

4. Metoda $k.p$

Rovnice pro periodickou část Blochovy funkce,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \vec{k} \cdot \nabla + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{k},n}(\vec{r}) = E_{\vec{k},n} u_{\vec{k},n}(\vec{r}), \quad (4.1)$$

obsahuje v Hamiltoniánu člen

$$\frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}. \quad (4.2)$$

Ten je malý v blízkosti $\mathbf{k} = 0$ a budeme ho považovat za poruchu. Předpokládejme, že nedegenerovaný n -tý pás zde má extrém s hodnotou energie $E_{0,n}$; poruchový počet dává

$$u_{\vec{k},n} = u_{0,n} + \frac{\hbar}{m} \sum_{n \neq n'} \frac{\langle u_{0,n} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{0,n'} \rangle}{E_{0,n} - E_{0,n'}} u_{0,n'} \quad (4.3)$$

a

$$E_{\vec{k},n} = E_{0,n} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle u_{0,n} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{0,n'} \rangle|^2}{E_{0,n} - E_{0,n'}}. \quad (4.4)$$

Parabolickou disperzní relaci (4.4) obvykle zapisujeme ve tvaru

$$E_{\vec{k},n} = E_{0,n} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (4.5)$$

kde m^* je efektivní hmotnost n -tého pásu:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2 k^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle u_{0,n} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{0,n'} \rangle|^2}{E_{0,n} - E_{0,n'}} . \quad (4.6)$$

Po rozboru symetrie funkcí u pro strukturu ZnS s bodovou grupou T_d zůstane v sumě (4.6) jediný sčítanec pro efektivní hmotnost dna vodivostního pásu (stav Γ_{1c}), spojený s nejbližším níže ležícím (valenčním, trojnásobně degenerovaným) stavem Γ_{4v} . Odstup energií obou stavů je přímý gap E_0 , tedy namísto (4.6) máme

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{2 |\vec{k} \cdot \langle \Gamma_{1c} | \vec{p} | \Gamma_{4v} \rangle|^2}{m^2 k^2 E_0} . \quad (4.7)$$

Dimenze reprezentace Γ_4 je tři a její báze funkce označujeme jako $|x\rangle$, $|y\rangle$ a $|z\rangle$. Všechny tři maticové prvky operátoru hybnosti ve (4.7) jsou vzhledem k symetrii stejné:

$$\langle \Gamma_{1c} | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | x \rangle = \langle \Gamma_{1c} | -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} | y \rangle = \langle \Gamma_{1c} | -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} | z \rangle = iP . \quad (4.8)$$

Vztah (4.7) se tedy dále zjednoduší na

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{2P^2}{m^2 E_0} , \quad \frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2P^2}{mE_0} . \quad (4.9)$$

Pro praktické využití tohoto výsledku zbývá už jen odhadnout velikost P , nebo lépe veličiny $2P^2/m$ s rozměrem energie. Ta je pro většinu zajímavých polovodičů IV, III-V a II-VI zhruba stejná (~ 20 eV). Zjistíme tedy, že efektivní hmotnosti vodivostních elektronů jsou nejméně o řád menší než v prázdném prostoru, a zmenšují se s klesajícím gapem.

	Ge	GaAs	InP	InAs	GaSb	InSb	CdTe
E_0 [eV]	0.89	1.55	1.34	0.45	0.81	0.24	1.59
m_c^*/m (exp)	0.041	0.067	0.073	0.026	0.047	0.015	0.11
m_c^*/m ((2.44))	0.04	0.078	0.067	0.023	0.04	0.012	0.08

Gapy a efektivní hmotnosti, z Yu-Cardona.

Označení reprezentací bodových grup

Chemická notace (Mulliken, 1933) běžná v molekulární fyzice nebo v mřížové dynamice.

Používá symboly

A a B pro jednorozměrné reprezentace (B tehdy, je-li lichá při nejmenší rotaci kolem hlavní osy),

E pro dvojrozměrné reprezentace,

T, U, V, W pro reprezentace dimenze 3, 4, 5, 6.

Fyzikální (Bethe, 1929; Koster, Dimmock, Wheeler and Statz, 1963):

$\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$; v novější literatuře o kondenzovaných látkách.

Alternativní (BSW, Bouckaert, Smoluchowski and Wigner, 1935); dosti často.

Příklad pro T_d :

Mulliken	KDWS	BSW
A_1	Γ_1	Γ_1
A_2	Γ_2	Γ_2
E	Γ_3	Γ_{12}
T_1	Γ_4	Γ_{15}
T_2	Γ_5	Γ_{25}

Tabulka charakterů ireducibilních reprezentací grupy T_d a jejich bázové funkce.

	$\{E\}$	$\{3C_2\}$	$\{6S_4\}$	$\{6\sigma\}$	$\{8C_3\}$	Basis functions
A_1	1	1	1	1	1	xyz
A_2	1	1	-1	-1	1	$x^4(y^2 - z^2) + y^4(z^2 - x^2) + z^4(x^2 - y^2)$
E	2	2	0	0	-1	$\{(x^2 - y^2), z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)\}$
T_1	3	-1	1	-1	0	$\{x(y^2 - z^2), y(z^2 - x^2), z(x^2 - y^2)\}$
T_2	3	-1	-1	1	0	$\{x, y, z\}$