バンド理論 課題 (2020/4/30)

1. 緩やかに変化するポテンシャル $V(x)$ 中の電子の状態を、波数 k を持つ平面波の重ね合わせとしてあらわす。x を小さい幅 h の区間に区切り、位置 $x_i \sim x_{i+1} = x_i + h$ の範囲では ポテンシャルは $\mathrm{V}(x_i)$ で一定と近似する。転送行列法の以下の関係式を導け。

$$\Psi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \qquad k_i = \sqrt{\frac{m_i}{\hbar^2}(E - V_i)}$$

境界条件

$$\Psi_i(x_{i+1}) = \Psi_{i+1}(x_{i+1}) \qquad {m_i}^{-1}{\Psi_i}'(x_{i+1}) = {m_{i+1}}^{-1}{\Psi_{i+1}}'(x_{i+1})$$

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {\alpha^+}_i P_i & {\alpha^-}_i / Q \\ {\alpha^-}_i Q & {\alpha^+}_i / P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$${\alpha^\pm}_i = \frac{1}{2}[1 \pm (m_{i+1}/m_i)(k_i/k_{i+1})]$$

$$P_i = \exp[i(k_i - k_{i+1})x_{i+1}]$$

$$Q_i = \exp[i(k_i + k_{i+1})x_{i+1}]$$

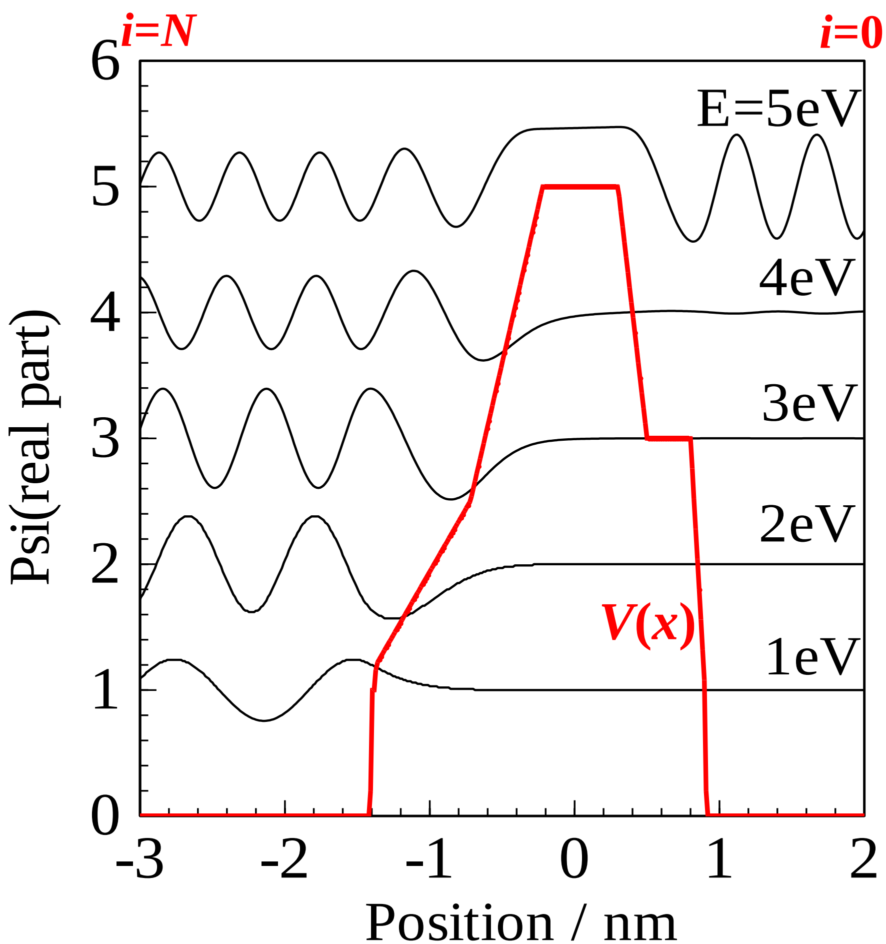
PowerPoint 等 のファイルで提出

期限: 今日の17:00までにできたところまでで可

平面波近似: 転送行列法

H. Mizuta, T. Tanoue, "The Physics and Applications of Resonant Tunnelling Diodes," Cambridge Univ Press (1995)

$$\Psi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \qquad k_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2}(E - V_i)}$$



境界条件

$$\Psi_i(x_{i+1}) = \Psi_{i+1}(x_{i+1})$$

$$m_i^{-1}\Psi'_i(x_{i+1}) = m_{i+1}^{-1}\Psi'_{i+1}(x_{i+1})$$

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^{+}{}_i P_i & \alpha^{-}{}_i / Q_i \\ \alpha^{-}{}_i Q_i & \alpha^{+}{}_i / P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$\alpha^{\pm}{}_i = \frac{1}{2}\left[1 \pm (m_{i+1}/m_i)(k_i/k_{i+1})\right]$$

$$P_i = \exp\left[i(k_i - k_{i+1})x_{i+1}\right]$$

$$Q_i = \exp\left[i(k_i + k_{i+1})x_{i+1}\right]$$

有効媒質近似・有効質量近似

半導体は原子がとびとびに並んでいるが・・・・

バンド理論、Blochの定理により、

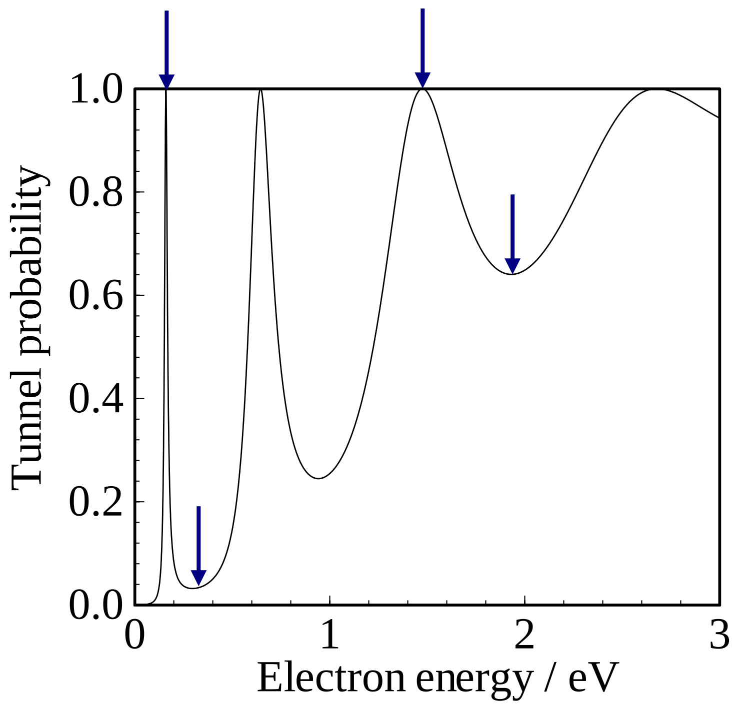
バンド $E(k)$ にある電子には周期的に並んだ原子による散乱は受けない

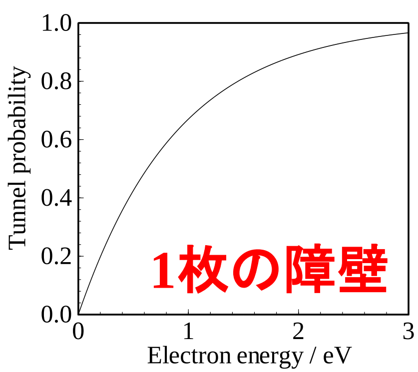
・誘電率 ε の均質媒質と近似できる

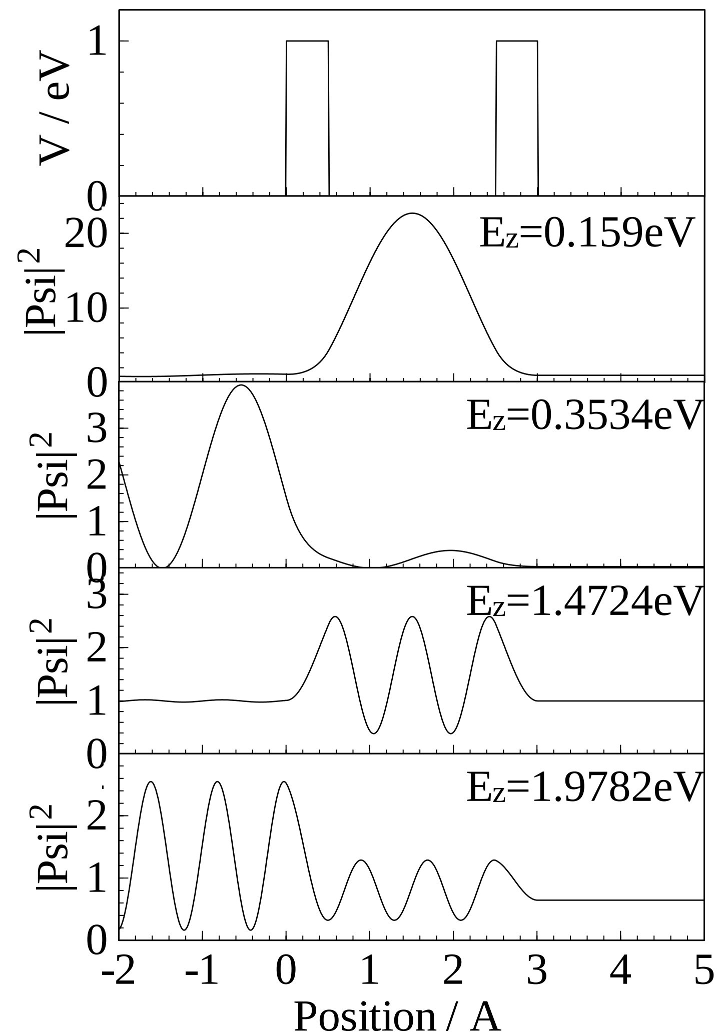
・電子は有効質量 m_e^* と電荷 $-|e|$ を持つ粒子と近似できる

ε、m_e^*、m_h^* がわかると、
いろいろな物性値を計算できる

2枚の障壁のトンネル(QW, RTD)







質量を含んだShrödinger方程式の境界条件

$$\frac{\hbar^2}{2m(x)}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=2(V(x)-E)\psi(x)$$

$m(x)$は $x_0-h \sim x_0$ と $x_0 \sim x_0+h$ の範囲で一定とし、
両辺を x_0-h から x_0+h の範囲で積分する

$$\frac{\hbar^2}{2m(x_0+h)}\psi'(x_0+h)-\frac{\hbar^2}{2m(x_0-h)}\psi'(x_0-h)=\int_{x_0-h}^{x_0+h}(V(x)-E)\psi(x)dx$$

$$=h[(V(x_0+h)-E)\psi(x_0+h)+(V(x_0-h)-E)\psi(x_0-h)]$$

$$\sim h[V(x_0+h)+V(x_0-h)]\psi(x_0)$$

最後の変形で、x_0 において $\Psi(x)$ が連続の条件を用いた。

さらに、**$[V(x_0+h)+V(x_0-h)]$ が $1/h$ よりも十分小さければ、** h => 0 で

$$m(x_0+h)^{-1}\psi'(x_0+h)=m(x_0-h)^{-1}\psi'(x_0-h)$$

有限の井戸型ポテンシャルでは h => 0で $h\mathrm{V}_0$ => 0 であるから、
一次微分も x_0 で連続である必要がある。

課題回答 (2020/4/30)

$$\Psi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \qquad k_i = \sqrt{\frac{m_i}{\hbar^2}(E - V_i)}$$

境界条件: 波動関数の連続条件

$$\boldsymbol{\Psi_i(x_{i+1}) = \Psi_{i+1}(x_{i+1})}$$

$$A_i e^{ik_i x_{i+1}} + B_i e^{-ik_i x_{i+1}} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} x_{i+1}} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} x_{i+1}}$$

$$A_{i+1} + B_{i+1} e^{-i2k_{i+1} x_{i+1}} = A_i e^{i(k_i - k_{i+1}) x_{i+1}} + B_i e^{-ik_i (k_i + k_{i+1}) x_{i+1}}$$

$$A_{i+1} + B_{i+1} e^{-i2k_{i+1} x_{i+1}} = A_i P_i + B_i / Q_i$$

$$P_i = \exp[i(k_i - k_{i+1}) x_{i+1}]$$

$$Q_i = \exp[i(k_i + k_{i+1}) x_{i+1}]$$

境界条件: 波動関数の一次微分の連続条件

$$\boldsymbol{{m_i}^{-1} {\Psi_i}'(x_{i+1}) = {m_{i+1}}^{-1} {\Psi_{i+1}}'(x_{i+1})}$$

$$k_i {m_i}^{-1} \left[A_i e^{ik_i x_{i+1}} - B_i e^{-ik_i x_{i+1}} \right] = k_{i+1} {m_{i+1}}^{-1} \left[A_{i+1} e^{ik_{i+1} x_{i+1}} - B_{i+1} e^{-ik_{i+1} x_{i+1}} \right]$$

$$A_{i+1} - B_{i+1} e^{-i2k_{i+1} x_{i+1}} = \beta_i [A_i P_i - B_i / Q_i]$$

$$\beta_i = (m_{i+1} / m_i)(k_i / k_{i+1})$$

課題回答 (2020/4/30)

$$A_{i+1} + B_{i+1}e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} = A_i P_i + B_i/Q_i$$

$$P_i = \exp[i(k_i - k_{i+1})x_{i+1}]$$

$$Q_i = \exp[i(k_i + k_{i+1})x_{i+1}]$$

$$A_{i+1} - B_{i+1}e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} = \beta_i[A_i P_i - B_i/Q_i]$$

$$\beta_i = (m_{i+1}/m_i)(k_i/k_{i+1})$$

$$\begin{pmatrix} 1 & e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} \\ 1 & -e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_i & 1/Q_i \\ \beta_i P_i & -\beta_i/Q_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} e^{i2k_{i+1}x_{i+1}} \begin{pmatrix} -e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} & -e^{-i2k_{i+1}x_{i+1}} \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_i & \frac{1}{Q_i} \\ \beta_i P_i & -\frac{\beta_i}{Q_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i2k_{i+1}x_{i+1}} & -e^{i2k_{i+1}x_{i+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_i & 1/Q_i \\ \beta_i P_i & -\beta_i/Q_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1+\beta_i)P_i & (1-\beta_i)/Q_i \\ e^{i2k_{i+1}x_{i+1}}(1-\beta_i)P_i & e^{i2k_{i+1}x_{i+1}}(1+\beta_i)/Q_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha^+{}_i P_i & \alpha^-{}_i/Q_i \\ \alpha^-{}_i Q_i & \alpha^+{}_i/P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$\alpha^\pm{}_i = \frac{1}{2}[1 \pm (m_{i+1}/m_i)(k_i/k_{i+1})] = \frac{1}{2}[1 \pm \beta_i]$$

物質流密度と連続の方程式

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi d\boldsymbol{r} = \int \left(\Psi^* \frac{d}{dt}\Psi + \frac{d}{dt}\Psi^*\Psi\right) d\boldsymbol{r}$$

$$\frac{d}{dt}\Psi = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\boldsymbol{r})\Psi\right)$$

$$\frac{d}{dt}\Psi^* = -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V(\boldsymbol{r})\Psi^*\right)$$

を用いて

$$-\frac{\hbar}{2mi}\int(\Psi^*\nabla^2\Psi - (\nabla^2\Psi^*)\Psi)d\boldsymbol{r} = -\frac{\hbar}{2mi}\int \nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi)d\boldsymbol{r}$$

フラックス (物質流密度) を

$$J = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi)$$

と定義すると、連続の方程式

$$\frac{d}{dt}\Psi^*\Psi + \nabla \boldsymbol{J} = \boldsymbol{0}$$

が得られる

一次元モデルの電流

H. Mizuta and T. Tanoue, The physics and applications of resonant tunneling diodes, Cambridge Univ Press (1995)

z 方向にポテンシャル$V(z)$ があるとする

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left({k_x}^2 + {k_y}^2\right) + E_z \qquad \boldsymbol{k}_\parallel = (k_x, k_y)$$

電子が 左電極 (L, ${E_F}^L$) から 右電極 (R, ${E_F}^R$) に流れる電流

$$J = J_\rightarrow - J_\leftarrow$$

$$J_\rightarrow = 2\sum\nolimits_{k_x,k_y,k_z>0} ev_z T(E_z) f_L(\boldsymbol{k})(1 - f_R(\boldsymbol{k}))$$ **Tsu-Esaki formula**

$$= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty k_\parallel dk_\parallel \int_0^\infty dk_z\, ev_z T(E_z) f_L(k_\parallel, k_z)[1 - f_R(k_\parallel, k_z)]$$

$$J_\leftarrow = 2\sum\nolimits_{k_x,k_y,k_z<0} ev_z T(E_z) f_R(\boldsymbol{k})(1 - f_L(\boldsymbol{k}))$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty k_\parallel dk_\parallel \int_{-\infty}^\infty dk_z\, ev_z T(E_z) f_R(k_\parallel, k_z)[1 - f_L(k_\parallel, k_z)]$$

$$f_{L,R}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{1+\exp\left[\left(E(\boldsymbol{k}) - {E_F}^{L,R}\right)/kT\right]}$$

$$v_z = \frac{dE(k_z)}{dk_z}$$

k_x, k_y で積分して

$$\boldsymbol{J = \int_0^\infty dE_z T(E_z) S(E_z)}$$

一次元モデルの電流

H. Mizuta and T. Tanoue, The physics and applications of resonant tunneling diodes, Cambridge Univ Press (1995)

$$J = \int_0^{\infty} dE_z T(E_z) S(E_z)$$

$$S(E_z) = \frac{m^* ekT}{2\pi^2 \hbar^3} \ln\left[\frac{1+\left[\left(E(k)-E_F{}^L\right)/kT\right]}{1+\left[\left(E(k)-E_F{}^R\right)/kT\right]}\right]$$

転送行列法より

$$\Psi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \qquad k_i = \sqrt{\frac{m_i}{\hbar^2}(E - V_i)}$$

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^+{}_i P_i & \alpha^-{}_i / Q \\ \alpha^-{}_i Q & \alpha^+{}_i / P_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$

$$\alpha^{\pm}{}_i = \frac{1}{2}\left[1 \pm (m_{i+1}/m_i)(k_i/k_{i+1})\right]$$

$$P_i = \exp[i(k_i - k_{i+1})x_{i+1}] \quad Q_i = \exp[i(k_i + k_{i+1})x_{i+1}]$$

$$(A^L, B^R) = (A_0, B_N) = (1,0)$$

$\Psi = A\exp(ikx)$ が担う電流は

$$J = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*)\Psi\right) = \frac{\hbar}{2m} k |A|^2$$

より、

$$T(E_z) = \frac{m^{*L}}{m^{*R}} \frac{k^R}{k^L} \frac{|A^R|^2}{|A^L|^2}$$