

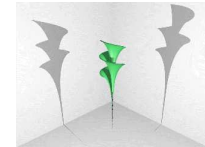
# Multi-band models for charge transport in semiconductor devices



Luigi Barletti

*Università di Firenze*

*Dipartimento di Matematica "Ulisse Dini"*



*Quantum-mechanical models for physics and technology*

20 Dicembre 2004 - LENS - Polo Scientifico di Sesto Fiorentino

# Modelli di dispositivi

- Classici

# Modelli di dispositivi

- Classici
- Semi-classici

# Modelli di dispositivi

- Classici
- Semi-classici
- Quantistici:  $\lambda_e \approx L_{\text{dev}}$

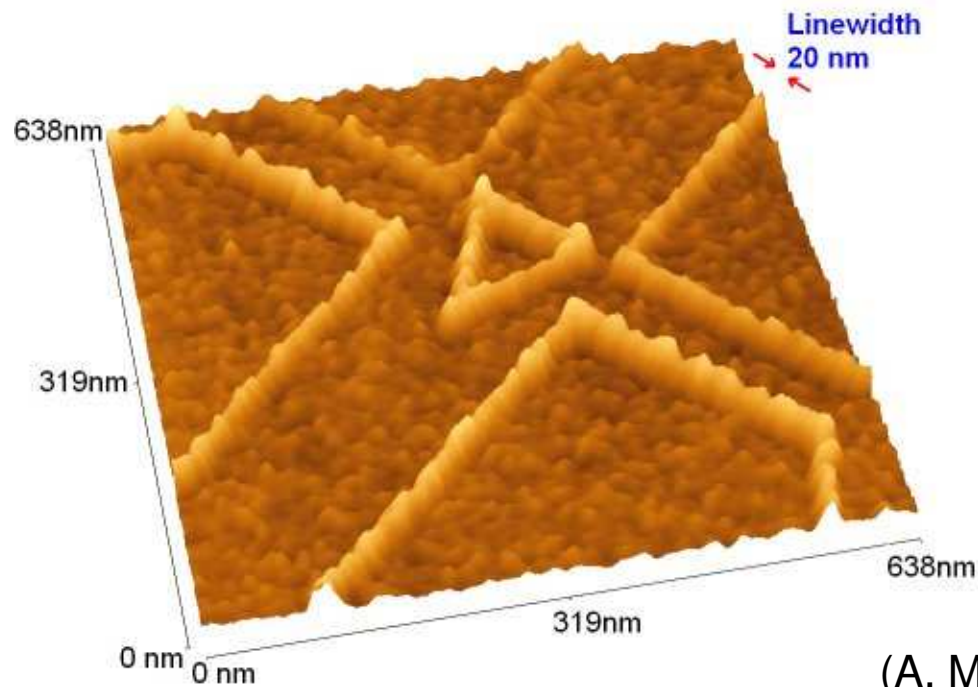
# Modelli di dispositivi

- Classici
- Semi-classici
- Quantistici:  $\lambda_e \approx L_{\text{dev}}$

Per un elettrone con impulso dell'ordine di  $10^{-25}$  Kg m/s, si ha  $\lambda_e \approx 10^{-9}$  m.

# Modelli di dispositivi

- Classici
- Semi-classici
- Quantistici:  $\lambda_e \approx L_{\text{dev}}$



(A. M. Song - Manchester)

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)



# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

Modelli di **singola banda**: *letteratura abbondante!*

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

Modelli di **singola banda**: *letteratura abbondante!*

Modelli **multi-banda**:

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

Modelli di **singola banda**: *letteratura abbondante!*

- ben sviluppato Schrödinger

Modelli **multi-banda**:

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

Modelli di **singola banda**: *letteratura abbondante!*

- ben sviluppato Schrödinger

Modelli **multi-banda**: ● c'è qualcosa su Wigner

# Modelli quantistici

- Equazione di Schrödinger / von Neumann
- Equazione di Wigner (“quasi-cinetica”)
- Equazioni idrodinamiche (grandezze “macroscopiche”)

Modelli di **singola banda**: *letteratura abbondante!*

- ben sviluppato Schrödinger

Modelli **multi-banda**:

- c'è qualcosa su Wigner
- pochissimo su HD!

# Attività del gruppo - 1

*Vari approcci all'equazione di Wigner multi-banda, aspetti fisici, analitici e numerici.*

L. Demeio, L. B., A. Bertoni, P. Bordone, C. Jacoboni, Wigner-function approach to multi-band transport in semiconductors, *Physica B*, 314, 104 (2002).

L. Demeio, P. Bordone, C. Jacoboni, Numerical and analytical applications of multiband transport in semiconductors, *Proc. XXIII RGD Symposium* (2002).

G. Borgioli, G. Frosali G., P. Zweifel, Wigner approach to the two-band Kane model for a tunneling diode, *Transport Theory Stat. Phys.* 3, 347 (2003).

L. B., Wigner envelope functions for electron transport in semiconductor devices, *Transport Theory Stat. Phys.* 32, 253 (2003).

*segue . . .*

# Attività del gruppo - 1

. . . segue

L. Demeio, L. B., P. Bordone, C. Jacoboni, Wigner function for multiband transport in semiconductors, *Transport Theory Stat. Phys.* **32**, 307 (2003).

L. Demeio, P. Bordone, C. Jacoboni, Multi-band, non-parabolic Wigner-function approach to electron transport in semiconductors, *J. Stat. Phys.*, sottoposto.



# Attività del gruppo - 2

*Hamiltoniane multi-banda; studio dei modelli esistenti e loro superamento; analisi asintotica rigorosa.*

G. Borgioli, O. Morandi, G. Frosali, M. Modugno, Different approaches for multi-band transport in semiconductors, *Ukrainian Math. J.*, in corso di stampa (2005).

O. Morandi, M. Modugno, A multiband envelope function model for quantum transport in a tunneling diode, *Phys.Rev. B*, sottoposto.

N. Ben Abdallah, L. B., Quantum transport in crystals: effective-mass theorem and k·p Hamiltonians, in preparazione.

# Attività del gruppo - 3

## *Modelli idrodinamici multi-banda (QHD - QDD - QET - etc.)*

G. Alì, G. Frosali, On the zero-temperature quantum hydrodynamic model for the two-band Kane system, preprint (2004).

G. Alì, G. Frosali, C. Manzini, Two-band quantum models for semiconductors arising from the Bloch envelope theory, Proc. SCEE-2004.

G. Alì, G. Frosali, C. Manzini, On the drift-diffusion model for a two-band quantum fluid at zero-temperature, *Ukrainian Math. J.*, in corso di stampa (2005).

L. B., Quantum moment equations for a two-band k-p Hamiltonian, *Boll. Unione Mat. Italiana*, in corso di stampa (2005).

L. B., A “spinorial” Wigner function describing the two-band k-p dynamics of electrons in crystals, Proc. di SIMAI04 (sottoposto).

*Modelli cinetici e idrodinamici a due bande:  
approccio tramite l'Hamiltoniana  $k \cdot p$   
e la funzione di Wigner "spinoriale"*

# Hamiltoniana k·p a due bande

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

$E_g$  = band-gap

$K = \langle u_v | \nabla | u_c \rangle$  = costante interbanda

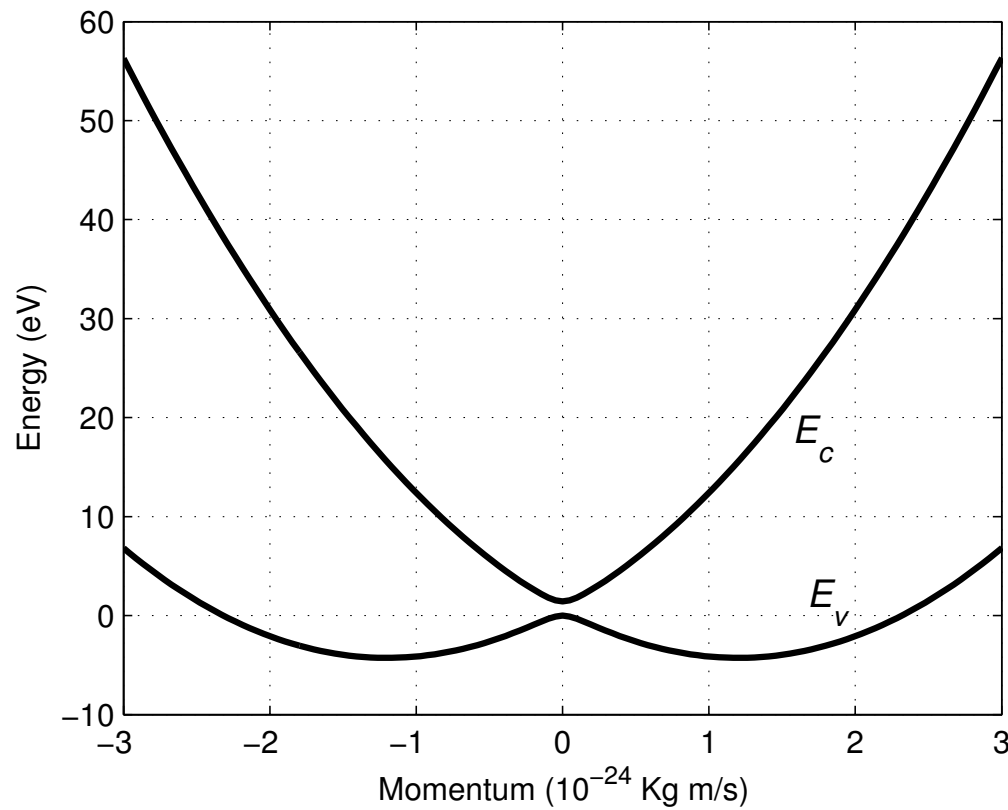
$V$  = potenziale “esterno”

---

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

# Hamiltoniana $k \cdot p$ a due bande

Ecco ad esempio la relazione di dispersione per il punto  $\Gamma$  del GaAs calcolata con questa Hamiltoniana:



# 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  $2 \times 2$  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:

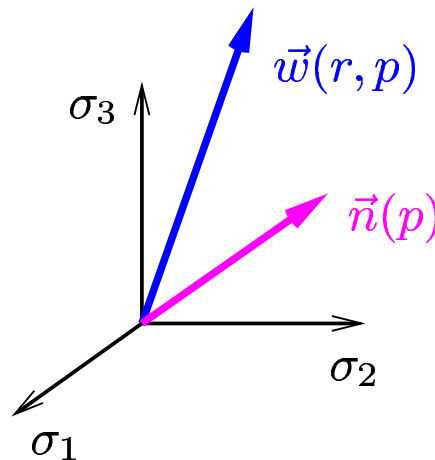
- 1, se l'elettrone è in **banda di conduzione**,
- 1, se l'elettrone è in **banda di valenza**.

# 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:

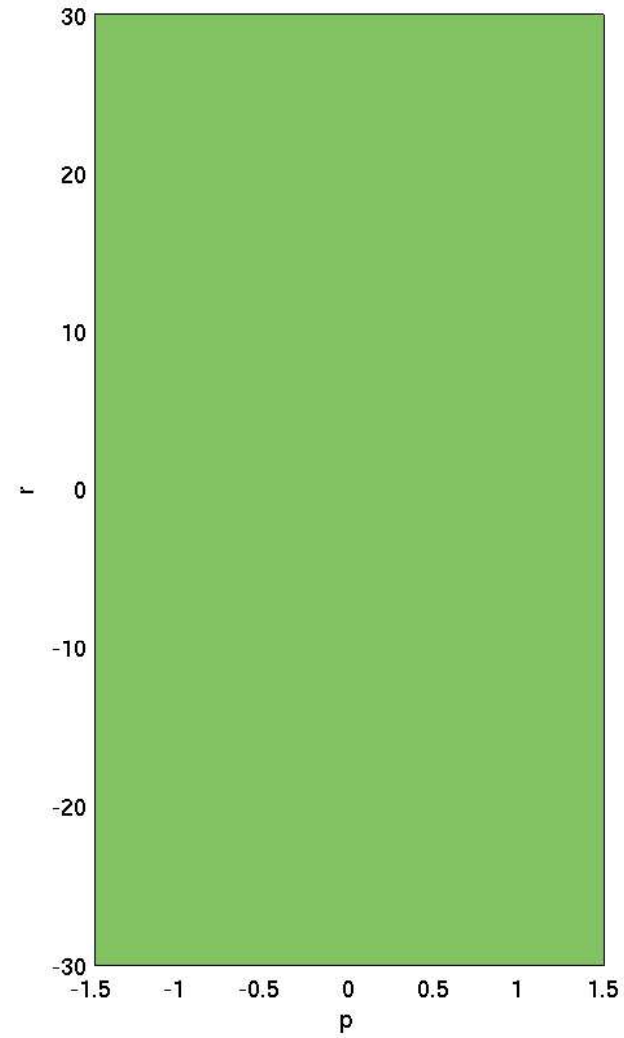
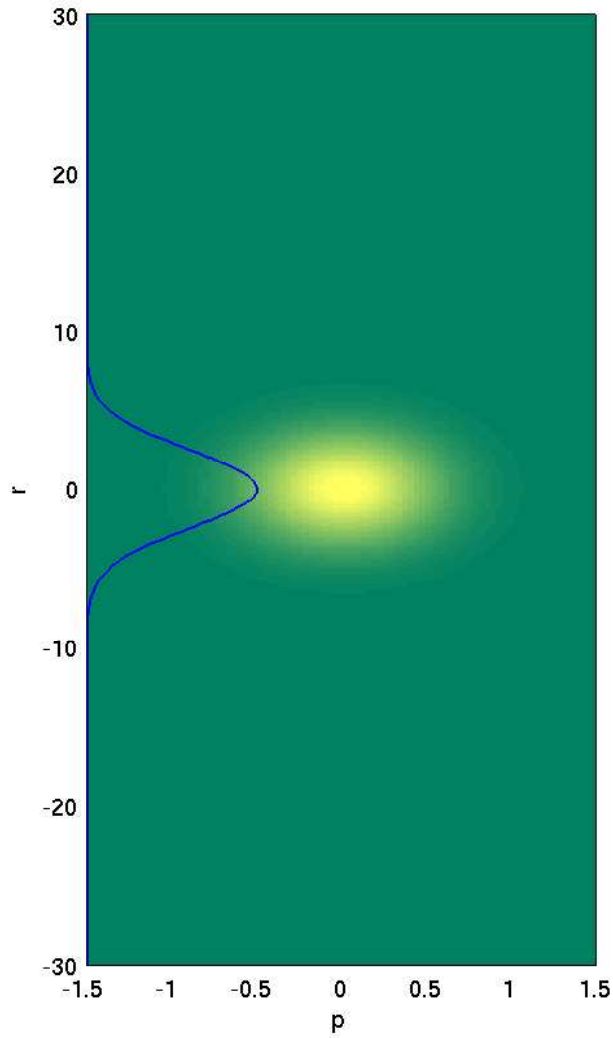
$$w_0(r, p, t = 0) = \frac{1}{2\pi \Delta_r \Delta_p} \exp\left(-\frac{r^2}{2\Delta_r^2} - \frac{p^2}{2\Delta_p^2}\right)$$

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

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

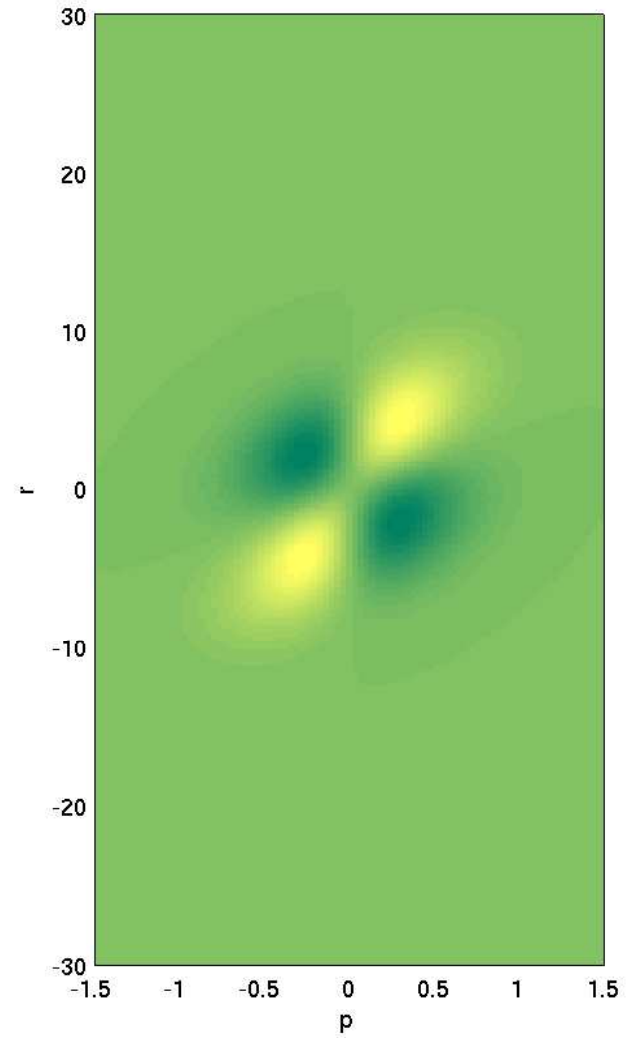
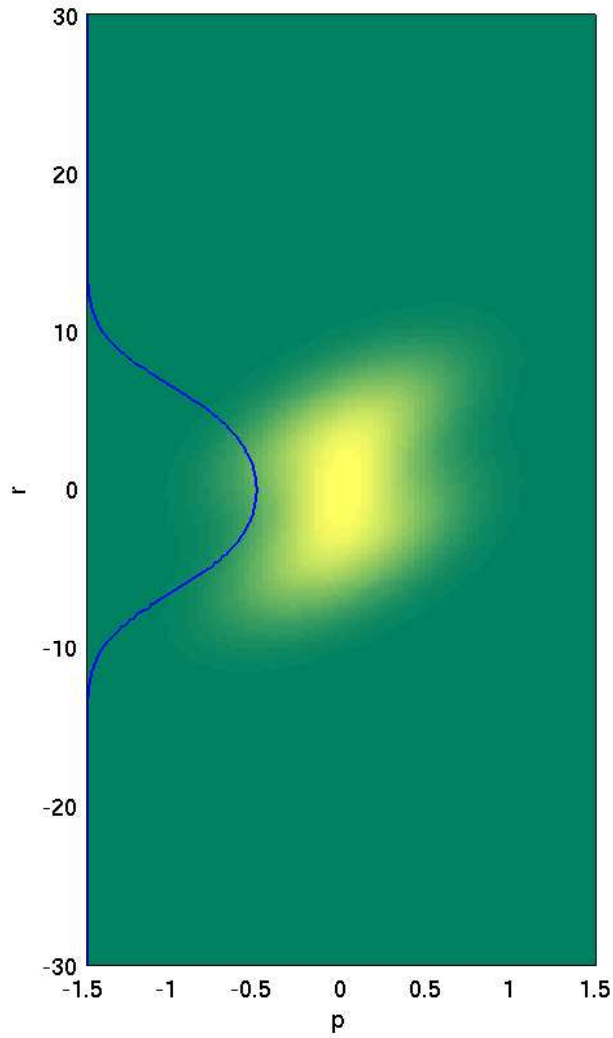
# Dinamica

$t = 0$



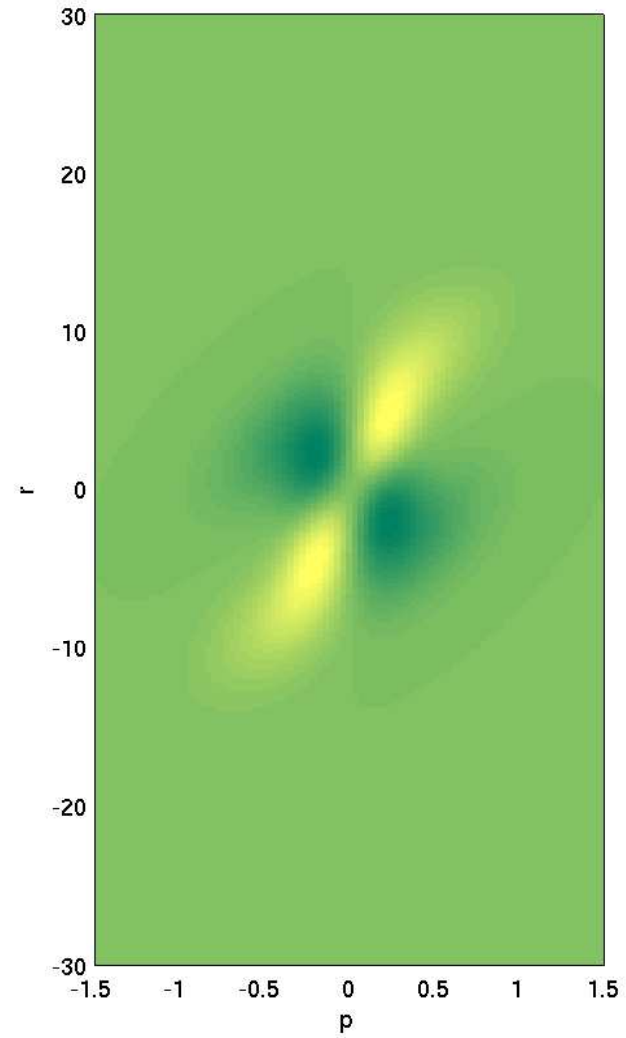
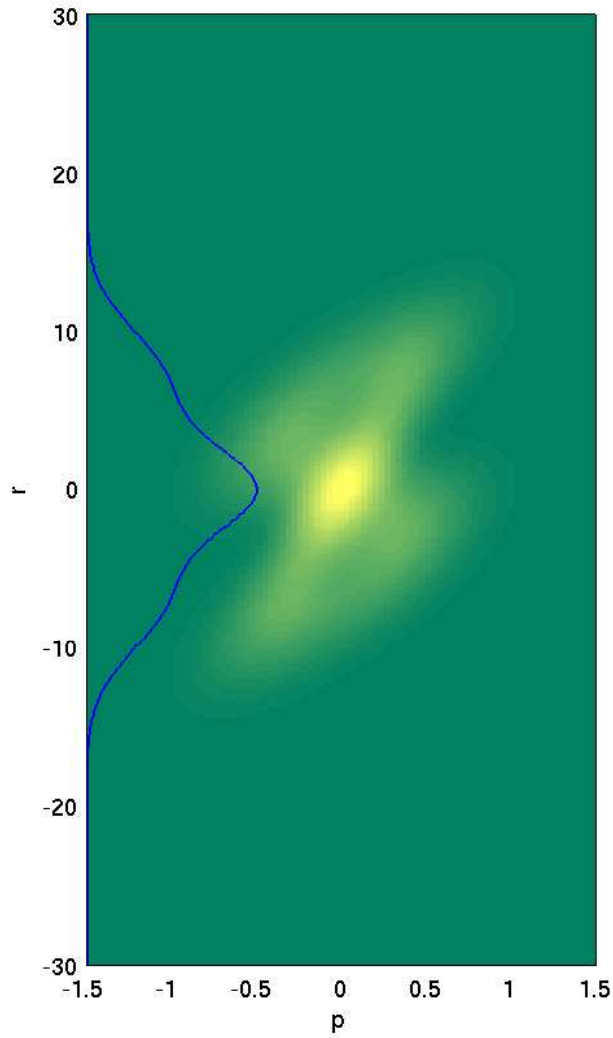
# Dinamica

$t = 4$



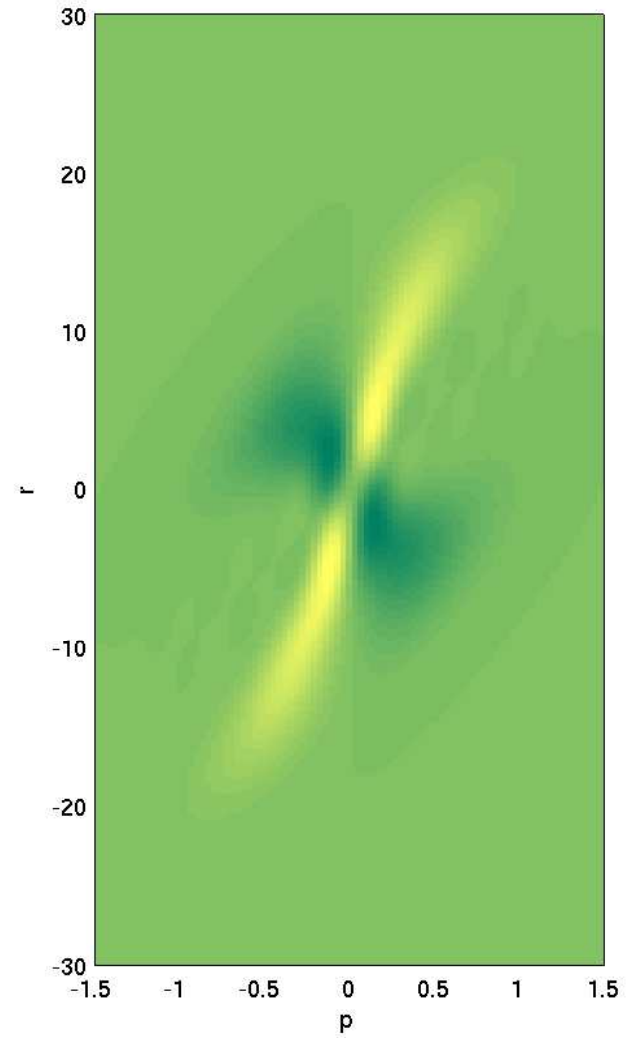
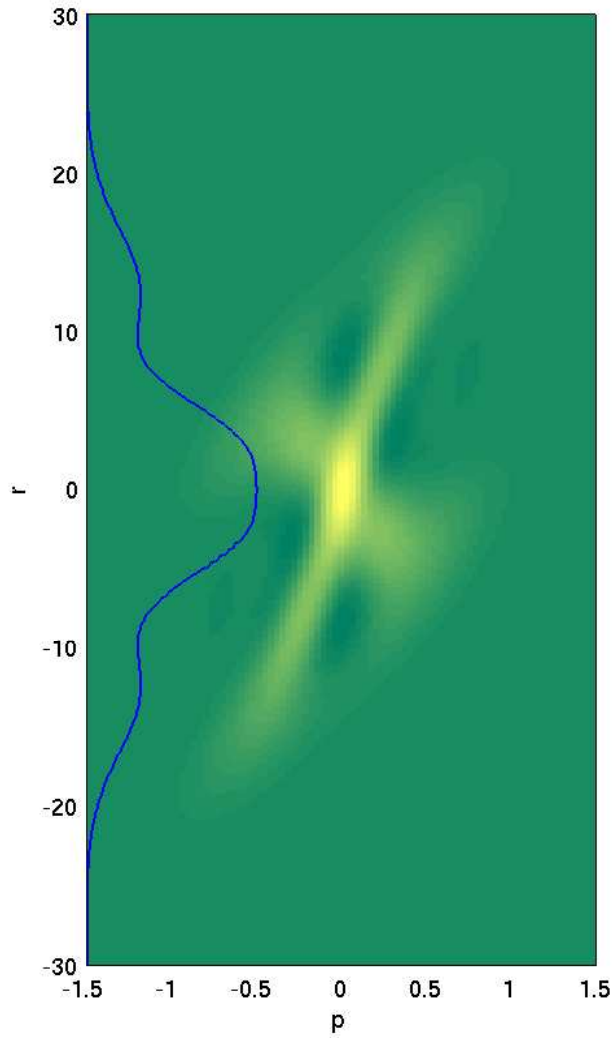
# Dinamica

$t = 6$



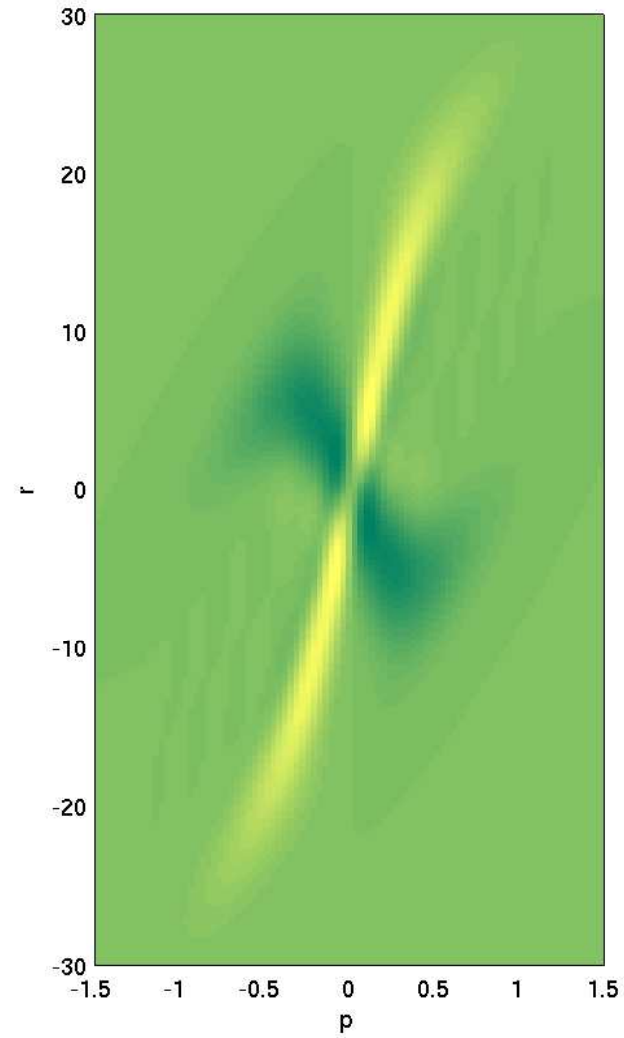
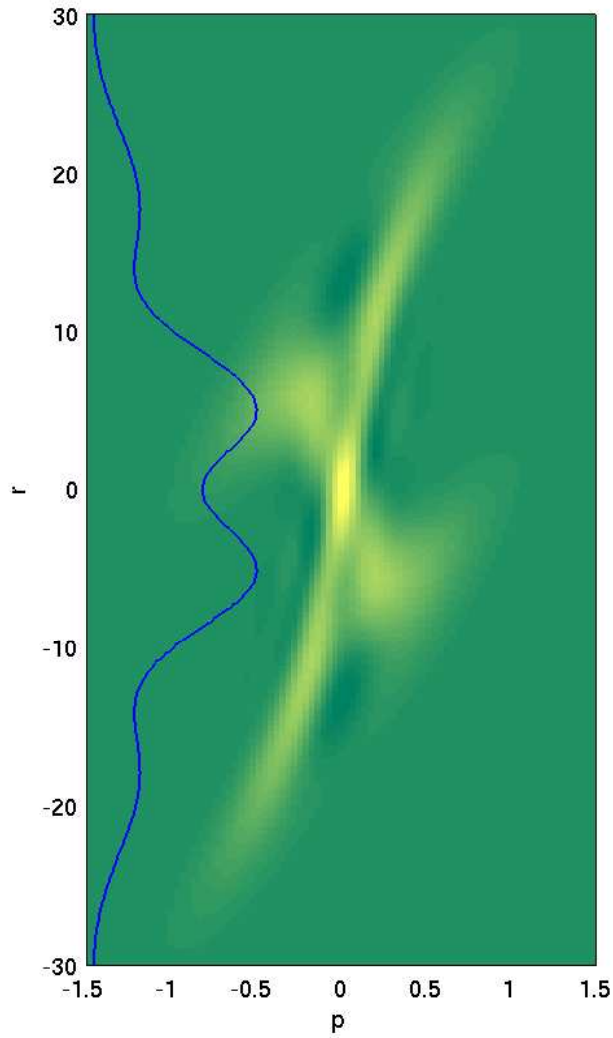
# Dinamica

$t = 10$



# Dinamica

$t = 14$



# Dinamica

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

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

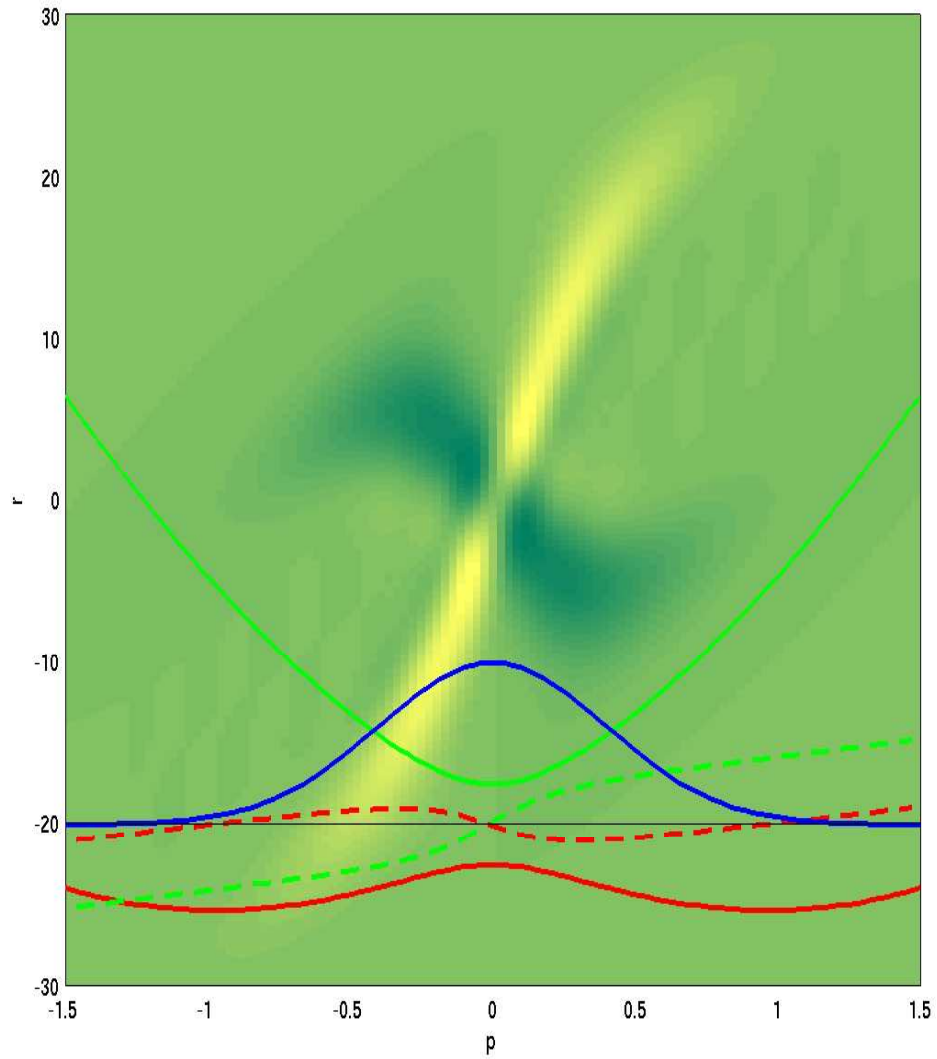
e quella in banda di **valenza**

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

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

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

Equazione di continuità per la densità totale:

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

# Equazioni dei momenti - ordine 1

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

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.*

# Ringraziamenti

MIUR - COFIN 2002

*Problemi Matematici delle Teorie Cinetiche*

Progetto “intragruppo” GNFM

*Modelli Matematici per la Microelettronica*