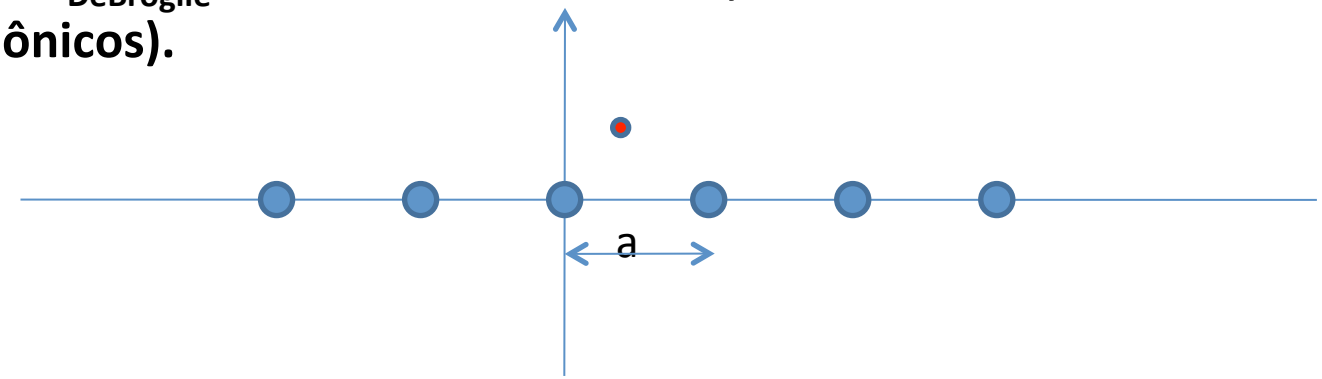
FI-227 Física de Dispositivos Semicondutores

Tópico 1

Estrutura de banda (breve resumo)

- **Nosso problema é encontrar as auto-funções de 1 elétron sujeito a um potencial periódico.(Vamos nos restringir a 1D por simplicidade (o conceito físico é mais importante que a manipulação de somatórios e vetores)**
- **Considere um elétron livre com um auto-estado para o eletron :**
- **$\Psi_k(x) = A_k e^{ikx}$, onde k pode ser qualquer número real. O momento do elétron é $\hbar k$ e a energia $\hbar^2 k^2/2m$ (Não há restrição a k).**
- **Considere um cristal com parâmetro de rede a, de comprimento L, onde L>>a e L >> $L_{DeBroglie}$ do eletron. Claro *L= Na, N* o número de átomos (caroços iônicos).**



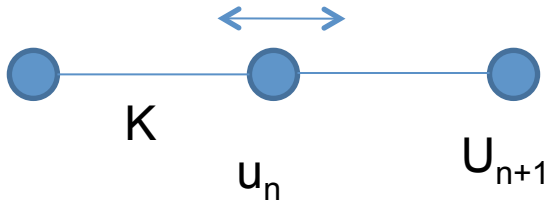
- É intuitivo que $\Psi_k(x+L) = \Psi_k(x+Na) = \Psi_k(x)$

- Então, esta restrição do confinamento implica numa quantização de k (quasi-quantização) $k_n=n2\pi/L$; ou $k_n=n2\pi/Na$; $n=0,\pm1, ...$

- Notemos que para $-\pi/a<k<\pi/a$ primeira zona de Brillouin)

temos N possíveis k_n. (Em cada zona de Brillouin há um número de estados espaciais (k) igual ao número de pontos da rede); uma zona de Brilloiuin descreve todos os estados dos elétrons: $e^{ikx}=e^{i(k+m2\pi)x}$

Vibração dos caroços iônicos



- Consideremos pequenas oscilações (potencial parabólico): $U = \frac{1}{2}K\sum_{1}^{n}[u_n - u_{n-1}]^2; T = \frac{1}{2}m\sum_{1}^{n}[\dot{u}_n]^2$

- Para o m-ésimo caroço: $\frac{\partial L}{\partial u_m} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_m}\right) = 0$

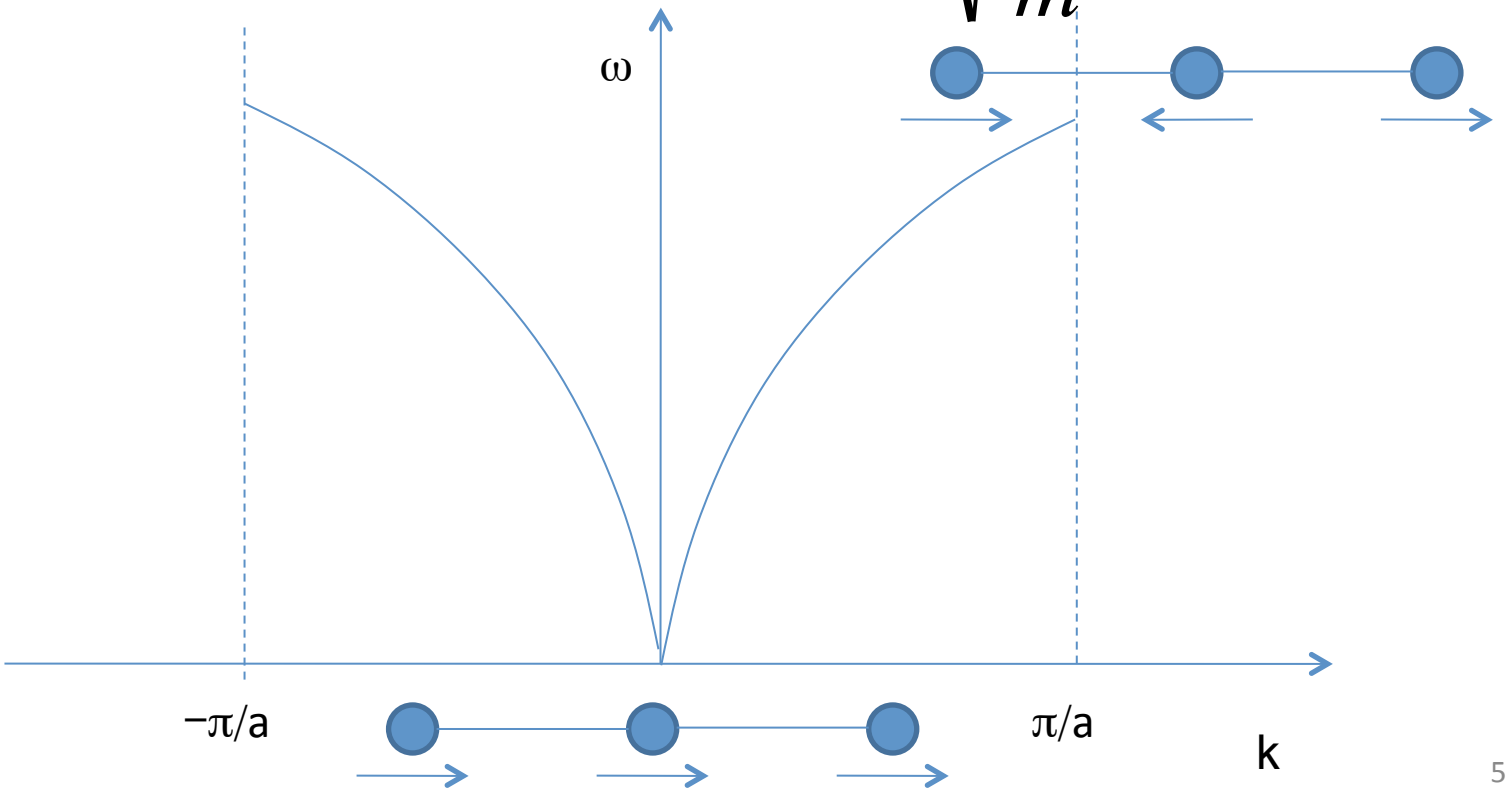
- $\frac{\partial U}{\partial u_m} = K(2u_m - u_{m-1} - u_{m+1}); m > 1; m < M+1; \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_m} = m\dot{u}_m \Rightarrow$

$$m\ddot{u}_m + K(2u_m - u_{m-1} - u_{m+1}) = 0$$

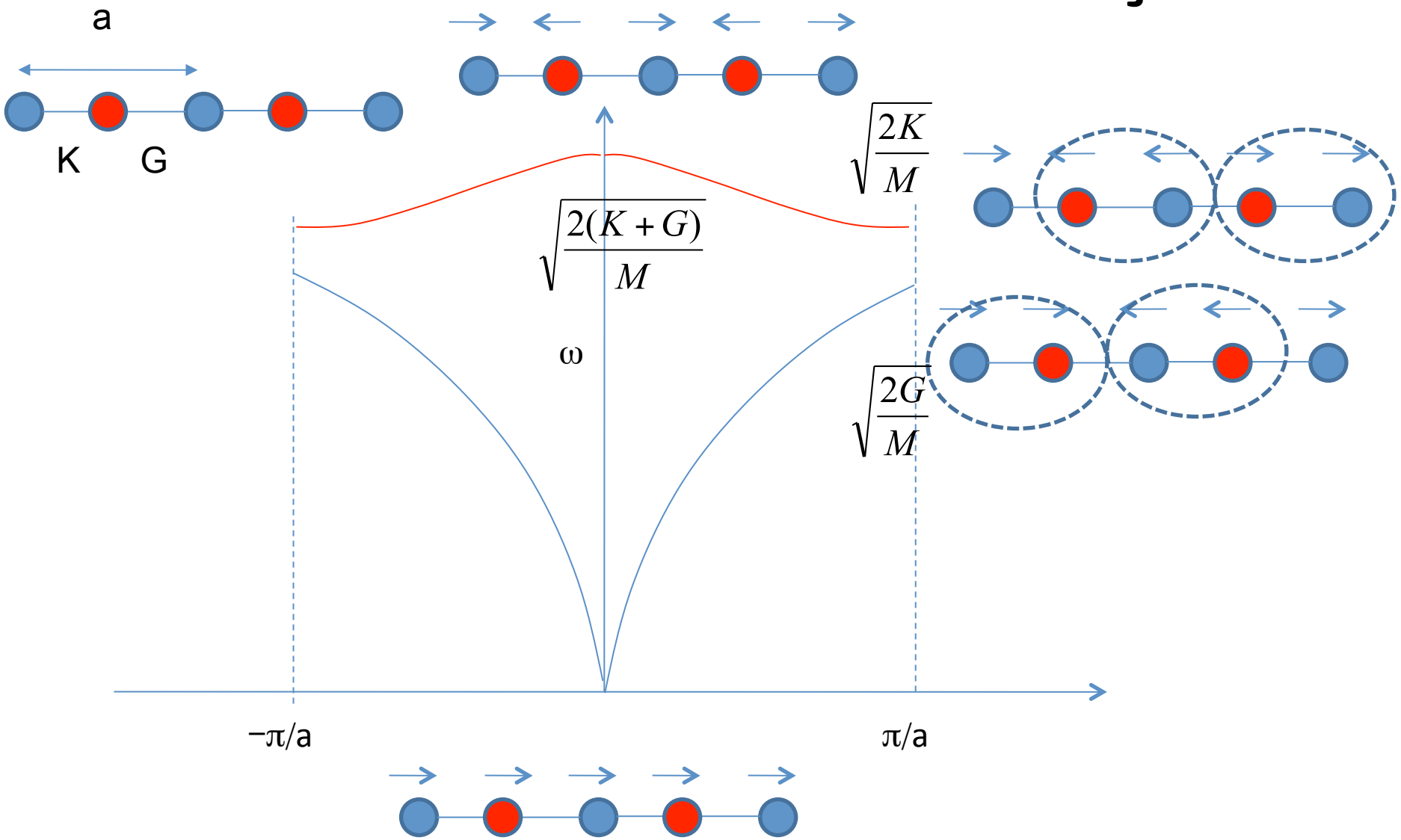
- Se fizermos:

$$u_m = Ce^{i(kna-\omega t)}; u_1 = u_{N+1} \Rightarrow k_n = \frac{n}{N}\frac{2\pi}{a}$$

$$\omega^2 = \frac{K}{m}(2-2\cos ka) \Rightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{K}{m}}\left|sen(ka/2)\right|$$



Se tivermos mais um caroço



Potencial periódico

- Agora, consideremos o potencial criado pelos caroços iônicos U(x); Este tem a simetria da rede e portanto pode ser expandido numa série de Fourier com componentes $U_K e^{iKx}$, $K_m = m2\pi/a$, com m=0,±1, ...

$$U(x) = \sum_K U_K e^{iKx}$$

$$\Psi(x) = \sum_k c_k e^{ikx}$$

- Substituindo na eq. De Schroendinger, temos

$$\sum_k (\varepsilon - \varepsilon(k)) c_k e^{ikx} = \sum_k \sum_K c_k U_K e^{i(k+K)x}; \varepsilon(k) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- Para um dado k no lado esquerdo, há infinitos termos c_{k-K} que resultam numa exponencial e^{ikx}. Agrupando:

$$(\varepsilon - \varepsilon(k)) c_k = \sum_K c_{k-K} U_K$$

- Essencialmente temos em cada zona de Brillouin:
  - N estados **k**;
  - para cada **k**, temos infinitas equações acoplando os infinitos coeficientes $c_{\mathbf{k}-K}$, uma vez que existem infinitos K.
  - Este problema secular tem, em princípio, infinitas (n) soluções $\varepsilon_n(\mathbf{k})$;
  - Ou seja, teremos infinitas funções $\varepsilon_n(k)$, *chamadas* bandas(cada uma com índice n). E para cada k, infinitos auto-estados (com índice n):

$$\Psi_{kn}(x) = \sum_K c^n_{k-K} e^{i(k-K)x}$$

Ondas de Bloch

- Notem que a expressão das funções $\Psi_{kn}(x)$ são tais que:

$$\Psi_{kn}(x) = \sum_K c^n_{k-K} e^{i(k-K)x} = e^{ikx}\left(\sum_K c^n_{k-K} e^{-iKx}\right) = e^{ikx} u_n(x)$$

- Onde *u(x)* é uma função periódica na rede: *u(x+a)=u(x),* pois $e^{-iKa}=1$ para qualquer K.
- As funções $\Psi_{kn}(x) = e^{ikx} u_n(x)$ são chamadas ondas de Bloch.

- Ou seja, as soluções para um elétron na rede cristalina são ondas de Bloch.
- Por fim, a onda de Bloch tem a seguinte propriedade:

$$\Psi_{kn}(x+a) = e^{ika}e^{ikx}u_n(x+a) =$$
$$= e^{ika}e^{ikx}u_n(x) = e^{ika}\Psi_{kn}(x);$$
$$\Rightarrow \Psi_{kn}(x+a) = e^{ika}\Psi_{kn}(x)$$

- Solução par as bandas $(\varepsilon - \varepsilon(k))c_k = \sum_K c_{k-K} U_K$

- De fato, devemos esperar que o potencial periódico deva ter somente alguns coeficientes não desprezíveis para os termos como $K_m = m2\pi/a$, m= 0, 1, 2, ...m_{max}.
- Sendo assim, o problema se reduz a um sistema $m_{max} \times m_{max}$ com m_{max} bandas. (Para funções com derivadas contínuas, K_m decresce com m^2.
- Por exemplo, consideremos o caso em que somente $U_{K0} = U_0$ e $U_{K1} = U_{-K1} = U_1$, onde $K_0=0$ e $K_1=2\pi/a$; apliquemos na equação acima e teremos 3 equações envolvendo c_k, c_{k-K1} *e* c_{k+K1}.
- Em forma matricial, temos o problema secular para cada k:

- Resolvendo o sistema da p. 8 para um certo k, temos:

$$(\varepsilon - \varepsilon(k))c_k = \sum_K c_{k-K} U_K$$

$$\pi / a < k < \pi / a; K_1 = 2\pi / a; \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$[\varepsilon - \varepsilon(k - K_1)]c_{k-K1} = \cancel{c_{k-2K1} U_1} + c_{k-K1} U_0 + c_k U_1$$

$$[\varepsilon - \varepsilon(k)]c_k = c_{k-K1} U_1 + c_k U_0 + c_{k+K1} U_1$$

$$[\varepsilon - \varepsilon(k + K_1)]c_{k+K1} = c_k U_1 + c_{k+K1} U_0 + \cancel{c_{k+2K1} U_1}$$

$$\begin{bmatrix} U_0 + \varepsilon(k - 2\pi/a) - \varepsilon & U_1 & 0 \\ U_1 & U_0 + \varepsilon(k) - \varepsilon & U_1 \\ 0 & U_1 & U_0 + \varepsilon(k + 2\pi/a) - \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{k-K1} \\ c_k \\ c_{k+K1} \end{bmatrix} = 0$$

- Por simplicidade, podemos subtrair U_0 do potencial (mudança de referência) e obter:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon(k - 2\pi/a) - \varepsilon & U_1 & 0 \\ U_1 & \varepsilon(k) - \varepsilon & U_1 \\ 0 & U_1 & \varepsilon(k + 2\pi/a) - \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_k \\ c_{k-K1} \\ c_{k+K1} \end{bmatrix} = 0$$

$$[\varepsilon(k - 2\pi/a) - \varepsilon][\varepsilon(k) - \varepsilon][\varepsilon(k + 2\pi/a) - \varepsilon] =$$

$$[\varepsilon(k + 2\pi/a) + \varepsilon(k - 2\pi/a) - 2\varepsilon]U_1^2 = 0$$

- Para cada k, temos 3 soluções para ε. resolvendo para todos k's temos 3 bandas.

Casos especiais:

- k=0; (lembrem que *ε(-x)= ε(x)*

$$[\varepsilon(2\pi/a)-\varepsilon][-\varepsilon][\varepsilon(2\pi/a)-\varepsilon]=2[\varepsilon(2\pi/a)-\varepsilon]U_1^2=0\Rightarrow$$

$$[\varepsilon-\varepsilon(2\pi/a)]\{\varepsilon[\varepsilon(2\pi/a)-\varepsilon]-2U_1^2\}=0$$

$$\varepsilon=\varepsilon_1;$$

$$\varepsilon=\frac{\varepsilon_1}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{\varepsilon_1}{2}\right)^2-2U_1^2};\varepsilon_1\equiv\frac{\hbar^2(2\pi/a)^2}{2m}$$

- Notem que para U_1=0, temos $\varepsilon = \varepsilon_1$ (duplamente degenerado) e $\varepsilon=0$
- Para U_1pequenos, temos $\varepsilon = \varepsilon_1$; $\varepsilon = \Delta$; $\varepsilon = \varepsilon_1-\Delta$; $\Delta=2U_1^2/\varepsilon_1$ *(Varia com o quadrado da perturbação)*

Casos especiais:

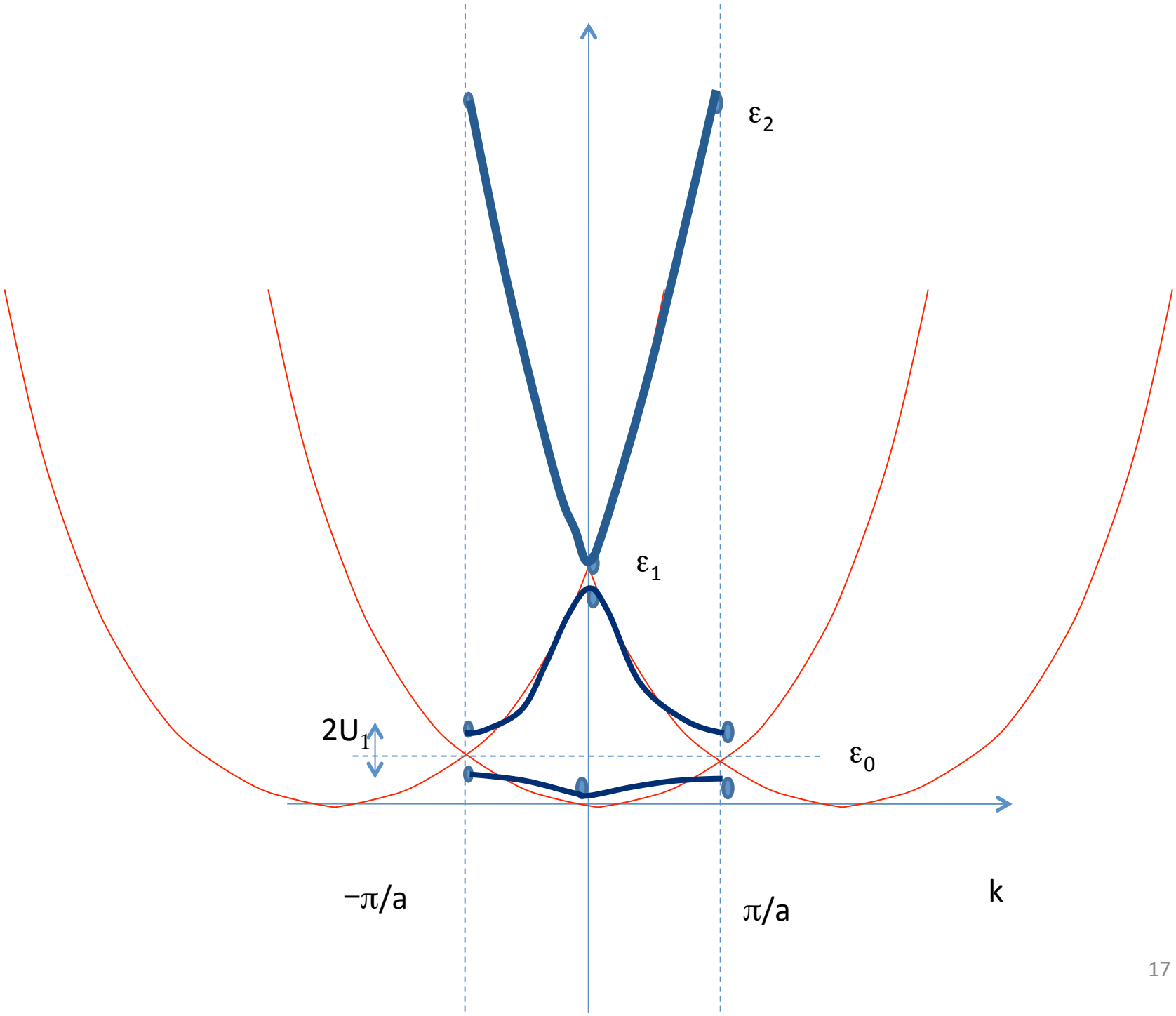
- k=±π/a;

$$\left(\varepsilon_2 - \varepsilon\right)\left[U_1^2 - \left(\varepsilon_0 - \varepsilon\right)^2\right] + U_1^2\left(\varepsilon_0 - \varepsilon\right) = 0;$$

$$\varepsilon_2 \equiv \frac{\hbar^2\left(3\pi / a\right)^2}{2m}; \varepsilon_0 \equiv \frac{\hbar^2\left(\pi / a\right)^2}{2m}$$

- Para U_1=0, temos $\varepsilon = \varepsilon_0$ (duplamente degenerado) e $\varepsilon = \varepsilon_2$
- Para U_1pequenos, temos $\varepsilon \sim \varepsilon_2$ *; Duas raízes ocorrem para* $\varepsilon \sim \varepsilon_0$*; Neste caso,* $\varepsilon_2 - \varepsilon \sim \varepsilon_2$ *; então:*

$$\varepsilon_2\left[U_1^2 - \left(\varepsilon_0 - \varepsilon\right)^2\right] \approx 0 \Rightarrow \left(\varepsilon - \varepsilon_0\right) = \pm U_1$$


ε2
ε1
2U1
ε0
−π/a
π/a
k

Bandas proibidas

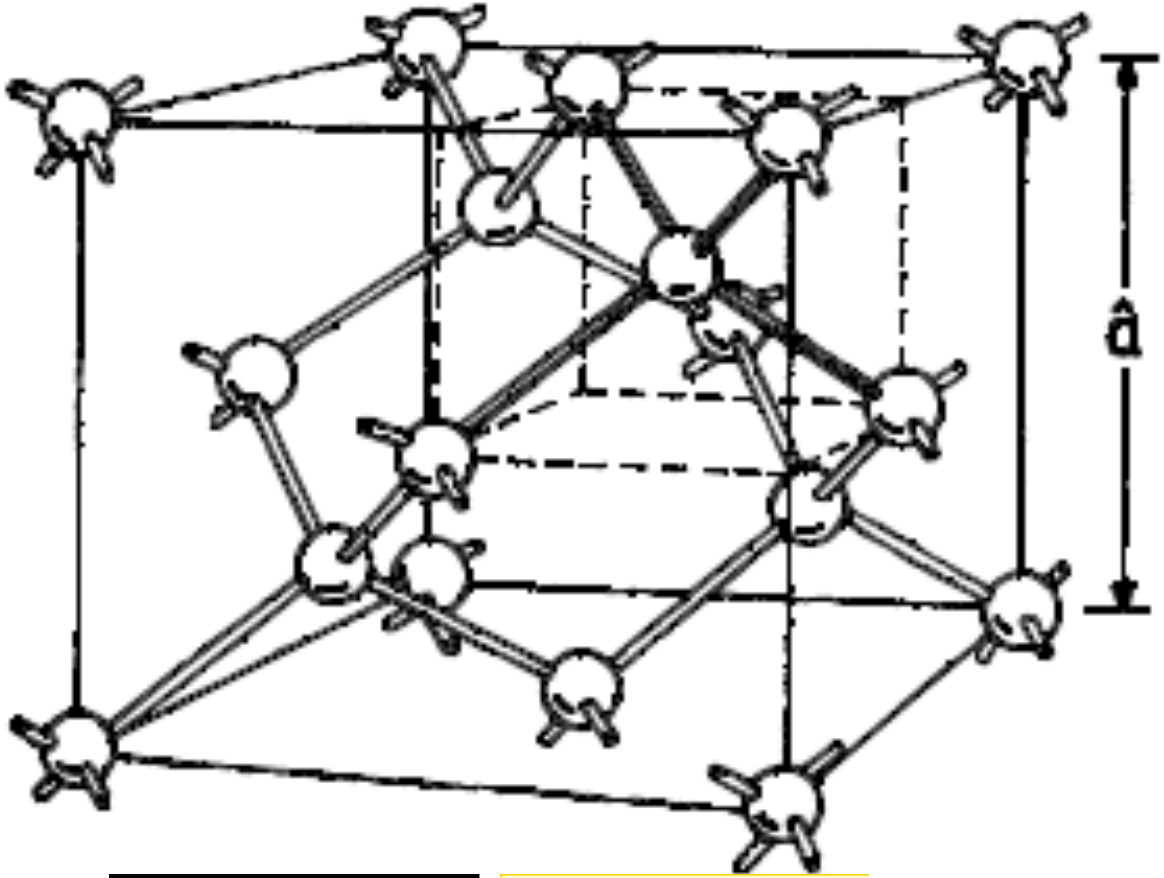
- Portanto, alguns valores de energia são proibidos e cria-se um intervalo proibido de energia (GAP). Notemos que este intervalo é tanto maior quanto maior for a perturbação U_1.
- Se considerarmos mais termos, vamos aumentando o sistema e aumentando o número de bandas. Portanto a existência de mais bandas pode ser visto como uma perturbação às bandas já calculadas.
- Notem que onde há degenerescência para o elétron livre, há uma separação dos níveis da ordem de 2U.

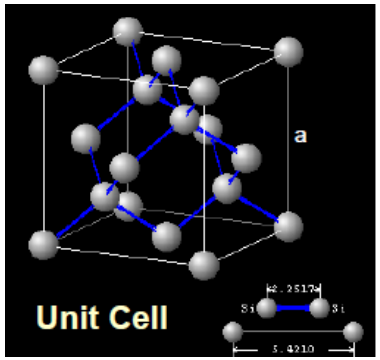
3-D

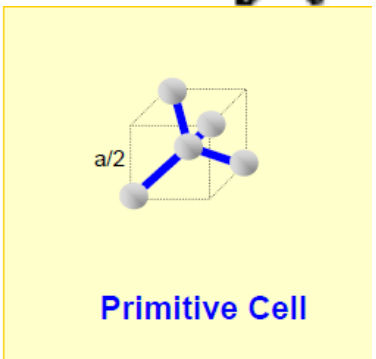
- Em três dimensões a extensão do que tratamos é direta.
- As zonas de Brillouin são tri-dimensionais;
- As bandas são funções de três coordenadas; portanto necessitamos 4D para graficá-las! (Escolhemos algumas direções especiais para graficá-las)
- Cada banda tem o número de estados k igual ao número de átomos da rede.
- As degenerecências ocorrem de forma mais complexa;
- Mais elementos U_K são necessários mesmo para casos simples;

Estrutura do diamante

- Estrutura FCC+ 1/4(111)a
- 2 átomos por célula primitiva
- (group IV) diamante, Si e Ge.

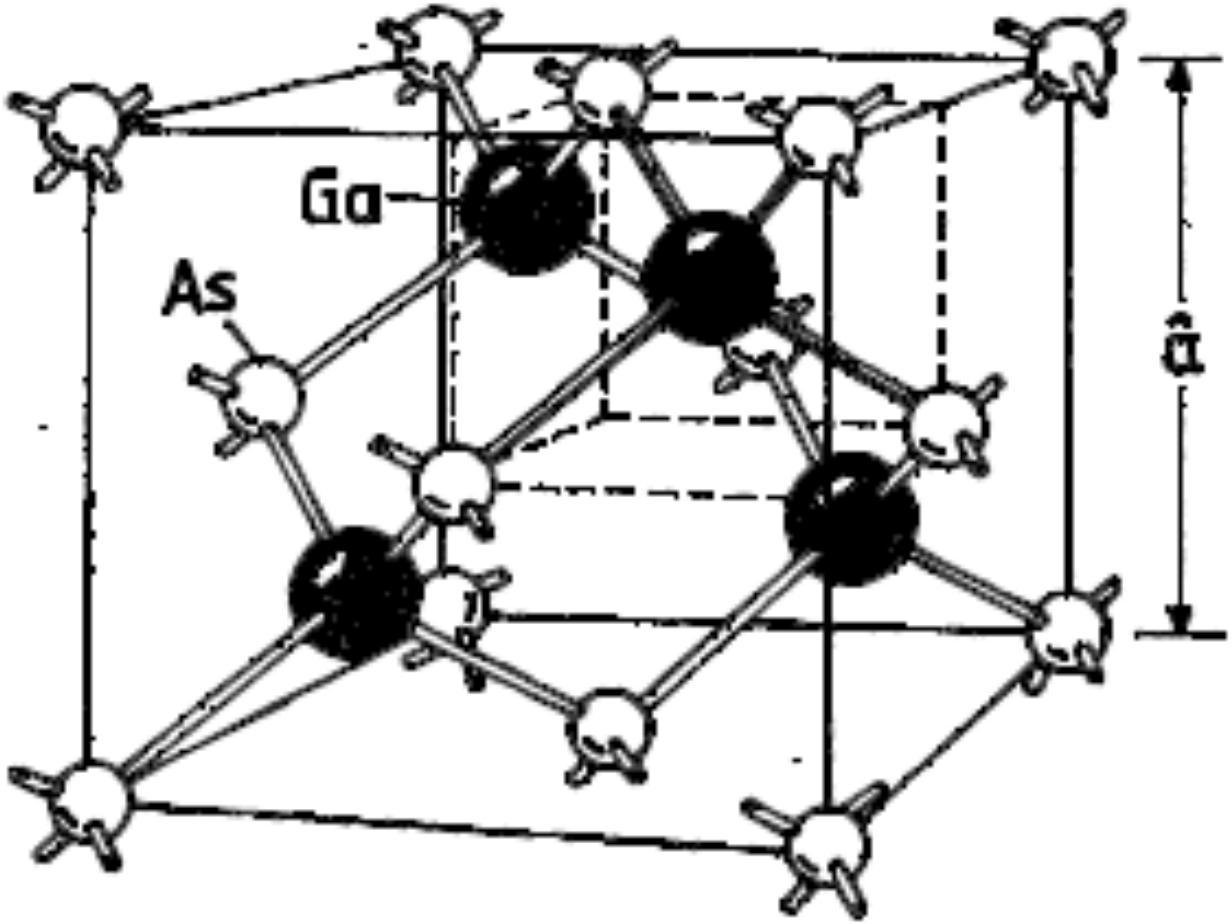






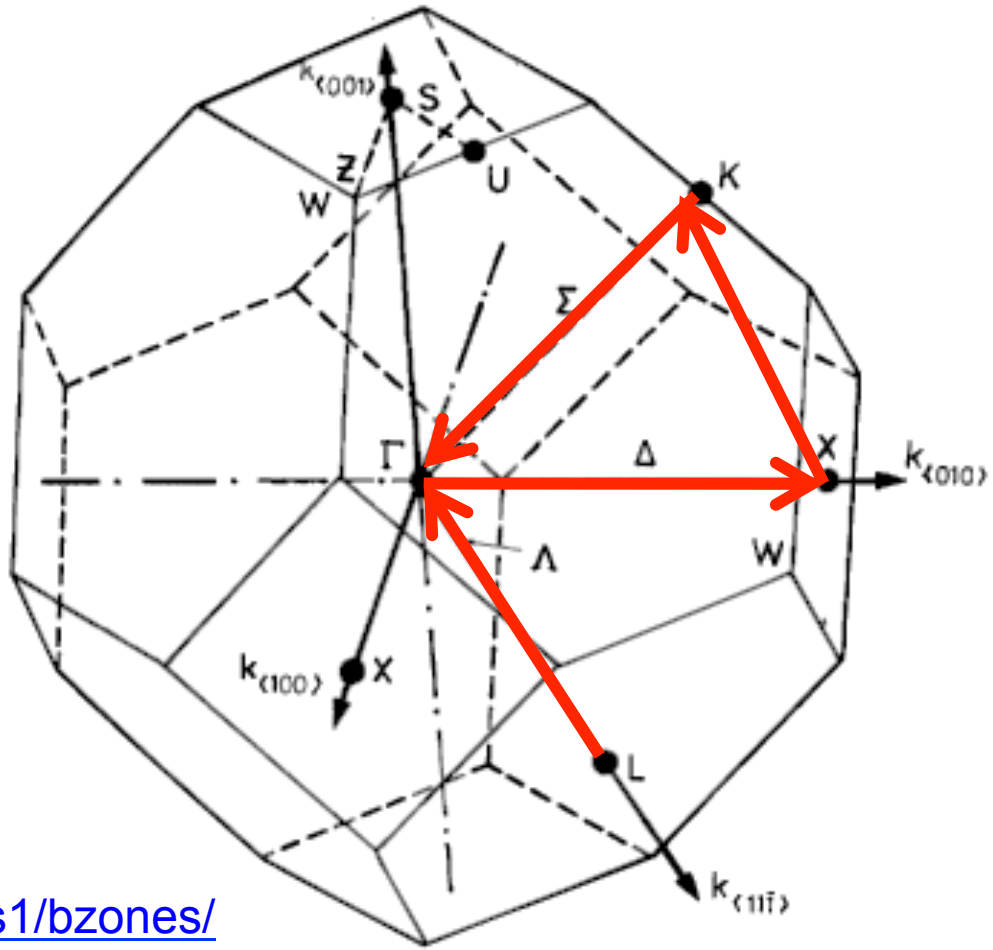
Blenda de Zn (composto)

- Estrutura FCC+ 1/4(111)a (outro átomo)
- 2 átomos por célula primitiva.
- (III-V) GaAs, InP, InSb, etc



Primeira zona de Brillouin (blenda de Zn)

Graficando-se em direções especiais (simetria) temos uma boa idéia da estrutura.



Zonas de Brillouin:
http://lamp.tu-graz.ac.at/~hadley/ss1/bzones/
Para recortar e montar:
http://lamp.tu-graz.ac.at/~hadley/ss1/crystaldiffraction/cutoutBZ/face_centered_cubic.pdf

Multi-eletron

- Cada banda na primeira zona de Brillouin tem N estados, onde N é o número de átomos numa célula primitiva.
- O número de elétrons que estão para preencherem os estados são :

IV Semiconductors

C $1s^2\,2s^2 2p^2$

Si $1s^2 2s^2 2p^6\,3s^2 3p^2$

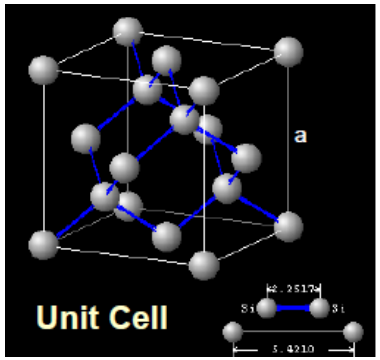
Ge $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^2$

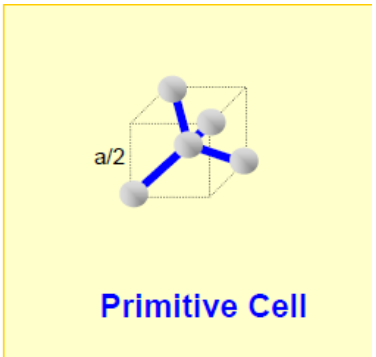
III–V Semiconductors

Ga $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^1$

As $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^3$

Diamante: (2 átomos x 4 elétrons)xN = 8N

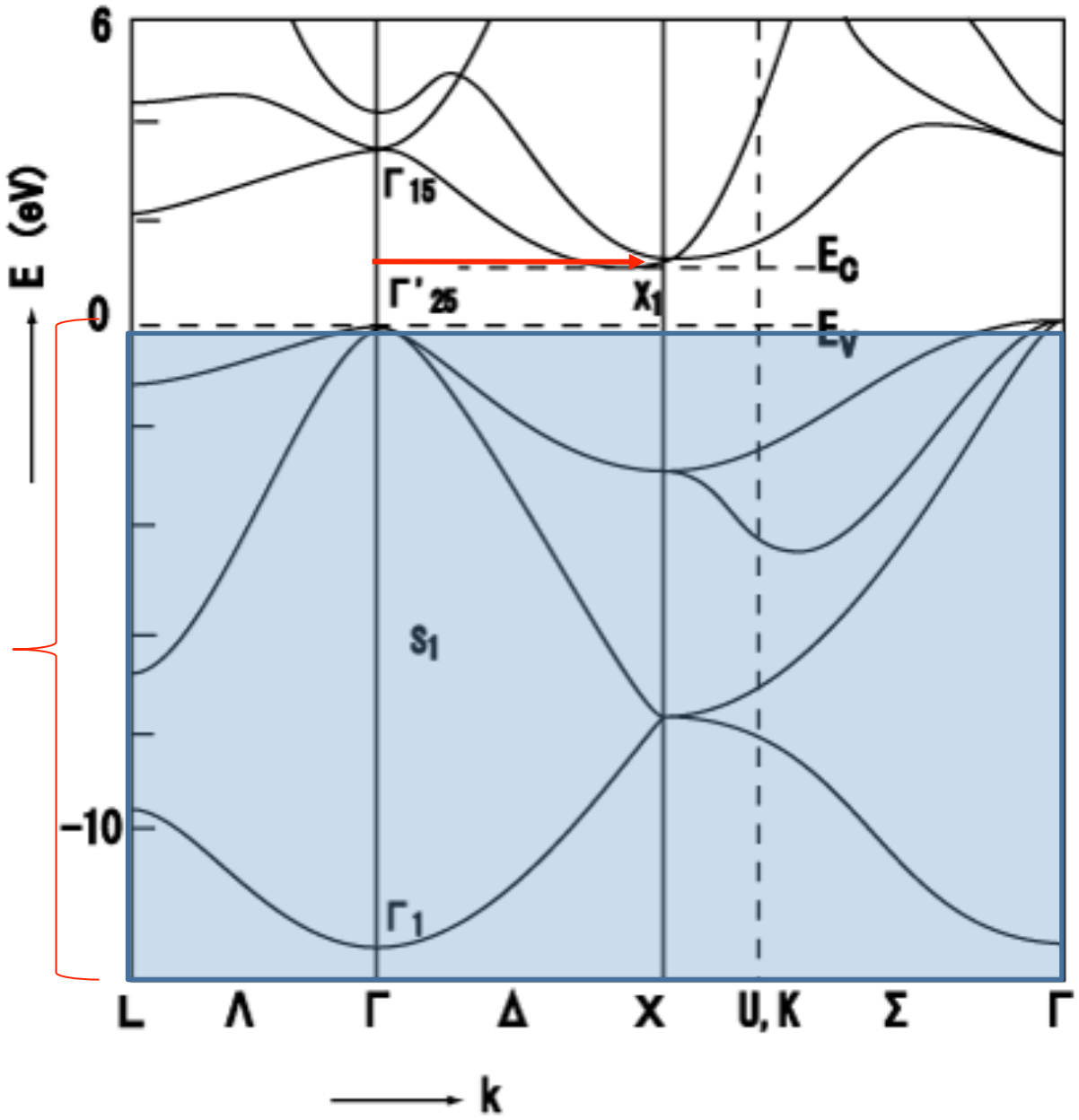




Blenda de Zn: (1 átomo x 3 elétrons + 1 átomo x 5 elétrons)xN = 8N

Silício

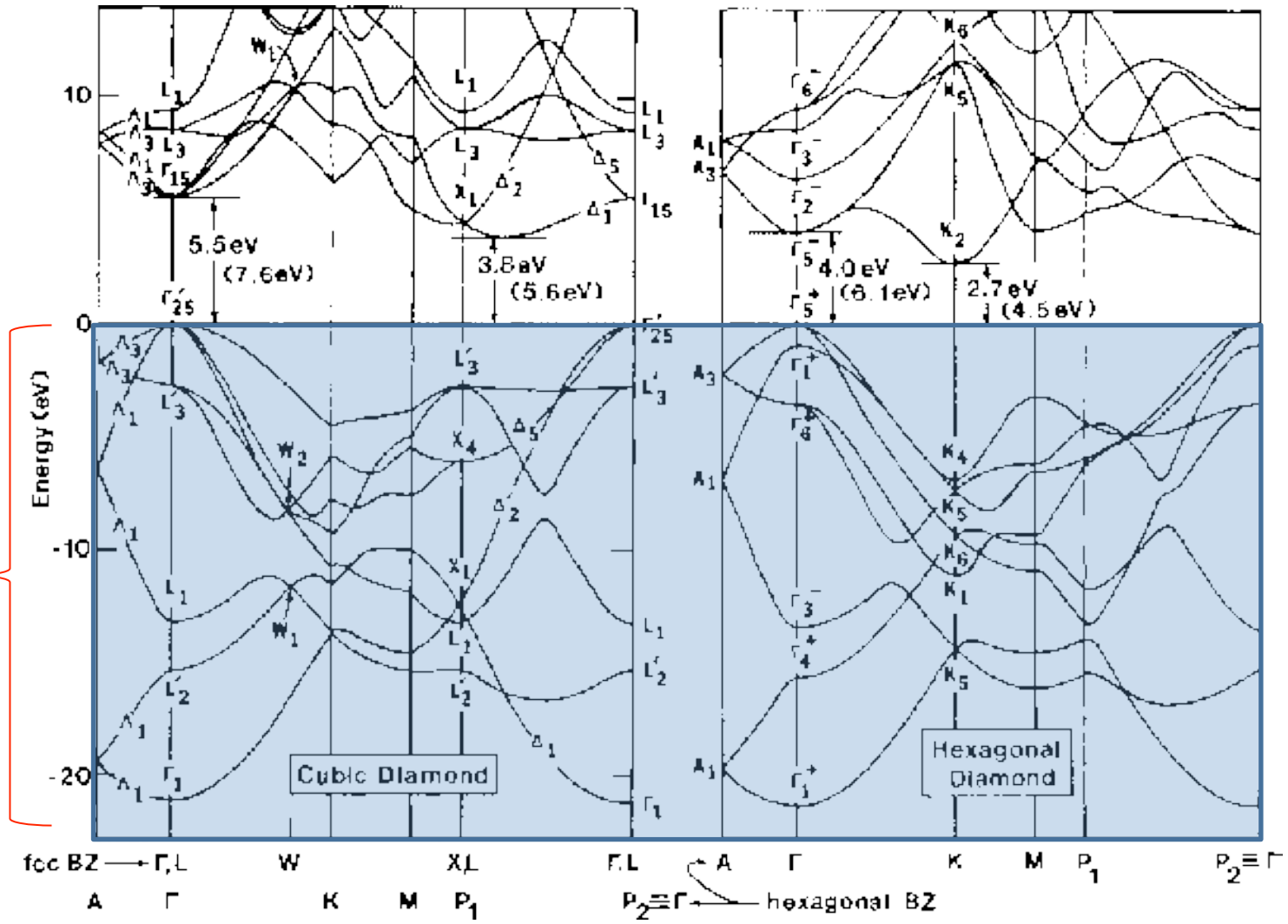
Gap indireto



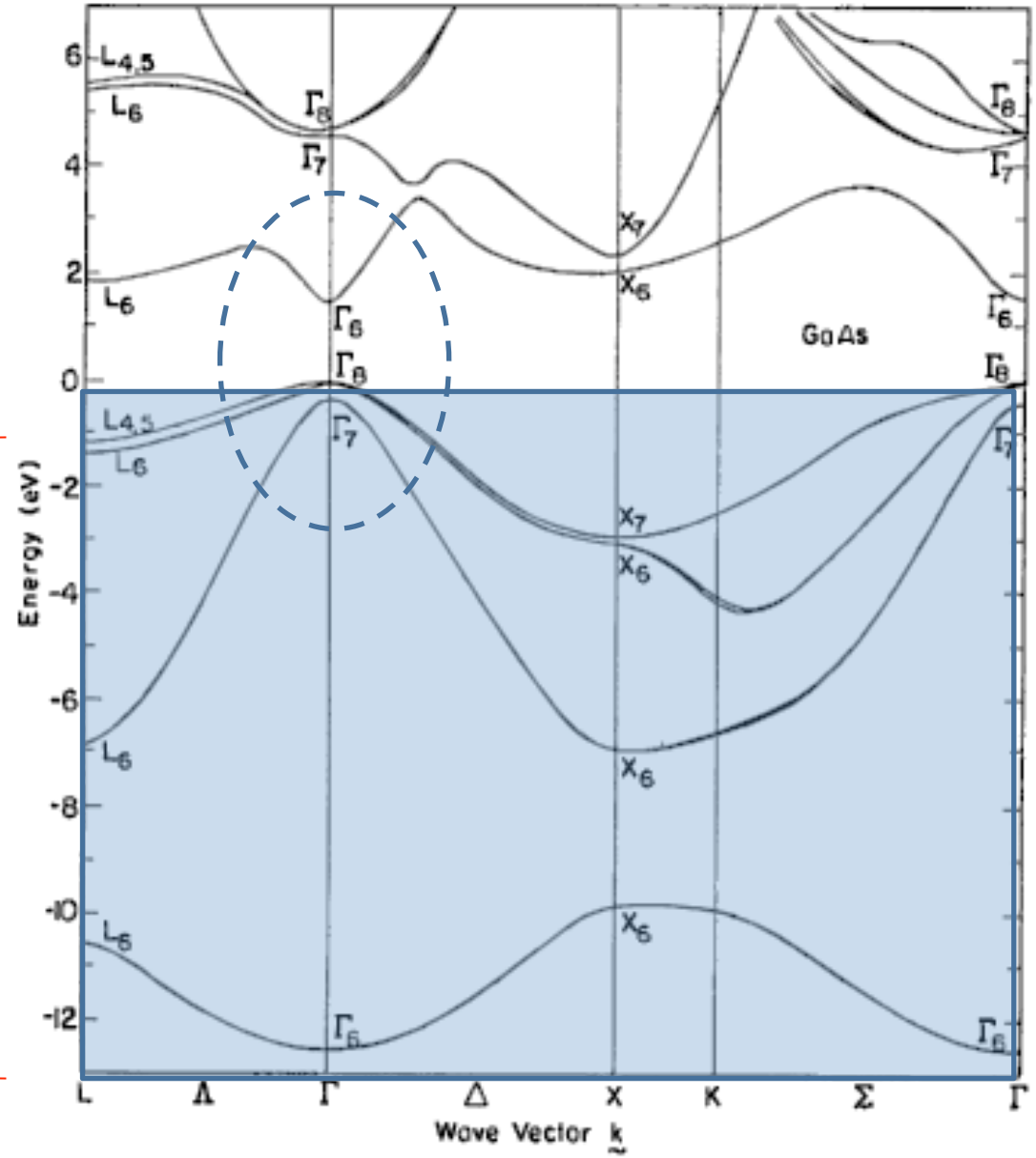
8 bandas preenchidas

Diamante (cúbico e hexagonal)

8 bandas preenchidas
Eg>> kT
isolante

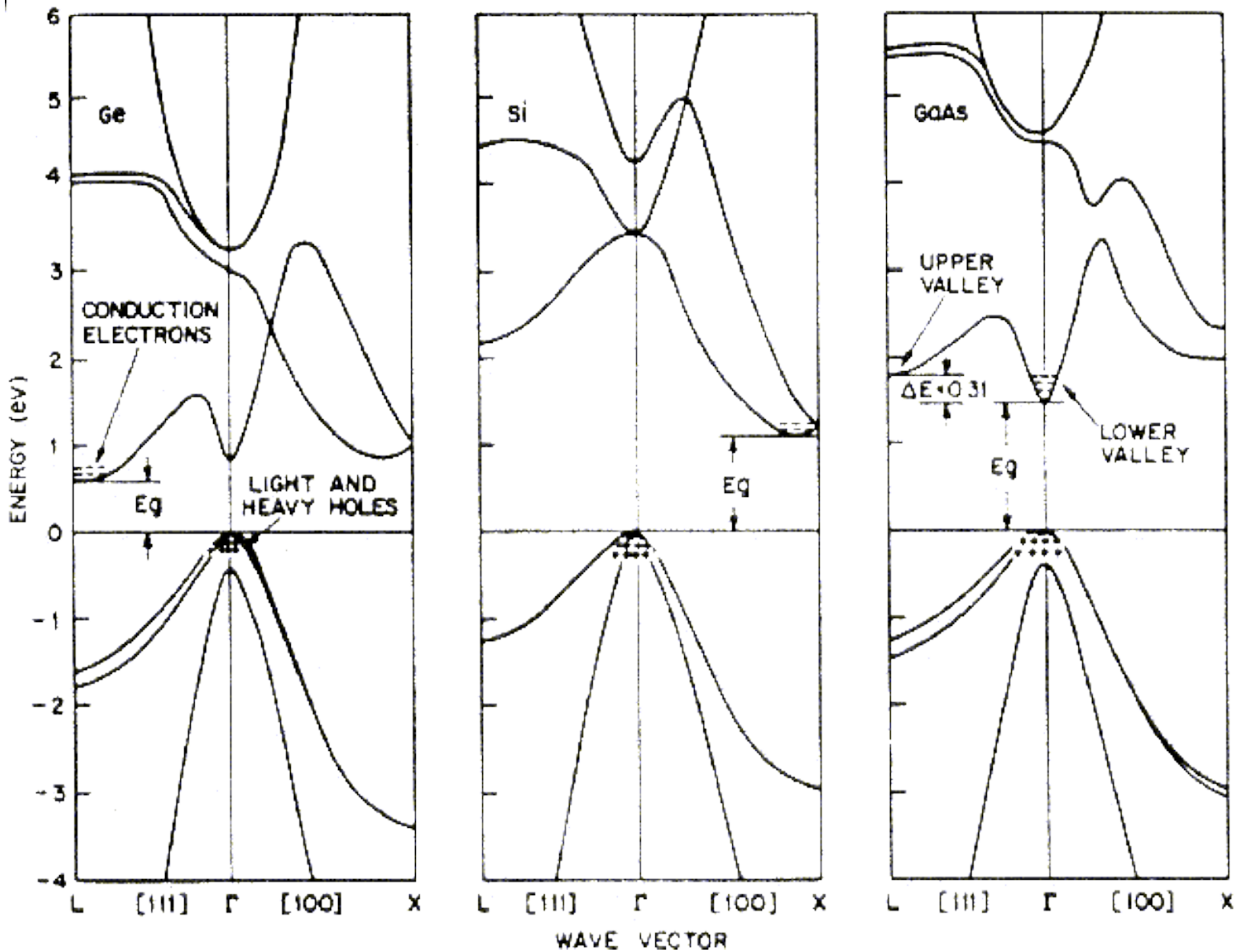


GaAs



8 bandas preenchidas

Si, Ge e GaAs


Ge
Si
GaAs
CONDUCTION ELECTRONS
LIGHT AND HEAVY HOLES
UPPER VALLEY
LOWER VALLEY
ΔE=0.31
Eg
ENERGY (eV)
WAVE VECTOR
L
[111]
Γ
[100]
X

Tight Biding

- Ondas de Bloch construídas a partir de orbitais atômicos periódicos;
- Esperamos que:
  - H ~H_{at} (**r**-**R**)com orbitais Ψ_n(**r-R**)próximo aos caroços iônicos;
  - H~ΔU(**r**) longe dos caroços (r longe de R) onde Ψ_n(**r**) ~0;
- Propomos a onda de Bloch correspondente a cada nível atômico E_n:

$$f_{k,n}(r) = \sum_R e^{ik.R} \Psi_n(r - R)$$

- Consideramos que de fato, a perturbação do potencial mistura estados de energia similar;

$$f_k(r) = \sum_R e^{ik.R} \sum_n^M b_n \Psi_n(r-R) \equiv \sum_R e^{ik.R} \Phi(r-R)$$

- Substituindo na equação de Shoroendinger, temos:

$$Hf_k(r) = \left(\sum_{R'} H_{at}(r-R') + \Delta U(r) \right) f_k(r) = \varepsilon(k) f_k(r)$$

- Multiplicando-se pelo complexo conjugado de $\Psi_m^*(\boldsymbol{r})$ e integrando em todo espaço, teremos:

- Vejamos:

$$(1)\sum_{n} b_n \sum_{R'} \sum_{R} \int \Psi_m^*(r) H_{at}(r-R') \Psi_n(r-R) e^{ik.R}\, dr =$$

$$E_m \sum_{n} b_n \sum_{R} \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r-R) e^{ik.R}\, dr =$$

$$E_m \left(b_m + \sum_{n} b_n \sum_{R\neq 0} \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r-R) e^{ik.R}\, dr \right); pois$$

$$\Psi_m^*(r) H_{at}(r-R') = E_m \delta(R');$$

$$(2)\varepsilon(k) \sum_{n} b_n \sum_{R} \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r-R) e^{ik.R}\, dr =$$

$$\varepsilon(k) \left(b_m + \sum_{n} b_n \sum_{R\neq 0} \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r-R) e^{ik.R}\, dr \right)$$

$$[\varepsilon(k)-E_m]b_m = -[\varepsilon(k)-E_m]\left[\sum_n\left(\sum_{R\neq 0}\int \Psi_m^*(r)\Psi_n(r-R)e^{ik.R}\,dr\right)b_n\right]=$$

$$\sum_n\left(\int \Psi_m^*(r)\Delta U(r)\Psi_n(r)e^{ik.R}\,dr\right)b_n$$

$$+\sum_n\left(\sum_{R\neq 0}\left(\int \Psi_m^*(r)\Delta U(r)\Psi_n(r-R)e^{ik.R}\,dr\right)\right)b_n$$

- Ou seja, temos um problema secular M × M envolvendo os coeficientes b_m, cada solução nos dá uma função $\varepsilon_n(k)$ (M bandas). envolvendo bm

- Notemos que, de acordo com pag. 27, todas as integrais devem ser << 1; ou envolve o overlap entre funçoes em sítios distintos ou funções atômicas e ΔU.
- No limite $[\varepsilon(k) - E_m]b_m \sim 0$, ou seja, b_m só é considerável quando $\varepsilon(k) \sim E_m$
- Em geral, alguns vizinhos (R) são considerados para obter as funções *f, g e h.*

$$[\varepsilon(k) - E_m](b_m + \sum_n f_{m,n}(k) b_n) =$$

$$\sum_n (g_{m,n}(k) + h_{m,n}(k)) b_n$$

Subníveis s

- Consideremos o subnível s (sem spin);
- Temos um único: E, b e Ψ;

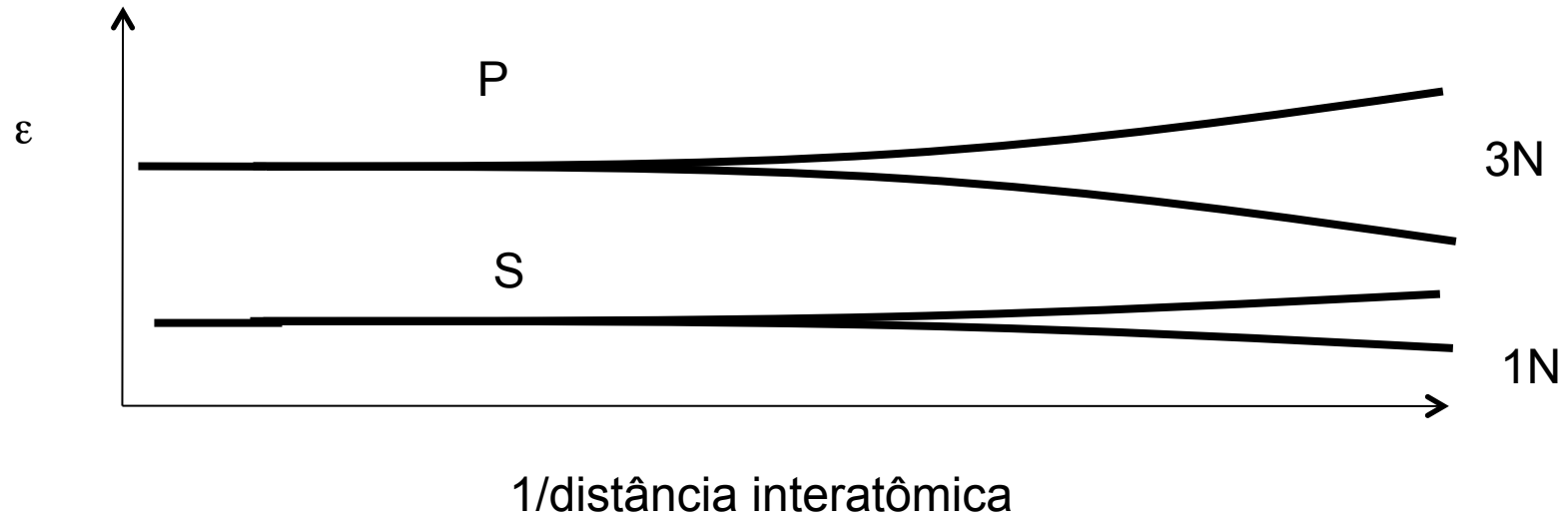
$$[\varepsilon(k) - E](b + f(k)b) = (g(k) + h(k))b \Rightarrow$$

$$\varepsilon(k) = E + \frac{g(k) + h(k)}{1 + f(k)}$$

- Onde as funções g, h e k são obtidas considerando um certo número de vizinhos…e depois considerando ajustes experimentais.

Subníveis p

- Consideremos o subnível p (sem spin);
- Temos um único: três pares b_i, Ψ_i;
- Obtemos um sistema 3 x 3 com três bandas.



k.p

- O método k.p usa uma aproximação perturbativa para obter as ondas de Bloch próximas do centro da zona de Brillouin;
- A partir de ajustes experimentais é possível obter informações importante até relacionadas com transições entre bandas.

- Considere a onda de Bloch:

$$\Psi_k = e^{ik.r} u_k(r)$$

- Considere a equação de Schoroendinger:

$$[\frac{p^2}{2m} + U(r)]\Psi_k = \varepsilon_k \Psi_k ; p = -i\hbar\nabla$$

- Se substituirmos Ψ_k, obtemos:

$$[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(r) + \frac{\hbar}{m} k.p]u_k(r) = (\varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})u_k(r)$$

- Ou seja, obtemos uma equação para a parte periódica da onda de Bloch.

- Notem que para k=0, temos $u_0(r)$, que satisfaz:

$$[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+U(r)]u_0(r)=\varepsilon_0 u_0(r)$$

- Considerando que *U(r)* é essencialmente o potencial atômico é plausível pensar que $u_0(r)$ deve ser muito próximo a um orbital atômico.
- Considerando que temos N orbitais atômicos de (dos orbitais que interagem no cristal) $u_{0n}(r)$ com energia ε_{0n}, o modelo ***k.p*** propõe que podemos escrever $u_k(r)$ como uma combinação linear de $u_{0n}(r)$.

$$u_k(r)=\sum_n^N c_n u_{0n}(r)$$

- Para k≠0 temos então que a equação:

$$[H_{at} + \frac{\hbar}{m} k.p]u_k(r) = \left(\varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)u_k(r); H_{at}u_{0n}(r) = \varepsilon_n u_{0n}(r)$$

- Substituindo $u_k(r)$ da página 35, multiplicando por $u_{0m}^*(r)$ e integrando em todo espaço, temos:

$$\sum_n \left(\delta_{mn}\varepsilon_n + (k.p)_{mn}\right)c_n = \sum_n \lambda(k)\delta_{mn}c_n;$$

$$(\delta_{mn}(\varepsilon_n - \lambda(k)) + (k.p)_{mn})c_n = 0$$

$$\lambda(k) \equiv \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \int u_{0m}^*(r) H_{at} u_{0n}(r) = \delta_{mn}\varepsilon_n.$$

$$(k.p)_{mn} \equiv \frac{\hbar}{m}\int u_{0m}^*(r)(k.p)u_{0n}(r) = \frac{\hbar k}{m}.\int u_{0m}^*(r)\, p u_{0n}(r) = \frac{\hbar k}{m}.p_{mn}$$

- Consideremos uma base com 3 estados com energia ε_1, ε_2 e ε_3, temos o seguinte
- determinante:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 - \lambda(k) & \frac{\hbar}{m} k.p_{12} & \frac{\hbar}{m} k.p_{13} \\ \frac{\hbar}{m} k.p_{21} & \varepsilon_2 - \lambda(k) & \frac{\hbar}{m} k.p_{23} \\ \frac{\hbar}{m} k.p_{31} & \frac{\hbar}{m} k.p_{32} & \varepsilon_3 - \lambda(k) \end{vmatrix} = 0$$

- Desta solução, obtemos três soluções, três bandas.
- Notem que se ***k.p*** for nulo, as soluções são todas puramente parabólicas.

Modelo de Kane

- Consideremos como base os estados s-p dos quatro elétrons de valência do nível ns^2np^2 ;
- Estes estados são auto-estados dos operadores J e J_z;
- Notemos que estes auto-estados já incluem a interação spin-órbita com separação $-\Delta$.

u_i	$\lvert J, m_J \rangle$	ψ_{J,m_J}	$\varepsilon_i(k=0)$	
u_1	$\left\lvert \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$i\lvert S\uparrow\rangle$	0	Γ_6
u_3	$\left\lvert \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}\lvert Z\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\lvert (X+iY\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_5	$\left\lvert \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\lvert X+iY)\uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_7	$\left\lvert \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\lvert X+iY)\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\lvert Z\uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0 - \Delta$	Γ_7
u_2	$\left\lvert \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$	$i\lvert S\downarrow\rangle$	0	Γ_6
u_4	$\left\lvert \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}\lvert X-iY)\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\lvert Z\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_6	$\left\lvert \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\lvert X-iY)\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_8	$\left\lvert \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\lvert X-iY)\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\lvert Z\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0 - \Delta$	Γ_7

- Seguindo o método k.p, a partir desta base, temos uma matriz 8x8 envolvendo k_x, k_y ,k_z e P, onde:

$$P \equiv \frac{-i}{m}\langle S|p_x|X\rangle = \frac{-i}{m}\langle S|p_y|Y\rangle = \frac{-i}{m}\langle S|p_z|Z\rangle$$

- Considerando **k**=k_z**z**, o problema se reduz a uma matriz 4x4. Esta aproximação é de certa forma arbitrária, mas intuitiva para obtermos o comportamento próximo ao ponto Γ.
- Obtemos o seguinte problema secular:

	$\lvert iS\uparrow\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\lvert iS\downarrow\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$
$\langle iS\uparrow\rvert$	$\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$
$\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rvert$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\varepsilon_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	0	0	$\frac{P}{\sqrt{3}}\hbar k_-$	0	0	0
$\left\langle\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rvert$	$P\hbar k_-$	0	$-\varepsilon_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	0	0	0	0	0
$\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rvert$	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\varepsilon_0-\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\langle iS\downarrow\rvert$	0	$\frac{P}{\sqrt{3}}\hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_-$	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z$
$\left\langle\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rvert$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\varepsilon_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	0	0
$\left\langle\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rvert$	0	0	0	0	$P\hbar k_+$	0	$-\varepsilon_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$	0
$\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rvert$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\varepsilon_0-\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$

$$k_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(k_x \pm ky\right)$$

$$\begin{vmatrix} \lambda(k) & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & \lambda(k)+\varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda(k)+\varepsilon_0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & 0 & \lambda(k)+\varepsilon_0+\Delta \end{vmatrix} = 0$$

- Uma primeira solução é obviamente $\lambda(k)=-\varepsilon_0$; ou seja uma banda parabólica com concavidade positiva com mínimo em $-\varepsilon_0$

- Resta resolvermos:

$$\lambda(\lambda+\varepsilon_0)(\lambda+\varepsilon_0+\Delta)=\hbar^2P^2k^2(\lambda+\varepsilon_0+\frac{2}{3}\Delta)$$

- Se a perturbação (P) fosse nula, uma solução de ordem zero seria:

$$\lambda_1^{(0)}=0;\lambda_2^{(0)}=-\varepsilon_0;\lambda_3^{(0)}=-\varepsilon_0-\Delta$$

- Para P pequeno, substituímos a raiz de ordem zero na equação, com exceção do termo correspondente àquela raiz.
- Poe exemplo para a raiz 1:

$$\lambda(\varepsilon_0)(\varepsilon_0+\Delta)=\hbar^2P^2k^2(\varepsilon_0+\frac{2}{3}\Delta)$$

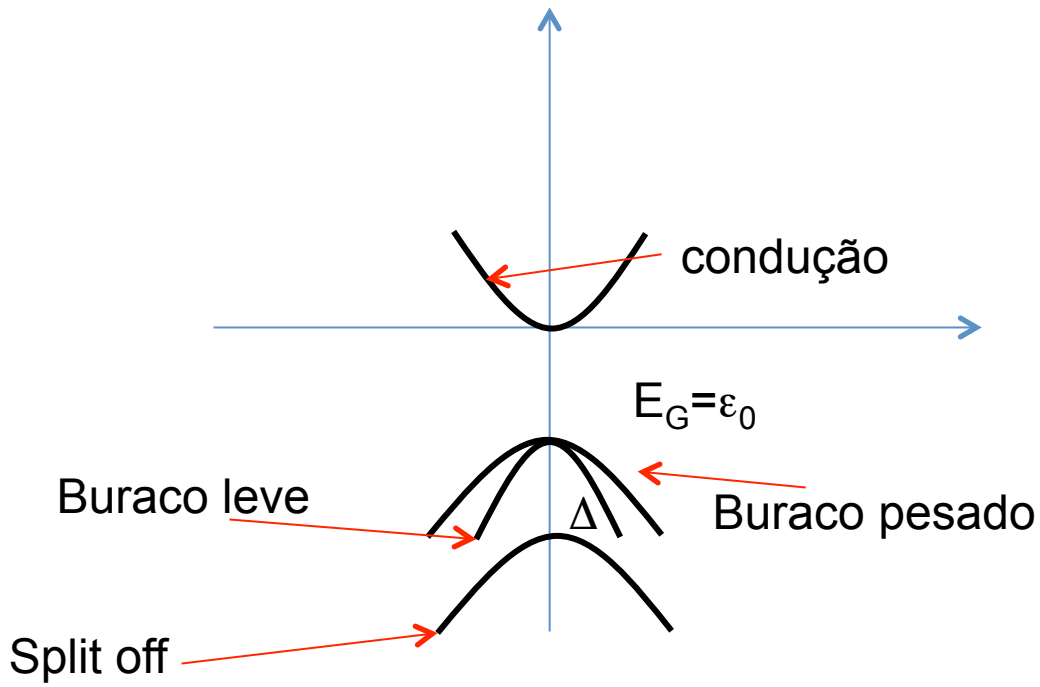
- Então:

$$\lambda_1^{(1)} = \hbar^2 P^2 k^2 \frac{(\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)};$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar^2 P^2 k^2 \frac{(\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{m} + \frac{P^2(\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta)}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)}$$

- As outras bandas ficam como exercício;

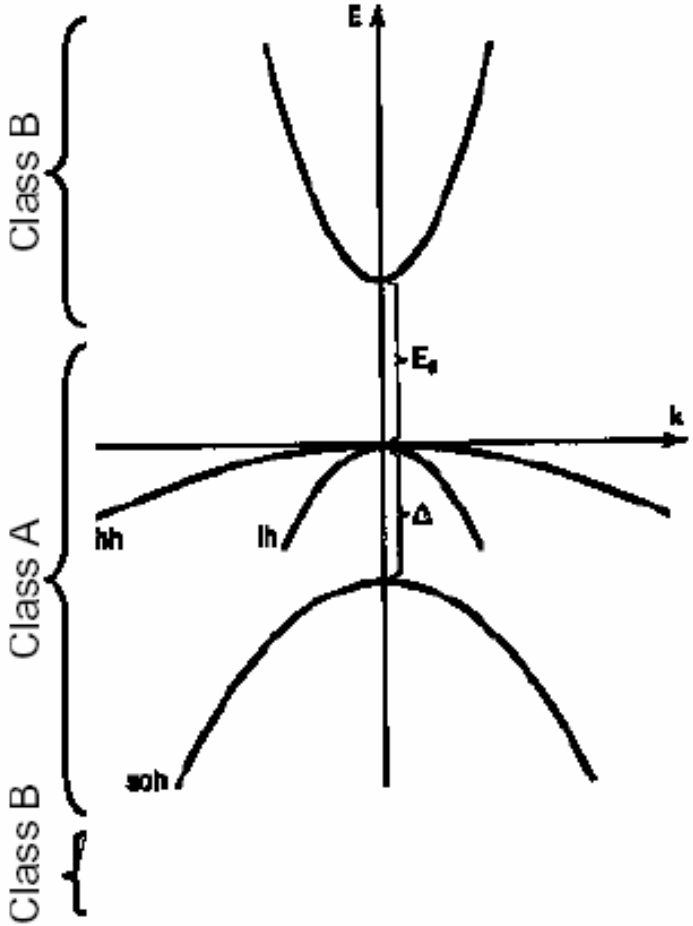
- Esta banda corresponde à banda de condução. De fato, esta é a única banda que o modelo prevê corretamente (notem que é a única com a concavidade certa).
- Notem também que a concavidade (relacionada com a massa) não é igual à do elétron livre.
- Também, se medimos propriedades como m*, ε_0 (gap) e Δ, podemos obter o elemento de matriz do operador momento entre estados da banda de condução e de valência. Este elemento é fundamental no cálculo de probabidade de transição.



- As bandas de valência não têm as concavidades certas.

Luttinger-Kohn

- Seguimos o modelo de Kane.
- No entanto iremos considerar outras bandas (classe B) como perturbação



- Conforme o modelo de Kane, tínhamos:

$$\sum_{n}^{A}\left[(\lambda(k)-\varepsilon_n)\delta_{mn}+U_{mn}\right]c_n=0;$$

Onde U_{mn} é a perturbação.Se quiséssemos levar em conta as outras bandas, teríamos que somar:

$$\sum_{n}^{A}\left[(\lambda(k)-\varepsilon_n)\delta_{mn}+U_{mn}\right]c_n+\sum_{\alpha\neq m}^{B}\left[(\lambda(k)-\varepsilon_\alpha)\delta_{m\alpha}+U_{m\alpha}\right]c_\alpha=0;$$

$$\sum_{n\neq m}^{A}U_{mn}c_n+\sum_{\alpha\neq m}^{B}U_{\alpha n}c_\alpha+[\lambda(k)-\varepsilon_m+U_{mm}]c_m=0;$$

$$[\lambda(k)-\varepsilon_m-U_{mm}]c_m=\sum_{n\neq m}^{A}U_{mn}c_n+\sum_{\alpha\neq m}^{B}U_{\alpha n}c_\alpha$$

Notem que no segundo somatório tiramos a=m pois não estamos interessados em obter os coeficientes ds bandas B

$$c_m = \frac{\sum_{n\neq m}^{A} U_{mn} c_n}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]} + \frac{\sum_{\alpha\neq m}^{B} U_{\alpha n} c_\alpha}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]} =$$

Reaplica recursivamente aqui e eliminamos termos maiores que segunda ordem.

$$c_m = \frac{\sum_{n=m}^{A} U_{mn}(1-\delta_{mn}) c_n}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]} + \frac{\sum_{\alpha\neq m}^{B} U_{\alpha n} c_\alpha}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]} =;$$

$$c_m = \frac{\sum_{n=m}^{A} U_{mn}(1-\delta_{mn}) c_n}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]} + \frac{\sum_{\alpha\neq m}^{B} U_{m\alpha} \left[\frac{\sum_{n\neq m}^{A} U_{\alpha n} c_n}{[\varepsilon_\alpha - \lambda(k) - U_{\alpha\alpha}]} + \cancel{\frac{\sum_{\beta\neq \alpha}^{B} U_{\alpha\beta} c_\beta}{[\varepsilon_\alpha - \lambda(k) - U_{\alpha\alpha}]}} \right]}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]}$$

$$c_m = \frac{\sum_{n=m}^{A} c_n (U_{mn}^{A} - U_{mn}\delta_{mn})}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{mn}]}; U_{mn}^{A} \approx U_{mn} + \sum_{\alpha\neq m}^{B} \frac{U_{m\alpha} U_{\alpha n}}{[\varepsilon_m - \lambda(k) - U_{\alpha\alpha}]}$$

- AS bandas classe A de interesse são então as três bandas duplamente degeneradas: buraco leve, pesado e split off. As B são a banda de condução, a banda mais profunda que a split off e outras (em princípio).
- A base ficam as 6 auto funções do subnível p.
- Mostramos a matriz (Hamiltoniano)de LuttingerKohn a seguir.
- Obtemos então uma matriz 6x6. Conforme outras bandas são inseridas, é possível ajustar experimentalmente as os parâmetros das bandas e descrever melhor o sistema.

Luttinger-Kohn

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 = \frac{1}{3}\left[A_0 + 2B_0\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 = \frac{1}{6}\left[A_0 - B_0\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 = \frac{C_0}{6}$$

$$H_{LK} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} a_+ & b & c & 0 & ib/\sqrt{2} & -i\sqrt{2}\,c \\ b^* & a_- & 0 & c & if & i\sqrt{\frac{3}{2}}\,b \\ c^* & 0 & a_- & -b & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\,b^* & if \\ 0 & c^* & -b^* & a_+ & -i\sqrt{2}\,c^* & -ib^*/\sqrt{2} \\ -ib^*/\sqrt{2} & -if & i\sqrt{\frac{3}{2}}\,b & i\sqrt{2}\,c & d & 0 \\ i\sqrt{2}\,c^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\,b^* & -if & ib/\sqrt{2} & 0 & d \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \end{array}$$

$$a_\pm = E_v - (\gamma_1 \mp 2\gamma_2)\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_o} - (\gamma_1 \pm \gamma_2)\frac{\hbar^2}{2m_o}\left(k_x^2 + k_y^2\right)$$

$$b = i2\sqrt{3}\,\gamma_3 \frac{\hbar^2}{2m_o}\left(k_x - ik_y\right)k_z$$

$$c = -\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_o}\left[\gamma_2\left(k_x^2 - k_y^2\right) - 2i\gamma_3 k_x k_y\right]$$

$$d = E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_o}\gamma_1 k^2$$