

Rafeindir í tvívíðri grind andpunkta

Halldór Fannar Guðjónsson

Sérverkefni í eðlisfræði
í umsjón dr. Viðars Guðmundssonar
Háskóli Íslands

3. nóvember 1996

Efnisyfirlit

1	Inngangur	2
2	Lýsing kerfis	3
3	Rafeind í lotubundnu mætti	6
4	Útreikningar á orkuborðum	9
4.1	Frjálsar rafeindir	9
4.2	Rafeindir í grind andpunkta	11
5	Ákvörðun efnamættis	20
5.1	Frjálsar rafeindir	20
5.2	Rafeindir í grind andpunkta	20
6	Fermi yfirborð	23
7	Lokaorð	26
A	Töluleg lausn Hermetísks eigingildisverkefnis	27
B	Töluleg ákvörðun efnamættis	29
C	Hraðvirk útfærsla á aðferð Householdors	30
	Heimildir	35

1 Inngangur

Núttíma hálfleiðaratækni gerir okkur kleift að mynda tvívíð rafeindakerfi. Kerfin eru tvívíð í þeim skilningi að sterkt innlokunarmætti verkar á rafeindirnar í stefnu hornrétt á tvívíða flötinn (sem við munum kalla z -stefnu) og veldur strjálum orkustigum E_z^k . Orkugeilin milli nærliggjandi orkustiga E_z er margfalt stærri en allar orkugeilar vegna hreyfinga í sléttunni og kerfið því affræðilega tvívítt. Slíkt tvívíð kerfi hafa verið framleidd með mikilli nákvæmni og hafa þau verið vinsælt viðfangsefni í grunnrannsóknnum jafnframt því að hafa hagnýtt gildi.

Nokkrum ólíkum aðferðum má beita til að mynda tvívítt rafeindakerfi. Sem dæmi má nefna samskeytingu n -AlGaAs og GaAs í einföldum samskeytum og skammtabrunnakerfi. Í skammtabrunnakerfum eru rafeindirnar innilokaðar í þunnu lagi sem er aðeins nokkrir tugir nm á þykkt. Þar sem bylgjulengd rafeindar í hálfleiðara er venjulega á þessu stærðarþrepi þá fáum við sterk skammtahrif og strjál orkustig með stórum orkugeilum. Slíkt kerfi má mynda með því að rækta AlGaAs kristall með sameindaúðun (MBE) og loka síðan fyrir Al gasið í skamman tíma þannig að þunnt lag af hreinu GaAs myndist á yfirborðinu. Þegar réttir þykkt er náð er aftur hleypt frá Al gasinu og aftur tekið til við að rækta AlGaAs. Þar sem orkustig leiðnirafeinda eru lægri í GaAs munu þær safnast fyrir í þunna GaAs laginu sem gegnir hér hlutverki skammtabrunns. Lagið gegnir þó aðeins hlutverki “brunns” fyrir þverhreyfingar, rafeindunum er ennþá frjálst að hreyfa sig samsíða laginu (sjá [1]).

Hin síðustu ár hafa orðið miklar framfarir í svokallaðri nanótækni (sjá t.d. [2]). Með þessari tækni er mögulegt að móta efni á nanómetrakvarðanum. Tæknin hefur m.a. verið notuð til að fækka enn frekar hreyfivíddum rafeinda í tvívíðum kerfum. Þannig hafa verið mynduð einvíð og jafnvel núllvíð kerfi, sem gjarnan eru nefnd skammtavírar og skammtapunktur (sjá [3]). Í skammtapunkti eru hreyfingar rafeinda í tvívíðu kerfi einnig takmarkaðar í x - og y -stefnu af hliðlægu innilokunarmætti og mætti því flokka sem gervi “atóm” með algerlega strjál orkuróf, $E^{ijk} = E_x^i + E_y^j + E_z^k$. Slíka punkta má mynda með því að æta lag af einföldum samskeytum þannig að eftir standi punktar af n -AlGaAs/GaAs samskeytum á grunni GaAs kristalls (sjá [4],[5]).

Andpunktur er fyrirbrigði sem má líta á sem andhverfu skammtapunkts. Hann er andhverfa skammtapunkts í þeim skilningi að í stað þess að binda rafeindir í strjál orkustig innan punktsins þá verður punkturinn forboðna svæðið og rafeindirnar berast um efnið sem liggur á milli punktanna. Slíkt kerfi má útbúa með því að æta á reglulegan hátt göt í skammtabrunnakerfi. Við fáum þá reglulegt net af “rásum” þar sem rafeindirnar geta ferðast og víxlverkað, hver við aðra.

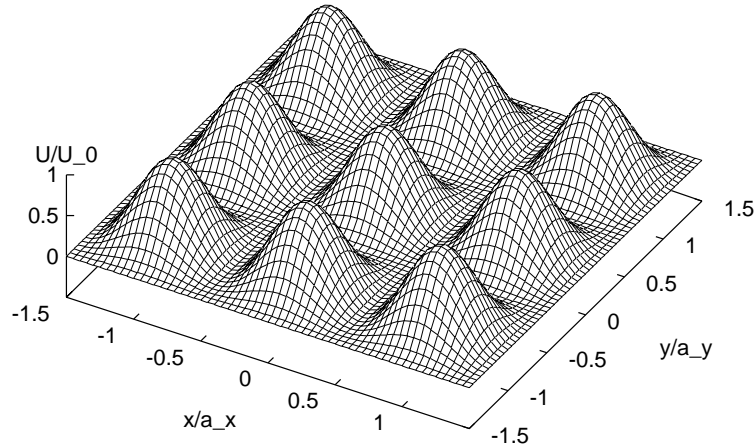
Í þessari ritgerð ætlum við að skoða eiginleika tvívíðs rafeindakerfis í slíkri grind andpunkta.

2 Lýsing kerfis

Við leggjum til grundvallar eftirfarandi andpunkta-mætti til lýsingar á virku mætti kristallsins í sléttunni:

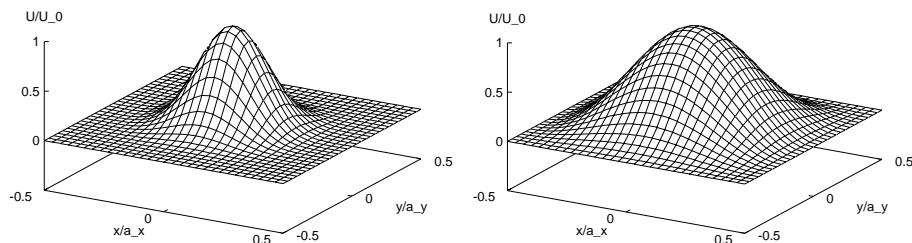
$$U(x, y) = U_0 \left[\cos\left(\frac{\pi}{a_x}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a_y}y\right) \right]^{2\alpha}. \quad (1)$$

Hér veljum við grindarfastana $a_x = a_y = 100$ nm og mættishæðina U_0 á stærðarþrepinu meV. Þessar stærðir eru í samræmi við þau GaAs kerfi sem hægt er að búa til á tilraunastofum með núverandi tækni (sjá [7]). Andpunktarnir í jöfnu (1) mynda ferningsgraga Bravais-grind eins og sýnt er á mynd 1.



Mynd 1: Ferningsgrind andpunkta samkvæmt jöfnu (1). Hér er $\alpha = 1$.

Við munum skoða Bravais-grindina nánar hér á eftir en beinum nú sjónum okkar að eiginleikum andpunktanna (1). Breidd punktanna ákvarðast af veldisvísinum α . Af þessum vísi ræðst því hversu vel aðgreindir andpunktarnir eru, hver frá öðrum, og þar með hversu breiðar “rásir” liggja á milli þeirra. Þetta er sýnt á mynd 2



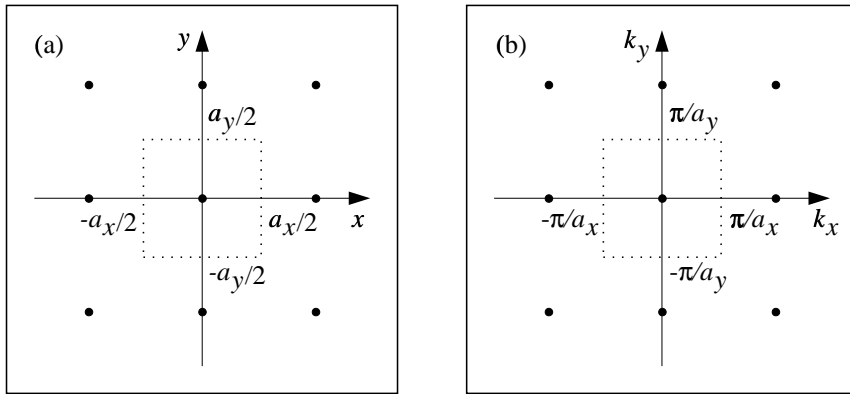
Mynd 2: Vel einangraður andpunktur (a) og breiður andpunktur með skörun (b). Í (a) er $\alpha = 3$ en fyrir (b) er $\alpha = 1$. Sýnd er ein frumeining í ferningsgrindinni.

Ef við látum Δx vera breidd punktsins í hálfri hámarkshæð þá er auðvelt að sýna að

$$\Delta x = \frac{2a_x}{\pi} \arccos\left(2^{-1/2\alpha}\right) \quad (2)$$

þegar $y = 0$. Þessi jafna gefur breiddina $\Delta x = 26$ nm við $\alpha = 4$. Með núverandi tækni er erfitt að búa til mjög skarpa andpunkta í kerfum með litla lotulengd og við takmörkum okkur því við $\alpha < 4$.

Eins og áður hefur komið fram þá svara miðjur andpunktanna (1) til ferningslaga Bravais-grindar með grindarföstum a_x og a_y . Þetta er sýnt á mynd 3. Grindin er valin þannig að sérhver Wigner-Seitz frumeining inniheldur einn andpunkt.



Mynd 3: Grind andpunkta og tilsvareandi nykurgrind. Á mynd (a) má sjá Wigner-Seitz frumeiningu í grindinni og á mynd (b) má sjá samsvarandi frumeiningu nykurgrindarinnar, þ.e. fyrsta Brillouin svæðið.

Við veljum sem grunnvigra grindarinnar $\mathbf{a}_1 = a_x \hat{\mathbf{x}}$ og $\mathbf{a}_2 = a_y \hat{\mathbf{y}}$. Alla punkta grindarinnar má þá rita

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (3)$$

þar sem $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$. Við getum ákvarðað vigra nykurgrindarinnar útfrá sambandinu

$$e^{\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 1. \quad (4)$$

Ef við stingum inn almennu formi grindarvigra (3) í jöfnu (4) fæst lausnin

$$\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \quad (5)$$

þar sem $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$ og

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_x} \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_y} \hat{\mathbf{y}}. \quad (6)$$

Vigrarnir $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ eru grunnvigrar nykurgrindarinnar. Allar línulegar samantektir þeirra með heiltölustuðlum gefur nykurgrindina en span þeirra gefur nykur-rúmið¹ (sjá mynd 8).

¹Athugið að span vigra táknar allar línulegar samantektir þeirra með rauntölustuðlum.

Við viljum nú skoða rafeindir sem eru bundnar í x - y sléttunni af ytra mætti í z -stefnu og geta því aðeins hreyfst frjálssar í plani grindarinnar. Ef við gerum ráð fyrir að rafeindirnar víxlverki ekki innbyrðis þá má lýsa ástandi kerfisins með óháðum einnar rafeinda ástöndum. Ástand kerfisins $|\Psi\rangle$ er þá tensor-feldi af ástandi hverrar rafeindar um sig. Það er

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle. \quad (7)$$

Hér er $|\psi_i\rangle$ ástand rafeindar i og n er fjöldi þeirra. Rafeindaástöndin uppfylla Schrödinger-jöfnuna

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \quad (8)$$

með einnar agnar Hamilton-virkjanum

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2 + U(\hat{\mathbf{R}}). \quad (9)$$

Í jöfnu (8) höfum við táknað orku i -tu rafeindar með E_i , og í Hamiltonvirkjanum (9) er $\hat{\mathbf{P}}$ skriðþungavirkinn og $\hat{\mathbf{R}}$ staðarvirkinn. Ofanvarp jöfnu (8) á staðarvigragrunninn $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ gefur

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \quad (10)$$

þar sem m er virkur massi rafeindar. Í GaAs er þessi massi töluvert lægri en venjulegi rafeindamassinn, þ.e. $m = 0.067m_e$. Mættið $U(\mathbf{r})$ í jöfnu (10) er summa innilokunarmættis í z og andpunkta-mættisins (1),

$$U(\mathbf{r}) = U(x, y) + U(z). \quad (11)$$

Eins og fram kom í kafla 1 veldur innilokunarmættið strjálum orkustigum með mun stærri orkugeil en breidd allra leyfilegra orkustiga vegna hreyfinga í sléttunni. Við getum því litið á kerfið sem tvívítt og hunsað mættið $U(z)$ héðan í frá.

Sökum þess að andpunktamættið er lotubundið fæst að mættið í (11) er lotubundið í x - y sléttunni. Um eiginástönd rafeindar í lotubundu mætti gilda nokkrar almennar reglur og munum við nú kynna þeim.

3 Rafeind í lotubundnu mætti

Við látum $\psi(\mathbf{r})$ tákna bylgjufall stakrar rafeindar. Í samræmi við kafla 2 ritum við Schrödinger-jöfnuna án segulsviðs:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (12)$$

Hér höfum við áhuga á því að skoða lausnir jöfnu (12) þegar mættið $U(\mathbf{r})$ er lotubundið. Það er

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (13)$$

þar sem \mathcal{R} er mengi vigra. Rafeindir sem uppfylla einnar agnar Schrödinger-jöfnu með mætti af þessu tagi eru nefndar *Bloch rafeindir*. Sýna má [6] að bylgjufall þeirra má rita

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

þar sem

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (15)$$

Hér eru \mathbf{k} og n skammtatölur sem einkenna sérhvert eiginfall sem er lausn á jöfnu (12). Fyrirnefnda skammtatalan er gjarnan nefnd *bylgjuvigur* enda gegnir hún svipuðu hlutverki í jöfnu (14) og bylgjuvigur frjálsrar agnar. Skammtatöluna n má rekja til þess að fyrir gefinn bylgjuvigur \mathbf{k} eru til mörg eiginfall sem við getum þá aðgreint með umræddri skammtölu. Síðar mun koma í ljós að n segir til um hvaða orkuborða eiginfallið (rafeindin) tilheyrir. Þessi skammtatala er þá nefnd *borðavísir*.

Við látum nú \mathcal{K} vera mengi allra vigra \mathbf{K} þannig að

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \quad (16)$$

ef $\mathbf{R} \in \mathcal{R}$. Samkvæmt jöfnu (15) og setningu Fourier's má því rita

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K} \in \mathcal{K}} \hat{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{K})e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (17)$$

þar sem $\hat{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{K})$ er Fourier-mynd $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ og við höfum felld niður lágvísinn n , enda breytir hann engu í þeirri röksemdafærslu sem hér fylgir á eftir. Fourier-myndina skilgreinum við þannig:

$$\hat{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{K}) := \frac{1}{v} \int_{\mathcal{C}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (18)$$

Hér er heildað yfir eina lotu í $u(\mathbf{r})$, sem við táknum með \mathcal{C} og við látum v vera rúmmál hennar. Jöfnur (14) og (17) gefa nú að

$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{K} \in \mathcal{K}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} \quad (19)$$

þar sem við höfum skilgreint $c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} := \hat{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{K})$, til einföldunar á rithætti. Við athugum nú að mættið $U(\mathbf{r})$ er lotubundið á sama hátt og $u_{\mathbf{k}}$. Það má því einnig rita sem Fourier-röð í \mathbf{K} :

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}' \in \mathcal{K}} \hat{U}(\mathbf{K}')e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}. \quad (20)$$

Við stingum nú inn jöfnum (19) og (20) í Schrödinger-jöfnuna (12). Fyrri liðurinn gefur

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{K}}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{K})^2 c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}. \quad (21)$$

Síðari liðinn má rita

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}) &= \left(\sum_{\mathbf{K}'\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}')e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\right)\left(\sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{K}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}\right) \\ &= \sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}'\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}')c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}+\mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{K}',\mathbf{K}''\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}')c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'+\mathbf{K}''}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}'')\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Í síðasta skrefinu höfum við sett $\mathbf{K}'' = \mathbf{K} + \mathbf{K}'$ og notfært okkur að þegar summað er yfir öll $\mathbf{K}' \in \mathcal{K}$ fyrir tiltekið $\mathbf{K} \in \mathcal{K}$ þá er það jafngilt því að summa yfir öll² $\mathbf{K}'' \in \mathcal{K}$.

Schrödinger-jafnan verður

$$\sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{K}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}\left\{\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{K})^2 - E\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}'\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}')c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'+\mathbf{K}}\right\} = 0. \quad (23)$$

Sökum þess að föllin $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ eru hornrétt þá verður stærðin innan slaufusvigans að vera núll fyrir sérhvern lið summunnar í jöfnu (23). Það er

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{K})^2 - E\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}'\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}')c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'+\mathbf{K}} = 0 \quad (24)$$

fyrir öll $\mathbf{K} \in \mathcal{K}$. Þessa jöfnu má rita á samhverfan hátt með því að framkvæma breytuskiptin $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K} - \mathbf{K}'$. Þá fæst að

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{K})^2 - E\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}'\in\mathcal{K}}\hat{U}(\mathbf{K}-\mathbf{K}')c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}'} = 0 \quad (25)$$

fyrir öll $\mathbf{K} \in \mathcal{K}$. Þessi jafna er í raun Schrödinger-jafnan í nykurrúminu. Nykurrúmið má skilgreina sem span grunnvigranna fyrir \mathcal{K} en mengið \mathcal{K} er iðulega nefnt nykurgrindin.

Við skulum skoða jöfnu (25) aðeins nánar. Þegar \mathbf{K} hleypur yfir öll leyfileg gildi við fast \mathbf{k} fæst jöfnuhneppi sem tengir saman stuðlana $c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_1}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_2}, \dots$ Lausn þessa jöfnuhneppis gefur okkur orkuna E og stuðlana $c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$ í liðun bylgjufallsins í jöfnu (19).

Til þess að ákvarða lausn $\psi_{n\mathbf{k}}$ á upprunalegu Schrödinger-jöfnunni (12) og tilheyrandi orku $E_n(\mathbf{k})$ þarf því að leysa umrætt jöfnuhneppi með gefnum bylgjuvigi \mathbf{k} . Borðavísirinn n kemur hér að góðum notum þar sem slíkt jöfnuhneppi hefur margar lausnir fyrir gefinn bylgjuvigi. Við fáum því strjált orkuróf $E_n(\mathbf{k})$

²Athugið að mengið \mathcal{K} er ótakmarkað, samanber skilgreiningu í jöfnu (16).

($n = 1, 2, \dots$) fyrir fast \mathbf{k} . Sýna má [8] að þessum orkugildum má úthluta gildum á n þannig að fyrir fast n sé $E_n(\mathbf{k})$ samfelld fall af \mathbf{k} og lotubundið þannig að:

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = E_n(\mathbf{k}), \quad \mathbf{K} \in \mathcal{K}. \quad (26)$$

Einnig má sýna [8] að þá er $E_n(\mathbf{k})$ alls staðar diffranlegt fall af \mathbf{k} nema í punktum $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ þar sem orkan er margföld, $E_n(\mathbf{k}') = E_{n'}(\mathbf{k}')$ fyrir $n \neq n'$.

Þegar orkustigunum er úthlutað n eins og hér hefur verið lýst þá kallast þau *orkuborðar*. Nafngiftina má rekja til þess að hvert $E_n(\mathbf{k})$ er þá samfelld og lotubundið í \mathbf{k} , sem þýðir að það hefur efri og lægri mörk. Fyrir tiltekið n liggja því öll orkustigin $E_n(\mathbf{k})$ í borða með orku sem liggur á milli þessara marka.

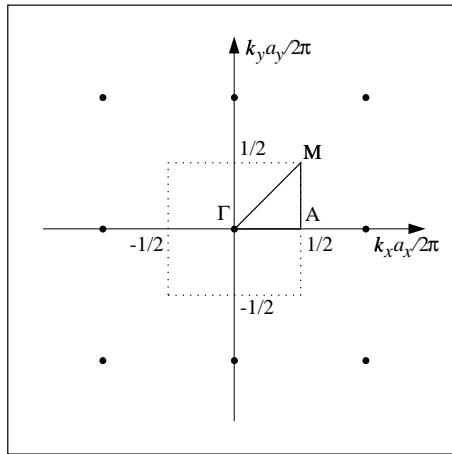
Það sem hér hefur verið sagt má draga saman í eftirfarandi niðurstöðu. Orkustig rafeinda í lotubundnu mætti mynda orkuborða. Til þess að ákvarða orkuborðana þurfum við að leysa jöfnu (25) fyrir bylgjuvigur \mathbf{k} í nykurrúminu sem við látum hlaupa yfir smæstu lotu í \mathcal{K} . Okkur nægir að skoða smæstu lotuna í \mathcal{K} sökum jöfnu (26). Slík lota kallast frumeining og má velja hana með ýmsum hætti. Dæmi um frumeiningu er fyrsta Brillouin svæðið en það er sýnt á mynd 3 fyrir ferningslaga nykurgrind. Til þess að orkustigin myndi orkuborða þarf að úthluta vísinum n , sem kallast þá *borðavísir*, þannig að $E_n(\mathbf{k})$ sé samfelld og næstum alls staðar diffranlegt fall af \mathbf{k} . Það verður viðfangsefni næsta kafla.

4 Útreikningar á orkuborðum

Samkvæmt grein 3 gefur lausn jöfnuhneppisins (25) okkur orku og eiginástönd rafeindar í andpunkta-mættinu (1). Við endurritum hér jöfnuhneppið til hægðarauka:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 - E\right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}' \in \mathcal{K}} \hat{U}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}'} = 0, \quad \forall \mathbf{K} \in \mathcal{K}. \quad (27)$$

Hér er $\mathcal{K} = \{\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \mid m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\}$ þar sem $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ eru grunnvigrar nykurgrindarinnar eins og þeir voru skilgreindir í kafla 2. Við munum skoða lausnirnar innan fyrsta Brillouin svæðisins og höfum sérstaklega áhuga á orkuborðunum á samhverfuásum í nykurgrindinni. Þessir ásar eru ΓA , AM og $M\Gamma$ og eru þeir sýndir á mynd 4 (nafngiftir eru hér í samræmi við [7]). Ef við



Mynd 4: Fyrsta Brillouin svæðið fyrir andpunkta-grindina. Mikilvægustu samhverfupunktur ásamt nafngiftum eru sýndir.

skilgreinum einingarlausu stíkana t_x og t_y þannig

$$t_x := \frac{a_x}{2\pi} k_x \quad (28)$$

$$t_y := \frac{a_y}{2\pi} k_y \quad (29)$$

þá má rita fyrsta Brillouin svæðið sem mengið $[-1/2, 1/2] \times [-1/2, 1/2]$. Þetta er sýnt á mynd 4. Við munum notast við þessa framsetningu svæðisins héðan í frá.

Í næstu greinum munum við leysa jöfnu (27) fyrir tvö tilvik. Annars vegar fyrir frjálsar rafeindir í umræddri grind og hins vegar fyrir rafeindir sem víxlverka við andpunkta í grindinni (sjá kafla 2).

4.1 Frjálsar rafeindir

Strangt til tekið þá hafa frjálsar rafeindir ekki orkuborða eins og lýst var í kafla 3. Þetta sést á því að víxlverkunarmættið er $U(\mathbf{r}) = 0$ fyrir frjálsar agnir

og því inniheldur mengið \mathcal{R} allt rúmið, samanber skilgreiningu þess í jöfnu (13). Jafna (27) gefur þá einfaldlega

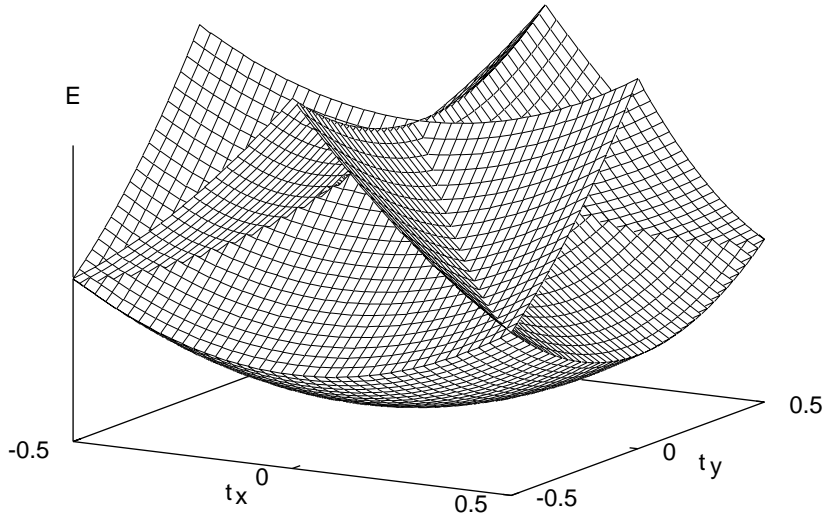
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (30)$$

sem er gamalkunn staðreynd. Þessi jafna lýsir samfelldum orkustigum sem hafa engin efri mörk en orkuborðar hafa nausynlega efri og neðri mörk.

Í stað þess að skoða algerlega frjálssar rafeindir þá skulum við skoða rafeindir í andpunkta-mættinu (1) þegar $U_0 \rightarrow 0$. Fyrir slíkar rafeindir gefur jafna (27) að

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2, \quad \forall \mathbf{K} \in \mathcal{K}. \quad (31)$$

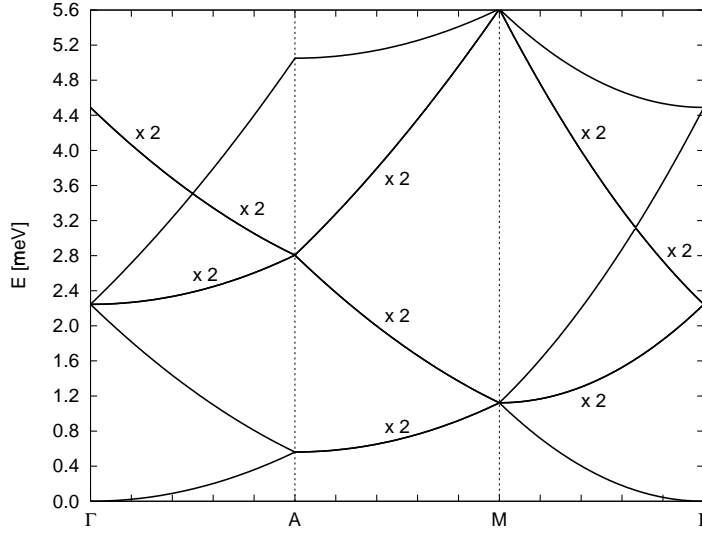
Þessi jafna lýsir fleygboga orkuflötum með miðju í grindarpunktum nykurgrindarinnar. Á mynd 5 má sjá lægstu orkustigin samkvæmt jöfnu (31) fyrir \mathbf{k} í fyrsta Brillouin-svæðinu. Þessir orkufletir eru fengnir með því að láta \mathbf{K} í jöfnu (31) aðeins hlaupa yfir $\mathbf{K} = 0$ og fjóra næstu nágranna í nykurgrindinni.



Mynd 5: Lægstu orkufletir frjálssra rafeinda í ferningslaga grind.

Nú er ætlun okkar að flokka orkustigin í jöfnu (31) í orkuborða. Þetta er hins vegar ekki vandalaust. Samkvæmt kafla 3 eigum við að úthluta strjálu orkustigunum, sem jafna (31) gefur fyrir sérhvert gildi á \mathbf{k} , borðavísi n þannig að $E_n(\mathbf{k})$ sé samfellt, lotubundið og alls staðar diffranlegt nema í punktum þar sem strjálu orkustigin eru margföld. Þessi skilyrði ákvarða ótvírætt 3 lægstu orkuborðana í okkar tilviki. Með hækkandi orku fjölga punktum þar sem orkustigin eru margföld og við fjórða orkuborða er svo komið að við höfum tvo möguleika á að velja orkustig í borðann þannig að öll skilyrði séu uppfyllt. Til glöggvunar sýnum við orkustigin á samhverfuásnum grindarinnar á mynd 6.

Við þessum vanda mátti búast því eins og áður hefur komið fram þá hafa frjálssar rafeindir ekki orkuborða heldur samfelld orkustig án efri marka. Til þess



Mynd 6: Orkustig frjálsra rafeinda í ferningslaga Bravais-grind. Hér er orkan sýnd sem fall af \mathbf{k} þar sem bylgjuvígurinn er látinn taka gildi á línun milli punktanna Γ ($\mathbf{k} = 0$), A og M í fyrsta Brillouin-svæðinu. Tvöföld orkustig eru auðkennd með “x 2”.

að auðvelda okkur samanburð á orkustigum frjálsra rafeinda og orkuborðum í grind andpunkta er æskilegt að flokka frjálsu orkustigin í “borða”. Við gerum það með því að leysa jöfnu (27) með $U(\mathbf{r})$ eins og í jöfnu (1) og tökum svo markgildið $U_0 \rightarrow 0$. Þetta gefur okkur “orkuborðana” á mynd 7.

4.2 Rafeindir í grind andpunkta

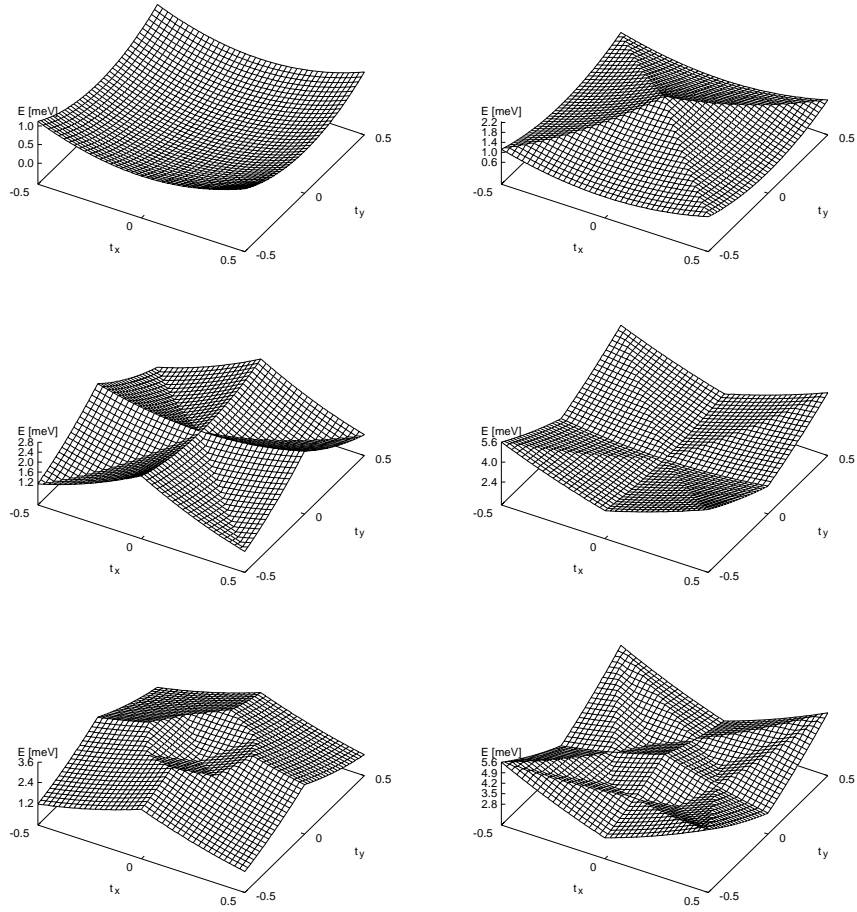
Við ákvörðum fyrst Fourier-stuðlana í jöfnu (27). Samkvæmt skilgreiningu (18) er

$$\hat{U}(\mathbf{K}) = \frac{1}{v} \int_C e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (32)$$

$$= \frac{U_0}{a_x a_y} \int_0^{a_x} \int_0^{a_y} e^{-i(K_x x + K_y y)} \left[\cos\left(\frac{\pi}{a_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a_y} y\right) \right]^{2\alpha} . \quad (33)$$

Í síðara skrefinu höfum við stungið inn rúmmáli frumeiningar, þ.e. $v = a_x a_y$, og valið hentuga frumeiningu C fyrir grindina. Eins og við var að búast þá eru Fourier-stuðlarnir í jöfnu (33) mjög háður veldisvísinum α . Til að byrja með skulum við setja $\alpha = 1$. Þá fæst að

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{K}) &= \frac{U_0}{4} f(K_x a_x) f(K_y a_y) \\ &= \frac{U_0}{4} f(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1) f(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2) \end{aligned} \quad (34)$$



Mynd 7: Lægstu orkustig frjálstra rafeinda í ferningslaga grind. Orkustigin hafa verið flokkuð í sex “borða”.

Þar sem fallið f er

$$f(z) := 2e^{-i\frac{1}{2}z} \sin\left(\frac{1}{2}z\right) \left[\frac{2z^2 - (2\pi)^2}{z(z^2 - (2\pi)^2)} \right]. \quad (35)$$

Athugum nú að $\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2$ og

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (36)$$

Jöfnu (34) má því rita

$$\hat{U}(\mathbf{K}(m_1, m_2)) = \frac{U_0}{4} f(2\pi m_1) f(2\pi m_2) \quad (37)$$

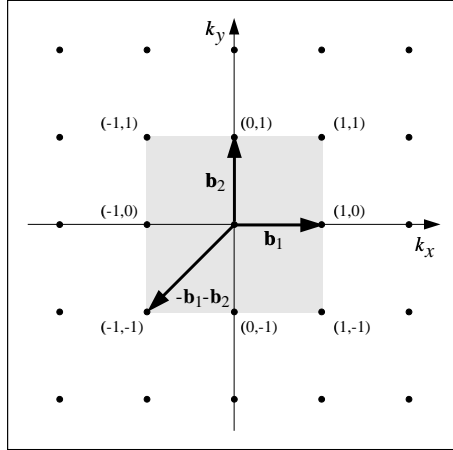
með $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$. Með beinni innsetningu í jöfnu (35) fæst nú að

$$\hat{U}(\mathbf{K}(m_1, m_2)) = \begin{cases} U_0/4 & \text{ef } (m_1, m_2) = (0, 0) \\ U_0/8 & \text{ef } (|m_1|, |m_2|) \in \{(0, 1), (1, 0)\} \\ U_0/16 & \text{ef } (|m_1|, |m_2|) = (1, 1) \\ 0 & \text{annars.} \end{cases} \quad (38)$$

Þetta er athyglisverð niðurstaða. Jafna (38) segir að Fourier-stuðullinn $\hat{U}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ hverfi ef munurinn á nykurvigrunum \mathbf{K} og \mathbf{K}' er meiri en sem nemur einum grunnvigri í hvorum þætti. Það er

$$\hat{U}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') = 0 \quad \text{ef } |(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{a}_i| > 2\pi \quad (39)$$

þar sem $i = 1, 2$. Það þýðir að jafna (27) tengir aðeins saman stuðlana $c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$ og $c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}'}$ á ferningi í kringum \mathbf{K} . Þetta er sýnt á mynd 8.



Mynd 8: Áhrifasvæði mættisins $U(\mathbf{r})$ í nykurrúminu þegar $\alpha = 1$. Hér er $\mathbf{k} = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ og skyggða svæðið er ferningurinn þar sem áhrifa mættisins gætir í jöfnu (27).

Þessi staðreynd gerir okkur kleift að einskorða okkur við hluta nykurgrindarinnar \mathcal{K} án þess að tapa upplýsingum eða nákvæmni. Okkur nægir t.d. hlutrúmið³

$$\mathcal{K}' = \{\mathbf{K}' = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \mid |m_1|, |m_2| \leq 1\}. \quad (40)$$

ef ætlunin er að skoða áhrif mættisins á allra lægstu orkustigin (fyrsta orkuborðann). Hér höfum við hins vegar áhuga á áhrifum mættisins á nokkra lægstu orkuborðana. Samkvæmt jöfnu (31) í grein 4.1 og jöfnu (39) getum við þá takmarkað okkur við hlutrúmið

$$\mathcal{K}' = \{\mathbf{K}' = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 \mid |m_1|, |m_2| \leq 2\}. \quad (41)$$

³Þetta sést með því að velja $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ í jöfnu (39).

Þetta hlutrúm inniheldur 25 nykurvigra og jöfnur hneppisins í (27) verða því 25. Við leysum þetta jöfnuhneppi tölulega (sjá viðauka A) fyrir þrjú orkugildi $U_0 = 0, 1, 5$ meV. Niðurstöður eru birtar á mynd 9. Eins og við var að búast fáum við sömu orkuborða og í grein 4.1 þegar $U_0 = 0$ meV. Á mynd 9 sést glögggt hvernig andpunktamættið brýtur upp margfeldnina í orkustigum frjálssu rafeindanna, þau klofna og raða sér í orkuborða. Við skulum skoða þessa klofnun ögn nánar.

Með einföldum truflunarreikningi [6] má sýna að áhrif veiks lotubundins mættis á orkustig frjálssra rafeinda eru mest nærri Bragg-plönnum. Samanburður á tilvikum (A) og (B) á mynd 9 staðfestir þetta. Athugið að hér mætast þrjú Bragg-plön í punktinum M og samhverfuásinn AM liggur á Bragg-plani (sjá mynd 10). Færsla orkustiganna verður því mest á bilinu A til M eins og sést á mynd 9.

Í því tilfalli að orkustig frjálssra rafeinda er tvöfalt á Bragg-plani gefur 1. stigs truflunarreikningur að það klofni í tvo aðskilda borða með orkugeil (sjá [6])

$$\Delta E = 2|\hat{U}(\mathbf{K}_{12})|. \quad (42)$$

Hér er $\mathbf{K}_{12} = \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2$ og nykurgrindarvigrairnir \mathbf{K}_i eru miðpunktar þeirra tveggja frjálssu orkuflata í jöfnu (31) sem skarast á Braggplani og gefa umrætt tvöfallt orkustig.

Dæmi um þetta tilfalli eru fyrsti og annar orkuborði í punkti A á mynd 9. Grindarvigrar frjálssu orkuflataanna eru $\mathbf{K}_1 = 0$ og $\mathbf{K}_2 = \mathbf{b}_1$. Jafna (42) og (38) gefa að þessi orkustig klofni í orkuborða með orkugeil

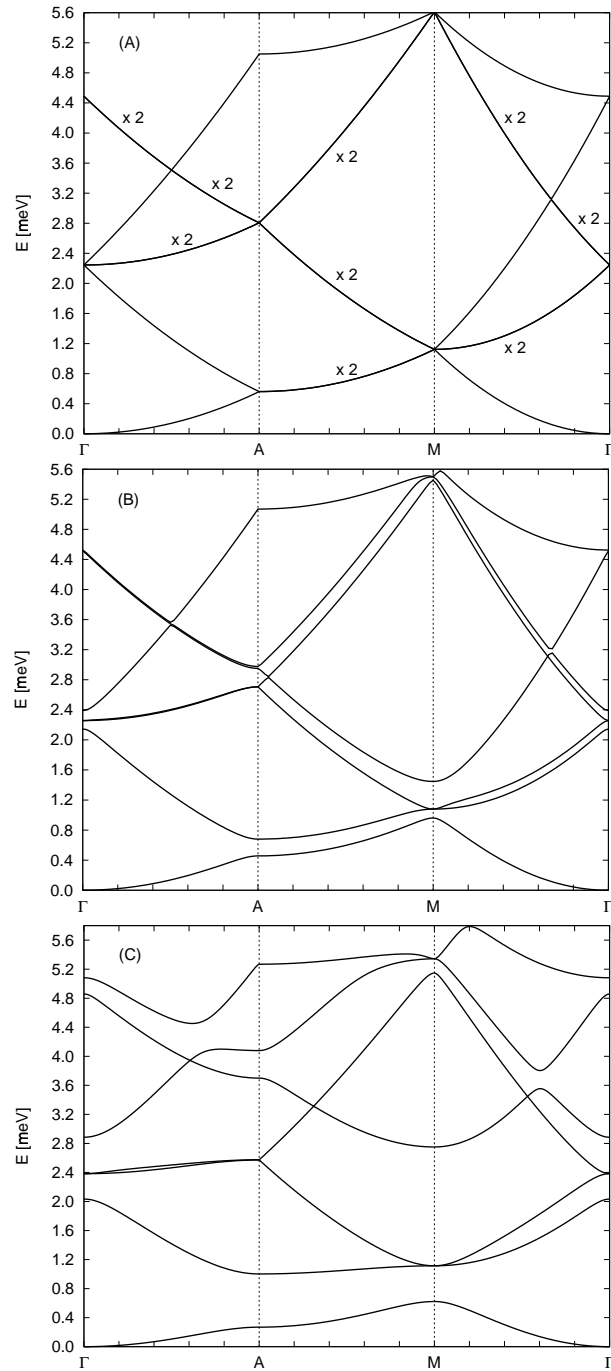
$$\Delta E = \frac{1}{4}U_0 \quad (43)$$

fyrir lítil gildi á U_0 . Hér er átt við lítil gildi miðað við frjálssu orkustigin í þessum punkti. Þetta gildir því ekki þegar $U_0 = 1$ meV eins og á mynd 9 (B). Þar fæst klofnun upp á 0.22 meV sem er um 10% frá ΔE . Ef við hins vegar lækkum U_0 niður í 0.01 meV fæst klofnun upp á 2.495 μeV , í góðu samræmi við jöfnu (43).

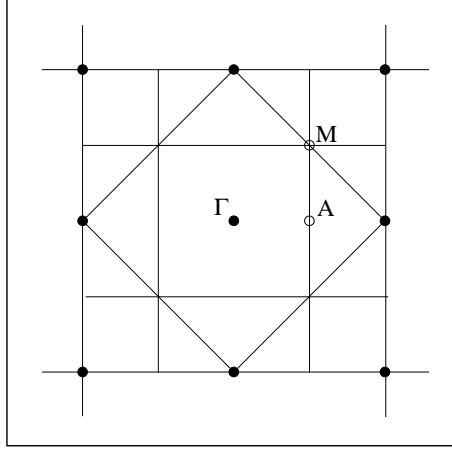
Snúum okkur nú að þeim margföldu orkustigum sem klofna ekki á Bragg-plani. Dæmi um þetta eru 2./3. orkustigið í M. Í þessum punkti mætast þrjú Bragg-plön, þ.e. plan (11), (10) og (01). Orkustig frjálssu rafeindanna

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2 \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{K}(1, 1))^2 \\ E_3 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{K}(1, 0))^2 \\ E_4 &= \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{K}(0, 1))^2 \end{aligned} \quad (44)$$

eru því margföld með orku $E_M = 1.12$ meV þegar $\mathbf{k} = \mathbf{k}_M$. Í þessum punkti eru umrædd orkustig vel aðskilin frá öðrum orkustigum, samanber mynd 9 (A). Fyrsta stigs nálgun á jöfnu (27) fyrir lítil U_0 gefur þá að nærri \mathbf{k}_M séu trufluðu



Mynd 9: Orkuborðar rafeinda í ferningsgrind andpunkta með mættishæð $U_0 = 0$ meV (A), 1 meV (B) og 5 meV (C). Borðarnir eru sýndir á samhverfufásnum nykurgrindarinnar. Tvöfaldir borðar eru auðkenndir með “x 2”.



Mynd 10: Bragg-plön í tvívíðri ferningsgrind. Aðeins eru sýnd þau plön sem afmarka fyrstu þrjú Brillouin-svæðin.

orkustigin lausnir á

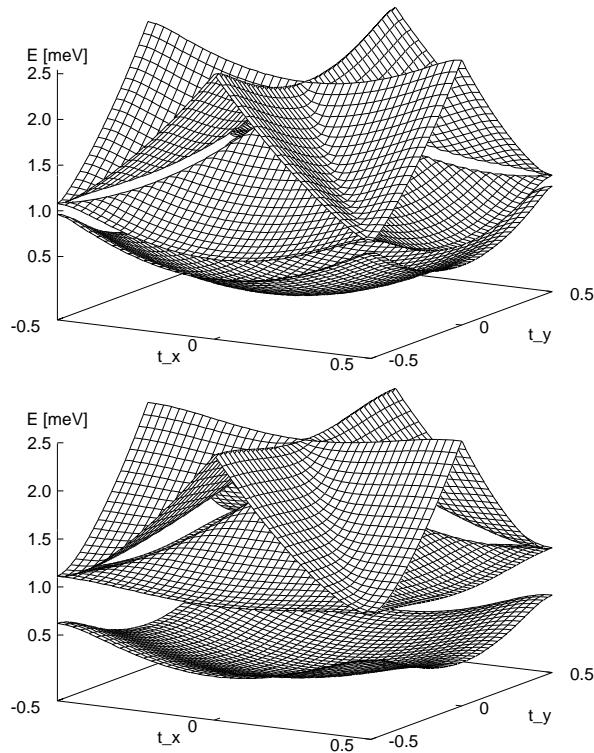
$$\begin{vmatrix} E_1 - E & \hat{U}_1 & \hat{U}_1 & \hat{U}_2 \\ \hat{U}_1 & E_2 - E & \hat{U}_2 & \hat{U}_1 \\ \hat{U}_1 & \hat{U}_2 & E_3 - E & \hat{U}_1 \\ \hat{U}_2 & \hat{U}_1 & \hat{U}_1 & E_4 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (45)$$

þar sem $\hat{U}_1 := \hat{U}(1, 0) = \hat{U}(0, 1)$ og $\hat{U}_2 := \hat{U}(1, 1)$. Í \mathbf{k}_M eru núllstöðvarnar

$$E = \begin{cases} E_M - \hat{U}_2 & (\text{tvöföld}) \\ E_M + \hat{U}_2 - 2\hat{U}_1 \\ E_M + \hat{U}_2 + 2\hat{U}_1 \end{cases} \quad (46)$$

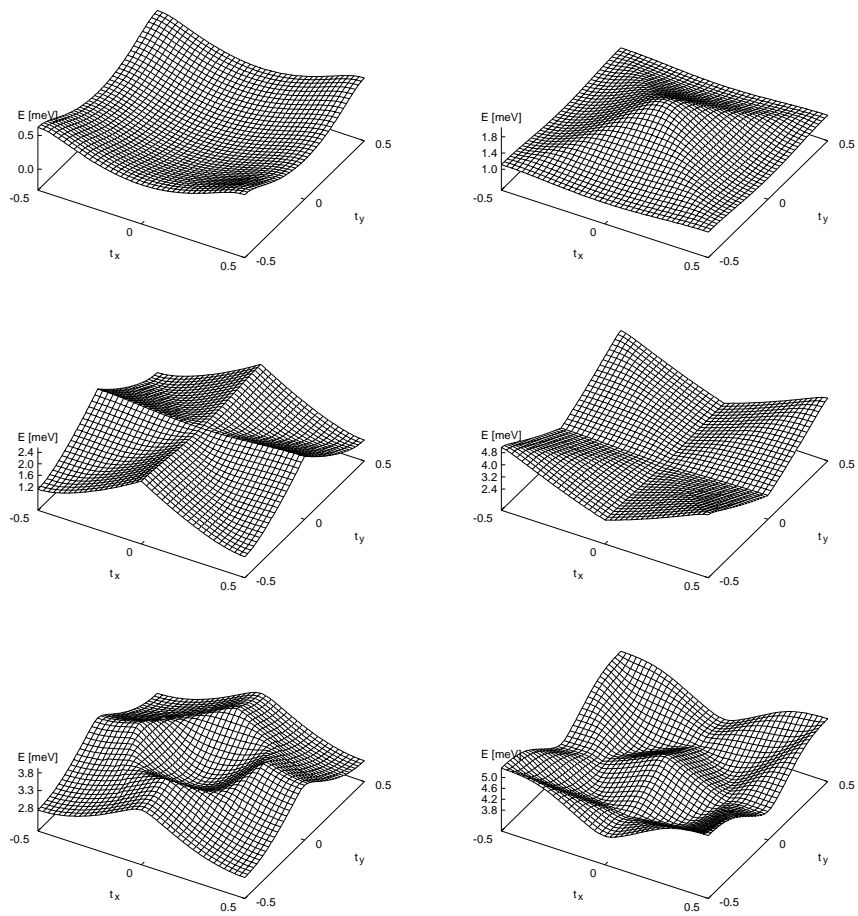
Þetta kemur heim og saman við klofnun orkustiganna á mynd 9. Takið eftir því að margfeldnin í M helst tvöföld þó svo að $U_0 = 5$ meV sem getur ekki talist lítið í þessu samhengi. Þessi margfeldni er í raun almennur eiginleiki ferningsssamhverfunar í grindinni ef við tökum ekki tillit til spuna-brautar víxlverkunar, eins og hér er gert. Þetta kemur skýrt fram á mynd 11. Þar sjáum við einnig hvernig frjálsu “orkuborðarnir” hafa mýkst og $E_n(\mathbf{k})$ er nú bæði samfellt og diffranlegt. Þetta kemur einnig fram á mynd 12 þar sem við sýnum 6 lágstu orkuborðana í andpunktagrindinni. Í kafla 3 kom fram að ekki er hægt að tryggja diffranleika í punktum þar sem orkuborðarnir eru margfaldir. Þetta gildir t.d. fyrir 3. og 4. orkuborðann í punkti A á Mynd 9.

Að lokum skulum við athuga áhrif skarpari andpunkta á rafeindirnar. Í þessu augnamiði veljum við $\alpha = 3$ í jöfnu (1). Fourier þættir þessa mættis eru umtalsvert fleiri en fyrir $\alpha = 1$ og áhrifasvæði mættisins í nykurrúminu er því töluvert stærra. Jöfnuhneppið (27) tengir nú stuðlana $c_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$ við 48 næstu nágranna í nykurgrindinni—í stað 8 áður. Til þess að skoða 9 lágstu orkuborðana

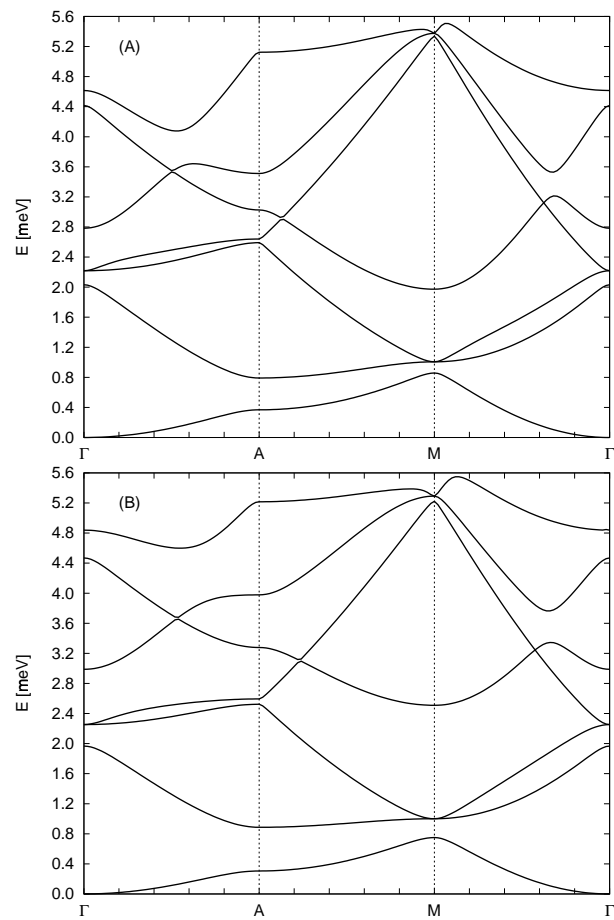


Mynd 11: Lægstu orkufletir frjálstra rafeinda í ferningslaga grind. Á efri myndinni er $U_0 = 1$ meV en 5 meV á þeirri neðri. Í báðum tilfellum er $\alpha = 1$.

Þurfum við grunn 81 grindarvigna og jafna (27) gefur okkur þá Hermetísk eiginildisvandamál fyrir 81×81 fylki. Lausnin, þ.e.a.s. orkuborðarnir, er sýnd á mynd 13 fyrir tvö mismunandi gildi á mættishæð. Hér klofna 3. og 4. orkustigið í A enda hefur nú andpunktamættið ekki lengur hverfandi Fourier-þátt fyrir nykurvignurinn $\mathbf{K}(2, 0)$. Eins og við var að búast verða orkuborðarnir þá diffranglegir. Að öðru leyti eru orkuborðarnir keimlíkir borðunum á mynd 9. Eins og áður haldast orkustigin tvöföld í \mathbf{k}_M .



Mynd 12: Lægstu orkuborðar rafeinda í ferningslaga andpunktagrind. Hér er mættishæðin $U_0 = 5$ meV og $\alpha = 1$.



Mynd 13: Orkuborðar rafeinda í ferningsgrind skarpra andpunkta ($\alpha = 3$) með mættishæð $U_0 = 5$ meV (A) og 10 meV (B). Borðarnir eru sýndir á samhverfuásam nykurgrindarinnar.

5 Ákvörðun efnamættis

Í þessum kafla er ætlunin að ákvarða efnamættið, $\mu(n, T)$, fyrir frjálssar rafeindir í tvívídd annars vegar og rafeindir í grind andpunkta hins vegar. Efnamætti tvívíðs rafeindakerfis ákvarðast af sambandinu

$$n = 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f(E(\mathbf{k})) \quad (47)$$

þar sem $f(E)$ er Fermi-fallið:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}. \quad (48)$$

Í jöfnu (47) er heildað yfir allt nykurrúmið og við margföldum útkomuna með 2 vegna spuna rafeindanna. Stærðin n er hér þéttleiki rafeindanna, T er hitastig kerfisins og k_B er Boltzmann fastinn. Við ritum gjarnan efnamættið μ sem fall af n og T sökum þess að síðarnefndu stærðirnar eru ytri stíkar í tilraunum. Það er, við getum stjórnað hitastiginu og þéttleikanum og efnamættið ákvarðast þá af jöfnu (47) sem er háð n og T . Við munum velja $T = 1$ K og n á stærðarþrepinu 10^{11} cm^{-2} í því sem á eftir fer.

5.1 Frjálssar rafeindir

Fyrir frjálssar rafeindir er samband orku og bylgjuvígurs

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (49)$$

eins og fram kom í grein 4.1. Í heildinu í jöfnu (47) er þá hentugt að skipta yfir í pólhnit og heilda yfir E í stað \mathbf{k} ,

$$\begin{aligned} n &= \int \frac{m}{\hbar^2 \pi} f(E) dE \\ &= \frac{m}{\hbar^2 \pi} \int \frac{e^{-(E-\mu)/k_B T}}{1 + e^{-(E-\mu)/k_B T}} dE \\ &= \frac{m}{\hbar^2 \pi} k_B T \ln \left(1 + e^{\mu/k_B T} \right). \end{aligned} \quad (50)$$

Jöfnu (50) má umrita fyrir μ og fæst þá

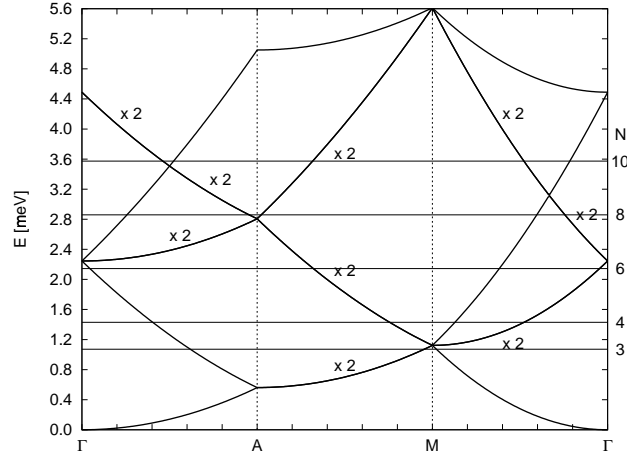
$$\mu(n, T) = k_B T \ln \left(e^{\gamma n/k_B T} - 1 \right) \quad (51)$$

þar sem $\gamma := \hbar^2 \pi / m$. Jafna (51) er efnamætti tvívíðs rafeindagass. Á mynd 14 er sýnt hvernig það leggst í borðabygginguna.

5.2 Rafeindir í grind andpunkta

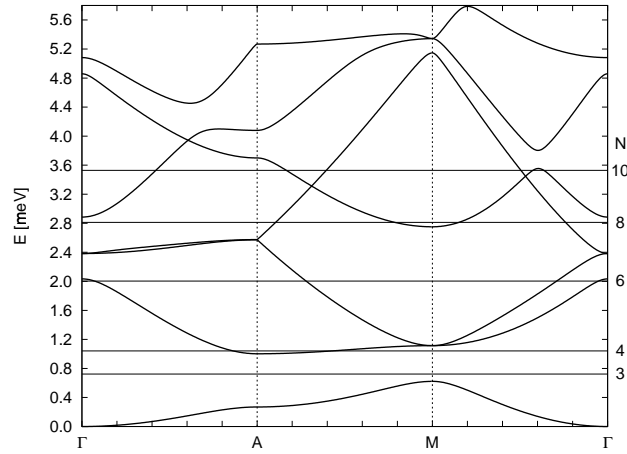
Við ætlum nú að leysa jöfnu (47) þegar $E(\mathbf{k})$ er gefið með orkuborðunum sem við reiknuðum í grein 4.2. Fyrir orkuborða er venjan að rita jöfnu (47) á eilítið annan hátt:

$$n = 2 \sum_i \int_B \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f(E_i(\mathbf{k})). \quad (52)$$



Mynd 14: Efnamætti tvíníðs rafeindagass við fast hitastig $T = 1$ K en breytilegan fjölda agna á frumeiningu, N , sem sýndur er á hægri lóðás. Þéttleiki þeirra fæst með sambandinu $n = N \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Hér er $E_i(\mathbf{k})$ orkuborði númer i og aðeins er heildað yfir eina frumeiningu B í nykurgrindinni, venjulega fyrsta Brillouin-svæðið eins og nafngiftin gefur til kynna. Til þess að leysa þessa jöfnu fyrir efnamættið beitum við tölulegum aðferðum (sjá viðauka B). Niðurstöður eru birtar á mynd 15. Þar kemur fram



Mynd 15: Efnamætti rafeinda í grind andpunkta við fast hitastig $T = 1$ K en breytilegan fjölda agna á frumeiningu, N , sem sýndur er á hægri lóðás. Þéttleiki þeirra fæst með sambandinu $n = N \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Hér er mættishæð andpunktanna $U_0 = 5 \text{ meV}$ og $\alpha = 1$.

að við agnaþéttleikann $n = 3.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ er kerfið hálfleiðari með granna orkugeil. Geilin er um 0.4 meV en $k_B T \simeq 0.1 \text{ meV}$ við hitastig á stærðarþrepinu

1 K. Annars er hér, eins og gjarnan í tvíníðum kerfum, um málmkennt kerfi að ræða.

6 Fermi yfirborð

Í þessum kafla ætlum við að skoða svokölluð Fermi-yfirborð. Við skilgreinum fyrst Fermi-orkuna sem markgildið af efnamættinu þegar hitastigið stefnir á alkul,

$$\varepsilon_F := \lim_{T \rightarrow 0} \mu. \quad (53)$$

Auðvelt er að taka þetta markgildi af efnamættinu í (51). Afraksturinn er Fermi-orkan fyrir tvívítt rafeindagas:

$$\varepsilon_F = \gamma n. \quad (54)$$

Hér er $\gamma = \hbar^2 \pi / m$. Fermi-orkan er oft notuð sem nálgun fyrir efnamættið enda er munurinn á þessu stærðum sáralítil við lágt hitastig. Í kafla 5 hefðum við eins getað notað Fermi-orkuna (54) í stað efnamættisins (51) við $T = 1$ K. Við snúum okkur nú að því að skilgreina Fermi-yfirborð.

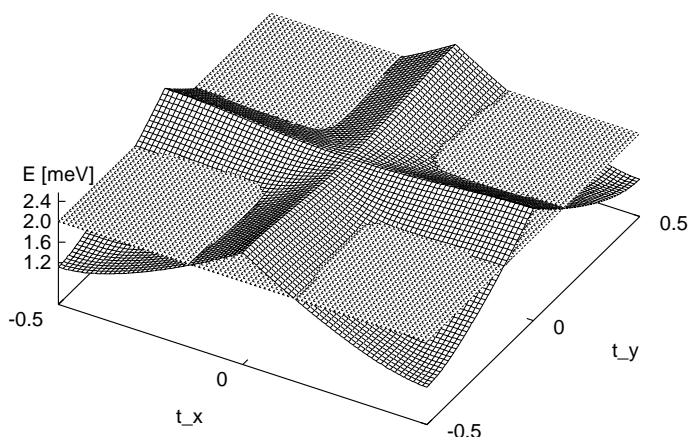
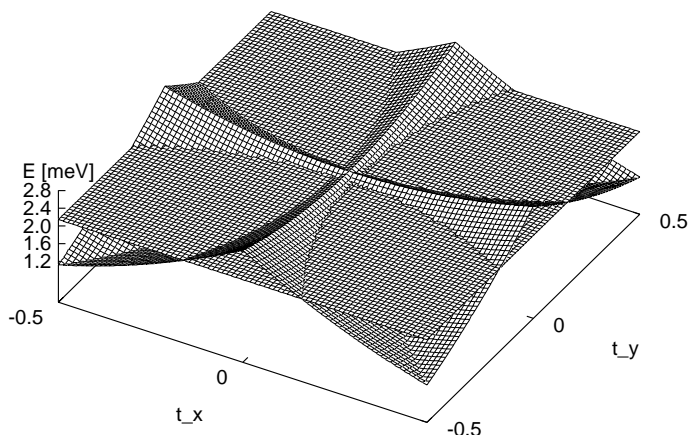
Við $T = 0$ hagar sér Fermi-fallið (48) eins og þrepafall í $E = \mu(n, 0)$. Samkvæmt skilgreiningu (53) er $\mu(n, 0) = \varepsilon_F$. Öll ástand með orku minni en Fermi-orkan eru því setin en öll önnur tóm. Þetta leyfir okkur að skilgreina yfirborð í nykurrúminu sem skilur að setin og ósetin ástönd við $T = 0$. Þetta yfirborð hefur fasta orku, sem er Fermi-orkan, og kallast Fermi-yfirborð. Grein Fermi-yfirborðsins í n -ta orkuborðanum er það yfirborð í nykurrúminu sem uppfyllir jöfnuna

$$E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_F \quad (55)$$

Slík grein þarf ekki nauðsynlega að vera til. Athugið jafnframt að í tvívídd markast Fermi-yfirborðin af skurðferli Fermi-orkunnar við orkuborðana og “yfirborðin” eru því línur.

Til þess að skoða Fermi-yfirborð fyrir rafeindir í grind andpunkta gerum við þá nálgun að $\varepsilon_F \approx \mu(n, 1 \text{ K})$. Við skoðum sömu andpunkta og í kafla 5 og látum $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Tilsvarandi Fermi-orka liggur í 3. orkuborðanum eins og sýnt er á mynd 16. Þar koma einnig Fermi-yfirborðin fram í formi skurðferla, eins og áður var minnst á.

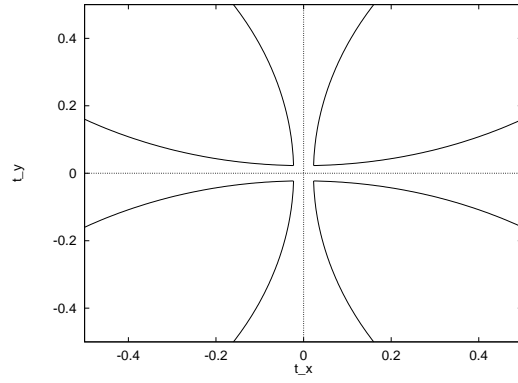
Fermi-yfirborðið fyrir frjálsu rafeindirnar má ákvarða beint með því að leysa jöfnu (55) fyrir “orkuborðana” í jöfnu (31) í grein 4.1. Lausnin er sýnd á mynd 17. Til þess að ákvarða yfirborðið fyrir andpunktagrindina notum við hins vegar tölulegar aðferðir—eins og svo oft áður. Frá rúmfræðilegu sjónarhorni er vandamálið sem við okkur blasir það að ákvarða skurðferil plansins og sveigða yfirborðsins sem sýnd eru á neðri hluta myndar 16. En hér höfum við ekki fagaða framsetningu á yfirborðinu eins og í tilviki frjálsa rafeindagassins og getum því ekki leyst jöfnuna (55) með hreinni algebru. Þess í stað reiknum við út orkugildin í 3. orkuborðanum á þéttu punktaneti og gerum tvílínulega nálgun á orkunni innan hvers fernings. Með tiltölulega einföldum algoritma má ákvarða skurðferil plans við slíkt yfirborð. Niðurstöðurnar eru sýndar á mynd 18. Þegar myndin er borin saman við mynd 17 verkur tvennt athygli. Fermi-yfirborðið er nú hornrétt á Bragg-plönnin (sjá mynd 10) og flatarmál setnu ástandanna í nykurrúminu er minna en á mynd 17. Fyrirnefnda atriðið má rekja til samhverfu grindarinnar: jafnmættisferlar eru oftast hornréttir á Bragg-plön þar sem þeir



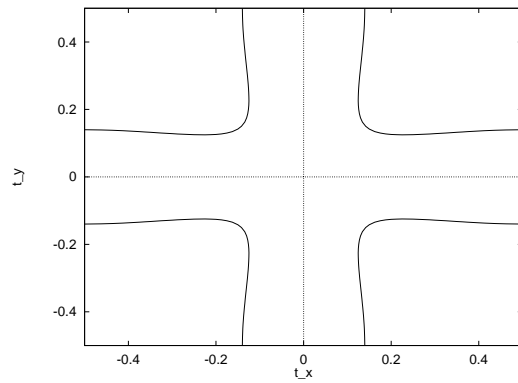
Mynd 16: Skurður Fermi-orku við 3. orkuborða. Efri myndin sýnir tvívítt rafeindagas en sú neðri rafeindir í grind andpunkta. Hér er agnaþéttleikinn $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ og andpunktarnir hafa mættishæð $U_0 = 5 \text{ meV}$ og $\alpha = 1$.

skera plönin. Síðarnefnda atriðið er afleiðing af breyttri borðabyggingu. Eins og sést á myndum 14 og 15 þá eru orkuborðarnir í þessum tveimur kerfum töluvert ólíkir, t.d. liggur fyrsti orkuborðinn mun neðar í andpunktakerfinu en rafeindagasinu. Sá fjöldi setinna ástanda sem virðist í fljótu bragði á vanta til að rafeindaþéttleikinn sé hinn sami í kerfunum er því veginn upp af meiri sætni í neðri orkuborðum andpunktakerfisins.

Auðvelt er að sýna að þéttfni með hálfyllta orkuborða hefur ætíð málmkennda eiginleika (sjá [6]). Á myndum 16 og 18 kemur greinilega fram að 3. orkuborðinn er aðeins fylltur að hluta við rafeindaþéttleikann $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ í andpunktagrindinni. Reyndar er svo við flestar aðstæður í kerfinu okkar; orkuborðar eru hálfylltir og kerfið því málmkennt.



Mynd 17: Grein Fermi-yfirborðs í 3. Brillouin-svæðinu fyrir tvívítt rafeindagas með agnaþéttleika $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Setnu ástöndin eru utan krossins.



Mynd 18: Grein Fermi-yfirborðs í 3. Brillouin-svæðinu fyrir rafeindir í grind andpunkta. Rafeindaþéttleikinn er $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ og mættishæð andpunktanna $U_0 = 5 \text{ meV}$ og $\alpha = 1$. Setnu ástöndin eru utan krossins.

7 Lokaorð

Hugmyndin að þessu verkefni kviknaði síðla ársins 1995 og var þá strax hafist handa við vinnslu þess. Þessi vinna stóð síðan, með nokkrum hléum þó, fram á mitt næsta ár. Efnid hefur því fengið góðan tíma til að gerjast hjá höfundinum og tími gafst til skipulagðrar og vandaðrar forritunar. Forritunin fyrir þetta verkefni var töluverð; rúmlega 2000 forritslínur liggja að baki þeim niðurstöðum sem hér eru birtar. Leitast var við að velja tölulega algoritma sem gæfu af sér litla skekkju og hægt væri að útfæra á hraðvirkan hátt í tölvu. Síðara skilyrðið var afar mikilvægt þar sem allir reikningar voru framkvæmdir á 50 Mhz 486 Linux-vél með 8 Mb í minni. Í dag telst slík tölva ekki einu sinni boðleg sem ‘fermingar-vél’ en hún stóð sig engu að síður þrýðilega við þetta verkefni. Að jafnaði tóku útreikningar um 15 mínútur en þá mátti keyra í bakgrunni meðan unnið var að öðrum hlutum verkefnisins. Ákvörðun efnamættisins fyrir tiltölulega hátt hitastig fól í sér tímafrekustu útreikningana (um 8 klukkustundir). Það má rekja til þess að með hækkandi hitastigi nær Fermi-fallið til fleirri ástanda og því þarf að stækka ástandsgrunninn umtalsvert sem margfaldar reiknitíma.

Hér hefur verið leitast við að kanna eiginleika tvívíðs rafeindakerfis í grind andpunkta. Megin niðurstaðan er sú að ofast er um málmkennt kerfi að ræða og kemur þetta heim og saman við aðrar hliðstæðar rannsóknir. Hafa ber í huga að þessi niðurstaða er fengin með beitingu tiltekinnar aðferðar en ýmsar aðrar aðferðir eru mögulegar við orkuborðaútreikinga (sjá [6]). Við höfum t.d. gert þá nálgun að rafeindirnar séu næstum því frjálsar í andpunktagrindinni (nearly free electron approx.) enda er það réttlæt看legt þar sem líta má á punktana sem veika truflun í rafeindagasi. Það er því eðlilegt að ætla að slík nálgun gefi sennilegar niðurstöður fyrir kerfið okkar. Við gerum jafnframt þá nálgun að rafeindirnar séu óháðar (independent electron approx.). Slík nálgun þarf ekki nauðsynlega að hunsu öll áhrif vegna víxlverkana milli rafeinda. Velja má lotubundna mættið $U(\mathbf{r})$ þannig að það taki einnig til víxlverkana rafeindanna að einhverju leyti. Valið á mættinu kallar á sjálfsamkvæma reikinga, eins og t.d. Hartree-Fock, svo vel sé. Það eykur umfang útreikninganna töluvert og því var farin sú leið að láta $U(\mathbf{r})$ aðeins innihalda andpunktamættið, sem er auðvitað fyrirfram þekkt. Nægir þá að hornalínusetja Hamilton-virkjann einu sinni fyrir hvern punkt í nykurrúminu sem við höfum áhuga á. En hver svo sem aðferðin er þá má ætla að megin niðurstaðan standi óbreytt þótt borðabyggingin breytist líklega að einhverju leyti.

Ég vil að endingu nota tækifærið og færa Viðari Guðmundssyni, umsjónarmanni þessa verks, sérstakar þakkir fyrir góðar ábendingar og fádæma þolinmæði.

A Töluleg lausn Hermetísks eigingildisverkefnis

Fyrir okkur liggur það verkefni að ákvarða eigingildi $N \times N$ Hermetísks fylkis \mathbf{A} ; það er að finna N eigingildi λ_n þannig að

$$\mathbf{A}\mathbf{c}_n = \lambda_n\mathbf{c}_n \quad (56)$$

þar sem $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$. Tilsvarandi eiginvigrar eru \mathbf{c}_n en á þeim höfum við ekki áhuga hér. Eigingildisverkefnið í jöfnu (56) má rita á jafngildan hátt sem leit að núllstöðvum ákveðu:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda_n\mathbf{I}) = 0. \quad (57)$$

Á þessu formi er einmitt jöfnuhneppið (25) í kafla 3. Ýmsar leiðir má fara til að leysa jöfnu (57) en venjulega er sú leið farin að minnka fyrst umfang verkefnisins með því að koma fylkinu \mathbf{A} þríhornalínuform. Síðan má ákvarða eigingildin fyrir \mathbf{A} með því að ákvarða eigingildin fyrir þríhornalínufylkið, sem kostar tiltölulega litla fyrirhöfn. Við skulum líta á það verkefni.

Látum \mathbf{B} vera $N \times N$ fylki sem er fengið með því að þríhornalínusetja \mathbf{A} . Látum \mathbf{B}_k vera fylkið sem inniheldur fyrstu k línur og k dálka fylkisins \mathbf{B} . Fylkin \mathbf{B} og \mathbf{B}_k eru augljóslega Hermetísk. Skilgreinum nú kennifallið f_k þannig

$$f_k(\mu) = \det(\mathbf{B}_k - \mu\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} \beta_1 - \mu & \gamma_1 & & & & \\ \gamma_1^* & \beta_2 - \mu & \gamma_2 & & & \\ & & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdots & \cdots & \\ & & & & \gamma_{k-1} & \\ & & & & \gamma_{k-1}^* & \beta_k - \mu \end{vmatrix} \quad (58)$$

Auðvelt er að leiða út rakningarformið

$$f_k(\mu) = (\beta_k - \mu)f_{k-1}(\mu) - |\gamma_{k-1}|^2 f_{k-2}(\mu) \quad (59)$$

þar sem við setjum $f_0(\mu) = 1$ og $f_1(\mu) = \beta_1 - \mu$.

Sýna má að runan $f_0(\mu), f_1(\mu), \dots, f_j(\mu)$ hefur eiginleika Sturm-runu (sjá [9]). Það þýðir að fjöldi skipta sem runan skiptir um formerki fyrir gefið μ er jafn fjölda eigingilda fylkisins \mathbf{B}_j sem eru minni eða jöfn μ . Í ljósi þess að $\mathbf{B}_N = \mathbf{B}$ fæst eftirfarandi niðurstaða: Fjöldi skipta sem formerkið breytist í rununni

$$f_1(\mu), f_2(\mu), \dots, f_N(\mu) \quad (60)$$

er jafn fjölda eigingilda \mathbf{A} sem eru minni eða jöfn μ . Þessi staðreynd kemur okkur að gagni á margan hátt. Hana má nota til að ákvarða fjölda eigingilda á tilteknu bili og við getum því beitt helmingunarleit á árangursríkan hátt. Hún getur einnig sagt til um margfeldni eigingilda, sem helmingunarleitin getur ekki. Í raun nægir Sturm-runu eiginleikinn til að ákvarða öll eigingildi en slík aðferð er almennt hægvirik og við beitum því helmingunarleit með Sturm-runu eiginleikann sem hjálpartól.

Til þess að gera kerfisbundna leit að öllum eigingildunum er mikilvægt að vita hvar skal hefja leitina. Svokölluð Gerschgorin mörk koma hér að góðum notum (sjá [10]). Þau gefa að

$$\max_i \left\{ B_{ii} - \sum_{j \neq i} |B_{ij}| \right\} \geq \lambda_n \geq \min_i \left\{ B_{ii} + \sum_{j \neq i} |B_{ij}| \right\} \quad (61)$$

fyrir öll n . Fyrir fylki á þríhornalínuformi, eins og hér eru til umræðu, gefa summurnar í jönu (61) í mesta lagi 2 liði.

Við getum því ákvarðað eigingildi fylkisins **A** með eftirfarandi aðferð:

1. Stuðlafylki jöfnuhneppisins **A** er komið yfir á þríhornalínuform, **B**, með aðferð Householders.
2. Mörk eigingilda **B** eru fundin með Gerschgorin mörkum.
3. Eigingildi fylkisins **B** eru fundin með helmingunaraðferð innan Gerschgorin markanna og aðstoð Sturm-rununnar (60).

Atriði 1 er tekið til athugunar í viðauka C.

B Töluleg ákvörðun efnamættis

Efnamætti kerfis með orkuborða $E_i(\mathbf{k})$ ákvarðast af jöfnunni

$$n = 2 \sum_i \int_B \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f(E_i(\mathbf{k})). \quad (62)$$

þar sem n er þéttleiki agna og f er Fermi-fallið eins og það er skilgreint í jöfnu (48) í grein 5. Við notum tvívíða trapísu-aðferð til þess að nálgast heildið (svæðið B er tvívítt). Það er, við skiptum svæðinu B í smáa ferninga og reiknum út gildi orkuborðanna í hornpunktunum. Þetta gerir okkur kleift að ákvarða gildi Fermi-fallsins í þessum punktum (fyrir tiltekið μ) en á milli þeirra gerum við tvílínulega nálgun. Þá fæst að

$$n \approx 2 \sum_i \frac{l^2}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{1}{4} \sum_{B_0} f(E(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \sum_{\partial B \setminus B_0} f(E(\mathbf{k})) + \sum_{B \setminus \partial B} f(E(\mathbf{k})) \right\}. \quad (63)$$

Hér er l hliðarlengd ferninganna í nykurrúminu, B_0 inniheldur hornpunkta B og ∂B er jaðar B . Sýna má að skekkjan í þessu mati heildisins er $O(l^2)$ (sjá [10]). Ef við drögum n frá báðum hliðum jöfnu (63) þá getum við litið svo á að efnamættið μ sé núllstöð hennar. Við notum efnamætti frjálsra rafeinda sem fyrstu ágiskun fyrir μ og beitum síðan helmingunaraðferð.

C Hraðvirk útfærsla á aðferð Householders

Það er afar mikilvægt að útfærslan á aðferð Householders sé hraðvirk og örugg. Við þurfum að þríhornalínusetja $N \times N$ fylki þar sem $N \sim [\sqrt{n} + 2\alpha]^2$ ef við ætlum okkur að skoða n lægstu orkustigin í grind andpunkta á forminu (1). Athugið að hér táknar $[x]$ heiltöluhluta x . Þetta þarf að gera í sérhverjum punkti nykurrúmsins þar sem við höfum áhuga á orkustigunum. Vegna ferningssamhverfu nægir okkur að skoða $1/4$ hluta fyrsta Brillouin-svæðisins. Engu að síður þurfum við reikna orkustigin fyrir fjölda nykurvigra á þessu svæði til þess að geta dregið upp mynd af samfelldum orkuborðum. Einnig þurfum við á talsvert mörgum gildum að halda til mögulegt sé að heilda yfir orkuborðana í jöfnu (62).

Af þessum sökum veljum við útfærslu Wilkinson's á Householders aðferð (sjá [11]). Hún er bæði hraðvirk og krefst lítils vinnsluminnis. Forritunin var framkvæmd í C++ því forritunarmálið býður upp á þægilega vinnslu með tvinntölur og getur einnig gefið af sér hraðvirkan keyrslukóða ef rétt er að farið (sjá t.d. [13]).

Það er gjarnan ljóður á hraðvirkum forritum að þau eru illskiljanleg og því erfið til aflúsunar og frekari þróunar. Til þess að leysa þetta vandamál förum við þá leið að sanna alla hluta forritsins, einingu fyrir einingu, og tryggjum við þannig að forritið vinni rétt (sjá [12]).

Hér á eftir fylgja hausaskrá og útfærsluskrá fyrir fallið `tri_diag()` sem kemur almennu Hermetísku fylki yfir á þríhornalínuform eins og hér hefur verið lýst.

```

// tri.h:
// Hausaskrá fyrir tri.cc - forrit sem kemur hermetísku fylki yfir
// á hornalínuform.

// Id: tri.h,v 1.1 1996/05/28 14:08:49 halldor Exp halldor

/* RCS log:
 * Log: tri.h,v
 * Revision 1.2 1996/01/25 03:09:15 halldor
 * #ifndef skilyrði bætt við til að koma í veg fyrir
 * "multiple inclusion".
 *
 * Revision 1.1 1996/01/16 23:50:20 halldor
 * Initial revision
 *
 */

#include <complex.h>

#ifndef TRI_H
#define TRI_H

//notkun: tri_diag( A, n );
//fyrir : A er neðra þríhyrningsfylki sem inniheldur  $n(n+1)/2$  stök í
// sætum  $[0..n(n+1)/2-1]$  og endurspeglar þannig hermetískt
//  $n \times n$  fylki, sem við köllum B. Tengsl milli staka í A og
// B eru:
//
//  $B_{ij} = A[(2n-j+2)(j-1)/2 + i-j], \quad j \leq i$ 
//
//  $A[(2n-i+2)(i-1)/2 + j-i]*, \quad j \geq i.$ 
//
// þar sem * táknar samokun.
//eftir: A er á þríhornalínuformi með tilliti til B. Það er:
//
//  $B_{ij} = 0$ , nema  $|i-j| \leq 1.$ 
//
void tri_diag( complex* A, int n );

#endif

```



```

// tri.cc:
// Forrit sem kemur hermetísku fylki yfir á þríhornalínuform með
// aðferð Householder.
//
// (C) 1996, Halldór Fannar Guðjónsson.

// Id: tri.cc,v 1.1 1996/05/28 14:08:49 halldor Exp halldor

// RCS Log:
// Log: tri.cc,v
// Revision 1.4 1996/05/28 12:39:59 halldor
// Útfærslan hefur nú verið sönnuð að fullu.
//
// Revision 1.3 1996/01/30 23:38:19 halldor
// Minniháttar breytingar.
//
// Revision 1.2 1996/01/25 03:09:15 halldor
// Þessi útgáfa virðist virka rétt. Um 80% algóritmans hafa verið
// sönnuð. Þarf að klára sönnun og gera fleiri próf. Lofar góðu.
//
// Revision 1.1 1996/01/16 23:51:49 halldor
// Initial revision
//
//

#include "tri.h"
#include "precision.h"
#include <math.h>
#include <complex.h>
#include <iostream.h>

void tri_diag( complex* A, int n ) {
    //Tökum frá minni fyrir helstu breytur:
    int i,j,k;
    int d[n+1], col[n+1];
    scalar r, h2;
    complex conj_r, gamma;
    complex v[n],conj_v[n],u[n],z[n];
    complex M[n][n];

    //Frumstillum vigur hornalínuvísanna þ.a. A[d[i]] = a_i,i:
    d[1] = 0;
    for( i = 1; i < n; i++ ) {
        //F.L.          _1
        //          d[1] = \ (n-j+2), 1 <= 1 <= i
        //                      /_j=2
        // og 1 <= i <= n.
        d[i+1] = d[i] + n - i + 1;
    }

    //Frumstillum vigur dálkvísanna þ.a.
    //
    //          { A[ col[j] + i ],      j <= i
    //          a_i,j = {
    //          { conj(A[ col[i] + j ]), j >= i.
    //
}

```

```

for( i = 1; i <= n; i++ ) {
    //F.L. col[1] = ( 2n-1+2 )( 1-1 )/2 - 1,    1 <= 1 <= i-1
    // og 1 <= i <= n+1.
    col[i] = (( 2*n-i+2 )*(i-1))/2 - i;
}

int tmp_b;
int b = 1;
int e = d[2];
for( k = 1; k < (n-1); k++ ) {
    //F.L. b = d[k] + 1 <=> A[b] = a_k+1,k
    //      e = d[k+1] <=> A[e-1] = a_n,k
    //
    // og stökin A[0..b-1] eru komin á þríhornalínuform
    // og 1 <= k <= n-1.

    //Ákvörðun r_k:
    scalar tmp = scalar(0.0);
    for( i = b; i < e; i++ ) {
        //F.L. tmp = |A[b]|^2 + |A[b+1]|^2 + ... + |A[i-1]|^2
        // og b <= i <= e.
        tmp += norm(A[i]);
    }
    r = sqrt(tmp);

    //Ákvörðun 2|h_k|^2:
    scalar mag_a = abs( A[b] );
    h2 = tmp + mag_a*r;

    if( h2 != scalar(0.0) ) {

        //Ákvörðun r* og v[k]:
        complex ctmp;
        if( mag_a ) {
            ctmp = scalar(1.0)/mag_a * A[b];
            v[k] = ( mag_a + r )*ctmp;
            conj_r = -r * ctmp;
        }
        else {
            v[k] = conj_r = scalar(0.0);
        }

        //Ákvörðun v_k[*]:
        tmp_b = b;
        conj_v[k] = conj(v[k]);
        for( i = k+1; i < n; i++ ) {
            //F.L. conj_v[j] = conj(A[b + (k-j)]), k+1 <= j <= i-1
            // og k < i <= n.
            conj_v[i] = conj(A[+tmp_b]);
        }

        //Núllstilling og ákvörðun u_k[]:
        for( i = 0; i < n; i++ ) u[i] = scalar(0.0);
        tmp_b = b;
        complex mult = v[k];
        for( j = k+1; j <= n; j++ ) {
            //F.L. sjá fylgiskjal A, yrðing 1.1.

```

```

        for( i = k; i <= n; i++ ) {
            //F.L. sjá fylgiskjal A, yrðing 1.2.
            if( j > i )
                u[i-1] += conj(A[col[i]+j])*mult;
            else
                u[i-1] += A[col[j]+i]*mult;
        }
        mult = A[++tmp_b];
    }

//Ákvörðun gamma_k:
gamma = complex(scalar(0.0));
for( i = k; i < n; i++ ) {
    //F.L. gamma = conj_v[k]*u[k] + conj_v[k+1]*u[k+1] +
    //          ... conj_v[i-1]*u[i-1]
    // og k <= i <= n.
    gamma += conj_v[i]*u[i];
}

//Ákvörðun z_k[]:
scalar factor1 = scalar(1.0)/h2;
complex factor2 = scalar(0.5)*gamma*factor1*factor1;
z[k-1] = scalar(1.0);
z[k] = factor1*u[k] - factor2*v[k];
tmp_b = b;
for( i = k+1; i < n; i++ ) {
    //F.L. sjá fylgiskjal A, grein 2.1.
    z[i] = factor1*u[i] - factor2*A[++tmp_b];
}

//Ákvörðun A_k:
//Fyrst einfaldi hlutinn:
A[b] = conj_r;
complex mult1, mult2;
for( j = k; j < n; j++ ) {
    tmp_b = d[j+1];
    A[tmp_b] = A[tmp_b] - scalar(2.0)*real( z[j]*conj_v[j] );
    mult1 = conj(z[j]);
    mult2 = conj_v[j];
    for( i = j+1; i < n; i++ ) {
        tmp_b++;
        A[tmp_b] = A[tmp_b] - z[i]*mult2 - mult1*A[b+i-k];
    }
}
}
//Færum okkur áfram um dálk, hoppum yfir hornalínustakið:
b = e + 1;
e = d[k+2];
}

// fin.

```

Heimildir

- [1] L. Bányai & S. W. Koch, *Semiconductor Quantum Dots*, World Scientific 1993.
- [2] P. Grambow, *Technologie und Untersuchung nanostrukturierter Halbleitersysteme*, Darmstädter Dissertation 1992.
- [3] F. Kuchar, H. Heinrich & G. Bauer (ritstj.), *Localization and Confinement of Electrons*, Springer-Verlag 1990.
- [4] V. Gudmundsson, A. Brataas, P. Grambow, B. Meurer, T. Kurth & D. Heitmann, *Bernstein modes in quantum wires and dots*, Phys. Rev. **B51**, 17744 (1995).
- [5] U. Merkt, *Quantendots auf Halbleitern*, Phys. Bl. 47 (1991) Nr. 6.
- [6] N. W. Ashcroft & N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College 1976.
- [7] Silberbauer, Doktorsritgerð, Háskólinn í Regensburg 1995.
- [8] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, Springer-Verlag 1981.
- [9] A. Jennings, J. J. McKeown, *Matrix Computation*, 2. útg. John Wiley & Sons 1992.
- [10] S. E. Koonin & D. C. Meredith, *Computational Physics*, Addison-Wesley Publishing Co. 1990.
- [11] J. H. Wilkinson, *Householder's method for the solution of the algebraic eigenproblem*, Computer J. **3**, 23–27 (1960).
- [12] S. Agnarsson, *Um sönnun forrita* (ljósrit), Reiknifræðistofa Háskóla Íslands 1992.
- [13] P. van der Linden, *Expert C Programming*, Prentice Hall 1994.