Задачи для самостоятельной работы студентов МФТИ

М.М. Глазов

(Дата: 16 февраля 2022 г.)

1. Гамильтониан Латтинжера в матричном виде с учетом гофрировки валентной зоны записывают в виде

$$\begin{bmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{bmatrix}, \tag{1}$$

где

$$F = (A - B)k_z^2 + \left(A + \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2),$$

$$G = (A + B)k_z^2 + \left(A - \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2),$$

$$I = -\frac{\sqrt{3}}{2}\left[B(k_x^2 - k_y^2) - 2\mathrm{i}\frac{D}{\sqrt{3}}k_x k_y\right],$$

$$H = -Dk_z(k_x - \mathrm{i}k_y).$$

Параметры A, B и D (отрицательные) связаны с константами γ_1, γ_2, γ_3 согласно

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1, \quad B = -\frac{\hbar^2}{m_0}\gamma_2, \quad D = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{m_0}\gamma_3.$$

Найти спектр гамильтониана (1) аналитически.

Рассчитать дисперсию электронов в валентной зоне с параметрами GaAs: $\gamma_1 = 6.98$, $\gamma_2 = 2.06$, $\gamma_3 = 2.93$.

2. Найти энергетический спектр электронов в модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия:

$$Eu = -\mathrm{i}P\boldsymbol{k}\boldsymbol{v}, \tag{2a}$$

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right)\boldsymbol{v} = \mathrm{i}P\boldsymbol{k}u + \mathrm{i}\frac{\Delta}{3}\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}. \tag{2b}$$

3. Для трехмерного гамильтониана Берневига-Хьюза-Жанга

$$\mathcal{H}_{BHZ}(\boldsymbol{k}) = E_0(\boldsymbol{k})\mathcal{I} + \begin{pmatrix} M(\boldsymbol{k}) & A_1k_z & 0 & A_2k_- \\ A_1k_z & -M(\boldsymbol{k}) & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & M(\boldsymbol{k}) & -A_1k_z \\ A_2k_+ & 0 & -A_1k_z & -M(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Здесь $E_0(\boldsymbol{k}) = D_1 k_z^2 + D_2 k_\perp^2$, $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\mathcal{I}$ – единичная матрица 4×4,

$$M(\boldsymbol{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2 k_\perp^2, \tag{4}$$

$k_\pm = k_x \pm i k_y$.

Выразить через зонные параметры эффективные массы электронов и дырок.

Построить дисперсионные кривые для Bi_2Se_3, где параметры таковы: $M = 0.28$ eV, $A_1 = 2.2$ eVÅ, $A_2 = 4.1$ eVÅ, $B_1 = 10$ eVÅ^2, $B_2 = 56.6$ eVÅ^2, $D_1 = 1.3$ eVÅ^2, $D_2 = 19.6$ eVÅ.

4. Для собственного полупроводника с шириной запрещенной зоны E_g и параболической дисперсией в зоне проводимости,

$$E_e = \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c},$$

и в валентной зоне,

$$E_h = -\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \; m_v < 0$$

где m_c – эффективная масса электронов, $|m_v|$ – эффективная масса дырок (см. рис. 1), вычислить зависимости от температуры концентраций электронов и дырок, а также химического потенциала. Считать, что температура низкая по сравнению с шириной запрещенной зоны $k_B T \ll E_g$.

(*) Получить ответ (численно) при произвольной температуре и фиксированном отношении масс $m_c/|m_v| = 1/3$, считая, однако, что температура, выраженная в энергетических единицах, мала по сравнению с ширинами разрешенных зон.

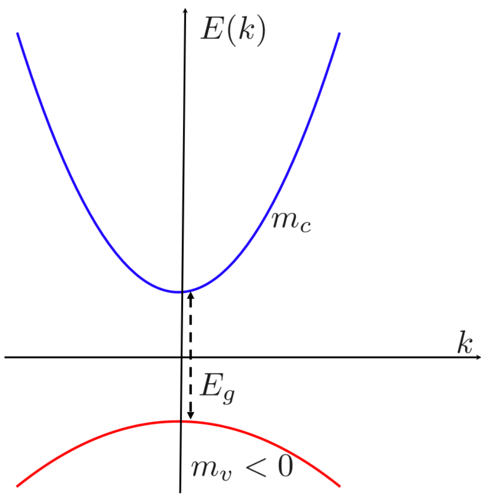

Рис. 1: Схема зонной структуры полупроводника в задаче 1.

5. Для полупроводника с параболической дисперсией в зоне проводимости и в валентной зоне (см. задачу 1), легированного мелкой донорной примесью с концентрацией n_d, уровень энергии которой лежит в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости, $E_d \ll E_g$, (см. рис. 2), найти зависимости от температуры концентраций электронов и дырок, а также химического потенциала. Считать, что температура низкая по сравнению с шириной запрещенной зоны $k_BT \ll E_g$, но может быть сравнима с E_d. Концентрация примеси мала по сравнению с атомной.

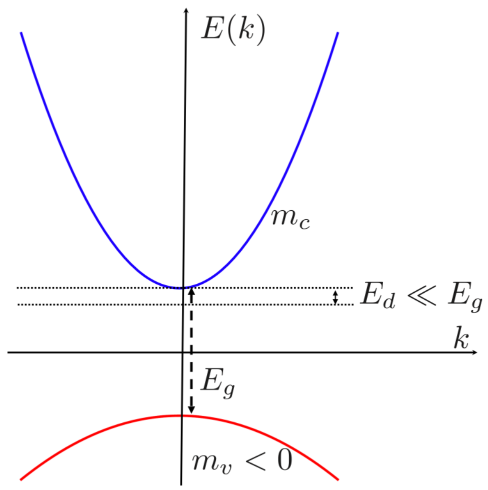

Рис. 2: Схема зонной структуры полупроводника, легированного мелкой донорной примесью.

6. Для электронов с изотропной дисперсией

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

найти зависимость химического потенциала от температуры $\mu(T)$ (при фиксированной концентрации) для:

   (a) трехмерного полупроводника ($k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$, x, y, z – декартовы оси),

   (b) двумерного полупроводника ($k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$),

   (c) одномерного полупроводника ($k = k_z$).

   Интегралы, не выражающиеся в элементарных функциях, взять численно. Получить аналитические асимптотики при $k_BT \ll E_F$ и $k_BT \gg E_F$ и сравнить с численным расчетом.

7. Известно, что в полупроводниках германий и кремний минимум зоны проводимости достигается не в центре зоны Бриллюэна, причем имеется Q эквивалентных минимумов энергии электрона, причем дисперсия электронов вблизи минимумов зоны проводимости

имеет вид

$$E_\alpha = E_g + \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar^2}{2m_i} \left(k_i - k_i^\alpha\right)^2, \ m_i > 0, \tag{5}$$

где k_i^α – компоненты волнового вектора, соответствующего одному из минимумов зоны проводимости. Поверхности постоянной энергии в германии и кремнии в **k**-пространстве имеют форму эллипсоидов вращения.

Найти связь концентрации электронов с уровнем Ферми для

(a) *германия*, где $Q = 4$ эквивалентных минимума, поперечная эффективная масса $m_\perp = 0.082 m_0$ продольная масса (для движения вдоль оси вращения эллипсоида) $m_{||} = 1.59 m_0$.

(b) *кремния*, где $Q = 6$ эквивалентных минимумов, поперечная эффективная масса $m_\perp = 0.19 m_0$ продольная масса $m_{||} = 0.92 m_0$.

Ответ выразить через интеграл Ферми-Дирака. Дать численную оценку положения химического потенциала μ при температуре 77 K и концентрации электронов $n = 10^{17}$ см$^{-3}$.

8. В рамках водородоподобной модели оценить энергию связи E_B и боровский радиус a_B экситона следующих полупроводниках: GaAs, InAs, CdTe, GaN. Параметры полупроводников (эффективные массы носителей заряда, диэлектрическую проницаемость) взять из справочников. В качестве эффективной массы дырки брать массу тяжелой дырки (heavy hole).

9. Определить энергию связи и боровский радиус экситона в двумерном полупроводнике, считая, что притяжение электрона и дырки описывается законом Кулона $V(r) = -e^2/(\varkappa r)$, где $\varkappa$ - эффективная диэлектрическая проницаемость системы, r – расстояние между электроном и дыркой. Движение электрона и дырки возможно лишь в плоскости (xy).

10. Привести аналитическую оценку энергии связи экситона в квазиодномерном полупроводнике (квантовой проволоке), где движение носителей заряда возможно лишь вдоль одной оси. Считать, что радиус проволоки $a \ll a_B$, где a_B – боровский радиус экситона в трехмерном полупроводнике с той же диэлектрической проницаемостью.

11. Для фрелиховского взаимодействия электронов с продольными оптическими фононами, описываемого гамильтонианом

$$V^{\mathrm{PO}} = -\mathrm{i}e \left(\frac{2\pi\hbar\omega_L}{\mathcal{V}\varepsilon^*}\right)^{1/2} \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{1}{q} \left(c_{\boldsymbol{q}} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{qr}} - c_{\boldsymbol{q}}^\dagger e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{qr}}\right),$$

где ω_L – частота продольного оптического фонона (дисперсией фонона пренебрегаем), ε^* – эффективная диэлектрическая проницаемость, $c_{\boldsymbol{q}}$ ($c_{\boldsymbol{q}}^\dagger$) – операторы уничтожения (рождения) фонона с волновым вектором $\boldsymbol{q}$, $\mathcal{V}$ – нормировочный объем, найти во втором порядке теории возмущений сдвиг дна зоны проводимости, обусловленный взаимодействием электрона с фононами. Температуру считать равной нулю, учесть процессы "виртуального" поглощения и испускания фононов. (*) Как изменится эффективная масса электрона (рассчитать соответствующую поправку)?

12. Оценить время испускания электроном оптического фонона в GaAs. Взаимодействие описывать гамильтонианом Фрелиха. Энергия оптического фонона $\hbar\omega_L = 35$ meV, $\varepsilon_0 = 13$, $\varepsilon_\infty = 10$. Считать, что кинетическая энергия электрона превышает энергию оптического фонона так, что процесс испускания фонона оказывается возможным. Заселенностью фононных и электронных состояний пренебречь. При оценках логарифмический множитель заменить на 1 (получить ответ с логарифмической точностью).

13. Оценить время релаксации электрона в зоне проводимости GaAs по импульсу при температуре $T = 300$ K за счет рассеяния на акустических фононах по механизму деформационного потенциала. Энергию электрона E положить равной k_BT. Анизотропией скорости звука пренебречь. При расчетах использовать следующие параметры: плотность $\rho = 5.31$ g/cm^3, $s = 5.14 \times 10^5$ cm/s, деформационный потенциал $|\Xi_c| = 10$ eV, эффективная масса электрона $m = 0.067m_0$.

14. В полупроводнике имеются электроны и дырки с концентрациями n_e и n_h, соответственно, m_e, m_h – их эффективные массы. Пусть τ_e – время релаксации импульса электронов, τ_h – время релаксации импульса дырок. Столкновениями электронов и дырок между собой пренебрегается.

    (а) В рамках модели Друде рассчитать компоненты тензора проводимости σ_{xx}, σ_{yy} на нулевой частоте в магнитном поле $\boldsymbol{B} \parallel z$.

    (б) Определить компоненты тензора удельных сопротивлений $\rho_{\alpha\beta} = [\hat{\sigma}]^{-1}_{\alpha\beta}$. Считать магнитное поле малым и сохранить в выражениях для $\rho_{\alpha\beta}$ лишь линейные и квадратичные по B члены, положить (для простоты) $m_e = m_h = m$, $\tau_e = \tau_h = \tau$.