = \gamma_2^L + \frac{E_p}{6E_g} && (15)
\end{aligned}
$$

Anàlogament, per a la conducció, si considerem que α és suma de la interacció de la conducció amb la valència més la interacció amb la resta de bandes (remotes) tenim que:

$$\alpha \left[= \frac{m_0}{m_e}\right] = \alpha^R + \alpha^{CV} \tag{16}$$

on hem calculada adés que $\alpha^{CV} = \frac{2E_p}{3E_g} + \frac{2E_p}{3(E_g+\Delta)}$. Per tant,

$$\alpha^R = \frac{m_0}{m_e} - \frac{2E_p}{3E_g} - \frac{2E_p}{3(E_g+\Delta)} = \frac{m_0}{m_e} - \frac{E_p}{3}\frac{3E_g+2\Delta}{E_g(E_g+\Delta)} \tag{17}$$

0.1 Checking amb dades de Pokatilov[3]

Parameters	GaAs	AlAs	InAs
$m_c(m_0)$	0.0665 [a]	0.150 [a]	0.02226 [b]
γ_1^L	7.10 [c]	3.76 [c]	19.67 [a]
γ_2^L	2.02 [c]	0.90 [c]	8.37 [a]
γ_3^L	2.91 [c]	1.42 [c]	9.29 [a]
E_p(eV)	28.0 [d]	21.1 [a]	22.2 [a]
E_g(eV)	1.519 [a]	3.130 [a]	0.418 [a]
Δ(eV)	0.341 [a]	0.275 [a]	0.380 [a]
E_v(eV)	0	−0.532 [c]	0.186 [e]
α	−2.27	0.11	0.24
γ_1	0.96	1.51	1.97
γ	−0.52	0.09	0.07
χ	−1.52	−0.69	−0.87

```
ClearAll["Global`*"]

(*GaAs*) mc = 0.0665; g1L = 7.1; g2L = 2.02; g3L = 2.91;
g = (2 * g2L + 3 g3L) / 5; Ep = 28; Eg = 1.519; del = 0.341;

Print["alp = ", Solve[1 / mc == alp + Ep/3 (2/Eg + 1/(Eg + del)), alp][[1, 1, 2]],
  "  g1 = ", g1L - Ep/(3 Eg), "  g = ", g - Ep/(6 Eg)]

alp = -2.26911  g1 = 0.955607  g = -0.518197
```

```
(*AlAs*) mc = 0.15; g1L = 3.76; g2L = 0.9; g3L = 1.42;
g = (2 * g2L + 3 g3L) / 5; Ep = 21.1; Eg = 3.13; del = 0.275;

Print["alp = ", Solve[1 / mc == alp + Ep/3 (2/Eg + 1/(Eg + del)), alp][[1, 1, 2]],
  "  g1 = ", g1L - Ep/(3 Eg), "  g = ", g - Ep/(6 Eg)]

alp = 0.106934  g1 = 1.51293  g = 0.0884643

(*InAs*)mc = 0.02226; g1L = 19.67; g2L = 8.37; g3L = 9.29;
g = (2 * g2L + 3 g3L) / 5; Ep = 22.2; Eg = 0.418; del = 0.38;

Print["alp = ", Solve[1 / mc == alp + Ep/3 (2/Eg + 1/(Eg + del)), alp][[1, 1, 2]],
  "  g1 = ", g1L - Ep/(3 Eg), "  g = ", g - Ep/(6 Eg)]

alp = 0.243748  g1 = 1.96665  g = 0.0703254
```

References

[1] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* Les Editions de Physique, Les Ulis Cedex, 1988.

[2] Al. L. Efros and M. Rosen, Phys. Rev. B 58 (1998) 7120.

[3] E. P. Pokatilov, V. A. Fonoberov, V. M. Fomin and J. T. Devreese, Phys. Rev. B 64 (2001) 245328.