

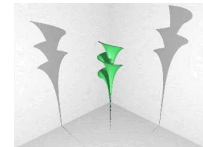
Multi-band models for charge transport in semiconductor devices



Luigi Barletti

Università di Firenze

Dipartimento di Matematica "Ulisse Dini"



Approssimazione di massa efficace

La maggior parte dei modelli di trasporto quantistico in semiconduttori utilizza la cosiddetta *approssimazione di massa efficace*.

Approssimazione di massa efficace

La maggior parte dei modelli di trasporto quantistico in semiconduttori utilizza la cosiddetta *approssimazione di massa efficace*.

Questa consiste nel sostituire l'Hamiltoniana periodica

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{per}} + V$$

Approssimazione di massa efficace

La maggior parte dei modelli di trasporto quantistico in semiconduttori utilizza la cosiddetta *approssimazione di massa efficace*.

Questa consiste nel sostituire l'Hamiltoniana periodica

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{per}} + V$$

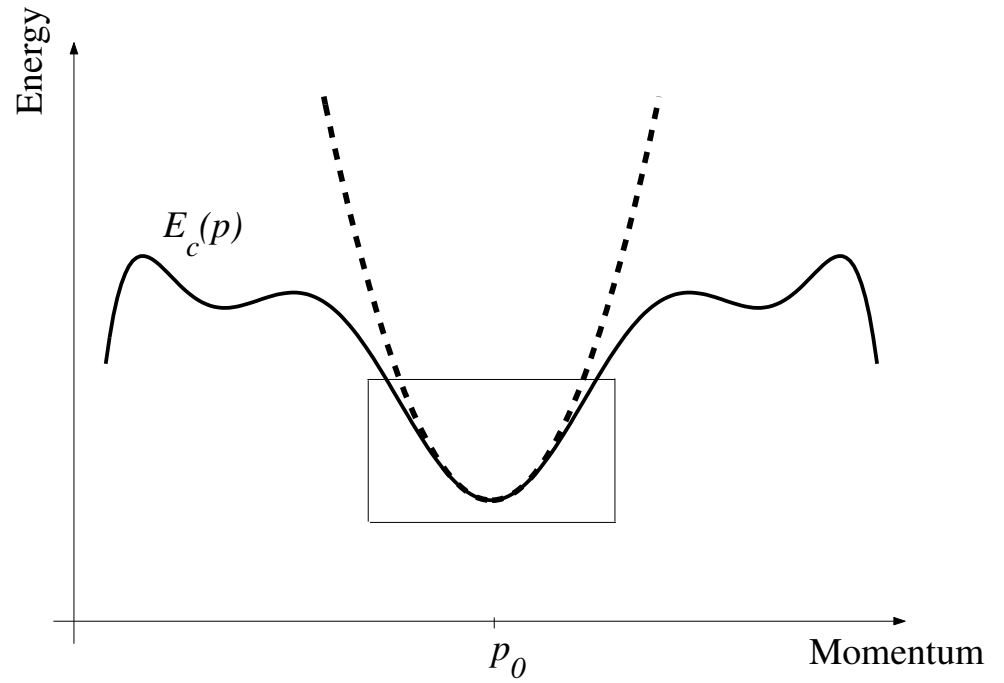
con la seguente:

$$H_{\text{me}} = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla^T \mathbf{M}^{-1} \nabla + V$$

Approssimazione di massa efficace

Il tensore di massa efficace M nasce da un'approssimazione parabolica della banda di conduzione:

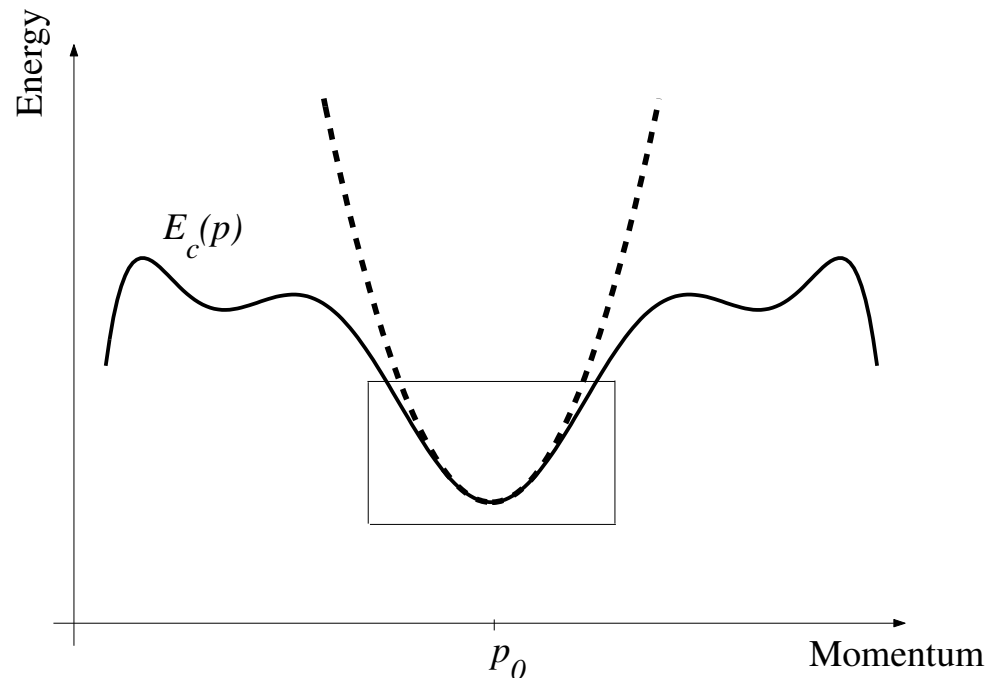
$$M^{-1} = \text{Hess}(E_c)|_{p_0}$$



Approssimazione di massa efficace

Il tensore di massa efficace M nasce da un'approssimazione parabolica della banda di conduzione:

$$M^{-1} = \text{Hess}(E_c)|_{p_0}$$

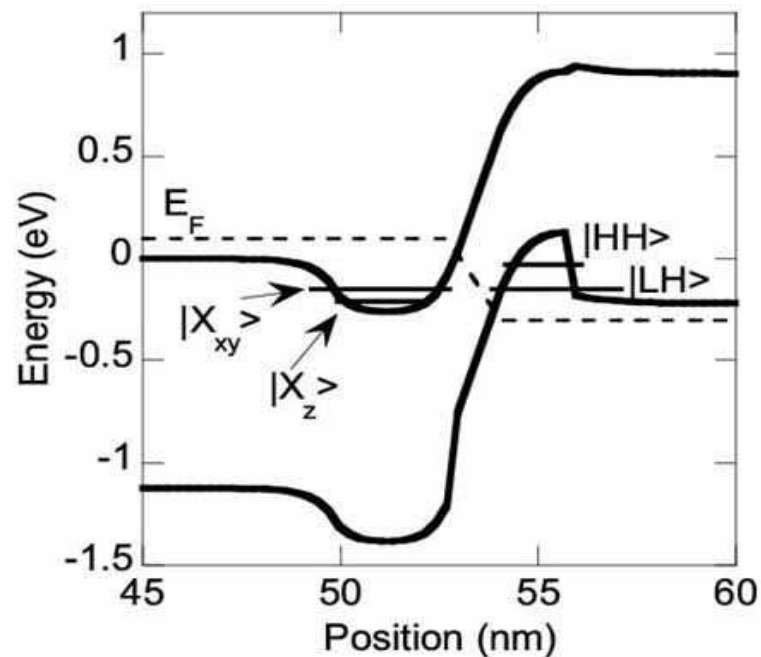


- In questa approssimazione l'elettrone/lacuna “vede” soltanto la banda di conduzione/valenza.

Dispositivi “interbanda”

L'approssimazione di massa efficace è incapace di descrivere il *tunneling interbanda*, effetto che è alla base del funzionamento di dispositivi di ultima generazione.

Diodo interbanda realizzato da P. Berger's (Ohio State University, USA)



Modelli multi-banda

Dobbiamo perciò andare oltre l'approssimazione di massa efficace e considerare modelli in cui gli elettroni vedono la disponibilità di almeno due bande di energia.

Modelli multi-banda

Dobbiamo perciò andare oltre l'approssimazione di massa efficace e considerare modelli in cui gli elettroni vedono la disponibilità di almeno due bande di energia.

1 - Modello di Kane a 2 bande:

$$H_{\text{Kane}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_g + V & -\frac{\hbar^2}{m} K \cdot \nabla \\ \frac{\hbar^2}{m} K \cdot \nabla & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V \end{pmatrix}$$

E. Kane, *J. Phys. Chem. Solids*, 1959

Modelli multi-banda

Dobbiamo perciò andare oltre l'approssimazione di massa efficace e considerare modelli in cui gli elettroni vedono la disponibilità di almeno due bande di energia.

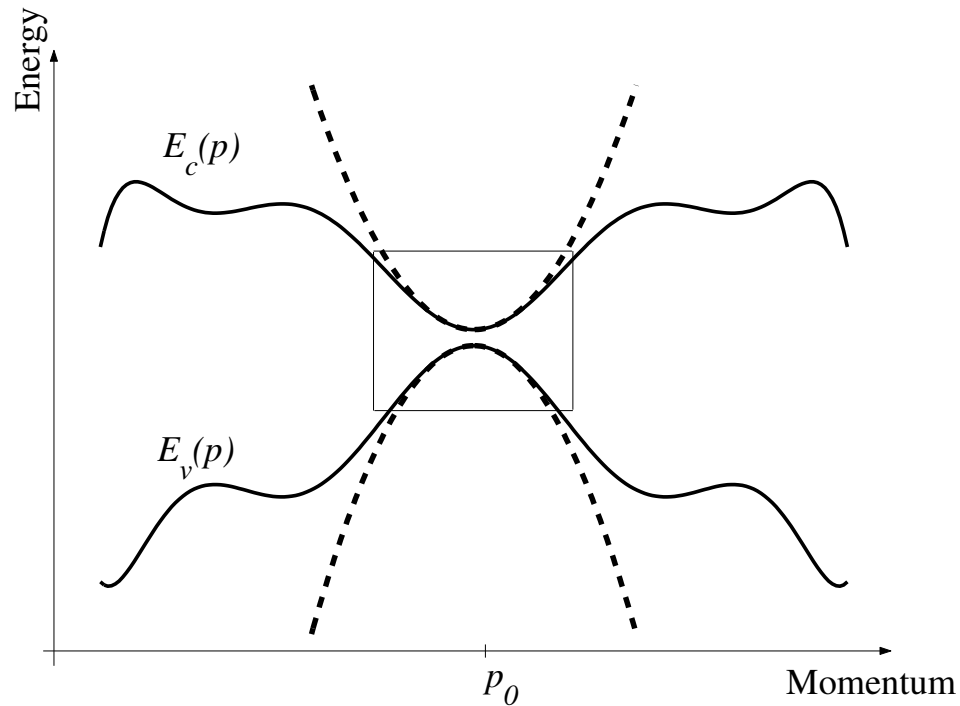
2 - Modello M-M di ordine 1 a 2 bande:

$$H_{M-M} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \Delta + E_g + V & \frac{\hbar^2}{mE_g} K \cdot \nabla V \\ \frac{\hbar^2}{mE_g} K \cdot \nabla V & -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \Delta + V \end{pmatrix}$$

O. Morandi & M. Modugno, 2004 (to appear).

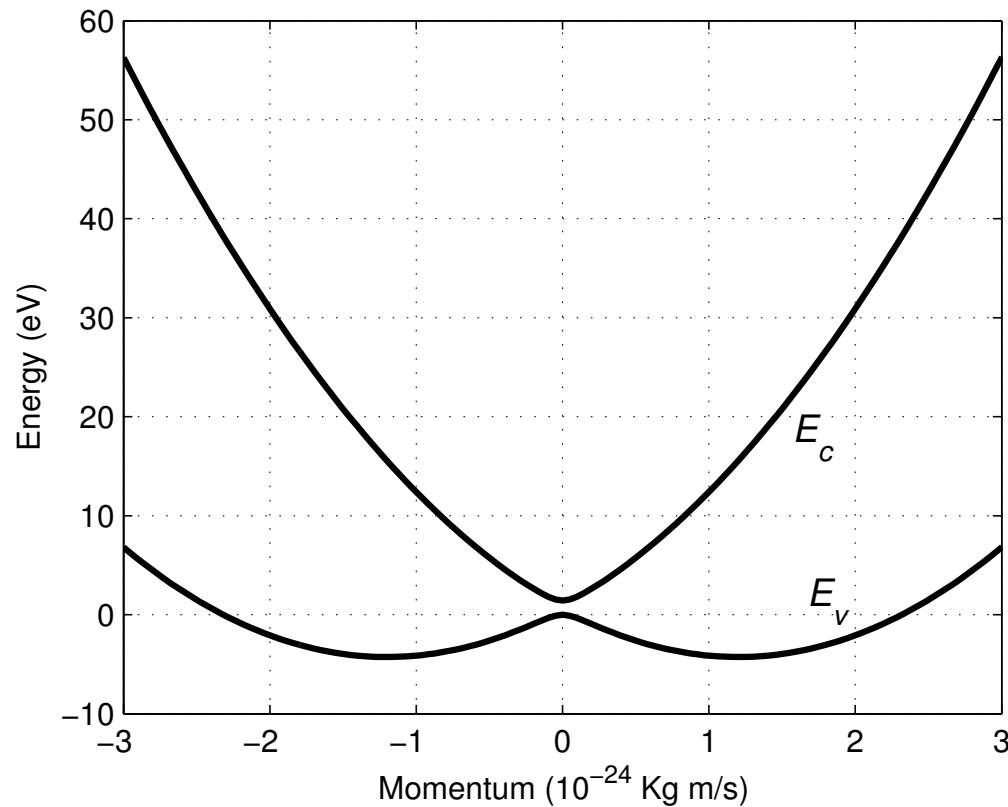
Modelli multi-banda

Modelli di questo tipo forniscono un'approssimazione della vera relazione di dispersione:



Modelli multi-banda

Ecco ad esempio la relazione di dispersione per il GaAs calcolata con l'Hamiltoniana di Kane:



Vogliamo ora introdurre un
formalismo cinetico (di Wigner)
per i modelli a due bande

Trasformazione di Wigner

È una trasformazione unitaria di $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ in sé

$$w(r, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \rho\left(r + \frac{\xi}{2}, r - \frac{\xi}{2}\right) e^{-i\xi \cdot p/\hbar} d\xi$$

che permette una *formulazione quasi-cinetica* della meccanica quantistica:

$$\text{Tr}(\rho A_\gamma) = \int_{\mathbb{R}^6} \gamma(r, p) w(r, p) dr dp$$

E. Wigner, *Phys. Rev.*, 1932

Funzioni di Wigner a 2 bande

Introduciamo una *matrice di Wigner*:

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{21} \\ w_{12} & w_{22} \end{pmatrix}$$

con

$$w_{ij}(r, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{ij} \left(r + \frac{\xi}{2}, r - \frac{\xi}{2} \right) e^{-i\xi \cdot p/\hbar} d\xi$$

Funzioni di Wigner a 2 bande

Introduciamo una *matrice di Wigner*:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{21} \\ w_{12} & w_{22} \end{pmatrix}$$

con

$$w_{ij}(r, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{ij} \left(r + \frac{\xi}{2}, r - \frac{\xi}{2} \right) e^{-i\xi \cdot p/\hbar} d\xi$$

Per (r, p) fissati, la matrice di Wigner è hermitiana:

$$\mathbf{W}^*(r, p) = \mathbf{W}(r, p)$$

Funzioni di Wigner a 2 bande

Ricordiamo che le matrici di Pauli

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

sono una **base ortogonale** dello spazio vettoriale delle matrici hermitiane 2×2 su \mathbb{R} :

$$\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}$$

Funzioni di Wigner a 2 bande

Perciò possiamo decomporre la matrice di Wigner secondo questa base e scrivere

$$W = w_0 \sigma_0 + w_1 \sigma_1 + w_2 \sigma_2 + w_3 \sigma_3 ,$$

dove le quattro funzioni $w_k = w_k(r, p)$ sono *reali*.

Funzioni di Wigner a 2 bande

Posto

$$\langle w \rangle(r) = \int w(r, p) dp,$$

risulta che

$$\langle w_0 \rangle^2 = \langle w_1 \rangle^2 + \langle w_2 \rangle^2 + \langle w_3 \rangle^2, \quad \text{per uno stato } \textit{puro},$$

$$\langle w_0 \rangle^2 \geq \langle w_1 \rangle^2 + \langle w_2 \rangle^2 + \langle w_3 \rangle^2, \quad \text{per uno stato } \textit{misto},$$

Funzioni di Wigner a 2 bande

Posto

$$\langle w \rangle(r) = \int w(r, p) dp,$$

risulta che

$$\langle w_0 \rangle^2 = \langle w_1 \rangle^2 + \langle w_2 \rangle^2 + \langle w_3 \rangle^2, \quad \text{per uno stato } \textit{puro},$$

$$\langle w_0 \rangle^2 \geq \langle w_1 \rangle^2 + \langle w_2 \rangle^2 + \langle w_3 \rangle^2, \quad \text{per uno stato } \textit{misto},$$

analogamente a quanto accade con i **parametri di Stokes** usati per descrivere un fascio di luce polarizzata!

Interpretazione

Se usiamo questo formalismo per descrivere una particella con spin, le funzioni w_k hanno un significato fisico chiaro.

Poiché, infatti, risulta

$$\text{Tr}(\rho\sigma_i) = 2 \int_{\mathbb{R}^6} w_i(r, p) dr dp,$$

si ha, per $i = 1, 2, 3$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} w_i(r, p) dr dp = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \text{valore atteso dell'indice} \\ \text{di spin nella direzione } i \end{array} \right\}$$

Hamiltoniana $k \cdot p$

Consideriamo il caso dell'Hamiltoniana $k \cdot p$ a due bande:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta + g + V & -K \cdot \nabla \\ K \cdot \nabla & -\frac{1}{2}\Delta - g + V \end{pmatrix}$$

(dove si è posto $\hbar = m = 1$ e $g = E_g/2$).

Hamiltoniana $k \cdot p$

Consideriamo il caso dell'Hamiltoniana $k \cdot p$ a due bande:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta + g + V & -K \cdot \nabla \\ K \cdot \nabla & -\frac{1}{2}\Delta - g + V \end{pmatrix}$$

(dove si è posto $\hbar = m = 1$ e $g = E_g/2$).

Usando le matrici di Pauli si può scrivere:

$$H = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V\right) \sigma_0 - iK \cdot \nabla \sigma_2 + g \sigma_3$$

Hamiltoniana $k \cdot p$

Se $V = 0$, in trasformata di Fourier si ha

$$\hat{H}(p) = \frac{1}{2} p^2 \sigma_0 + K \cdot p \sigma_2 + g \sigma_3$$

Hamiltoniana $k \cdot p$

Se $V = 0$, in trasformata di Fourier si ha

$$\hat{H}(p) = \frac{1}{2} p^2 \sigma_0 + K \cdot p \sigma_2 + g \sigma_3$$

da cui si ricava la relazione di dispersione

$$E_c(p) = \frac{1}{2} p^2 + \sqrt{(K \cdot p)^2 + g^2}$$

$$E_v(p) = \frac{1}{2} p^2 - \sqrt{(K \cdot p)^2 + g^2}$$

Proiezioni sulle bande

Scrivendo esplicitamente gli autovettori relativi a E_c ed E_v si possono ricavare:

Proiezioni sulle bande

Scrivendo esplicitamente gli autovettori relativi a E_c ed E_v si possono ricavare:

- le proiezioni sulle due bande, $\Pi_c(p)$ e $\Pi_v(p)$;

Proiezioni sulle bande

Scrivendo esplicitamente gli autovettori relativi a E_c ed E_v si possono ricavare:

- le proiezioni sulle due bande, $\Pi_c(p)$ e $\Pi_v(p)$;
- l'operatore "indice di banda" $\Pi_c(p) - \Pi_v(p)$;

Proiezioni sulle bande

Scrivendo esplicitamente gli autovettori relativi a E_c ed E_v si possono ricavare:

- le proiezioni sulle due bande, $\Pi_c(p)$ e $\Pi_v(p)$;
- l'operatore "indice di banda" $\Pi_c(p) - \Pi_v(p)$;

e si possono esprimere i loro valori attesi e densità in termini delle funzioni di Wigner w_k .

Indice di banda

In particolare, l'operatore *indice di banda* ha la seguente espressione:

$$\Pi_c(p) - \Pi_v(p) = \vec{n}(p) \cdot \vec{\sigma}$$

dove $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ e

$$\vec{n}(p) = \frac{\vec{B}(p)}{\|\vec{B}(p)\|}, \quad \vec{B}(p) = (0, K \cdot p, g)$$

Indice di banda

In particolare, l'operatore *indice di banda* ha la seguente espressione:

$$\Pi_c(p) - \Pi_v(p) = \vec{n}(p) \cdot \vec{\sigma}$$

dove $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ e

$$\vec{n}(p) = \frac{\vec{B}(p)}{\|\vec{B}(p)\|}, \quad \vec{B}(p) = (0, K \cdot p, g)$$

I suoi autovalori sono:

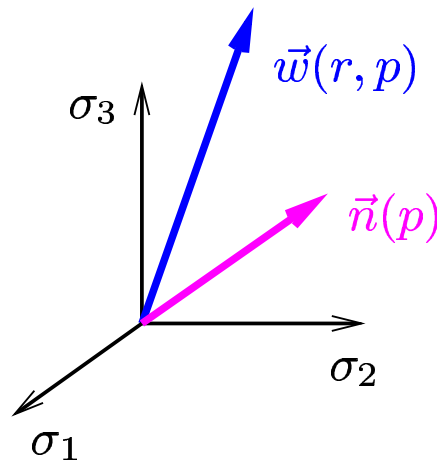
- 1, se l'elettrone è in **banda di conduzione**,
- 1, se l'elettrone è in **banda di valenza**.

Indice di banda

In termini delle funzioni di Wigner, posto $\vec{w} = (w_1, w_2, w_3)$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} \vec{n}(p) \cdot \vec{w}(r, p) dr dp = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \text{valore atteso} \\ \text{dell'indice di banda} \end{array} \right\}$$

Dunque, per r e p fissati, la “densità di banda” è data dalla proiezione di $\vec{w}(r, p)$ sulla direzione $\vec{n}(p)$:



Dinamica

La dinamica delle funzioni w_k è data dal seguente sistema di equazioni:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\partial_t + p \cdot \nabla_r + \Theta_V) w_0 = -K \cdot \nabla_r w_2 \\ (\partial_t + p \cdot \nabla_r + \Theta_V) w_1 = -2g w_2 + 2K \cdot p w_3 \\ (\partial_t + p \cdot \nabla_r + \Theta_V) w_2 = -K \cdot \nabla_r w_0 + 2g w_1 \\ (\partial_t + p \cdot \nabla_r + \Theta_V) w_3 = -2K \cdot p w_1 \end{array} \right.$$

dove $\Theta_V := iV(r + \frac{i}{2}\nabla_p) - iV(r - \frac{i}{2}\nabla_p)$

Dinamica

Seguiamo l'evoluzione libera ($V = 0$) di un pacchetto d'onde gaussiano che inizialmente si trova in uno stato misto in cui il valore atteso dell'indice di banda è 0:

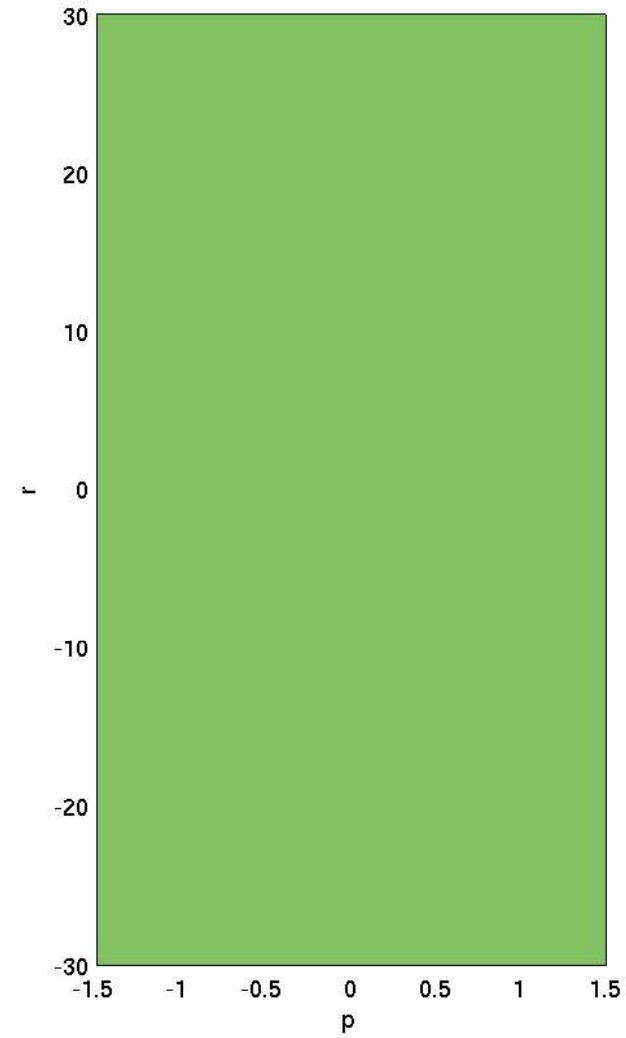
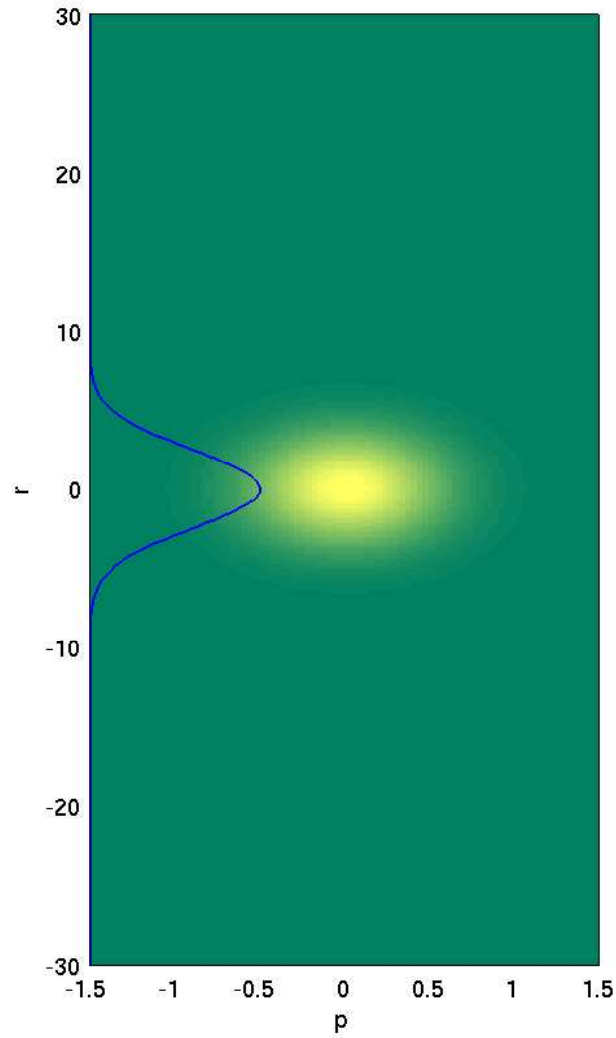
$$w_0(r, p, t = 0) = \frac{1}{2\pi\Delta_r\Delta_p} \exp\left(-\frac{r^2}{2\Delta_r^2} - \frac{p^2}{2\Delta_p^2}\right)$$

(con $\Delta_r\Delta_p \geq \frac{1}{2}$)

$$w_1(r, p, t = 0) = w_2(r, p, t = 0) = w_3(r, p, t = 0) = 0$$

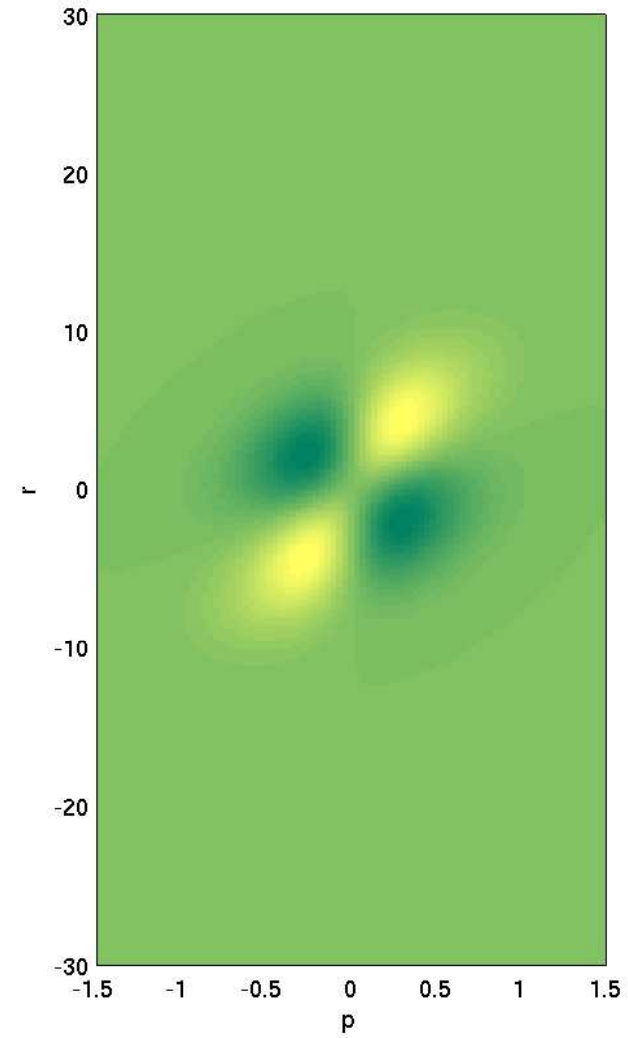
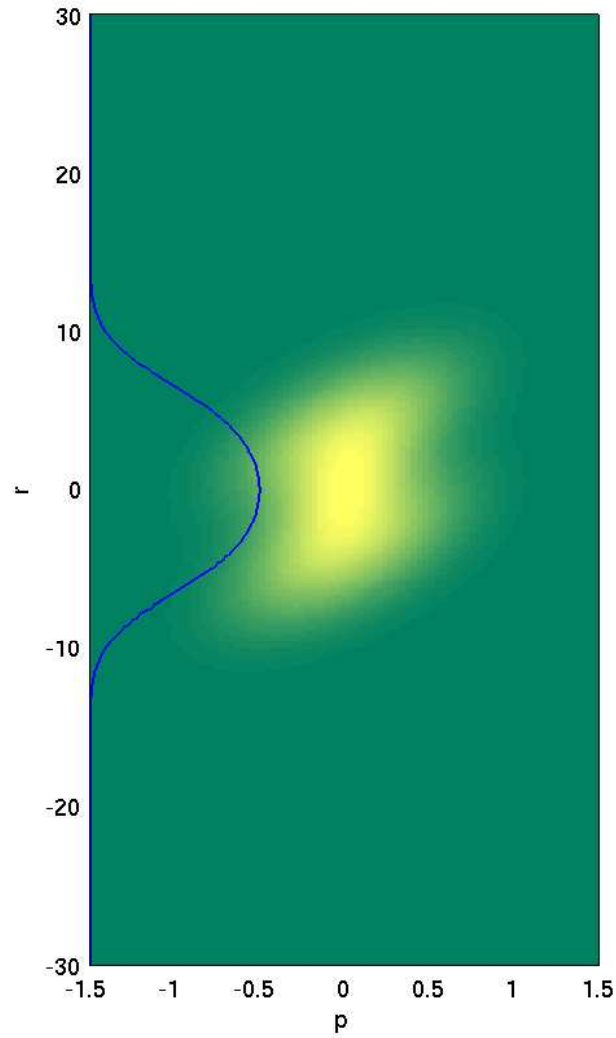
Dinamica

$t = 0$



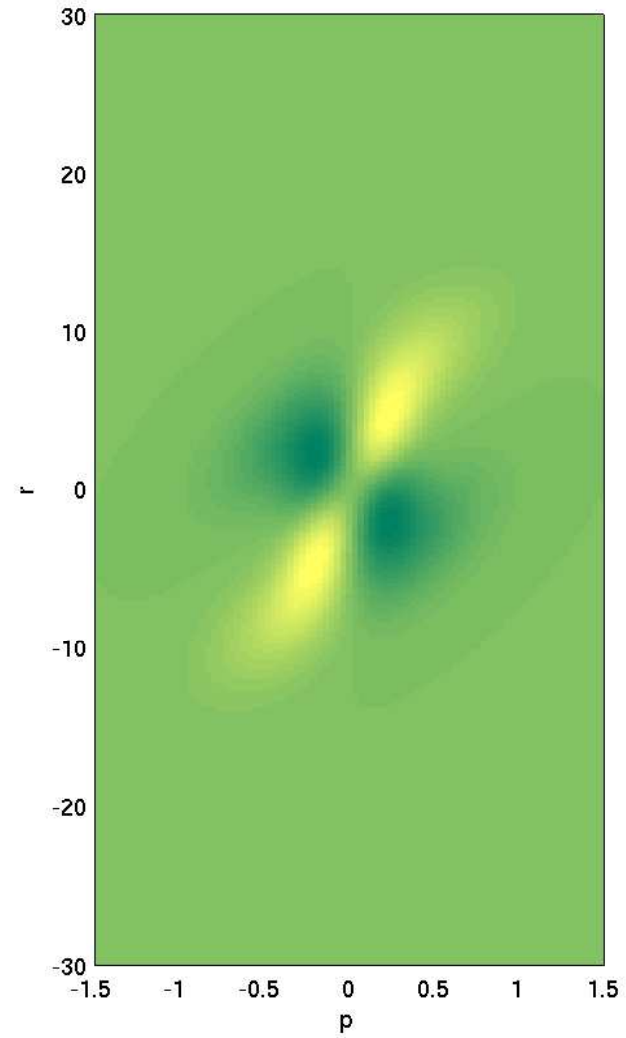
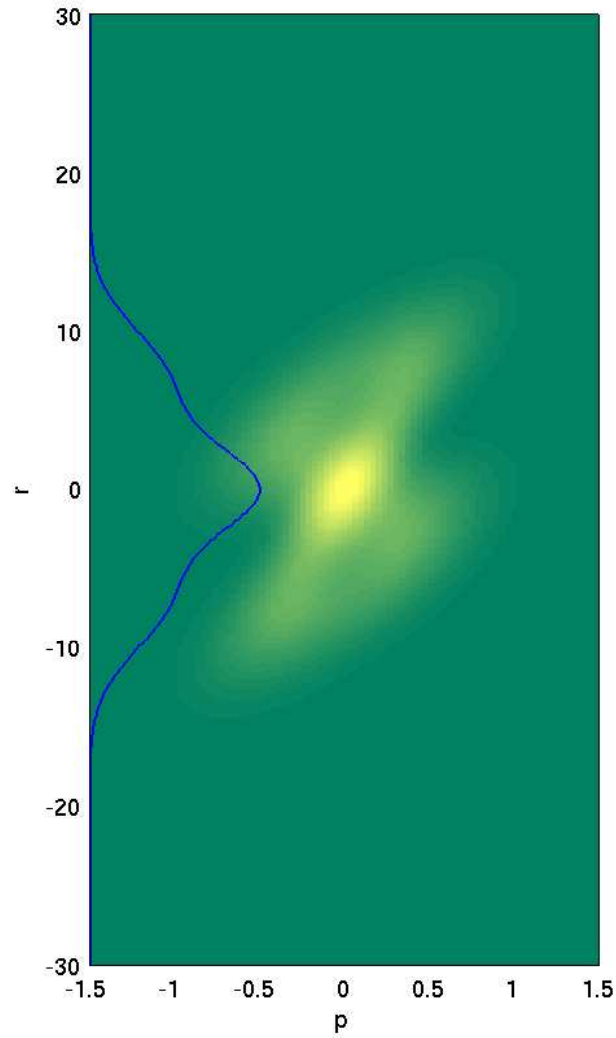
Dinamica

$t = 4$



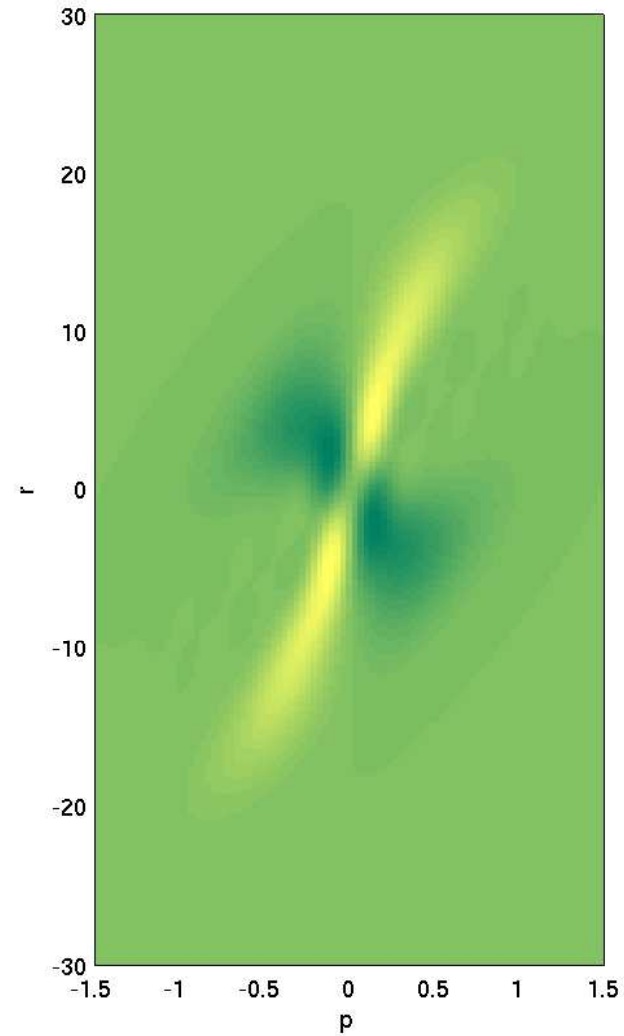
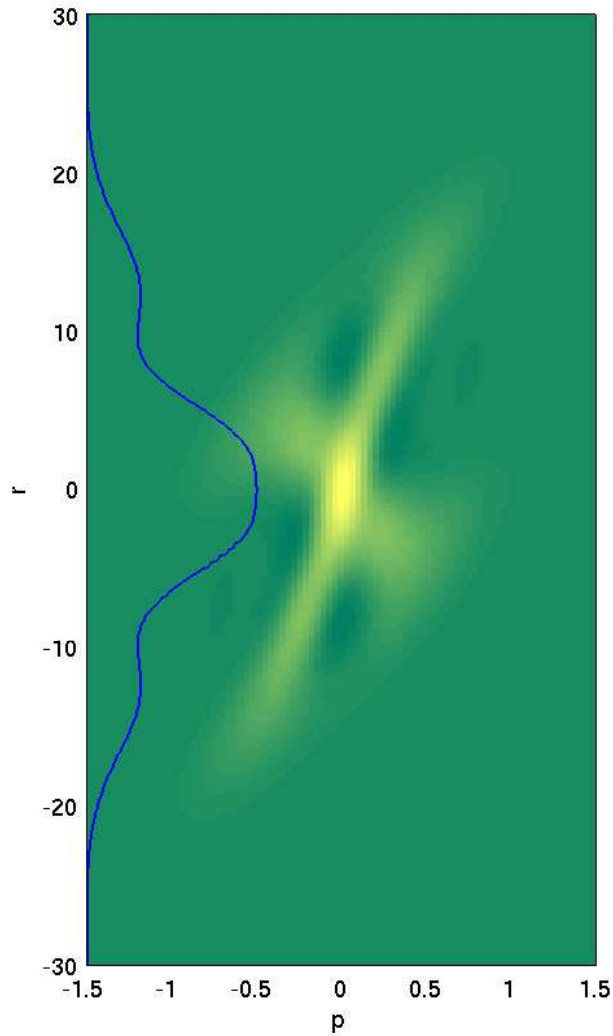
Dinamica

$t = 6$



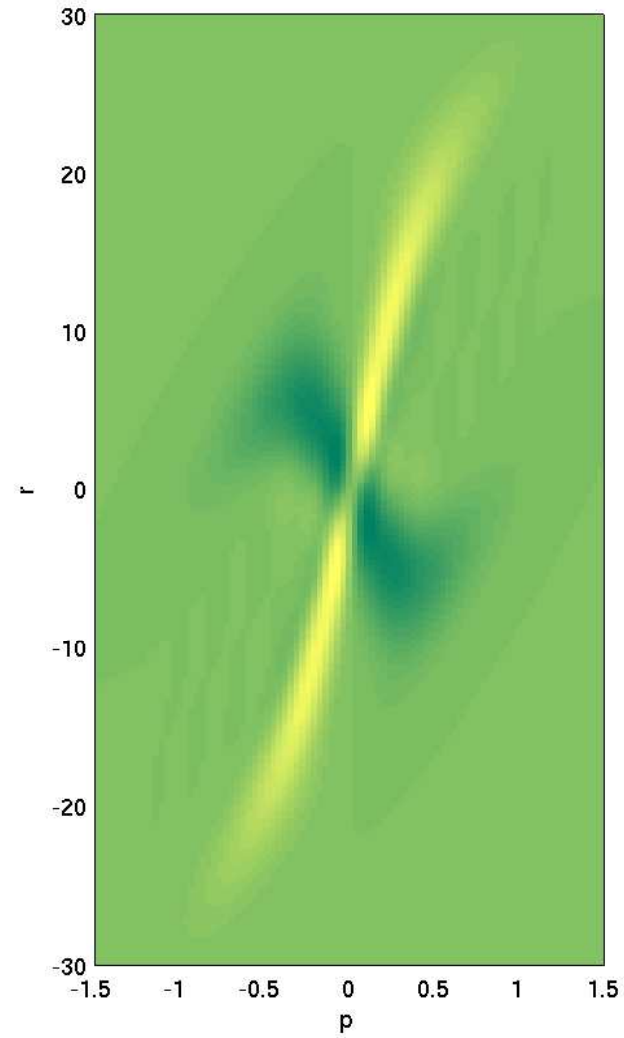
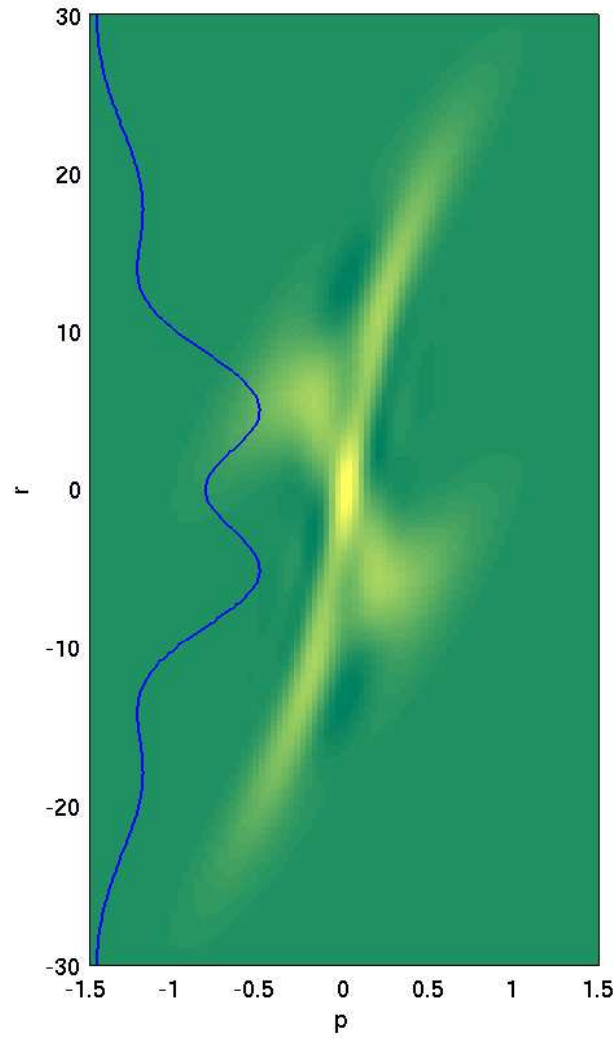
Dinamica

$t = 10$



Dinamica

$t = 14$



Dinamica

La spiegazione di questo comportamento risiede nel fatto che la posizione media dell'elettrone in banda di **conduzione** soddisfa

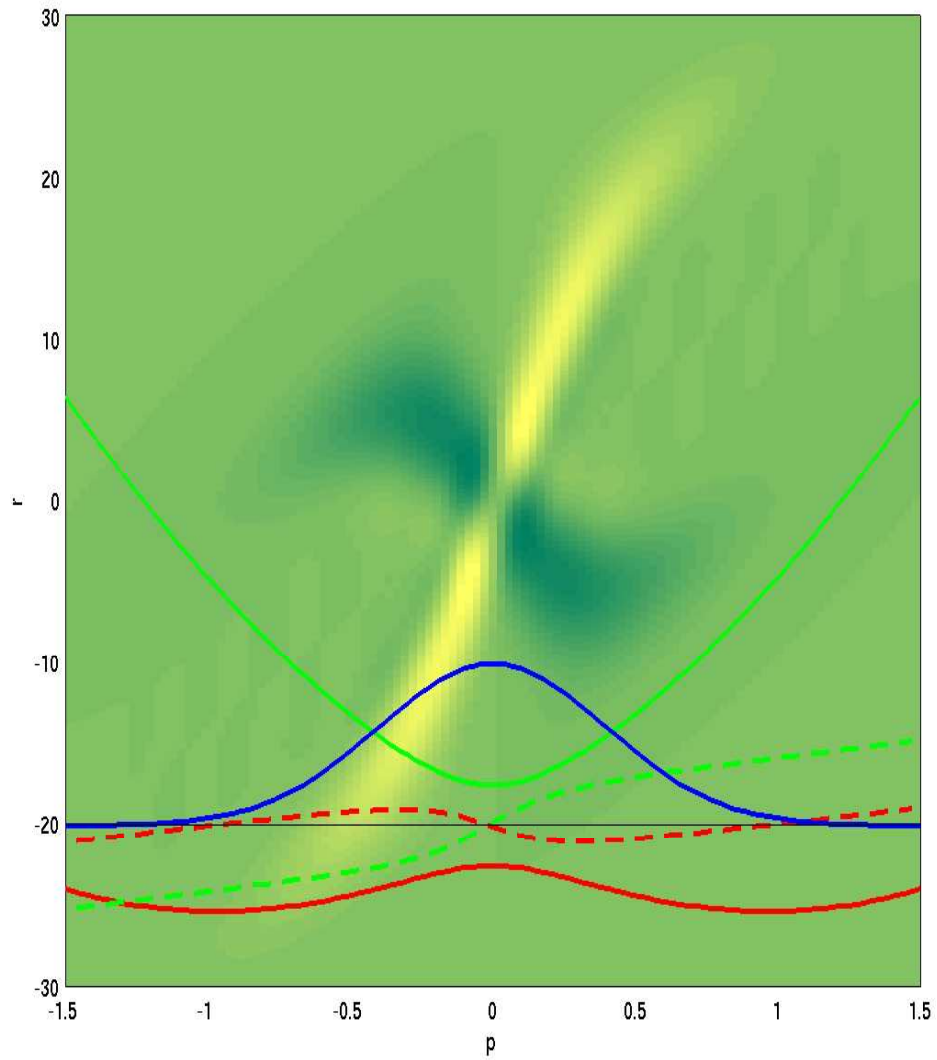
$$\partial_t \int r w_c(r, p) dr = E'_c(p) \int w_c(r, p) dr$$

e quella in banda di **valenza**

$$\partial_t \int r w_v(r, p) dr = E'_v(p) \int w_v(r, p) dr.$$

Pertanto la velocità del pacchetto, per p fissato, è proporzionale alla *derivata* delle bande di energia.

Dinamica



Equazioni dei momenti

Per $k = 0, 1, 2, 3$, definiamo le medie locali

$$n_k(r) = \int w_k(r, p) dp$$

$$j_k(r) = \int p w_k(r, p) dp$$

$$c_k(r) = \int p \otimes p w_k(r, p) dp$$

Equazioni dei momenti - ordine 0

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t n_0 + \nabla \cdot j_0 = -\nabla \cdot K n_2 \\ \partial_t n_1 + \nabla \cdot j_1 = -E_g n_2 + 2K \cdot j_3 \\ \partial_t n_2 + \nabla \cdot j_2 = -\nabla \cdot K n_0 + E_g n_1 \\ \partial_t n_3 + \nabla \cdot j_3 = -2K \cdot j_1 \end{array} \right.$$

Equazioni dei momenti - ordine 0

$$\begin{cases} \partial_t n_0 + \nabla \cdot j_0 = -\nabla \cdot K n_2 \\ \partial_t n_1 + \nabla \cdot j_1 = -E_g n_2 + 2K \cdot j_3 \\ \partial_t n_2 + \nabla \cdot j_2 = -\nabla \cdot K n_0 + E_g n_1 \\ \partial_t n_3 + \nabla \cdot j_3 = -2K \cdot j_1 \end{cases}$$

Equazione di continuità per la densità totale:

$$\partial_t n_0 + \nabla \cdot (j_0 + K n_2) = 0$$

Equazioni dei momenti - ordine 1

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t j_0 + \nabla \cdot c_0 + \nabla V n_0 = -\nabla \cdot K \otimes j_2 \\ \partial_t j_1 + \nabla \cdot c_1 + \nabla V n_1 = -E_g j_2 + 2K \cdot c_3 \\ \partial_t j_2 + \nabla \cdot c_2 + \nabla V n_2 = -\nabla \cdot K \otimes j_0 + E_g j_1 \\ \partial_t j_3 + \nabla \cdot c_3 + \nabla V n_3 = -2K \cdot c_1 \end{array} \right.$$

dove

$$c_i = \frac{j_i \otimes j_i}{n_i} + Q(n_i) + n_i T_i,$$

$$Q(n_i) = -\frac{\hbar^2}{4} \left(\nabla \otimes \nabla n_i - \frac{(\nabla n_i) \otimes (\nabla n_i)}{n_i} \right) \quad (\text{termine Bohmiano})$$

$$T_i = \text{“temperatura”}$$

Equazioni di tipo Madelung

Teorema. Se (w_0, w_1, w_2, w_3) sono le funzioni di Wigner di uno *stato puro*, allora la temperatura si annulla:

$$T_k \equiv 0, \quad k = 0, 1, 2, 3.$$

Equazioni di tipo Madelung

Teorema. Se (w_0, w_1, w_2, w_3) sono le funzioni di Wigner di uno *stato puro*, allora la temperatura si annulla:

$$T_k \equiv 0, \quad k = 0, 1, 2, 3.$$

Perciò le equazioni dei momenti di ordine 0 e 1 sono un sistema *chiuso* e rappresentano *equazioni di un fluido di Madelung a due bande*.

E. Madelung, *Zeitschr. f. Phys.*, 1926

Conclusioni

- Abbiamo introdotto un formalismo “spinoriale” per studiare le Hamiltoniane a due bande;

Conclusioni

- Abbiamo introdotto un formalismo “spinoriale” per studiare le Hamiltoniane a due bande;
- le funzioni di Wigner w_k che ne risultano hanno un ben preciso significato fisico;

Conclusioni

- Abbiamo introdotto un formalismo “spinoriale” per studiare le Hamiltoniane a due bande;
- le funzioni di Wigner w_k che ne risultano hanno un ben preciso significato fisico;
- le equazioni di evoluzione per le w_k hanno una forma particolarmente semplice;

Conclusioni

- Abbiamo introdotto un formalismo “spinoriale” per studiare le Hamiltoniane a due bande;
- le funzioni di Wigner w_k che ne risultano hanno un ben preciso significato fisico;
- le equazioni di evoluzione per le w_k hanno una forma particolarmente semplice;
- si ricavano facilmente le equazioni di tipo Madelung per il sistema.

Conclusioni

- Abbiamo introdotto un formalismo “spinoriale” per studiare le Hamiltoniane a due bande;
- le funzioni di Wigner w_k che ne risultano hanno un ben preciso significato fisico;
- le equazioni di evoluzione per le w_k hanno una forma particolarmente semplice;
- si ricavano facilmente le equazioni di tipo Madelung per il sistema.
- *Scopo finale: dedurre equazioni QDD, QET, QHD.*