

Modelli matematici per il trasporto di cariche in dispositivi quantistici

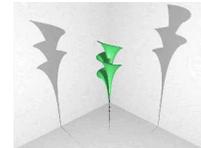
risultati e prospettive



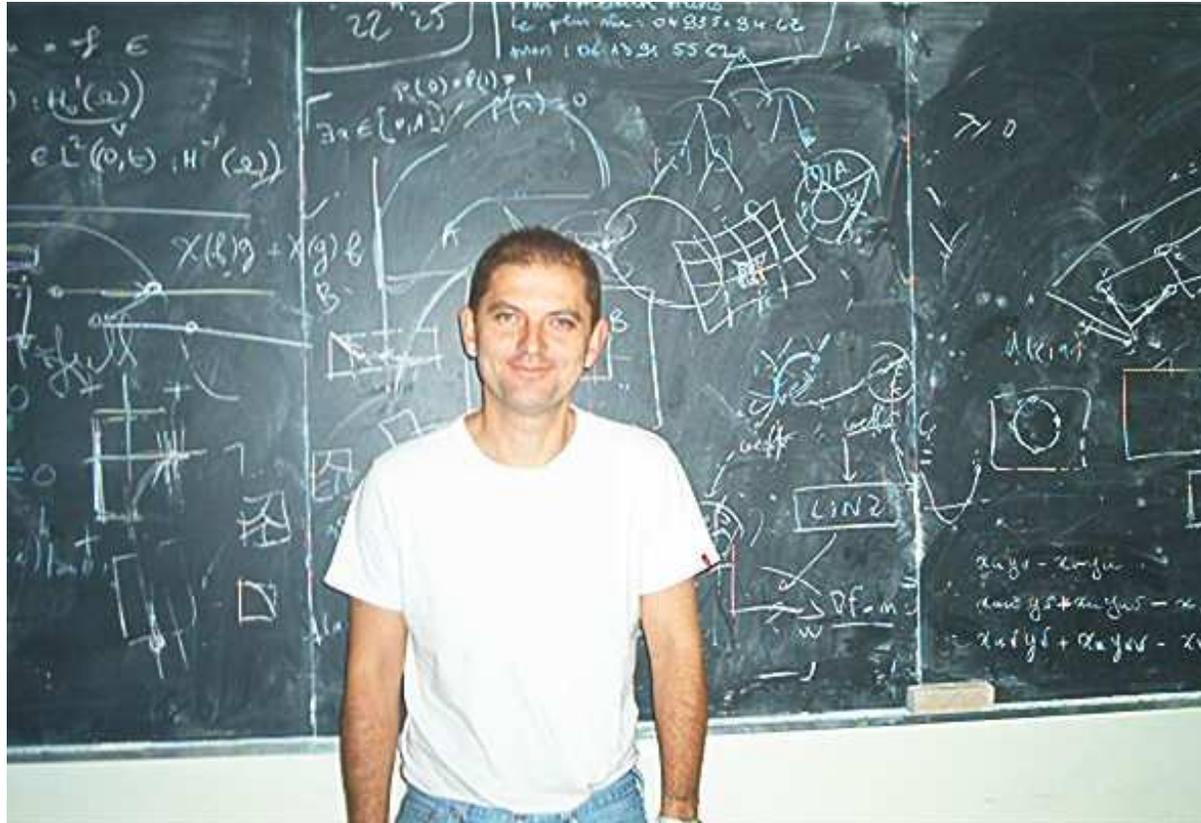
Luigi Barletti

Università di Firenze

Dipartimento di Matematica "Ulisse Dini"



Assemblea Scientifica GNFM, 28-30 ottobre 2004, Montecatini Terme



Frédéric Poupaud, 1961-2004

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

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

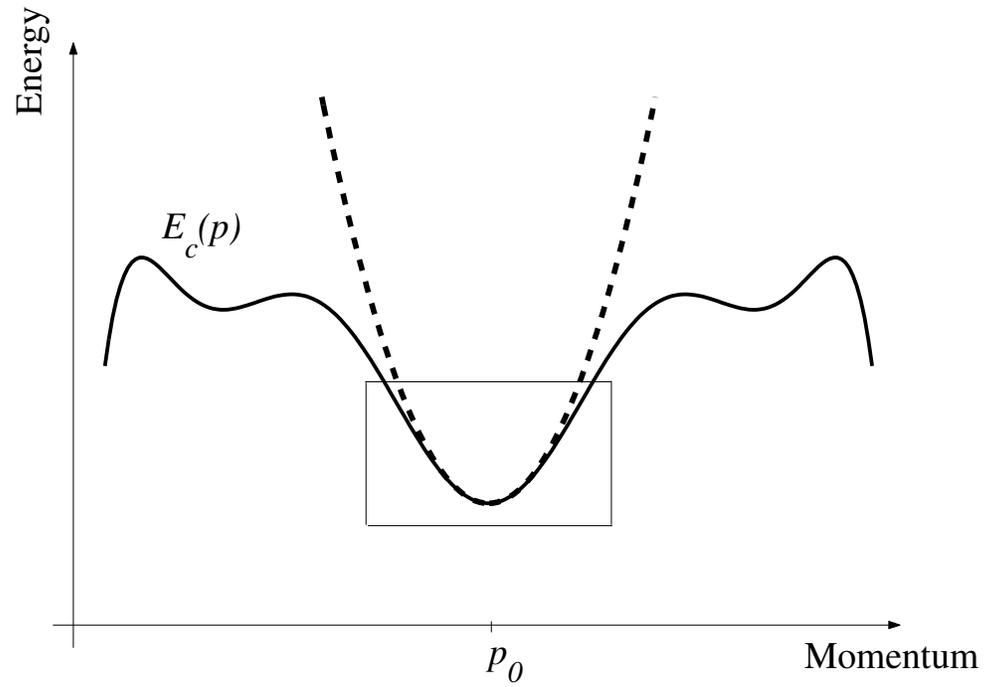
con la seguente:

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

Approssimazione di massa efficace

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

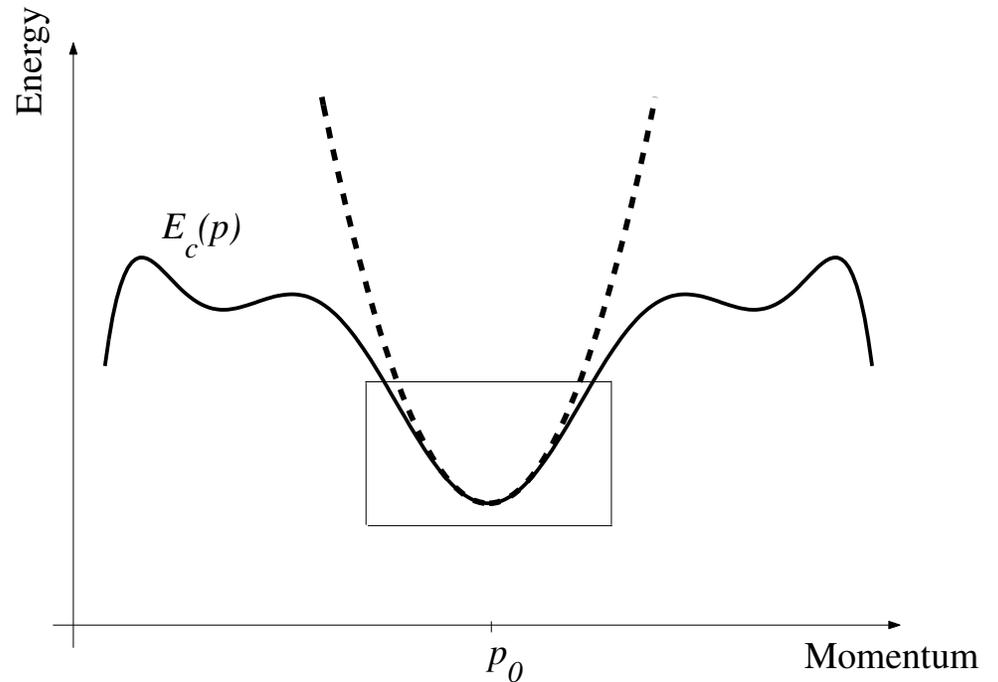
$$M^{-1} = \text{Hess}(E_c)|_{p_0}$$



Approssimazione di massa efficace

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

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

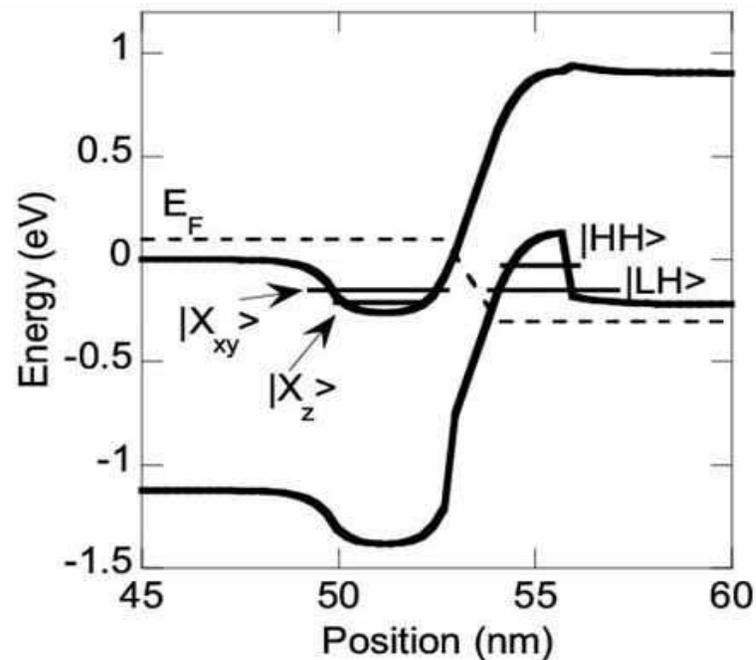


- In questa approssimazione l'elettrone/lacuna “vede” soltanto la banda di conduzione/valenza.

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.

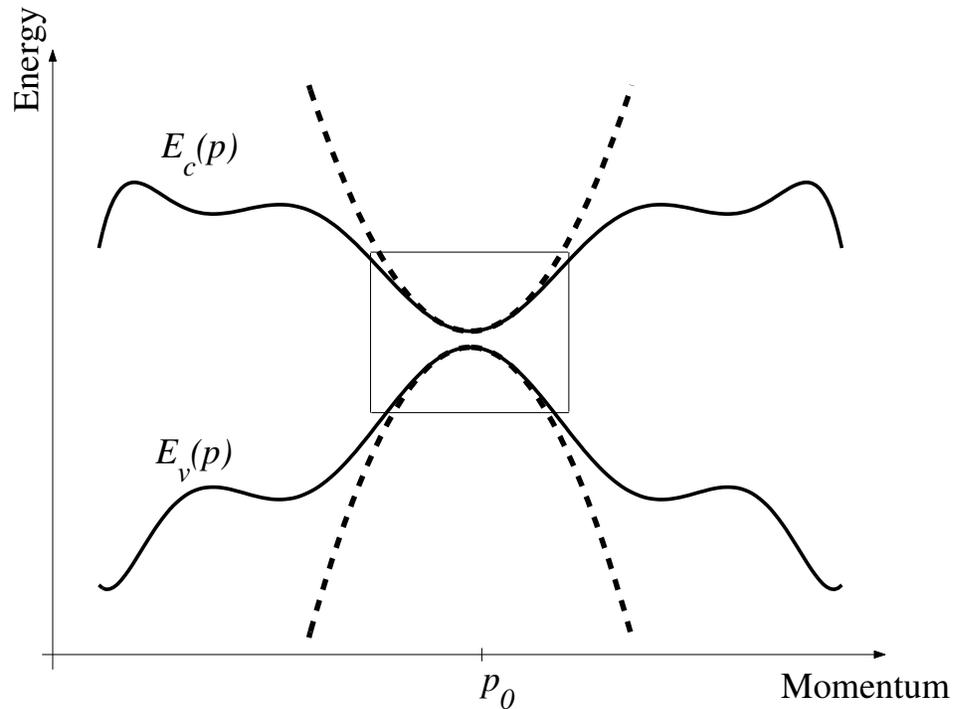
2 - Modello M-M di ordine 1 a 2 bande:

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

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

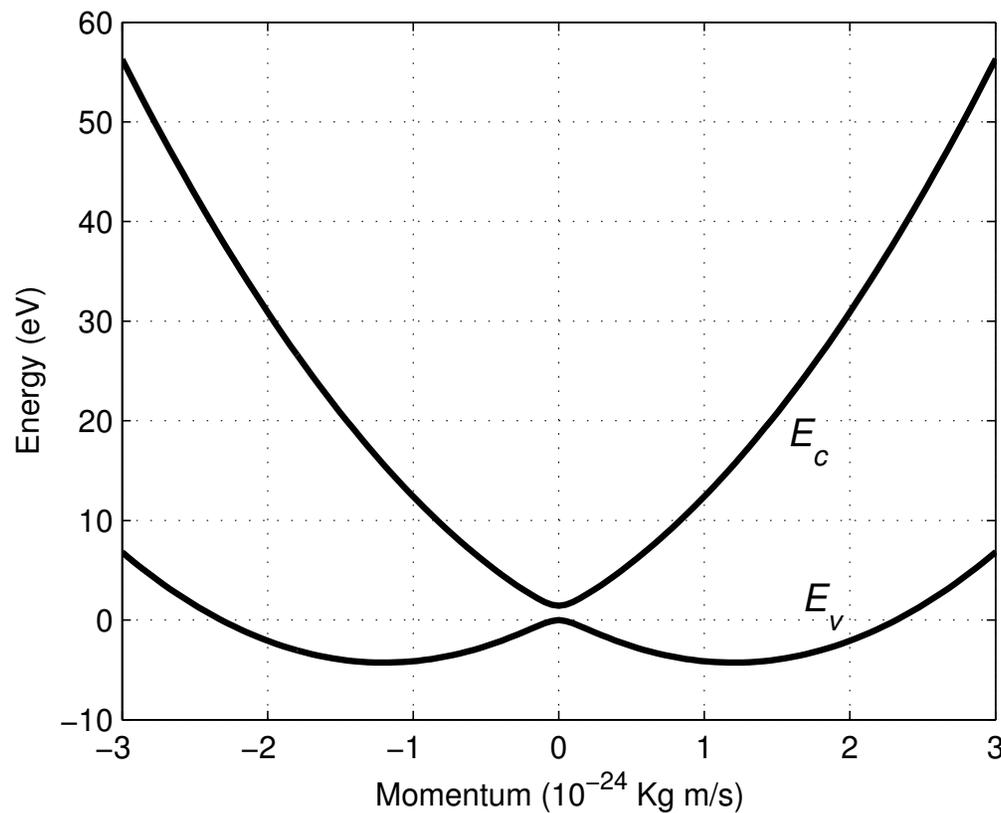
Modelli multi-banda

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

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

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

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

Interpretazione

E per le Hamiltoniane a due bande?

Hamiltoniana di Kane

Consideriamo il caso dell'Hamiltoniana di Kane:

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

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

Hamiltoniana di Kane

Consideriamo il caso dell'Hamiltoniana di Kane:

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

(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 di Kane

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 di Kane

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:

$$\Pi_c(p) - \Pi_v(p) = \frac{\vec{B}(p)}{\|\vec{B}(p)\|} \cdot \vec{\sigma}$$

dove $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ e $\vec{B}(p) = (0, K \cdot p, g)$

Indice di banda

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

$$\Pi_c(p) - \Pi_v(p) = \frac{\vec{B}(p)}{\|\vec{B}(p)\|} \cdot \vec{\sigma}$$

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

$$\vec{B}(p) = (0, K \cdot p, g)$$

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

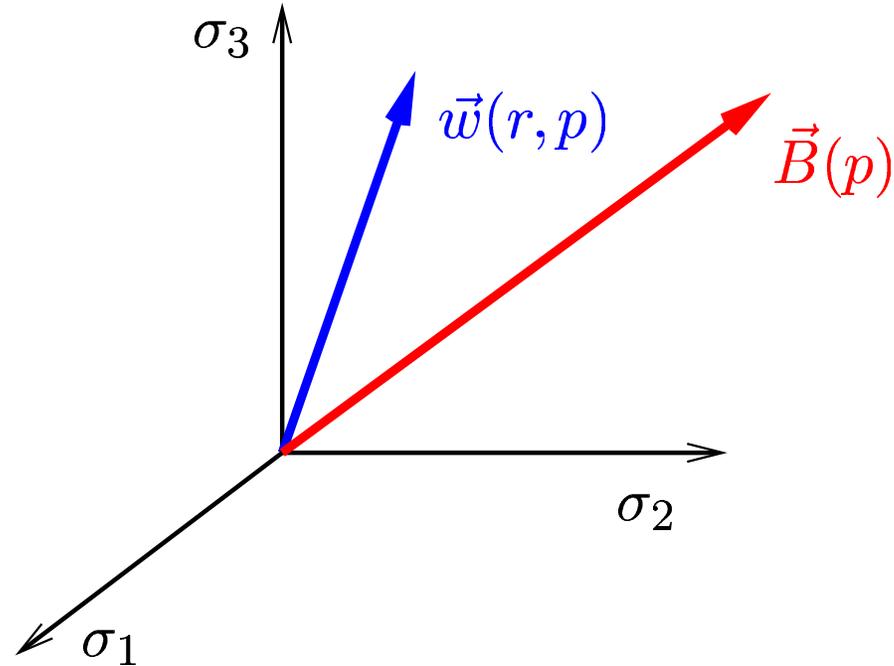
$$\vec{w} = (w_1, w_2, w_3),$$

si ha

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

Indice di banda

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



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 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:

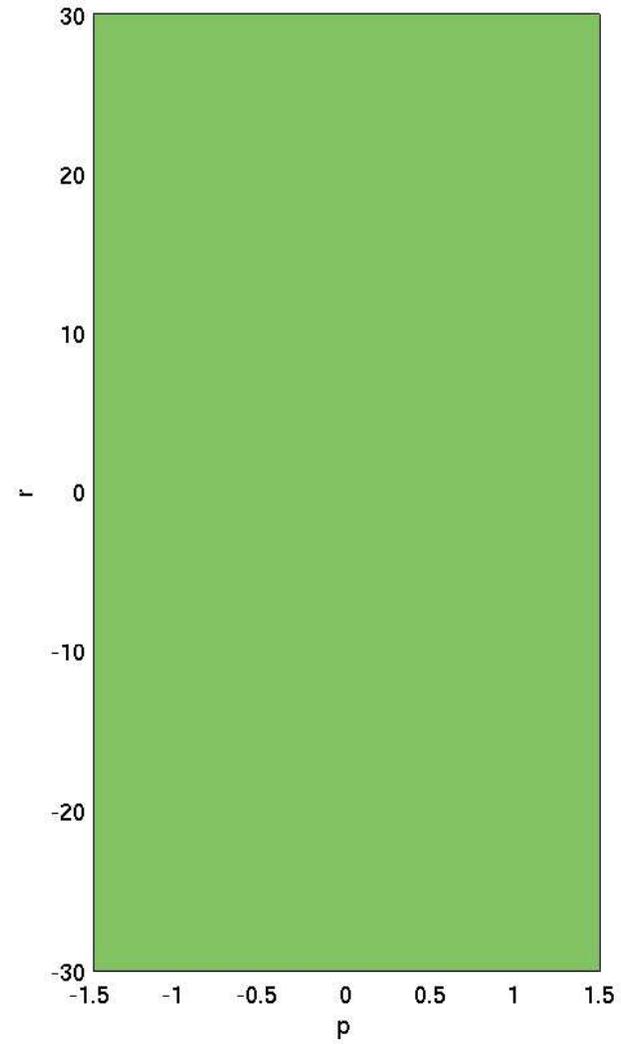
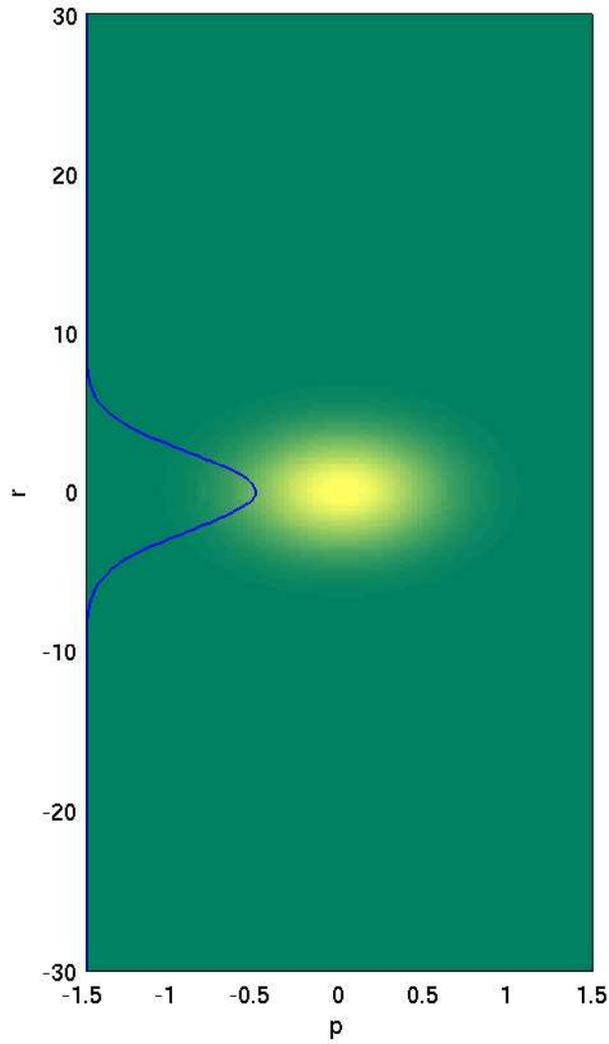
$$w_0(r, p, t = 0) = \frac{1}{2\pi\Delta_r\Delta_p} \exp\left(-\frac{r^2}{2\Delta_r^2} - \frac{p^2}{2\Delta_p^2}\right)$$

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

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

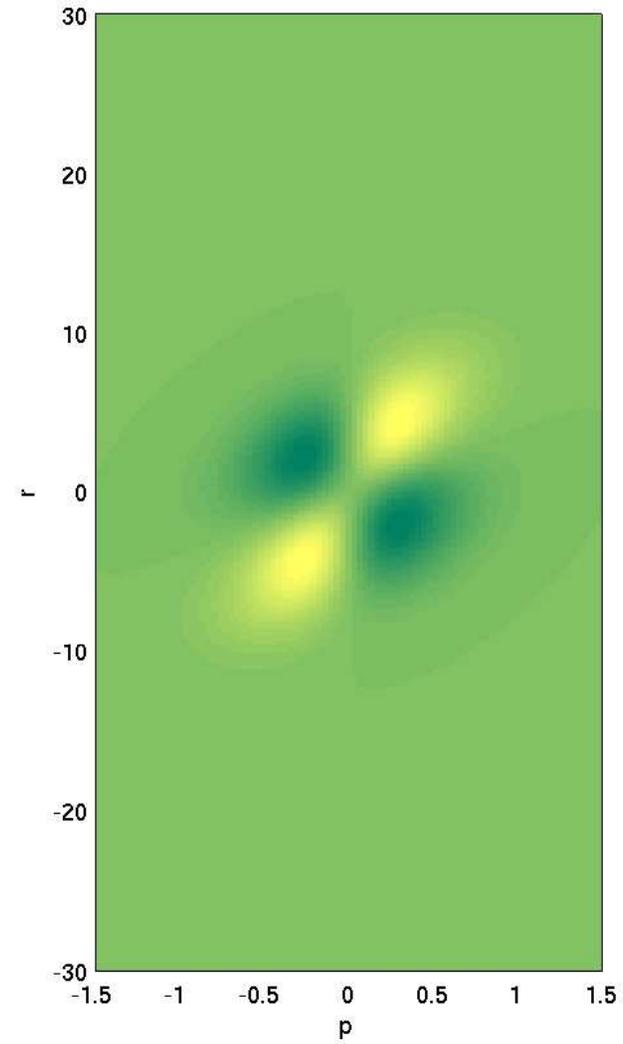
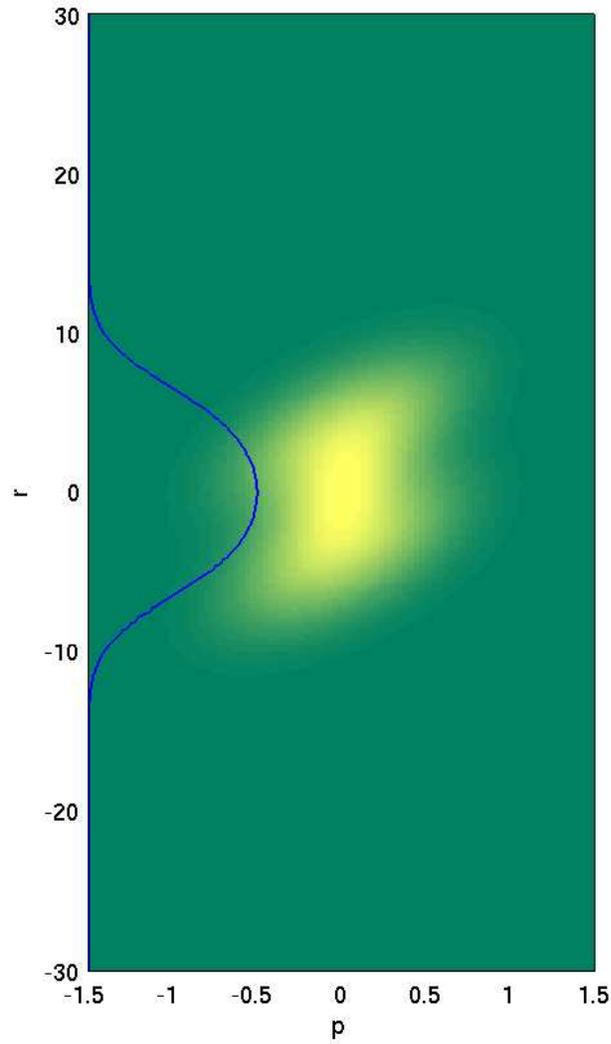
Dinamica

$t = 0$



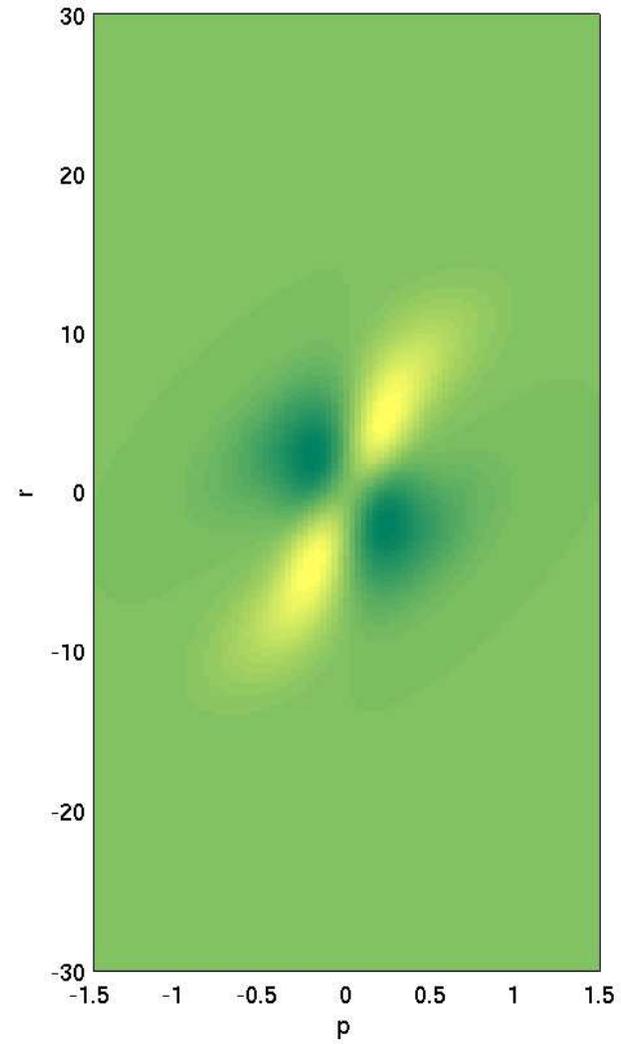
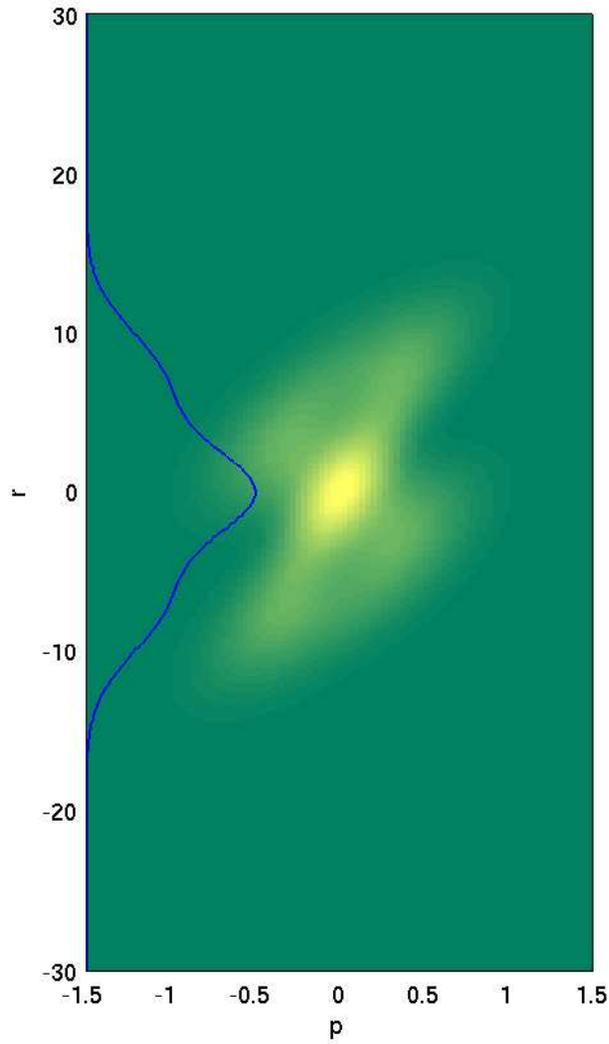
Dinamica

$t = 4$



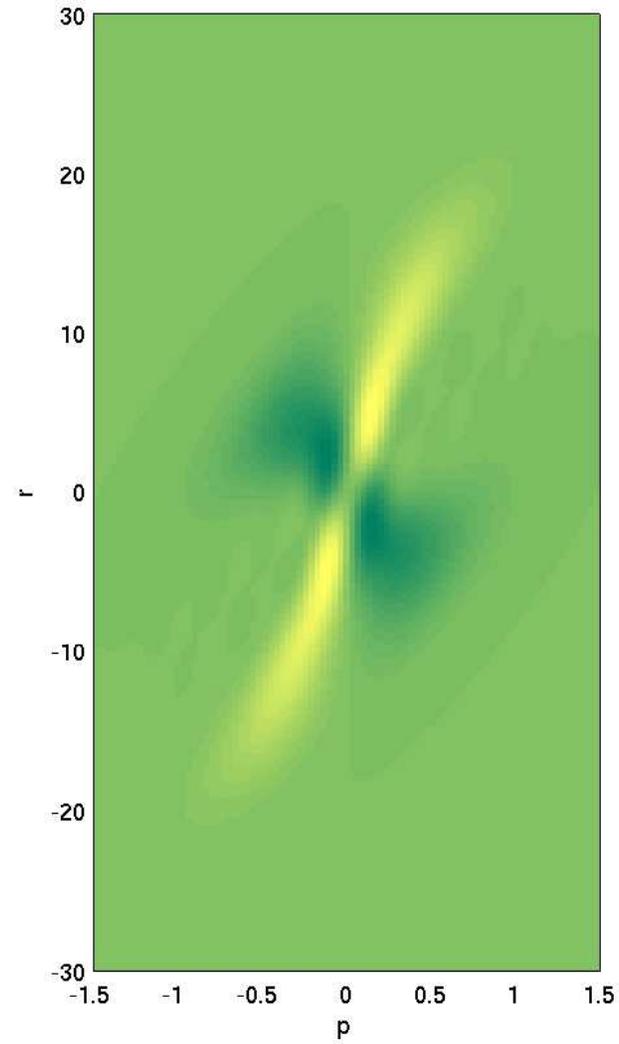
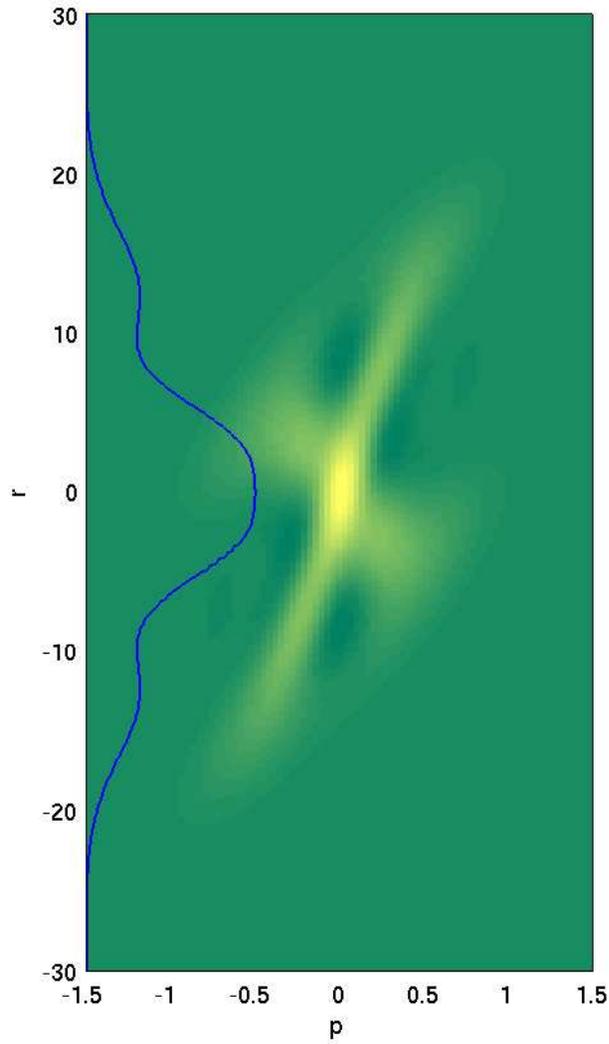
Dinamica

$t = 6$



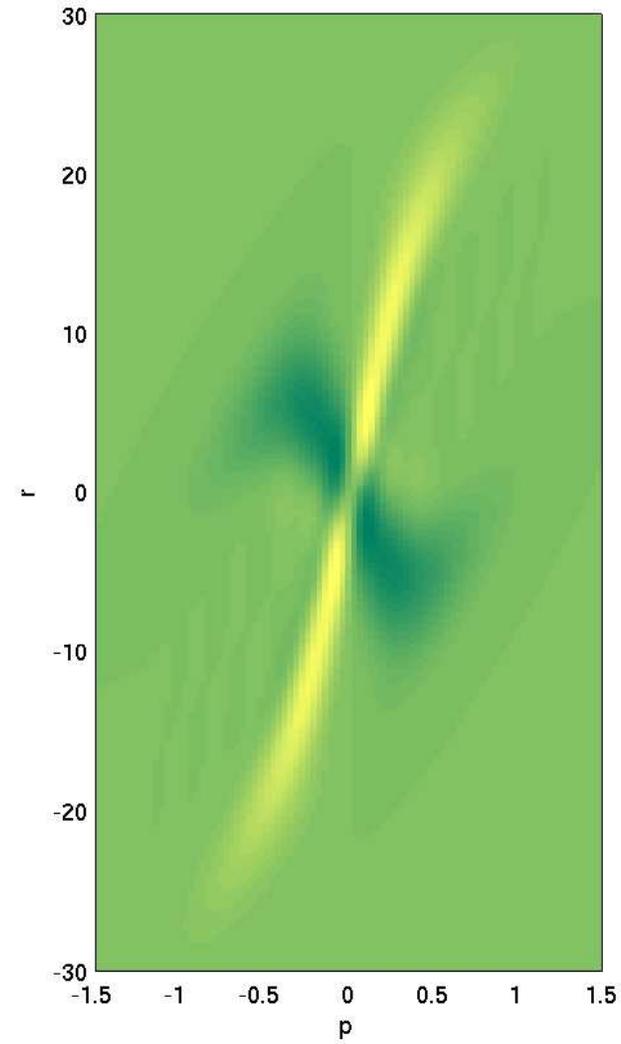
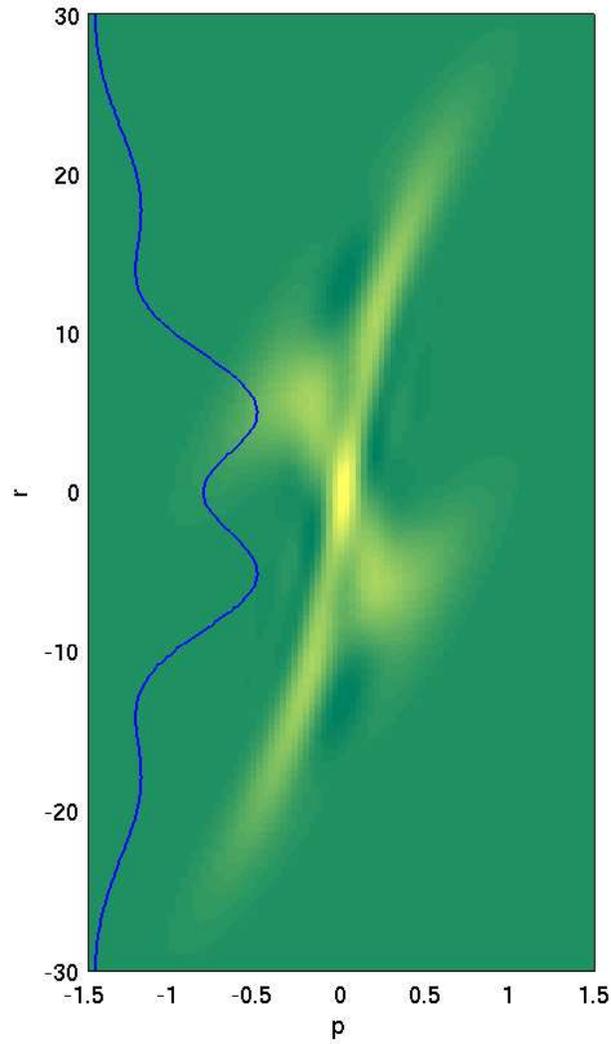
Dinamica

$t = 10$



Dinamica

$t = 14$



Dinamica

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

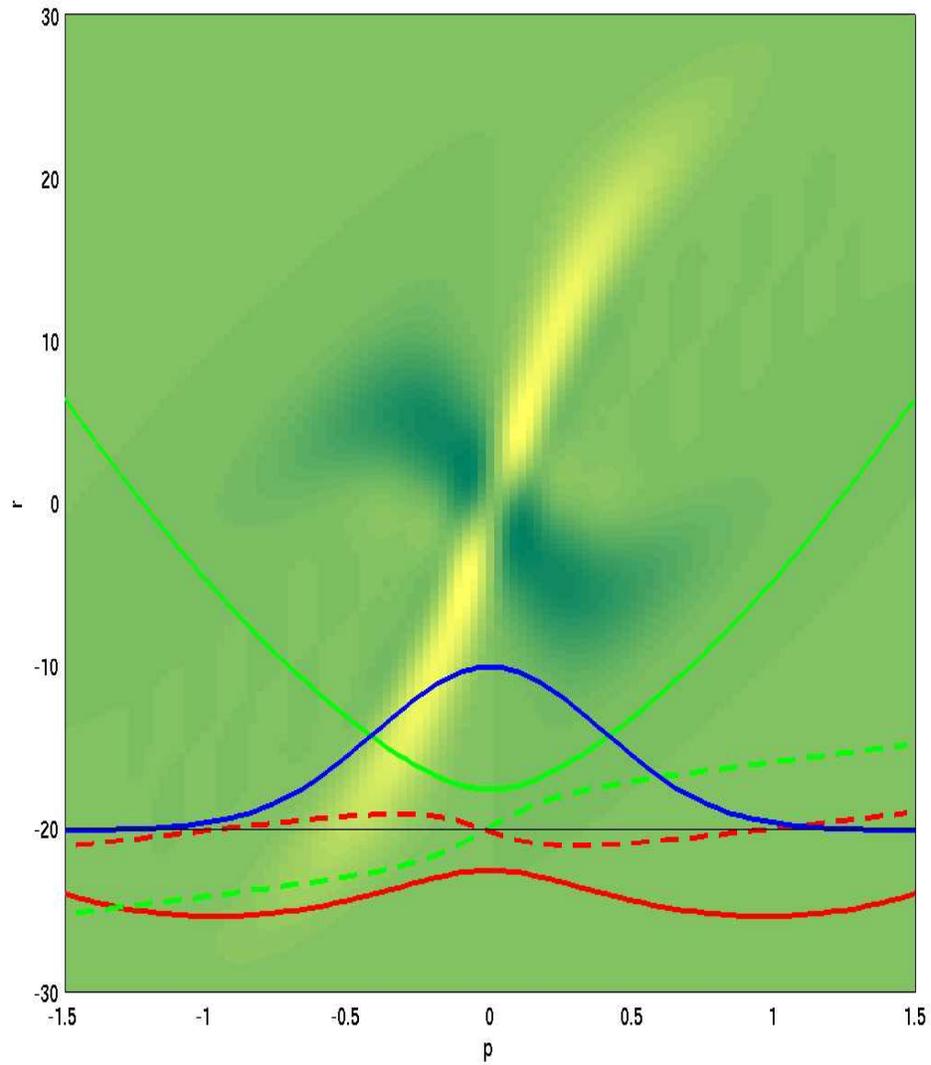
$$\partial_t \int r w_c(r, p) dr = E'_c(p) \int w_c(r, p) dr$$

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

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

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 formalissimo “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.*

Ringraziamento

Questa ricerca è svolta nell'ambito del progetto

Modelli Matematici per la Microelettronica

finanziato dal GNFM