4. Metoda *k.p*

Rovnice pro periodickou část Blochovy funkce,

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

obsahuje v Hamiltoniánu člen

$$\frac{\hbar}{m}\vec{k}\cdot\vec{p} \ . \tag{4.2}$$

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

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

a

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

Parabolickou disperzní relaci (4.4) obvykle zapisujeme ve tvaru

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

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

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

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

$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{m}+\frac{2\left|\vec{k}\cdot\langle\Gamma_{1c}\,|\,\vec{p}\,|\Gamma_{4v}\rangle\right|^2}{m^2k^2E_0}\ . \tag{4.7}$$

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

$$\left\langle\Gamma_{1c}\left|-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right|x\right\rangle=\left\langle\Gamma_{1c}\left|-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right|y\right\rangle=\left\langle\Gamma_{1c}\left|-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right|z\right\rangle=iP\ . \tag{4.8}$$

Vztah (4.7) se tedy dále zjednoduší na

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

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). Zjišťujeme 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):
Γ_1, Γ_2, Γ_3,... ; 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	$\{x, y, z\}$