

MASTER

Berekeningen van bandenstructuren van $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_n$ -superroosters

Arjona Gomez, F.

Award date:
1993

[Link to publication](#)

Disclaimer

This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

410610
Technische Universiteit Eindhoven
Faculteit Technische Natuurkunde
Vakgroep Theoretische Natuurkunde

Berekeningen van bandenstructuren
van $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_n$ -superroosters

F. Arjona Gomez

Verslag van een afstudeerwerk in de vakgroep Theoretische Natuurkunde.

Begeleiding Prof. dr. W. van Haeringen
dr. P.A. Bobbert
dr. ir. J. Cuypers

Hierbij wil ik mijn begeleiders bedanken voor hun bijdrage aan dit afstudeerwerk.

SAMENVATTING

In dit afstudeerwerk is een model ontwikkeld waarmee bandenstructuren van superroosters berekend kunnen worden. Dit model is een uitbreiding van de interface matching method zoals door J. Cuypers in zijn promotie-onderzoek is ontwikkeld. In dit model worden de golffuncties van het superrooster opgebouwd uit lineaire combinaties van de bulkgolffuncties van de halfgeleidermaterialen waaruit het superrooster is opgebouwd. De bulkgolffuncties zijn berekend m.b.v. de empirische pseudopotential methode. De lineaire combinaties van de bulkgolffuncties worden continu en continu differentieerbaar op elk punt van het interface tussen twee lagen van het superrooster op elkaar aangesloten. Deze aansluitvoorwaarden worden in een transmissiematrixformalisme opgeschreven. De bandenstructuren van superroosters worden dan op een elegante wijze verkregen uit de eigenwaarden van de transmissiematrix van de super-eenheidscel.

Met deze methode zijn bandenstructuurberekeningen van $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters en $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ -superroosters, die in de [001]-richting zijn gegroeid, uitgevoerd voor diverse waarden van m en n . De bandenstructuurberekeningen die uitgevoerd worden met het transmissiematrixformalisme blijken, wanneer 5 2D-Fouriercomponenten gebruikt worden, numeriek instabiel te worden t.g.v. exponentieel stijgende bulkoplossingen voor bovengenoemde superroosters als deze een laagdikte hebben die groter is dan 20 atoomlagen. Voor meer 2D-Fouriercomponenten wordt de methode nog sneller numeriek instabiel. De bandenstructuurberekeningen zijn geconfronteerd met de transmissiekarakteristieken van superroosters welke zijn berekend met de scatteringsmatrixmethode. Het scatteringsmatrixformalisme is numeriek stabiel. Deze laatste berekeningen laten zien dat het voldoende is om de bulkgolffuncties te ontwikkelen in 5 2D-Fouriercomponenten.

$(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters worden onderverdeeld in type I en type II. Of men te maken heeft met type I of type II superroosters is afhankelijk van de samenstelling en de laagdikte van de superroosters. In dit afstudeerwerk zijn verschillende configuraties (m,n) $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters geclassificeerd in type I en type II. Uit onze berekeningen blijkt dat als de GaAs laag groter of gelijk is aan 20 monolagen ($m \geq 20$) het superrooster altijd van het type I is. Voor configuraties waarbij zowel m en n kleiner zijn dan 20 monolagen, heeft men altijd te maken met een type II superrooster als $m < n$.

INHOUDSOPGAVE

Hoofdstuk 1	Inleiding	...	4
Hoofdstuk 2	Theorie	...	8
2.1	Flat-Band-Approximation	...	8
2.2	Empirische Pseudopotential Methode	...	10
2.2.1	De Vlakke Golven Methode	...	10
2.2.2	Pseudopotentialen van enkele III-V halfgeleiders Zincblende Structuur	...	12
2.2.3	Complexe Bandenstructuur	...	16
2.2.3.1	Chang-Schulman Procédé	...	16
2.3	Aansluitvoorwaarden	...	18
2.4	Bandenstructuur Van Superroosters	...	21
2.4.1	Brillouin Zone van Superroosters $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$...	21
2.4.2	Dispersierelatie Van Superroosters	...	24
Hoofdstuk 3	Resultaten	...	29
3.1	$(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(\text{Al}_{30}\text{Ga}_{70}\text{As})_m$ - Superroosters	...	29
3.2	$(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ - Superroosters	...	43
3.2.1	Type I en Type II Superroosters	...	48
Hoofdstuk 4	Conclusies	...	53
Referentielijst		...	54
Appendix		...	56

H1 INLEIDING

Heterostructuren zijn materialen die opgebouwd zijn uit lagen bestaande uit verschillende types halfgeleiders. Met behulp van molecular beam epitaxy is het mogelijk om heterostructuren te vervaardigen, waarbij de overgang tussen de verschillende halfgeleidermaterialen binnen één à twee atoomlagen plaatsvindt. Er zijn verschillende configuraties denkbaar die met deze techniek vervaardigd kunnen worden, bijvoorbeeld heterojuncties, quantumputten of quantumbarrières en superroosters. Men spreekt van heterojuncties als het materiaal is opgebouwd uit twee lagen halfgeleiders. Als daarentegen het materiaal opgebouwd is uit drie lagen waarbij de buitenste lagen van dezelfde samenstelling zijn, dan spreekt men van een quantumbarrière of quantumput. Superroosters bestaan uit laagsgewijs tegen elkaar gegroeide halfgeleidermaterialen van twee verschillende typen. Deze lagen verschillen om en om van samenstelling waarbij lagen van gelijke samenstelling dezelfde dikte hebben.

Aan het begin van de jaren 70 werden de eerste voorstellen voor superroosters gedaan en gerealiseerd (Esaki en Tsu [ref.9]). De veronderstelling was dat deze kunstmatige periodieke structuur aanleiding zou geven tot nieuwe energiebandenstructuren, zodat bandgap en effectieve massa geen gegeven grootheden meer zijn, maar binnen bepaalde grenzen gemanipuleerd kunnen worden.

Het belangrijkste kenmerk van superroosters en quantumputten is dat de dikte van de laag in grootte orde overeenkomt met de De Broglie-golflengte van elektronen. Het gedrag van elektronen in heterostructuren wordt dan bepaald door de regels van de quantummechanica. Er zijn verschillende technieken ontwikkeld om het gedrag van elektronen in deze structuren te berekenen. Deze zijn het effectieve massa model (EMM), de superceltechniek, en de interface matching techniek.

In het EMM wordt de wisselwerking van het onderliggende ionenrooster met de geleidingselektronen verdisconteerd in een effectieve massa. Met behulp van storingsrekening wordt de Schrödingervergelijking omgeschreven naar een effectieve-massa-vergelijking. Kort gezegd komt het er op neer dat de golffuncties benaderd worden door envelope-functies. Deze envelope-functies zijn de omhullende functies van de echte golffuncties. De vergelijking voor de envelope-functies heeft dezelfde vorm als de Schrödingervergelijking met dit verschil dat de elektronenmassa vervangen is door een effectieve massa. Verder is de roosterpotentiaal in de afzonderlijke lagen vervangen door een effectieve potentiaal die samenvalt met het geleidingsband-minimum (-maximum) van het betreffende bulkmateriaal. De envelope-functies worden aan elk interface continu en continu differentieerbaar op elkaar aangesloten. Er zijn echter ook andere aansluitvoorwaarden in omloop [ref.5]. De problematiek rond de aansluitvoorwaarden concentreert zich rond de vraag of een bepaalde aansluitvoorwaarde wel of niet aan fluxbehoud voldoet. Meestal gaat men er in deze methode vanuit dat de conductieband in het Γ -punt zijn minimum heeft. Het EMM is slechts geldig in een klein gebied rondom een gekozen punt b.v. het Γ -punt. Hierdoor is het EMM toepasbaar voor slechts bepaalde combinaties van

materialen en bepaalde breedten van de lagen van de superroosters.

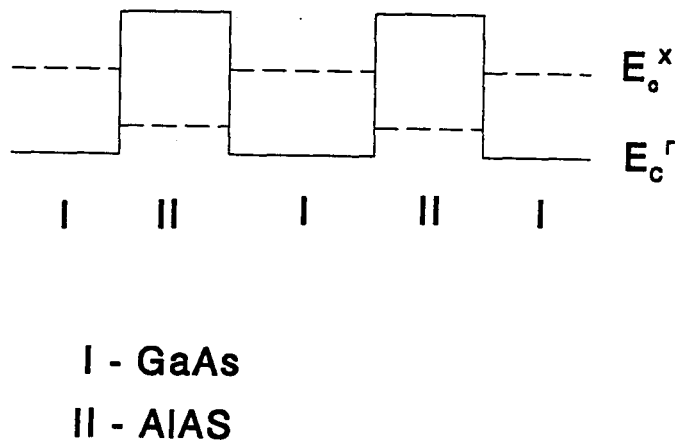
Superceltechnieken die gebruikt worden bij het berekenen van energiebandenstructuren van superroosters zijn gebaseerd op het feit dat in deze heterostructuren de translatie symmetrie loodrecht op het interface aanwezig is. Men kan dan een nieuwe eenheidscel definiëren, de super-eenheidscel, zodat met behulp van standaard bandenstructuur technieken de bandenstructuur van superroosters berekend kan worden. Als voorbeeld noemen we de pseudopotentialmethode. De kristalpotentiaal van de supercel wordt verondersteld gelijk te zijn aan de som van alle atomaire-pseudopotentialen in een supercel. De golffuncties worden dan ontwikkeld in een Fourierreeks met een eindig aantal vlakke golven. Vervolgens schrijft men de Schrödingervergelijking om in een stelsel van onafhankelijke vergelijkingen dat vervolgens gediagonaliseerd moet worden.

Het nadeel van deze methode is dat het aantal atomen in een supercel in het algemeen zeer groot moet zijn (enkele tientallen). Hierdoor moet men om tot een goede bandenstructurberekening te komen veel vlakke golven in de ontwikkeling van de golffuncties meenemen. Het berekenen van de bandenstructuren op deze wijze is daarom een tijdrovende zaak. Bovendien is de geheugenruimte van computers gelimiteerd, zodat men beperkt is in de grootte van de supercel. De veronderstelling in deze methode is verder dat het superrooster oneindig uitgestrekt is, zodat deze methode niet toereikend is voor het berekenen van elektrische transport eigenschappen door eindige superroosters.

Een andere techniek [ref.3 & 14 & 15] om transmissiekarakteristieken van eindige superroosters alsmede de energiebandenstructuren van oneindige superroosters te berekenen, is de interface matching method. Deze techniek is door ons onafhankelijk van de boven gerefereerde groepen ontwikkeld. In deze techniek veronderstellen we allereerst dat de golffuncties in de afzonderlijke lagen van de superrooster geconstrueerd kunnen worden uit de golffuncties van het betreffende bulkmateriaal (Flat-Band-Approximation, FBA). Deze kunnen bijv. berekend worden met de tight-binding method of met de empirische pseudopotential methode (in dit verslag gebruiken we de laatste methode). Vervolgens eisen we dat de golffuncties aan het interface continu en continu differentieerbaar op elkaar aansluiten, zodat de transmissie door superroosters bestaande uit een eindig aantal lagen berekend kan worden. Ook kunnen met deze methode de bandenstructuren van superroosters bestaande uit een oneindig aantal lagen worden berekend.

Superroosters worden onderverdeeld in twee typen (type I en type II). Deze classificatie heeft betrekking op de aard van de onderste geleidingsband van het superrooster. Als deze geassocieerd kan worden met Γ -resonanties (X-resonanties) in een laag van het superrooster dan classificeert men deze energieband met type I (type II). Om het bovenstaande wat te verduidelijken bespreken we het volgende voorbeeld.

Beschouw een dubbele-barrièrestructuur. Deze structuur bestaat uit een serie van vijf lagen van verschillende halfgeleidermaterialen bijv. GaAs en AlAs. GaAs is in tegenstelling tot AlAs een directe halfgeleider (het Γ -minimum ligt lager dan het X-minimum). Dit betekent dat de elektronen die geassocieerd zijn met het Γ -minimum (" Γ -elektronen") in de GaAs-laag een potentiaalput ondervinden. De elektronen die geassocieerd zijn met het X-minimum ("X-elektronen") ondervinden in deze laag een potentiaalbarrière. In de AlAs-laag is de situatie precies omgekeerd, de " Γ -elektronen" ondervinden in deze laag een potentiaalbarrière terwijl de "X-elektronen" in deze laag een potentiaalput ondervinden (zie figuur 1.1).



Figuur 1.1

Schematische weergave van een dubbele-barrièrestructuur. De "potentiaal" die de elektronen ondervinden wordt bepaald door de conductiebandminima van de afzonderlijke lagen.

Resonanties kunnen alleen in de potentiaalputten optreden. Doordat we als het ware twee afzonderlijke potentiaalputten hebben gecreëerd, in de AlAs-laag en in de GaAs-laag, is het karakter van deze resonanties verschillend. We spreken van Γ -resonanties als deze optreden in de GaAs-laag. Van X-resonanties spreekt men als deze in de AlAs-laag optreden. Door nu de breedte van de lagen te variëren kunnen we de ligging van de resonantieniveaus beïnvloeden. Zo heeft het verbreden van de GaAs-laag (AlAs-laag) tot gevolg dat de Γ -resonantie (X-resonantie) naar een lagere energie verschuift. Op deze wijze kunnen we heterostructuren vervaardigen waarbij het karakter van de onderste resonantie ofwel een Γ -resonantie of een X-resonantie is. In superroosters verbreden deze resonantieniveaus tot een energieband. Ook hierbij kunnen we aangeven of het karakter van de energieband van het Γ -type of van het X-type is. Doordat elektronengeleiding in het algemeen hoofdzakelijk in de onderste geleidingsband plaatsvindt is het van belang om te weten of deze energieband van het Γ -type of van het X-type is.

Het berekenen van transmissiekansen en bandenstructuren van respectievelijk eindige en oneindige superroosters alsmede het classificeren van superroosters in type I of type II is het doel van dit afstudeerwerk.

Het verslag is als volgt ingedeeld:

In hoofdstuk 2 wordt de theorie behandeld.

Allereerst behandelen we de Flat-Band-Approximation (2.1). In iedere laag van het superrooster worden de golffuncties berekend met behulp van het Chang-Schulman procédé (2.2.3). Vervolgens behandelen we de aansluitvoorwaarden waaraan de golffuncties aan de interfaces moeten voldoen (2.4). In een periodiek rooster moeten de golffuncties voldoen aan de Bloch-conditie. Deze conditie wordt geformuleerd in een transmissiematrixformalisme (2.4.2) waarna de eigenfuncties van superroosters berekend kunnen worden.

In hoofdstuk 3 worden de resultaten van de bandenstructuurberekeningen behandeld.

In de appendix worden enkele numerieke problemen, die met de transmissiematrix te maken hebben, behandeld.

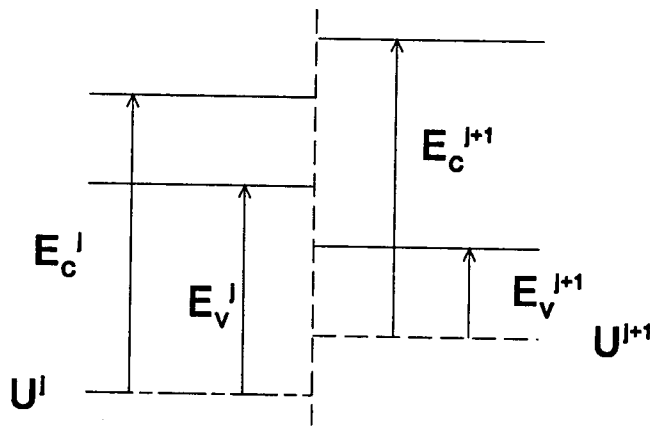
H 2 THEORIE

BANDENSTRUKTUREN EN TRANSMISSIEKARAKTERISTIEKEN VAN SUPERROOSTERS

In dit hoofdstuk behandelen we de empirische-pseudopotential methode en haar toepassing bij het berekenen van transmissiekansen en bandenstructuren van respectievelijk eindige en oneindige superroosters.

H 2.1 FLAT-BAND-APPROXIMATION

In de FBA (Flat-Band-Approximation) veronderstellen we dat de potentiaal gevoeld door elektronen in een laag van de heterostructuur dezelfde is als de bulkpotentiaal van de betreffende laag. Dit betekent dat randeffecten, zoals ladingsaccumulatie van elektronen aan het interface, worden verwaarloosd. De potentiaalsprong (bandoffset) aan het interface tussen de lagen wordt aan de hand van experimenteel gemeten of theoretisch berekende waarden bepaald. In dit verslag is gebruik gemaakt van de experimenteel gevonden bandoffset, zie hoofdstuk 3.1 en 3.2 .



Figuur 2.1 Relatieve positie van de conductieband minima en valentieband maxima in heterostructuren

Door de verbroken symmetrie in de groeirichting van heterostructuren is het golfgetal loodrecht op het interface (k_z) geen goed quantumgetal meer. Het golfgetal parallel op het interface (k_{\parallel}) is in lattice-matched heterostructuren wel een goed quantumgetal. We kunnen de golf functies in heterostructuren aanduiden met de energie E en het quantumgetal k_{\parallel} .

De golffuncties van elektronen in heterostructuren kunnen in de FBA als volgt worden bepaald:

1^e
Bereken voor elke laag bij gegeven energie E en golfgetal $\underline{k}_{\parallel}$ alle mogelijke oplossingen van

$$[H^j + U^j] \psi_{\underline{k}_{\parallel}, E}^{j,s} = E \psi_{\underline{k}_{\parallel}, E}^{j,s} \quad (2.1)$$

Waarbij:

H^j - de Hamiltoniaan voor de elektronen in de j^{de} laag.

U^j - constante die de bandoffset in de j^{de} laag verdiskonteert.

De index s nummert hier de verschillende oplossingen.

De oplossing van de Schrödingervergelijking is een lineaire combinatie van alle mogelijke oplossingen bij gegeven energie en parallel golfgetal:

$$\psi_{\underline{k}_{\parallel}}^j(\underline{r}) = \sum_s \alpha^{j,s} \psi_{\underline{k}_{\parallel}, E}^{j,s}(\underline{r}) \quad (2.2)$$

We merken op dat deze lineaire combinatie niet alleen bestaat uit alle Blochfuncties van het bulkmateriaal maar ook uit alle evanescent (uitdovende) golven.

2^e
Eis dat de golffuncties continu en continu differentieerbaar aan het interface opelkaar aansluiten. De coëfficiënten $\alpha^{j,s}$ worden eenduidig vastgelegd door de aansluitvoorwaarden aan de interfaces en door de randvoorwaarden voor $z=\infty$ en $z=-\infty$.

H 2.2 EMPIRISCHE PSEUDOPOTENTIALAAL METHODE

Zoals in het voorafgaande hoofdstuk is uiteengezet, wordt in de FBA verondersteld dat de potentiaal in de afzonderlijke lagen van een heterostructuur dezelfde is als de potentiaal van het bulkmateriaal van de betreffende laag. De golf functies in het bulkmateriaal worden berekend met behulp van de Empirische Pseudopotentialaamethode (EPM). In dit hoofdstuk zullen we nader ingaan op deze methode.

H 2.2.1 DE VLAKKE GOLVEN METHODE

In de vaste stof fysica wordt het gedrag van een elektron in een kristal vaak beschreven in het kader van de één-elektron Schrödingervergelijking. In deze zgn. meanfield benadering beweegt het elektron in een gemiddeld potentiaalveld t.g.v. de overige elektronen en de kristalpotentiaal. Deze potentiaal heeft de translatiesymmetrie van het Bravaisrooster. De één-elektron Schrödingervergelijking luidt:

$$H \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r}) \quad (2.3)$$

met:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{r}) \right] \quad (2.4)$$

$$V(\underline{r}) = V(\underline{r} + \underline{R}) \quad (2.5)$$

\underline{R} -Bravaisroostervector

$V(\underline{r})$ -Kristalpotentiaal

Een belangrijk hulpmiddel in de vaste stof fysica om bovenstaande vergelijking op te lossen is het Bloch-theorema. Dit theorema houdt in dat de eigenfuncties zo gekozen kunnen worden, dat ze geschreven kunnen worden in de vorm:

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} u_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad (2.6)$$

met:

$$u_{\underline{k}}(\underline{r}) = u_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}) \quad (2.7)$$

Hierin is \underline{k} een reële golfvector.

De functie $u_{\underline{k}}(\underline{r})$ is roosterperiodiek en kan dus ontwikkeld worden in een Fourierreeks:

$$u_{\underline{k}}(\underline{r}) = \sum_{\underline{K}} C_{\underline{k}, \underline{K}} e^{i \underline{K} \cdot \underline{r}} \quad (2.8)$$

en dus geldt:

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \sum_{\underline{K}} C_{\underline{k}, \underline{K}} e^{i(\underline{k} + \underline{K}) \cdot \underline{r}} \quad (2.9)$$

Waarin \underline{K} loopt over de verzameling reciproke roostervectoren.

Substitutie van 2.9 in 2.3 levert:

$$\sum_{\underline{K}} \left\{ \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\underline{r}}^2 + V(\underline{r}) - E \right) e^{i(\underline{k} + \underline{K}) \cdot \underline{r}} \right\} C_{\underline{k}, \underline{K}} = 0 \quad (2.10)$$

Nu is ook $V(\underline{r})$ roosterperiodiek, en is dus ook te ontwikkelen in een Fourierreeks:

$$V_{\underline{K}} = \sum_{\underline{K}'} V_{\underline{K}'} e^{-i \underline{K}' \cdot \underline{r}} \quad (2.11)$$

met:

$$V_{\underline{K}} \equiv \frac{1}{\Omega_c} \int_{\Omega_c} d^3 \underline{r} V(\underline{r}) e^{-i \underline{K} \cdot \underline{r}} \quad (2.12)$$

Hierbij is

Ω_c - de volume van de eenheidscel.

Het is nu handig om vergelijking 2.10 te vermenigvuldigen met $e^{-i(\underline{k} + \underline{K}') \cdot \underline{r}}$ en te integreren over het volume van de éénheidscel. Voor alle \underline{K} geldt dan:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\underline{k} + \underline{K})^2 + V_0 - E \right\} C_{\underline{k}, \underline{K}} + \sum_{\substack{\underline{K}' \neq \underline{K}}} V_{\underline{K} - \underline{K}'} C_{\underline{k}, \underline{K}'} = 0 \quad (2.13)$$

Dit is bij gegeven \underline{k} een lineair onafhankelijk stelsel vergelijkingen. Niet-triviale oplossingen vindt men als de coëfficiëntendeterminant nul gesteld wordt.

H 2.2.2 PSEUDOPOTENTIALEN VAN ENKELE III-V HALFGELEIDERS

In dit hoofdstuk gaan we nader in op de pseudopotentialen van III-V halfgeleiders. Deze halfgeleiders hebben een kristalstructuur die gekarakteriseerd wordt door een f.c.c.-rooster. De primitieve cel van deze materialen bestaat uit twee atomen, één uit groep III en één uit groep V. Deze structuur staat bekend als de zinctblende structuur.

ZINCBLLENDE STRUKTUUR

Kristalstructuren worden onderverdeeld naar hun Bravaisrooster en de manier waarop de primitieve cel met ionen is gevuld. De primitieve cel is per definitie het lichaam dat wordt opgespannen door de eenheidsvectoren. Een fcc-Bravaisrooster (faced centered cubic) is een kubisch translatiestrooster met roosterpunten op ieder hoekpunt en in het midden van elk vlak. De primitieve vectoren van een Bravaisrooster zijn in het algemeen niet eenduidig gedefinieerd.

Voor een fcc-rooster kiezen we, met het oog op de nog te behandelen superroosterstructuren, de volgende primitieve vectoren:

$$\underline{a}_1 = \frac{a}{2} (\underline{x} + \underline{y}) \quad \underline{a}_2 = \frac{a}{2} (-\underline{x} + \underline{y}) \quad \underline{a}_3 = \frac{a}{2} (\underline{y} + \underline{z}) \quad (2.14)$$

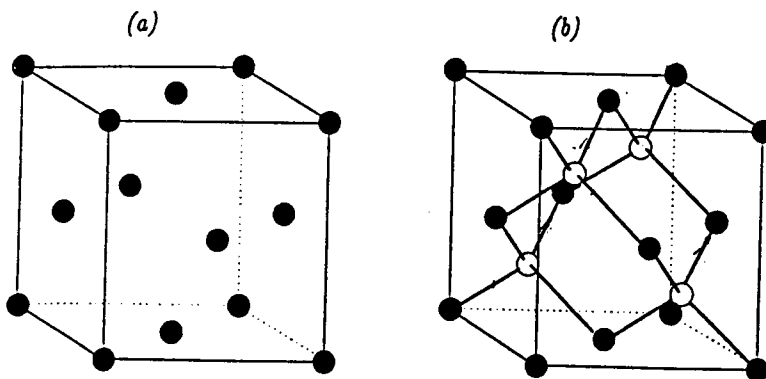
$$\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad (2.15)$$

met:

$$n_j = \dots -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots \quad \text{met } j = 1, 2, 3$$

De zinctblende-structuur kan men opvatten als twee ten opzichte van elkaar verschoven f.c.c. Bravais roosters. In elke primitieve cel bevinden zich twee atomen. De oorsprong nemen we in het midden tussen atoom 1 en atoom 2:

$$\underline{r}_1 = -\underline{r}_2 = \underline{\tau}$$



Figuur 2.2a Eenheidscel van een fcc-rooster

Figuur 2.2b Eenheidscel van zinctblende structuren

De bijbehorende reciproke roostervectoren zijn:

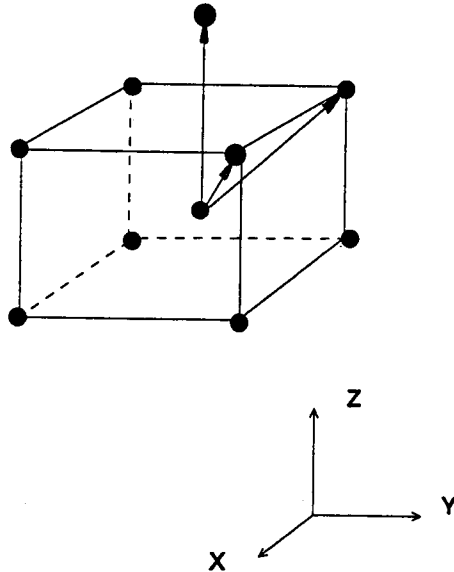
$$\underline{K} = K_1 \underline{b}_1 + K_2 \underline{b}_2 + K_3 \underline{b}_3 \quad (2.16)$$

met:

$$\underline{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\underline{x} + \underline{y} + \underline{z}) \quad \underline{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(-\underline{x} + \underline{y} + \underline{z}) \quad \underline{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(2\underline{z}) \quad (2.16a)$$

K_i is een geheel getal.

In de literatuur wordt dit een bcc-rooster genoemd.



Figuur 2.3 Reciproke roostervectoren van een bcc-rooster

De pseudokristalpotentiaal wordt verondersteld gelijk te zijn aan de sommatie over alle lokale, sferisch symmetrische atomaire pseudopotentialen, die geassocieerd worden met de individuele atomen gecentreerd op positie \underline{r}_α^j .

$$V^{ps}(\underline{r}) = \sum_{j=1}^{N_c} \sum_{\alpha=1}^n v^{ps, \alpha}(\underline{r} - \underline{r}_\alpha^j) \quad (2.17)$$

Hierbij is

n - aantal atomen per primitieve cel

N_c - aantal primitieve cellen in het kristal

De pseudopotential is in de reciproke ruimte te schrijven als een sommatie over alle atomaire pseudopotentialen (v^{ps}) in een eenheidscel vermenigvuldigd met de bijbehorende structuurfactor (S) [ref.10].

$$V_{|\underline{K}|}^{ps} = \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha,|\underline{K}|} v_{\alpha,|\underline{K}|}^{ps} \quad (2.18)$$

met:

$$S_{\alpha}^{ps} = \frac{1}{n} e^{-i\underline{K} \cdot \underline{r}^{\alpha}} \quad (2.19)$$

waarin:

$n = 2$ voor zinblendende structuren.

In zinblendende structuren is het daarnaast handig om de structuurfactor op te splitsen in een symmetrisch en een antisymmetrisch deel. De reden hiervoor is dat de coördinaten van de twee atomen in de primitieve cel spiegelsymmetrisch rond de oorsprong gekozen zijn. De posities van deze atomen in de primitieve cel zijn $r_1 = r_2 = \tau = (a/8)(1,1,1)$. De pseudopotentialen kunnen we als volgt schrijven:

$$V^{ps}(\underline{r}) = \sum_{\underline{K}} [v_{|\underline{K}|}^{s,ps} S_{\underline{K}}^s + i v_{|\underline{K}|}^{a,ps} S_{\underline{K}}^a] e^{i\underline{K} \cdot \underline{r}} \quad (2.20)$$

met:

$$S_{\underline{K}}^s = \cos(\underline{K} \cdot \underline{\tau}) \quad (2.21)$$

$$S_{\underline{K}}^a = \sin(\underline{K} \cdot \underline{\tau})$$

Het kenmerk van pseudopotentialen is dat ze kunnen worden ontwikkeld in een beperkt aantal vlakke golven. Doordat de atomaire pseudopotential bolsymmetrisch is, is het van belang om na te gaan hoeveel verschillende \underline{K} vectoren tot eenzelfde 'straal' $|\underline{K}|$ leiden. We hebben in het voorafgaande gezien dat het reciproke rooster van een f.c.c.-Bravais rooster een b.c.c. rooster is, met reciproke rooster vectoren (vgl 2.16 en 2.16a) :

$$\underline{K} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} K_1 - K_2 \\ K_1 + K_2 \\ K_1 + K_2 + 2K_3 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Definieer nu:

$$\alpha = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 |\underline{K}|^2 \quad (2.23)$$

De waarde die α kan aannemen is dus 0, 3, 4, 8, 11, 12, Het aantal malen dat deze waarden voorkomt is gelijk aan 1, 8, 6, 12, 24, 8, Doordat de pseudo-

potentiaal bolsymmetrisch wordt verondersteld, moeten steeds volle schillen worden meegenomen. Het aantal \underline{K} vectoren in de ontwikkeling van de pseudopotentiaal is dan gelijk aan 1, 9, 15, 27, 51, 59, In onderstaande tabel vindt men de pseudopotentialvormfactoren voor GaAs en AlAs. Uit symmetrie overwegingen volgt voor de zinblende structuur dat de structuurfactoren $S^s(4)$ en $S^s(8)$ gelijk aan nul zijn.

$v^{s/a} ()$	$v^s(3)$	$v^a(3)$	$v^a(4)$	$v^s(8)$	$v^s(11)$	$v^a(11)$
GaAs	-0.2290	0.0700	0.0600	0.0123	0.0600	0.0100
AlAs	-0.2200	0.0720	0.0625	0.0260	0.0700	-0.0075

Tabel 1 Enkele pseudopotentialvormfactoren van zowel GaAs als AlAs uitgedrukt in Rydberg.

De pseudopotentialvormfactoren zijn zo gekozen dat de experimenteel gemeten bandenstructuren wordt gereproduceerd [ref.1].

De bandenstructuren van $Al_xGa_{1-x}As$ -halfgeleiders kunnen worden berekend met behulp van de 'virtual-kristal approximation' [ref. 1]. In deze benadering wordt de potentiaal van $Al_xGa_{1-x}As$ benaderd door het rekenkundig gemiddelde van de pseudopotential van AlAs en GaAs. Het is een 1^{ste} orde benadering waarbij de 'disorder' t.g.v. de random verdeling verwaarloosd wordt.

$$V_{Al_xGa_{1-x}As}^{ps} = x V_{AlAs}^{ps} + (1-x)V_{GaAs}^{ps} \quad (2.24)$$

H 2.2.3 COMPLEXE BANDENSTRUKTUUR

Voorafgaande aan dit hoofdstuk is de $E(\underline{k})$ -dispersie relatie aan de orde geweest. Hierbij wordt bij gegeven reële waarde van de Bloch-vectoren \underline{k} de energie E uitgerekend. Zoals in de inleiding is vermeld, bestaan heterostructuren uit epitaxiaal gegroeide lagen van halfgeleider materialen. Doordat de lagen in de richting loodrecht aan het interface (z-as) een eindige breedte hebben, zijn zowel reële als complexe k_z -waarden nodig. Door Chang en Schulman is een procédé ontwikkeld waarmee complexe bandenstructuren berekend kunnen worden.

H 2.2.3.1 CHANG-SCHULMAN PROCÉDÉ

De Schrödingervergelijking in de j-de laag van de heterostructuur luidt:

$$[H^j + U^j] \psi_{\underline{k}}^j = E \psi_{\underline{k}}^j \quad (2.25)$$

Waarbij de Hamiltoniaan

$$H^j = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\underline{r}}^2 + V^{ps}(\underline{r}) \quad (2.26)$$

de één-elektron beweging beschrijft, met $V^{ps}(\underline{r})$ de empirische pseudopotential.

Ontbind nu de Blochvector \underline{k} in een vector loodrecht op het interface en een vector in het vlak parallel aan het interface:

$$\underline{k} = k_z \underline{e}_z + \underline{k}_{\parallel} \quad (2.27)$$

Voor de waarden van $\underline{k}_{\parallel}$ eisen we dat deze reëel zijn, echter de waarden van k_z mogen zowel reëel als complex zijn. Het is dus de bedoeling om bij vaste reële E en reële $\underline{k}_{\parallel}$ alle mogelijke k_z oplossingen te berekenen. Met het oog op het bovenstaande schrijven we de eigenfuncties in het j-de materiaal als volgt op:

$$\psi_{\underline{k}}^j(\underline{r}) = e^{i \underline{k}_{\parallel} \cdot \underline{r}} u_{\underline{k}}^j(\underline{r}) = e^{i (k_{\parallel} \cdot \underline{\rho} + k_z z)} u_{\underline{k}_{\parallel}, k_z}^j(\underline{r}) \quad (2.28)$$

Substitutie van 2.28 in 2.25 en omschrijven naar de reciproke roosterruimte zoals beschreven in de vorige paragrafen, geeft:

$$\sum_{\underline{K}'} [H_{\underline{K}, \underline{K}'}(\underline{k}_{\parallel}, k_z) + (U^j - E) \delta_{\underline{K}, \underline{K}'}] C_{\underline{k}_{\parallel}, k_z, \underline{K}'} = 0 \quad (2.29)$$

Waarbij:

$$H_{\underline{K}, \underline{K}'}(\underline{k}_{\parallel}, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m} (\underline{k}_{\parallel} + k_z \underline{e}_z + \underline{K})^2 \delta_{\underline{K}, \underline{K}'} + V_{|\underline{K} - \underline{K}'|}^{ps} \quad (2.30)$$

In het Chang-Schulman procédé wordt de bovenstaande matrixvergelijking omgeschreven als een eigenwaardenvergelijking met als eigenwaarde k_z . De matrixvergelijking wordt daartoe ontwikkeld in een matrix-polynoom in machten van k_z :

$$H_{\underline{K}, \underline{K}'}(\underline{k}_{\parallel}, k_z) + (U^j - E) I = H_{\underline{K}, \underline{K}'}^{(0)}(\underline{k}_{\parallel}, E) + H_{\underline{K}, \underline{K}'}^{(1)}(\underline{k}_{\parallel}) k_z + H_{\underline{K}, \underline{K}'}^{(2)}(\underline{k}_{\parallel}) k_z^2$$

Toepassen van het voorafgaande op bovenstaande matrixvergelijking levert:

$$H_{\underline{k}, \underline{k}'}^{(0)} = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\underline{k}_1 + \underline{K})^2 + U^j - E \right] \delta_{\underline{k}, \underline{k}'} + V_{|\underline{K} - \underline{k}'|}^{ps}$$

$$H_{\underline{k}, \underline{k}'}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m} 2 \underline{K}_z \delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \quad (2.32)$$

$$H_{\underline{k}, \underline{k}'}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2m} \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

De matrixvergelijking 2.29 kan dan als een eigenwaardenvergelijking worden geschreven met als eigenwaarde k_z :

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ (H^{(2)})^{-1}H^{(0)} & -(H^{(2)})^{-1}H^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{C} \\ k_z \underline{C} \end{bmatrix} = k_z \begin{bmatrix} \underline{C} \\ k_z \underline{C} \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

Bovenstaande vergelijking heeft een niet-triviale oplossing als de coëfficiënten-determinant nul is. In principe is de dimensie van deze eigenwaardenvergelijking oneindig groot, in de berekeningen beperken we ons echter tot N vlakke golven. Dit levert bij een gegeven waarde van de energie dus 2N eigenwaarden op (k_z). Het aantal oplossingen waarvoor k_z in de eerste Brillouinzone ligt is in het algemeen kleiner dan 2N. Stel dat aantal gelijk aan 2M. De algemene oplossing van de Schrödingervergelijking is dan:

$$\psi_{\underline{k}}^j(\underline{r}) = \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} \psi_{\underline{k}}^{j,s}(\underline{r}) \quad (2.34)$$

Met $\psi_{\underline{k}}^{j,s}$ een oplossing van (2.25) gegeven door:

$$\psi_{\underline{k}}^{j,s}(\underline{r}) = \sum_{\underline{K}}^M u_{\underline{K}, \underline{k}}^{j,s}(\underline{z}) e^{i(\underline{K} + \underline{k}) \cdot \underline{r}} \quad (2.35)$$

en

$$u_{\underline{K}, \underline{k}}^{j,s}(\underline{z}) = \sum_{K_z(\underline{K})} C_{\underline{k}, k_z^{j,s}; \underline{K}}^{j,s} e^{i(K_z + k_z^{j,s})z} \quad (2.36)$$

Waarbij $\underline{K} = \underline{K}_1 + K_z \underline{e}_z$ en $\underline{k} = \underline{k}_1 + k_z^{j,s} \underline{e}_z$ en waarbij (\underline{K}_1) -index betekent dat gesommeerd moet worden over \underline{K}_z waarvoor geldt $\underline{K} = \underline{K}_1 + K_z \underline{e}_z$.

H 2.3 AANSLUITVOORWAARDEN

In deze sectie behandelen we de aansluitvoorwaarden waaraan de golf functie aan het interface tussen twee lagen van een heterostructuur moet voldoen. De aansluitvoorwaarden worden geformuleerd aan de hand van een transmissiematrix. Dit formalisme is niet numeriek stabiel, het scattering matrix formalisme zoals door J. Cuypers is ontwikkeld is wel numeriek stabiel. In de appendix wordt op deze problematiek nader ingegaan. In dit hoofdstuk blijven we vasthouden aan de transmissiematrix, omdat in dit formalisme de aansluitvoorwaarden van heterostructuren bestaande uit meerdere interfaces zich laat vertalen als een simpele matrix vermenigvuldiging.

De golf functie in de j^{de} laag is via het Chang-Schulman model gegeven door:

$$\psi_{\underline{k}\parallel}^j(r) = \sum_{\underline{K}\parallel}^M \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} u_{\underline{K}\parallel, \underline{k}\parallel}^{j,s}(z) e^{i(\underline{K}\parallel + \underline{k}\parallel) \cdot \underline{\rho}} \quad (2.37)$$

Aan het interface eisen we dat voor alle $\underline{r}_{\parallel}$ de golf functie en zijn eerste afgeleide continu verlopen.

$$\psi_{\underline{k}\parallel}^j(\underline{r}_{\parallel}, z_0) = \psi_{\underline{k}\parallel}^{j+1}(\underline{r}_{\parallel}, z_0) \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \psi_{\underline{k}\parallel}^j}{\partial z} \Big|_{z=z_0} = \frac{\partial \psi_{\underline{k}\parallel}^{j+1}}{\partial z} \Big|_{z=z_0} \quad (2.39)$$

Substitutie van 2.37 in 2.38 en 2.39 levert:

$$\sum_{\underline{K}\parallel}^m \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} u_{\underline{K}\parallel, \underline{k}\parallel}^{j,s}(z_0) e^{i(\underline{K}\parallel + \underline{k}\parallel) \cdot \underline{\rho}} = \sum_{\underline{K}'\parallel}^M \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j+1,s} u_{\underline{K}'\parallel, \underline{k}\parallel}^{j+1,s}(z_0) e^{i(\underline{K}'\parallel + \underline{k}\parallel) \cdot \underline{\rho}} \quad (2.40)$$

$$\sum_{\underline{K}\parallel}^M \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} e^{i(\underline{K}\parallel + \underline{k}\parallel) \cdot \underline{\rho}} \frac{\partial u_{\underline{K}\parallel, \underline{k}\parallel}^{j,s}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_0} = \sum_{\underline{K}'\parallel}^M \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j+1,s} e^{i(\underline{K}'\parallel + \underline{k}\parallel) \cdot \underline{\rho}} \frac{\partial u_{\underline{K}'\parallel, \underline{k}\parallel}^{j+1,s}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_0}$$

Omdat de termen $e^{i\underline{K}\parallel \cdot \underline{\rho}}$ een volledig stelsel vormen, kan aan bovenstaande vergelijkingen alleen worden voldaan als we eisen dat voor alle $\underline{K}_{\parallel}$ geldt:

$$\sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} u_{\underline{K}_1, \underline{k}_1}^{j,s}(z_0) = \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j+1,s} u_{\underline{K}_1, \underline{k}_1}^{j+1,s}(z_0) \quad (2.41)$$

$$\sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j,s} \frac{\partial u_{\underline{K}_1, \underline{k}_1}^{j,s}(z_0)}{\partial z} = \sum_{s=1}^{2M} \alpha^{j+1,s} \frac{\partial u_{\underline{K}_1, \underline{k}_1}^{j+1,s}(z_0)}{\partial z}$$

Aan bovenstaande vergelijkingen moeten de α -coëfficiënten voor elke reciproke roostervector \underline{K}_\parallel voldoen, zodat deze vergelijkingen in een matrixvergelijking kunnen worden geschreven:

$$\underline{\underline{D}}^j(z_0) \underline{\alpha}^j = \underline{\underline{D}}^{j+1}(z_0) \underline{\alpha}^{j+1} \quad (2.42)$$

met:

$$\underline{\underline{D}}^j = \begin{pmatrix} u_{\underline{K}_1}^{j,1} & u_{\underline{K}_1}^{j,2} & \dots & \dots & \dots & u_{\underline{K}_1}^{j,2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{\underline{K}_m}^{j,1} & u_{\underline{K}_m}^{j,2} & \dots & \dots & \dots & u_{\underline{K}_m}^{j,2M} \\ \frac{\partial u_{\underline{K}_1}^{j,1}}{\partial z} & \frac{\partial u_{\underline{K}_1}^{j,2}}{\partial z} & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial u_{\underline{K}_1}^{j,2M}}{\partial z} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial u_{\underline{K}_m}^{j,1}}{\partial z} & \frac{\partial u_{\underline{K}_m}^{j,2}}{\partial z} & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial u_{\underline{K}_m}^{j,2M}}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

Het is nu handig om de $\underline{\underline{D}}$ -matrix op te splitsen in twee matrices. Beschouw hiertoe de matrixelementen:

$$u_{\underline{K}_\parallel, \underline{k}_\parallel}^{j,s}(z) = e^{i k_z^{j,s} z} \sum_{\underline{K}(\underline{K}_\parallel)} C_{\underline{k}_\parallel, k_z^{j,s}; \underline{K}}^{j,s} e^{i K_z z} \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial u_{\underline{K}_\parallel, \underline{k}_\parallel}^{j,s}(z)}{\partial z} = e^{i k_z^{j,s} z} \sum_{\underline{K}(\underline{K}_\parallel)} C_{\underline{k}_\parallel, k_z^{j,s}; \underline{K}}^{j,s} i (k_z^{j,s} + K_z) e^{i K_z z} \quad (2.45)$$

Definieer nu:

$$u_{\underline{k}_1, \underline{k}_2}^{j,s}(z) \equiv e^{i k_z^{j,s} \cdot z} V_{\underline{k}_1, \underline{k}_2}^{j,s}(z) \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial u_{\underline{k}_1, \underline{k}_2}^{j,s}(z)}{\partial z} \equiv e^{i k_z^{j,s} \cdot z} W_{\underline{k}_1, \underline{k}_2}^{j,s}(z) \quad (2.47)$$

De D-matrix kan worden geschreven als het produkt van twee matrices, namelijk:

$$\underline{\underline{D}}^j(z) = \underline{\underline{\tilde{D}}}^j(z) \underline{\underline{P}}^j(z) \quad (2.48)$$

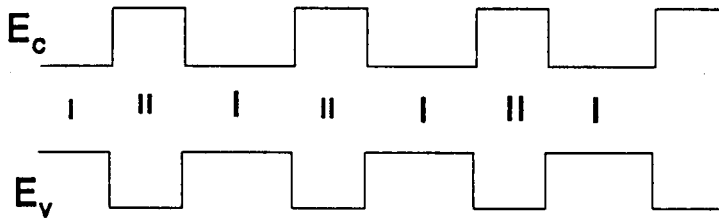
Hierin is P een diagonaalmatrix met de volgende elementen:

$$\underline{\underline{P}}_{s,s'}^j = e^{i k_z^{j,s} \cdot z} \delta_{s,s'} \quad (2.49)$$

De golfvuncties van heterostructuren bestaande uit meerdere interfaces kunnen op analoge wijze worden beschreven. Aan elk interface worden de bulkgolffuncties continu en continu differentieerbaar op elkaar aangesloten. Er ontstaat dan een transmissiematrix die de α -coëfficiënten van de verschillende lagen aan elkaar koppelt.

H 2.4 BANDENSTRUKTUUR VAN SUPERROOSTERS

Een superrooster bestaat uit een periodieke herhaling van twee verschillende lagen halfgeleidermaterialen. Deze lagen verschillen om en om van samenstelling, waarbij lagen van gelijke samenstelling dezelfde dikte hebben. In dit hoofdstuk behandelen we eerst de eerste Brillouin zone van een superrooster (opgebouwd uit lagen van GaAs en AlAs) en vervolgens laten we zien hoe, uitgaande van de transmissiematrix, de dispersie relatie van superroosters berekend kan worden.



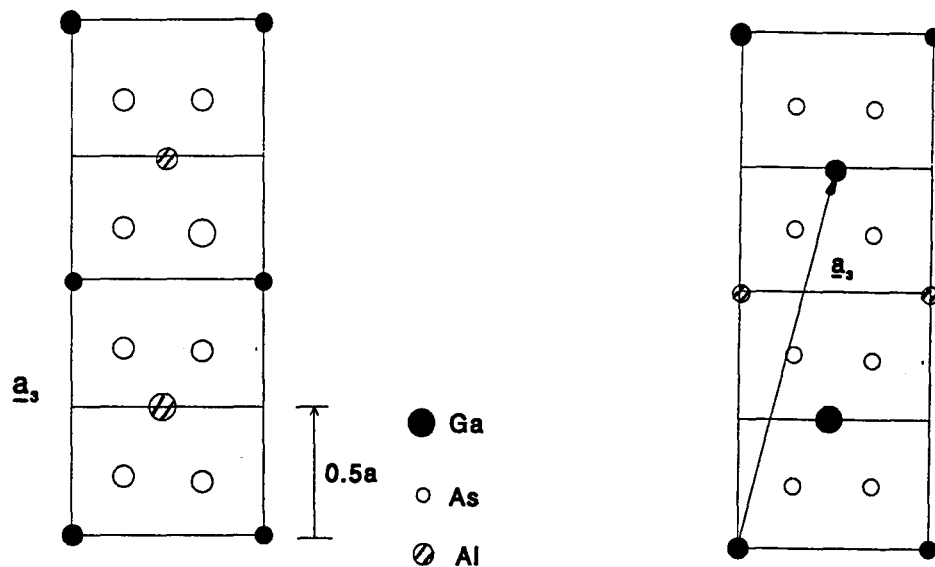
I en II - materiaal indices

Figuur 2.4 Schematische voorstelling van een superrooster

H 2.4.1 BRILLOUIN ZONE VAN SUPERROOSTERS $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$

In dit verslag gaat onze aandacht uit naar [001] gegroeide superroosters die opgebouwd zijn uit GalliumArsenide (GaAs) en AluminiumArsenide (AlAs). Zowel GaAs als AlAs hebben een zinblendende kristalstructuur. De roosterconstante van GaAs (AlAs) is gelijk aan $5,64 \text{ \AA}$ ($5,63 \text{ \AA}$). Door dit geringe verschil in roosterconstanten zijn de relatieve posities van de anionen (As) en kationen (Ga, Al) in het superrooster nagenoeg hetzelfde als in het bulkmateriaal. Een superrooster dat is opgebouwd uit m monolagen GaAs en n monolagen AlAs wordt aangeduid als $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$. Een monolaag van zowel GaAs als van AlAs bestaat uit twee atoomlagen. In GaAs bestaat de eerste atoomlaag uit atomen van het element gallium en de tweede atoomlaag uit atomen van het element arseen, de dikte van een monolaag gelijk is aan de helft van de roosterconstante (zie figuur 2.5).

Doordat de primitieve vector in de groeirichting [001] van de superroosterstructuur groter is dan de overeenkomende primitieve vector van het bulkmateriaal, bezit een superrooster niet meer de zinblendende structuur. Een illustratie hiervan vindt men in figuur 2.6. We merken op dat in het geval dat $n+m$ even is, de primitieve vector altijd parallel aan de [001] richting ligt. Als $n+m$ oneven is, heeft de primitieve vector ook nog een component in de [010] of [100] richting.



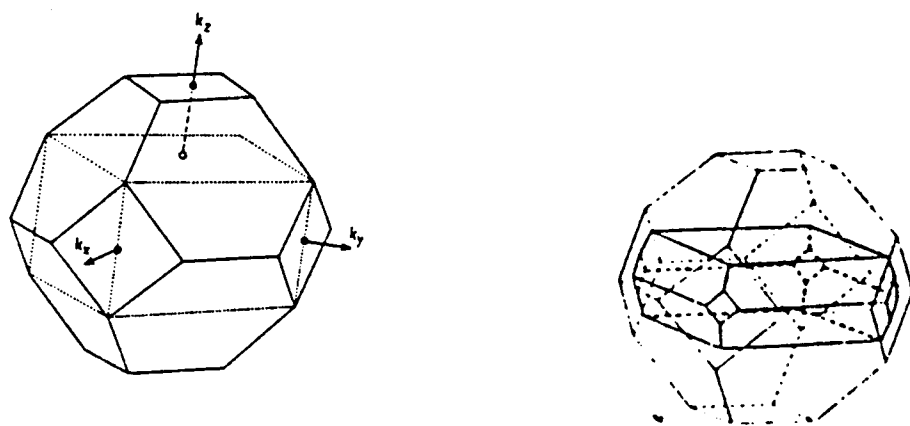
Figuur 2.5
Schematische voorstelling in de z-richting van (GaAs)₁(AlAs)₁ superrooster

Figuur 2.6
Schematische voorstelling in de z-richting van (GaAs)₂(AlAs)₁ superrooster

superrooster kristal structuur	Directe rooster vectoren	Reciproke rooster vectoren
$n+m = \text{even}$	$(1,1,0)$ $(-1,1,0)$ $(0,0,m+n)$	$(1,1,0)$ $(-1,1,0)$ $(0,0,2/(n+m))$
$n+m = \text{oneven}$	$(1,1,0)$ $(-1,1,0)$ $(0,1,n+m)$	$(1,1,1/(n+m))$ $(-1,1,1/(n+m))$ $(0,0,2/(n+m))$

Tabel 2.2 Reciproke rooster vectoren en directe rooster vectoren van superroosters [ref. 24]

Superroosters met $n+m$ even hebben een simpele tetragonale structuur terwijl superroosters met $n+m$ oneven een body-centered-tetragonale structuur hebben. In beiden gevallen is het volume van de super-eenheidscel $n+m$ maal het volume van de primitieve cel van een zinblendestructuur die men verkrijgt als men de twee mogelijke kationen vervangt door slechts één van de twee.



Figuur 2.7a 1^e Brillouin zone van $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ superrooster

Figuur 2.7b „ „ „ $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_1$ „

$$\underline{A}^j = \underline{\underline{P}}^j(z_j) \underline{\alpha}^j \quad (2.55)$$

Substitutie van 2.55 in 2.53 levert:

$$\underline{A}^{j+2} = \underline{\underline{P}}^{j+2}(w_{II}) (\underline{\underline{D}}^{j+2}(z_{j+1}))^{-1} \underline{\underline{D}}^{j+1}(z_{j+1}) \underline{\underline{P}}^{j+1}(w_I) (\underline{\underline{D}}^{j+1}(z_j))^{-1} \underline{\underline{D}}^j(z_j) \underline{A}^j \quad (2.56)$$

met:

$$w_I = z_{j+1} - z_j = \frac{a}{2} n e_{-k_r} \quad (2.57)$$

$$w_{II} = z_{j+2} - z_{j+1} = \frac{a}{2} m e_{-k_r} \quad (2.58)$$

Definieer:

$$\underline{A}^{j+2} \equiv \underline{\underline{T}}_{uc} \underline{A}^j \quad (2.59)$$

waarbij:

$$j = 0, 2, 4, 6, \dots$$

$\underline{\underline{T}}_{uc}$ -transmissiematrix van de super-eenheidscel

Nu geldt:

$$\underline{\underline{D}}(z) = \underline{\underline{D}}(z + \frac{a}{2}(n+m)e_{-k_r}) \quad (2.60)$$

zodat de transmissie door N super-eenheidscellen als volgt kan worden geschreven:

$$\underline{A}^{2N} = \underline{\underline{T}}_{uc}^N \underline{A}^0 \quad (2.61)$$

Als we bovenstaande formule toepassen op een structuur bestaande uit oneindig veel super-eenheidscellen dan eisen we dat voor $N \rightarrow \pm \infty$ de limiet van T_{uc}^N bestaat. De discussie wordt nu aanzienlijk vergemakkelijkt als we de eigenvectoren en eigenwaarden van $\underline{\underline{T}}_{uc}$ beschouwen:

$$\underline{\underline{T}}_{uc} \underline{A}_{ev} = t \underline{A}_{ev} \quad (2.62)$$

met

$$\underline{A}_{ev} = \{ a_1, a_2, a_3, \dots, a_{2M} \} \quad (2.63)$$

Toepassen van 2.62 op 2.61 levert:

$$\underline{\underline{T}}_{uc}^N \underline{A}_{ev} = t^N \underline{A}_{ev} \quad (2.64)$$

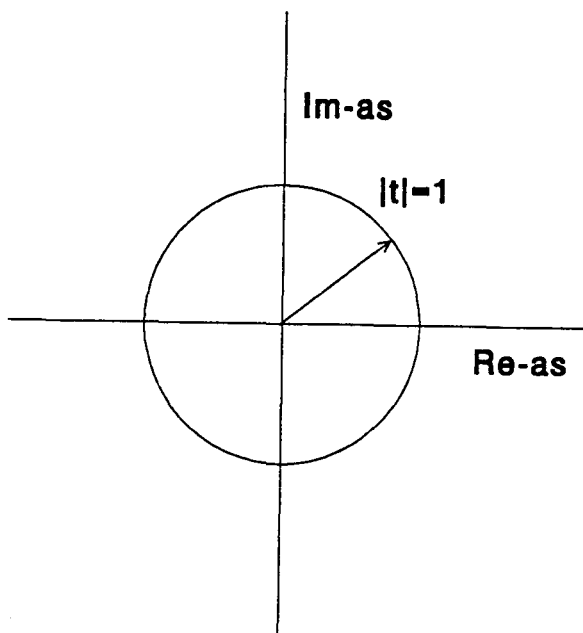
Als we eisen dat de golffunctie voor $N \rightarrow \pm\infty$ door de gehele structuur propageert, dan moeten de eigenwaarden van de eigenvector \underline{A}_{ev} in absolute zin gelijk zijn aan 1:

$$|t| = 1 \quad (2.65)$$

ofwel :

$$t = e^{i\phi} \quad (2.66)$$

met ϕ reëel



Figuur 2.9 Het complexe vlak. De eigenwaarden van de toegelaten Bloch oplossingen van de golffuncties van superroosters liggen op de cirkel met straal 1. De overige eigenwaarde corresponderen met evanescent toestanden.

Alleen die golffuncties waarvan de ontwikkelingscoëfficiënten een eigenwaarde hebben die in absolute zin gelijk aan één zijn, zullen door de gehele structuur propageren. In feite hebben we in het voorafgaande niets anders gedaan dan de Blochconditie voor superroosters in een transmissiematrixformalisme gegoten. We kunnen daarom de fase ϕ relateren aan een Blochvector van het superrooster \underline{k}_{sr} . Immers, na overbrugging van de super-eenhedscel moet de golffunctie op een fasefactor na in zich zelf overgaan:

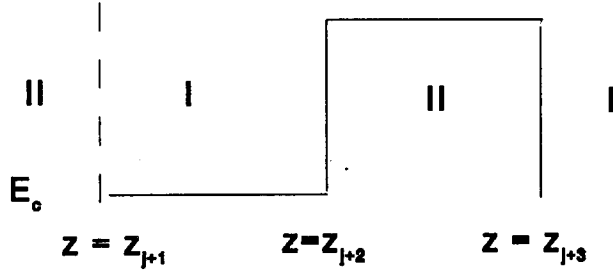
$$\underline{k}_{sr} \cdot \underline{L} = \phi \quad (2.67)$$

Hierbij is:

$$\underline{L} = \frac{a}{2}(m+n) \underline{e}_{\underline{k}_{sr}} \quad (2.68)$$

De eigenvectoren van \underline{T}_{ic} leggen de eigenfuncties van het superrooster in materiaal I vast.

Om de totale golf functie van het superrooster te berekenen is het noodzakelijk een tweede (zie figuur 2.10) super-eenheidscel te beschouwen.



Figuur 2.10 Schematische voorstelling van de super-eenheidscel

De transmissiematrix die de coëfficiënten van de $j+1^{\text{de}}$ laag koppelt met die van de $j+3^{\text{de}}$ laag, wordt door onderstaande vergelijking gegeven.

$$\underline{\alpha}^{j+3} = \underline{P}^{j+3}(-z_{j+2}) (\underline{\bar{D}}^{j+3}(z_{j+2}))^{-1} \underline{\bar{D}}^{j+2}(z_{j+2}) \underline{P}^{j+2}(z_{j+2}-z_{j+1}) (\underline{\bar{D}}^{j+2}(z_{j+1}))^{-1} \underline{\bar{D}}^{j+1}(z_{j+1}) \underline{P}^{j+1}(z_{j+1}) \underline{\alpha}^{j+1} \quad (2.69)$$

Definieer:

$$\underline{B}^{j+1} = \underline{P}^{j+1}(z_{j+1}) \underline{\alpha}^{j+1} \quad (2.70)$$

met:

$j=0,2,4,6 \dots$

Substitutie van 2.71 in 2.70 levert

$$\underline{B}^{j+3} = \underline{P}^{j+3}(z_{j+3}-z_{j+2}) (\underline{\bar{D}}^{j+3}(z_{j+2}))^{-1} \underline{\bar{D}}^{j+2}(z_{j+2}) \underline{P}^{j+2}(z_{j+2}-z_{j+1}) (\underline{\bar{D}}^{j+2}(z_{j+1}))^{-1} \underline{\bar{D}}^{j+1}(z_{j+1}) \underline{B}^{j+1} \quad (2.71)$$

Definieer:

$$\underline{B}^{j+3} \equiv \underline{\bar{T}}_{uc} \underline{B}^{j+1} \quad (2.72)$$

Zodat er geldt:

$$\underline{B}^{2N+1} = \underline{\bar{T}}_{uc}^N \underline{B}^1 \quad (2.73)$$

met eigenvectoren:

$$\underline{B}_{ev} = \{ b_1, b_2, b_3, \dots, b_{2M} \} \quad (2.74)$$

Als we de voorgaande redenering opnieuw volgen voor bovenstaande formule, dan moeten we eisen dat voor $N \rightarrow \pm\infty$ de eigenwaarden \tilde{t} in absolute zin één moeten zijn. Nu geldt verder dat:

$$\tilde{t} = t = e^{i\phi} \quad (2.75)$$

De eigenvectoren $\underline{\tilde{T}}_{uc}$ leggen de eigenfunctie van het superrooster in het materiaal II vast, zodat de totale eigenfunctie van het superrooster wordt gegeven door:

$$\psi(\underline{r}) = \begin{cases} \sum_{s=1}^{2M} a_s \psi^{sI}(\underline{r}) & z_i \leq z < z_{i+1} \\ \sum_{s=1}^{2M} b_s \psi^{sII}(\underline{r}) & z_{i+1} \leq z < z_{i+2} \end{cases} \quad \text{met } i = 0, 3, 7, \dots \quad (2.76)$$

Resumerend stellen we vast dat de dispersie relatie $E(\underline{k}_{sr})$ van superroosters in de FBA-benadering als volgt wordt bepaald:

1^e
Bereken de complexe golffuncties en complexe bandenstructuur in de afzonderlijke lagen in de groeirichting met behulp van standaard bandstructuurberekeningen (b.v. EPM).

2^e
Definieer een super-eenheidscel, en schrijf de aansluitvoorwaarden van deze cel als een transmissiematrix.

3^e
Bekijk welke eigenwaarden van deze matrix in absolute zin gelijk zijn aan 1, en schrijf deze als $e^{i\phi}$.

4^e
Ken aan de fase ϕ een Blochsperroostervector \underline{k}_{sr} toe

Door alle eigenwaarden van de transmissiematrix van de super-eenheidscel te beschouwen kan op analoge wijze de complexe bandenstructuur van superroosters worden berekend. De eigenwaarden die in absolute zin ongelijk aan één zijn leveren dan de evanescent toestanden op.

H 3 RESULTATEN

In dit hoofdstuk passen we de voorafgaande theorie toe op superroosters opgebouwd uit $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ en $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters. De transmissiematrixmethode om bandenstructuren van superroosters te berekenen wordt eerst gedemonstreerd aan de hand van superroosters opgebouwd uit $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$. Vervolgens bespreken we de resultaten van $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters.

H 3.1 $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ -SUPERROOSTERS

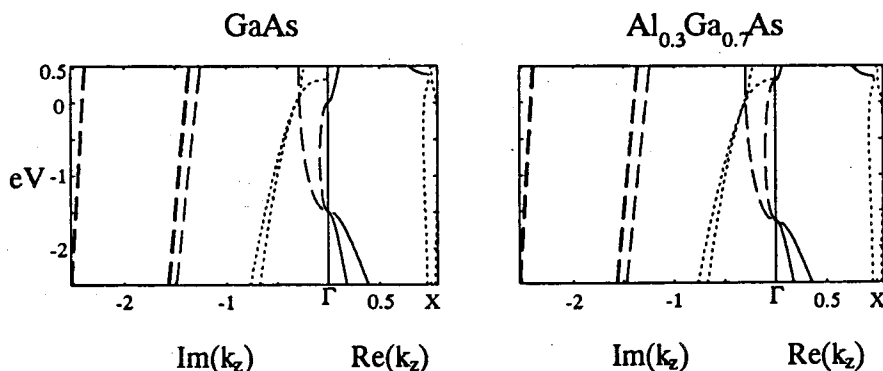
In onderstaande figuur staan weergegeven de complexe bandenstructuren van zowel GaAs als van $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ bij $k_{\perp} = \underline{\varepsilon}$. Om numerieke problemen t.g.v. ontandingen te vermijden is gekozen voor $\underline{\varepsilon} = (5.3, 1.3) \cdot 10^{-4}$. De NAG-routine die de seculiere determinant diagonaliseert, levert op punten waar de energie meervoudig ontaard is, een willekeurig orthogonaal stelsel van eigenvectoren.

De golffuncties zijn ontwikkeld in 27 vlakke golven. De 27 reciproke roostervectoren die bij deze vlakke golven behoren, leiden tot 13 projecties op het xy-vlak. Zowel GaAs als $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ zijn directe halfgeleiders (het Γ -minimum ligt lager dan het X-minimum). De bandoffset van de conductieband ΔE_c en de valentieband ΔE_v is bepaald aan de hand van experimenteel gevonden waarden:

$$\Delta E_c = 0.65 (E_{\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}}^{\text{gap}} - E_{\text{GaAs}}^{\text{gap}})$$

$$\Delta E_v = 0.35 (E_{\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}}^{\text{gap}} - E_{\text{GaAs}}^{\text{gap}})$$

De elektronen die geassocieerd zijn met het Γ -minimum (Γ -elektronen) ondervinden een potentiaalbarrière in de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -laag. In de GaAs-laag ondervinden deze elektronen een potentiaalput (zie figuur 3.1.2). Evenzo ondervinden gaten in de GaAs-lagen een potentiaalput en in de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -lagen een potentiaalbarrière.



Figuur 3.1.1 Complexe bandenstructuur van GaAs en $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ in de $[001]$ -richting.

	GaAs	Al _{0.3} Ga _{0.7} As
E _{gap} [eV]	1.38	1.833
m _{el} [*] /m ₀	0.0778	0.4864
m _{lh} [*] /m ₀	-0.106	-0.1339
m _{hh} [*] /m ₀	-0.439	-0.4495

Tabel 3.1 Bandgaps en effectieve massa van GaAs en Al_{0.3}Ga_{0.7}As berekend met 27 vlakke golven.

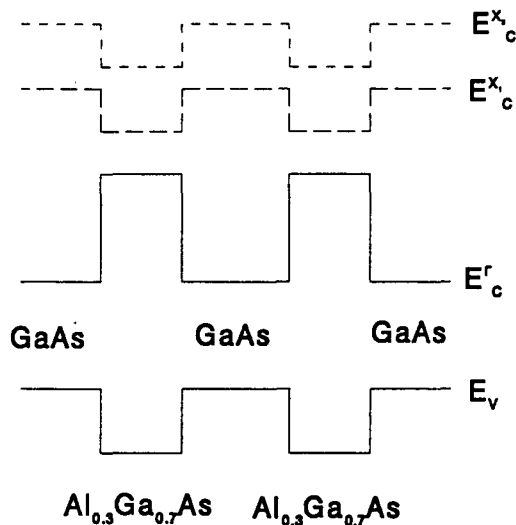
In dit verslag houden we de volgende conventies aan:

- $\alpha^{j,s}$ - ontwikkelingscoëfficiënt (zie formule 2.34)
- j - laagindex
- s - kanaalindex

s naar links / rechts "gaande" kanalen	valentieband regime	conductieband regime
1, 14	licht gat (lh)	Γ-elektron
2, 15	zwaar gat (hh1)	k _z -imaginair
3, 16	zwaar gat (hh2)	„
4, 17	k _z -imaginair	„
5, 18	„	„
6, 19	„	„
7, 20	„	„
8, 21	„	„
9, 22	„	„
10, 23	„	„
11, 24	„	„
12, 25	k _z -complex	X ₁ -elektron
13, 26	„	X ₃ -elektron

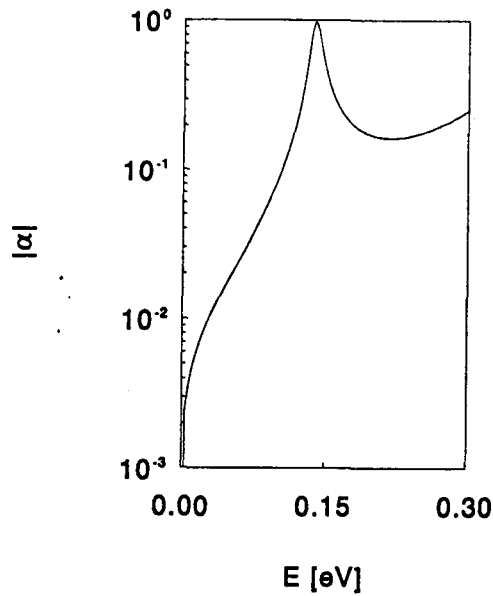
Tabel 3.2 Nummering van de kanalen

Alvorens de bandenstructuren van superroosters opgebouwd uit een oneindig aantal $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ -lagen te behandelen, concentreren we ons eerst op heterostructuren bestaande uit een eindig aantal materiaallagen. Als eerste van deze structuren beschouwen we een symmetrische configuratie bestaande uit vijf materiaallagen (zie onderstaande figuur). De breedte van zowel de GaAs als de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -laag is gelijk aan 10 monolagen gekozen ($\sim 28,25\text{\AA}$).



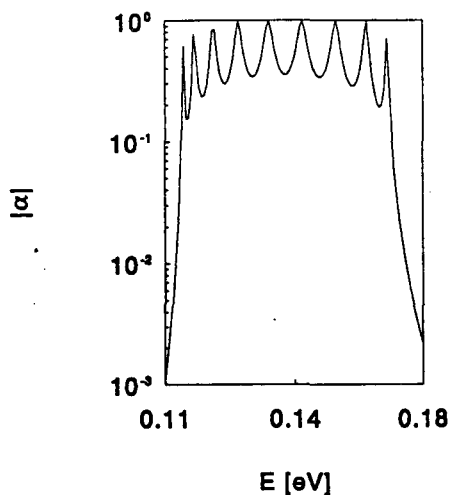
Figuur 3.1.2 Schematische weergave van zowel het conductiebandminimum als het valentiebandmaximum in een dubbele-barrièrestructuur.

We richten allereerst onze aandacht op het conductieband-energie regime. De golffunctie in de eerste laag is zo gekozen dat de coëfficiënt van het naar rechts "lopende" kanaal, corresponderend met de Γ -elektronen, 1 is ($\alpha^{1,1}=1$), terwijl de coëfficiënten van de overige inkomende kanalen gelijk aan nul zijn gesteld ($\alpha^{1,s}=0$ voor $s=2$ t/m 13 en $\alpha^{s,s'}=0$ voor $s'=14$ t/m 26). In figuur 3.1.3 staat de absolute waarde van het naar rechts lopende Γ -kanaal in de vijfde laag als functie van de energie uitgezet. We maken hieruit op dat in dit energie-interval één resonantiepiek ontstaat. De reden voor het ontstaan van deze transmissiepiek ligt in het feit dat in de middelste laag constructieve interferentie optreedt. Het golfgetal van de middelste laag die verantwoordelijk is voor de constructieve interferentie noemen we k_{res} . Resonantie treedt dus op als k_{res} nagenoeg "past" in de middelste laag.



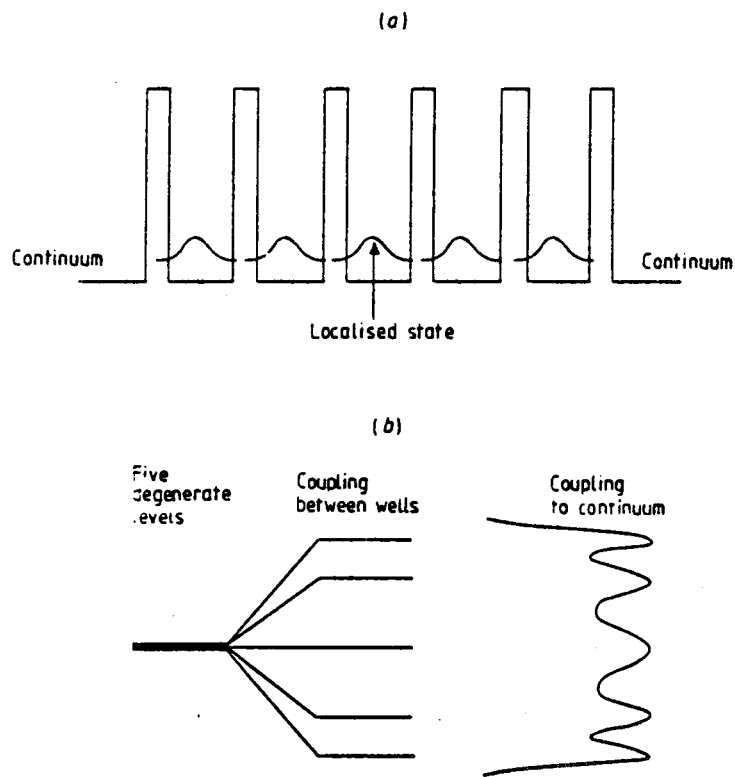
Figuur 3.1.3 De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van het getransmitteerde elektron door een dubbele-barrièrestructuur (zie hoofdtekst voor details).

We herhalen nu bovenstaande berekening voor een symmetrische configuratie bestaande uit $N=10$ barrières met barrièrebreedte (w_1) en putbreedte (w_2) gelijk aan 10 monolagen. Als inkomend kanaal kiezen we weer het Γ -kanaal in de eerste laag ($\alpha^{1,1}$). In figuur 3.1.4 is de absolute waarde van de coëfficiënt van het Γ -kanaal in de laatste laag ($\alpha^{\text{laatste},1}$) als functie van de energie weergegeven. Merk op dat 9 transmissiepieken waarneembaar zijn.



Figuur 3.1.4 De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van het getransmitteerde elektron voor een structuur bestaande uit 10 barrières

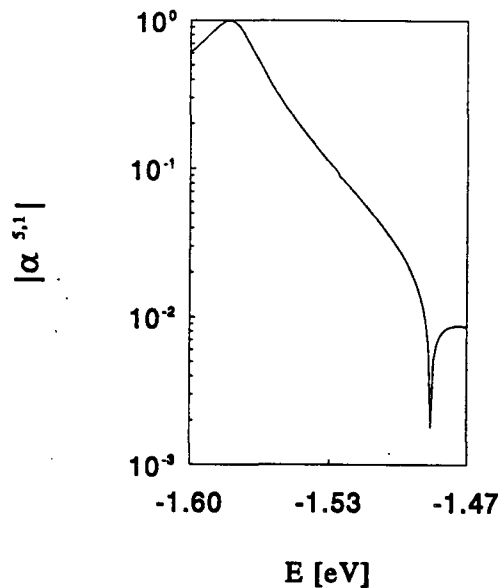
Deze pieken zijn gegroepeerd in een energie-interval. We kunnen dit als volgt verklaren: Beschouw M ontkoppelde quantumputten ($M+1$ barrières). Stel nu dat in ieder van deze putten zich één gebonden toestand bevindt. Dit systeem levert dus M ontaarde energieniveau's op. Als de quantumputten gekoppeld worden, dan wordt de golffunctie van het gehele systeem gegeven door lineaire combinaties van het ontkoppelde systeem. De basisset bestaat dan uit M golffuncties. Met deze basisset kan men M onafhankelijke lineaire combinaties maken. Elk van deze lineaire combinatie levert een gebonden toestand op met een andere energie. Als we nu het systeem koppelen aan het continuüm dan levert elke gebonden toestand een transmissiepiek op.



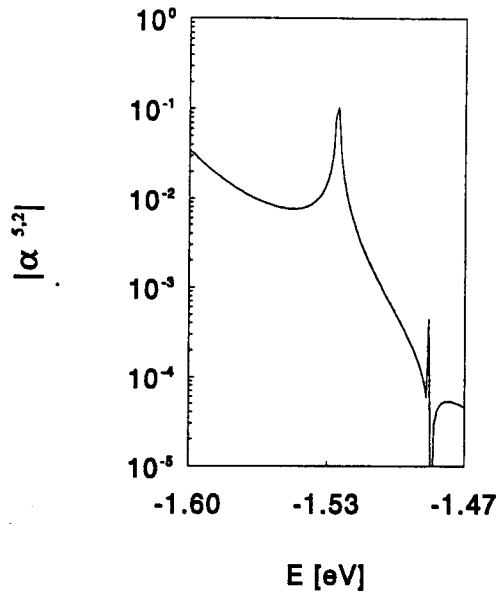
Figuur 3.1.5 Schematische weergave van het ontstaan van de transmissiepieken in een structuur bestaande uit meerdere barrières [ref.8] .

We richten nu onze aandacht op het valentieband energie-regime. Als in dit energie-interval een transmissiepiek ontstaat, waarvan de absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënten van de lichte gaten ($\alpha^{3,1}$, $\alpha^{3,14}$) in de middelste laag overheersen dan karakteriseren we dit niveau als een licht-gatresonantie. Evenzo karakteriseren we een zwaar-gatresonantie als een resonantie waarbij in de middelste laag de absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënten van de zware-gatenkanalen ($\alpha^{3,2}$, $\alpha^{3,15}$, $\alpha^{3,3}$, $\alpha^{3,16}$) overheersen t.o.v. de overige kanalen.

Beschouw een symmetrische dubbele-barrièrestructuur, met $w_1 = w_2 = 10$ monolagen. Als inkomend kanaal kiezen we een licht-gatkanaal ($\alpha^{1,1}$) en berekenen de absolute waarde van $\alpha^{5,1}$ van het getransmitteerde lichte-gatenkanaal in de laatste laag als functie van de energie. In figuur 3.1.6a zien we dat er twee transmissiepieken ontstaan, bij een energie van -1.53 [eV] en -1.58 [eV]. Het karakter van deze resonanties is respectievelijk zwaar-gatresonantie en licht-gatresonantie. De zwaar-gatresonantie is tweevoudig ontwaard. Merk op dat de resonantie bij -1.53 [eV] nauwelijks waarneembaar is. We kiezen nu in de eerste laag als inkomend kanaal een zwaar-gatkanaal ($\alpha^{1,2}$) en herhalen de berekening. In figuur 3.1.6b staat de absolute waarde van $\alpha^{5,2}$ als functie van de energie. In tegenstelling tot fig 3.1.6a is nu het resonante energieniveau bij -1.53 [eV] duidelijk waarneembaar.



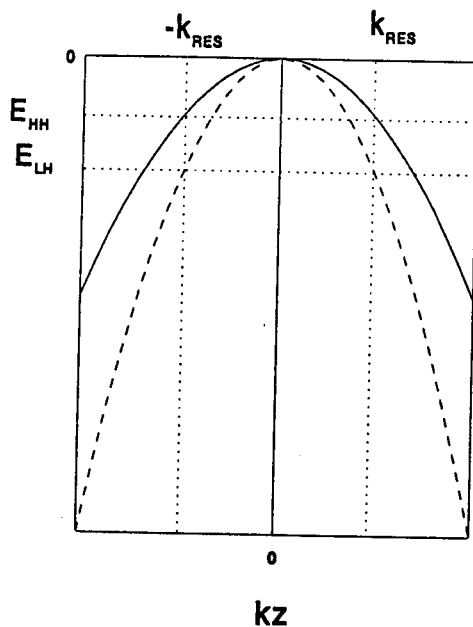
Figuur 3.16a De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van een getransmitteerde licht gat door een dubbele-barrièrestructuur als functie van de energie.



Figuur 3.1.6b De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van een getransmitteerde zwaar gat door een dubbele-barrièrestructuur als functie van de energie.

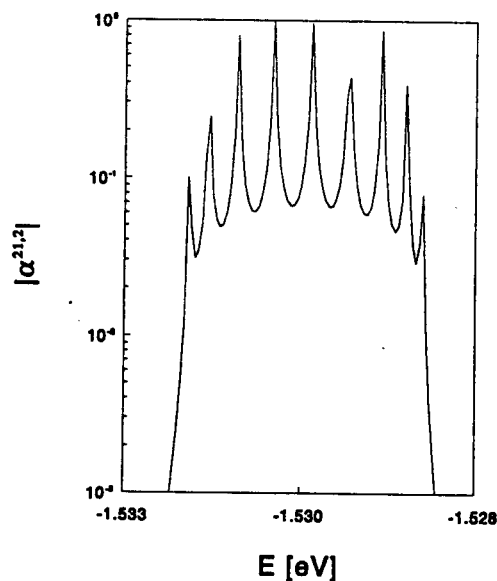
Uit het feit dat er in de middelste laag een licht-gatresonantie optreedt als deze wordt aangeslagen met een zwaar gat concluderen we dat aan het interface een koppeling bestaat tussen de zware en lichte gaten. Deze koppeling is het gevolg van het feit dat $\underline{k}_1 \neq \underline{0}$ (immers $\underline{k}_1 = \underline{\epsilon}$). Als we $\underline{k}_1 = \underline{0}$ stellen, dan zal, als we als inkomend kanaal een lichtgat kanaal kiezen, in figuur 3.1.6a alleen het tweede resonante energieniveau (-1.58 [eV]) waarneembaar zijn. Voor nadere beschouwingen over koppeling van energiebanden wordt verwezen naar referentie 5.

De verklaring van het feit dat we eerst een tweevoudig ontaard-energieniveau en vervolgens een licht-gatresonant niveau vinden ligt verscholen in de energiebanden structuur van de middelste laag (GaAs-laag). Veronderstel dat het golfgetal waarbij resonantie optreedt (\underline{k}_{res}) voor zware gaten nagenoeg even groot is als voor lichte gaten. Als we nu de energiebandenstructuur van GaAs beschouwen dan zien we dat bij een gegeven golfgetal k_z , de energie van de zware gaten hoger ligt dan die van de lichte gaten, zodat bij \underline{k}_{res} de zware gaten bij een hogere energie gaan resoneren en vervolgens de lichte gaten. Omdat de zware-gaten energieband van GaAs tweevoudig ontaard is, is uiteraard ook de zware-gatenresonantie tweevoudig ontaard.



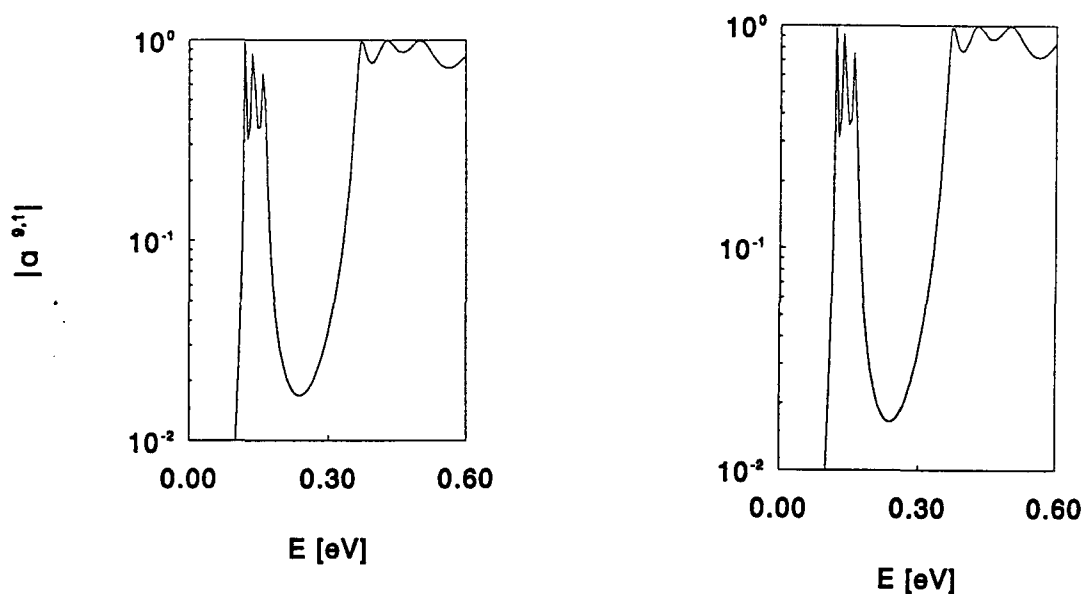
Figuur 3.1.7 Schematische voorstelling van de bovenkant van de valentieband en de ligging van de resonantie niveaus.

We beschouwen nu een symmetrische configuratie bestaande uit 10 potentiaalbarrières. Ook hierbij hebben we de breedten van de potentiaalputten en potentiaalbarrières gelijk gesteld aan 10 monolagen. We concentreren ons nu op het energie-interval rondom de eerste resonantie (zwaar-gatresonantie). Als inkomend kanaal kiezen we $\alpha^{1,2}$, corresponderend met een zwaar-gatkanaal in de eerste laag. In figuur 3.1.8 staat de absolute waarde van de $\alpha^{\text{laatste laag},2}$ als functie van de energie. We zien dat de resonantie opgesplitst is in, zoals verwacht 9 resonanties. Tevens zien we dat deze niveaus gegroepeerd zijn binnen een energie-interval. Als we nu het aantal barrières vergroten zullen de resonanties een energieband vormen.



Figuur 3.1.8 De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van het getransmitteerde zware gat door een structuur bestaande uit 10 barrières

De golffuncties zijn ontwikkeld in 27 vlakke golven. De 27 reciproke roostervectoren die bij deze 27 vlakke golven behoren, leiden tot maximaal 13 reciproke roostervectoren in de 2D-Brillouin zone. Binnen deze set ligt de subset bestaande uit 5 reciproke roostervectoren binnen een geprojecteerde bol in de \underline{k} -ruimte. Het is nuttig om te onderzoeken of de transmissiekarakteristieken voor beide sets reciproke roostervectoren overeenkomen. De set van 5 reciproke roostervectoren komt overeen met: lichte gaten, tweevoudig ontaarde zware gaten en 2 evanescent kanalen die gerelateerd zijn aan de X-minima van de 1^{ste} en 3^{de} conductieband (zie tabel 3.1). Als voorbeeld geven we de resultaten van de transmissie door een symmetrische structuur bestaande uit 4 barrières berekend met zowel 13 \underline{K}_1 - en 5 \underline{K}_1 - reciproke roostervectoren. Deze structuur bestaat uit 9 lagen die allen dezelfde breedte hebben (10 monolagen), de eerste laag is opgebouwd uit GaAs, de tweede uit Ga_{0.3}Al_{0.7}As, de overige lagen wisselen om en om van samenstelling. De golffunctie in de eerste laag is zo gekozen dat geldt dat $\alpha^{1,1} = 1$ terwijl $\alpha^{9,s} = 0$ voor $s=2$ t/m13. We berekenen de ontwikkelingscoëfficiënt van $\alpha^{9,1}$ in de laagste laag als functie van de energie in het conductieband energie regime.



Figuur 3.1.9 De absolute waarde van $\alpha^{9,1}$, voor een getransmitteerde elektron door een symmetrische viervoudige barrièrestructuur, berekend met 13 \underline{K}_1 reciproke roostervectoren (a) en 5 \underline{K}_1 reciproke roostervectoren (b).

Uit bovenstaande figuren concluderen we dat de transmissiekarakteristiek berekend met de set van 5 reciproke roostervectoren overeenstemt met de transmissiekarakteristiek voor de set van 13 reciproke roostervectoren.

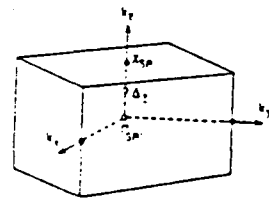
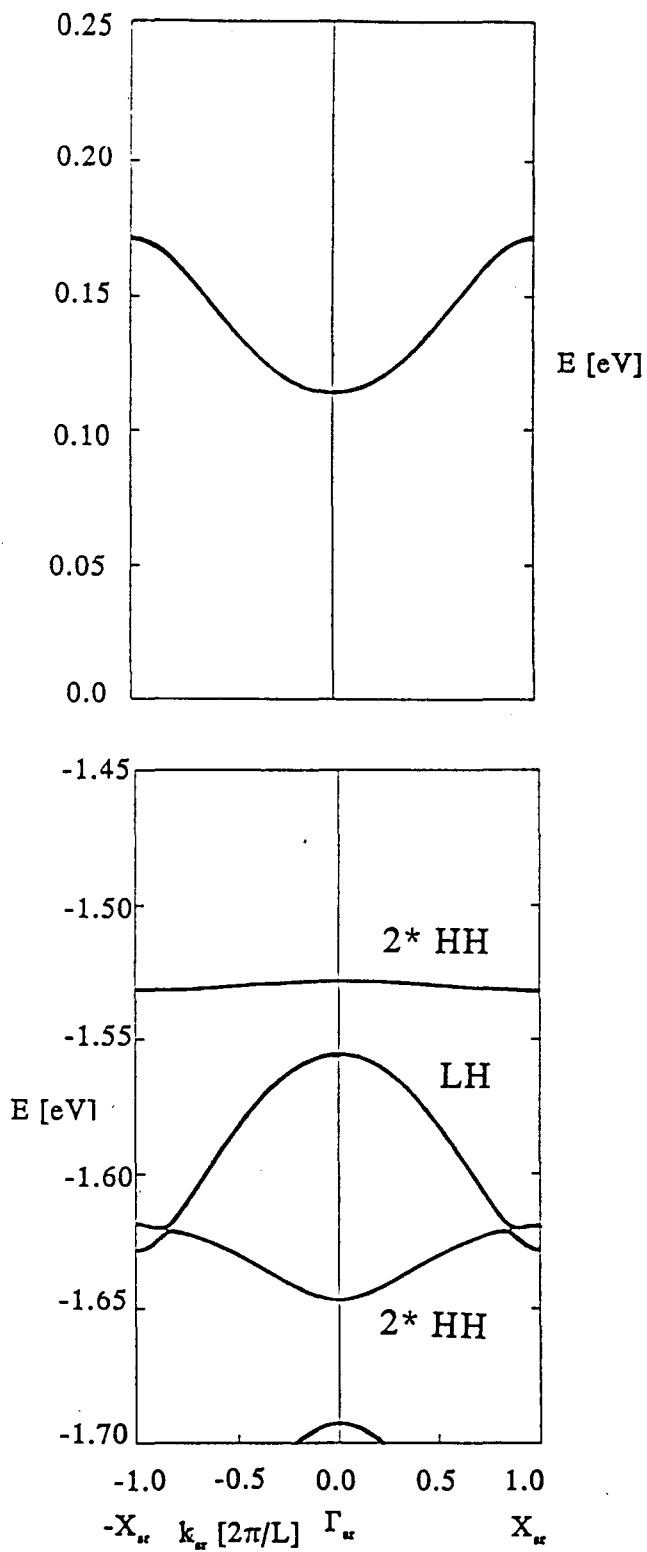
De hierboven gepresenteerde resultaten hebben alle betrekking op heterostructuren die opgebouwd zijn uit een eindig aantal lagen. We hebben gezien dat in een symmetrische dubbele-barrièrestructuur resonantiepieken ontstaan. Deze resonantie-energieën ontstaan als de golflengte van de golf functie nagenoeg "past" in de potentiaalput tussen de twee potentiaalbarrières.

Ook hebben we gezien dat er bij $k_{\perp} = 0$ aan het interface geen koppeling tussen de lichte gaten en de zware gaten is. We kunnen dan een duidelijk onderscheid maken tussen de verschillende resonantie-energieën, zodat we een resonantie kunnen karakteriseren. In het valentiebandregime maken we onderscheid tussen zware-gatenresonanties en lichte-gatenresonanties.

Verder hebben we gezien dat in een symmetrische structuur bestaande uit N barrières N-1 transmissiepieken ontstaan. De transmissiepieken groeperen zich in een energie-interval. In principe zijn we nu in staat om van elke transmissiepiek de fasefactor van de golf functie vlak voor de tweede barrière te bepalen en deze te relateren aan een Blochvector van het superrooster k_{sb} [ref.2]. Als we de energie uitzetten tegen de verkregen superrooster Blochvector dan verkrijgen we de dispersierelatie van het superrooster. Een andere methode om deze dispersierelatie te bepalen, is het berekenen van de eigenwaarden van de super-eenheidscel zoals in hoofdstuk 2 is uitgelegd. Het karakter van de energieband wordt bepaald uit de eigenvectoren van de super-eenheidscel.

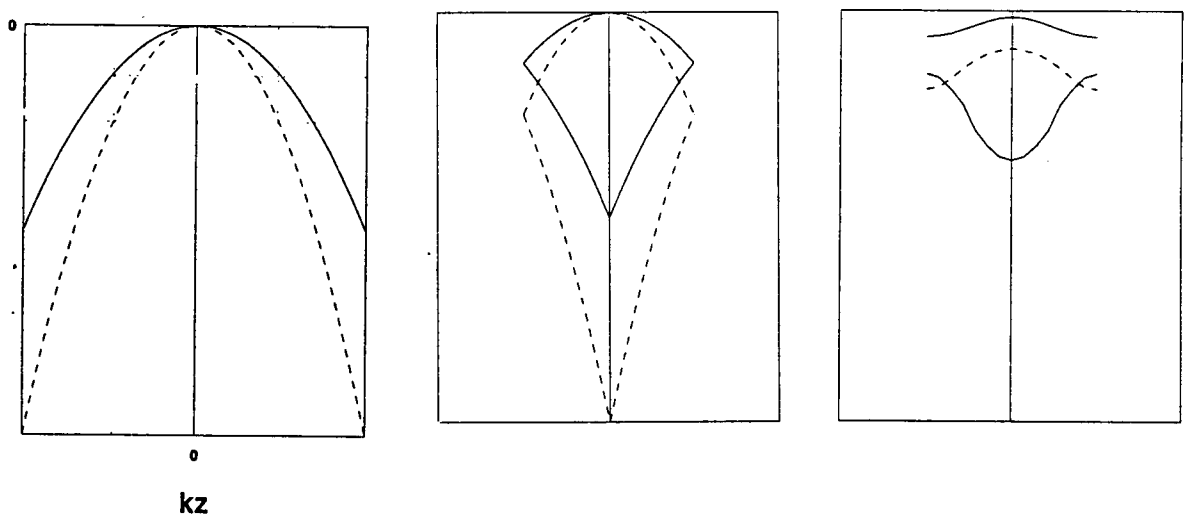
Een andere belangrijke constatering is dat de transmissiekarakteristieken berekend met 5 en 13 geprojecteerde reciproke roostervectoren dezelfde resultaten opleveren. Dit betekent dat we in de berekeningen van de eigenwaarden en eigenvectoren van de super-eenheidscel kunnen volstaan met het meenemen van vijf kanalen. Deze kanalen zijn de lichte gaten, tweevoudig ontaarde zware gaten en twee evanescent kanalen. De laatste twee kanalen zijn geassocieerd met het X_1 en het X_3 -punt (zie tabel 3.1). De coëfficiënten van deze kanalen zijn $\alpha^{j,1}$, $\alpha^{j,2}$, $\alpha^{j,3}$, $\alpha^{j,12}$, $\alpha^{j,13}$. Hier horen natuurlijk ook de teruggaande kanalen (s=14,15,16,25,26) bij.

In grafiek 3.1.10 vindt men de bandenstructuur van het superrooster $(\text{GaAs})_{10}(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_{10}$ berekend m.b.v. de eigenwaarden van de transmissiematrix van de super-eenheidscel.



Figuur 3.1.10 Energiebandenstructuur van $(\text{GaAs})_{10}(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_{10}$ - superrooster in de $[001]$ -richting tussen $-X_{sr}$ en X_{sr} in eenheden van $\frac{2\pi}{L}$.

We herinneren de lezer eraan dat de berekeningen uitgevoerd zijn met een $k_{\parallel} \approx 0$, zodat de bandenstructuur van het superrooster betrekking heeft op de lijn tussen de punten $-X_{sr}$ en X_{sr} in de 1^e Brillouin-zone van het superrooster. De eigenvectoren van de super-eenheidscel bepalen het karakter van de energiebanden. Het karakter van de eerste valentieband (= hoogste energieband op de energieschaal) is die van een zware-gatenband. De tweede valentieband heeft het karakter van een lichte-gatenband. Vervolgens vinden we een tweede band met het karakter van een zware-gatenband. We kunnen dit als volgt verklaren. Beschouw hiertoe het superrooster $Al_xGa_{1-x}As$ met aluminium percentage $x = 0$. We hebben dan het materiaal opgebouwd uit alleen GaAs-lagen (bulk materiaal). We representeren de energiebandenstructuur van GaAs in de eerste Brillouin-zone van het superrooster. Als we nu in de $Al_xGa_{1-x}As$ -lagen het aluminium percentage x langzaam variëren van 0 tot 30% dan introduceren we in deze lagen een stoorpotentiaal. Dit heeft tot gevolg dat aan de randen van de Brillouin-zone de banden worden opgesplitst. Het een en ander is weergegeven in onderstaande figuur.



Figuur 3.1.11

Schematische weergaven van het ontstaan van bandenstructuren in superroosters. De bandenstructuur van bulkmateriaal I (3.1.11a), het reduceren van deze bandenstructuur tot de 1^e Brillouin-zone van het superrooster (3.1.11b). De potentiaal van materiaal II wordt als een storing verdisconteerd; dit resulteert in opsplitsingen van de bandenstructuur (3.1.11c).

Merk op dat de breedte van de energiebanden overeenkomt met het transmissie-energie-interval van een superrooster opgebouwd uit een eindig aantal lagen. Vergelijk hiertoe figuur 3.1.4 met figuur 3.1.10. We concluderen hieruit dat een heterostructuur van het systeem $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{30}\text{Ga}_{70}\text{As})_n$ opgebouwd uit zeg 10 identieke potentiaalbarrières aardig de situatie benadert van een superrooster bestaande uit een oneindig aantal lagen. Dit wil zeggen dat in dit energie-interval, voor een heterostructuur bestaande uit zeg 10 potentiaalbarrières, de transmissiekans nagenoeg één is.

Superroosters bieden de experimentator de vrijheid om structuren te vervaardigen met bepaalde karakteristieken. In het kader hiervan is het nuttig om te onderzoeken hoe bepaalde grootheden zoals bandgap en effectieve massa als functie van de breedte van de potentiaalbarrières en potentiaalputten zich gedragen.

In onderstaande tabel staan deze grootheden als functie van de breedte van de potentiaalbarrière en potentiaalput weergegeven.

$(\text{GaAs})_m$ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$	$(m,n)=(10,6)$	$(m,n)=(10,10)$	$(m,n)=(10,14)$
E_{gap} [eV]	1.62	1.64	1.65
m_e^*/m_0	0.38	0.45	0.58
m_{LH}^*/m_0	-0.39	-0.42	-0.48
m_{HH}^*/m_0	-2.92	-6.0	-14.6

Tabel 3.3 Bandgap en effectieve massa van zowel elektronen als lichte gaten en zware gaten van $(\text{GaAl})_{10}(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ - superroosters als functie van n

Het vergroten van de barrièrebreedte heeft als consequentie dat de koppeling zwakker wordt, wat resulteert in een smallere energieband. Het smaller worden van de energiebanden heeft als consequentie dat de effectieve massa groter wordt. Doordat de energiebanden smaller worden wordt de bandgap groter.

$(\text{GaAs})_m$ $(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$	$(m,n)=(6,10)$	$(m,n)=(10,10)$	$(m,n)=(14,10)$
E_{gap}	1.72	1.64	1.60
m_{e}^*/m_0	0.41	0.45	0.50
m_{LH}^*/m_0	-0.41	-0.42	-0.44
m_{HH}^*/m_0	-3.5	-6.0	-9.0

Tabel 3.4 Bandgap en effectieve massa van zowel elektronen als lichte en zware gaten van $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_{10}$ -superroosters als functie van m .

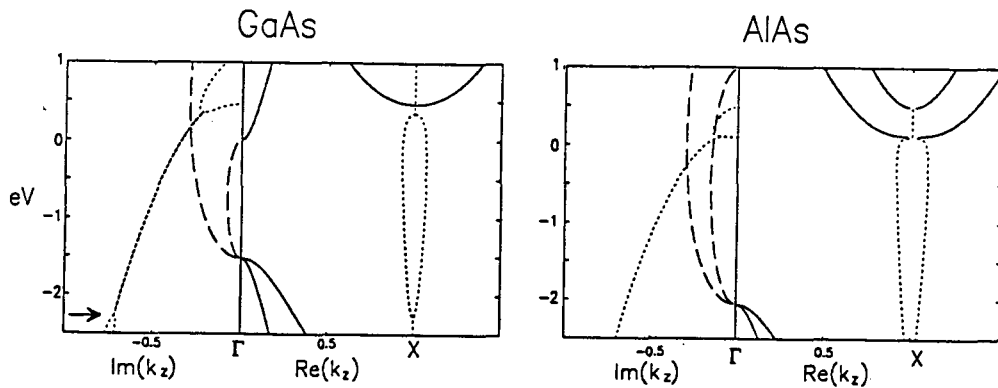
Het vergroten van de putbreedte heeft als consequentie dat de golflengte die tussen de barrières "passen" groter wordt, m.a.w. het golfgetal k_{res} voor de resonanties wordt kleiner. Een kleiner golfgetal komt overeen met een lagere resonantie-energie zodat dit niveau verlaagd wordt. De bandgap wordt dus verkleind. Doordat het niveau in energie daalt wordt de koppeling minder. Dit resulteert in een smallere band, zodat de effectieve massa groter wordt. Merk op dat de effectieve massa van de lichte gaten kleiner of gelijk is aan de effectieve massa van de elektronen. De verklaring hiervoor ligt in de hoogte van de potentiaalberg. Deze is voor elektronen groter dan voor gaten, zodat de koppeling van de golf functies van de lichte gaten groter is dan de koppeling van de elektronengolf functies. Dit resulteert in een kleinere effectieve massa van de lichte gaten t.o.v. de elektronen.

H 3.2 (GaAs)_m(AlAs)_n-SUPERROOSTERS

In figuur 3.2.1 staat de complexe bandenstructuur van zowel GaAs als van AlAs weergegeven. We zien hieruit dat AlAs een indirecte halfgeleider is, dit in tegenstelling tot GaAs welke een directe halfgeleider is. Voor de bandoffset van de conductionband en valentieband geldt evenals voor de hiervoor behandelde heterostructuren:

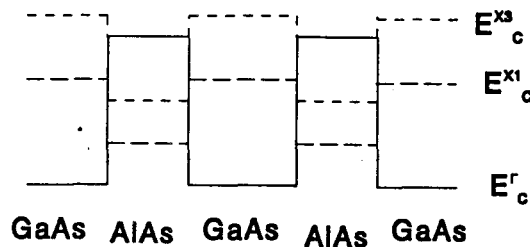
$$\Delta E_c = 0.65 * (E_{AlAs}^{gap} - E_{GaAs}^{gap}) \quad (3.2.1a)$$

$$\Delta E_v = 0.35 * (E_{AlAs}^{gap} - E_{GaAs}^{gap}) \quad (3.2.1b)$$



Figuur 3.2.1. Complexe bandenstructuur van GaAs en AlAs in de [001]-richting.

Heterostructuren opgebouwd uit (GaAs)_m(AlAs)_n leveren in het energie-interval tussen de Γ -bandminima van GaAs en AlAs een interessant gegeven op. De situatie is nu zodanig dat de Γ -elektronen in AlAs-laag een potentiaalbarrière ondervinden terwijl de X-elektronen in deze laag een potentiaalput ondervinden (zie figuur 3.2.2).

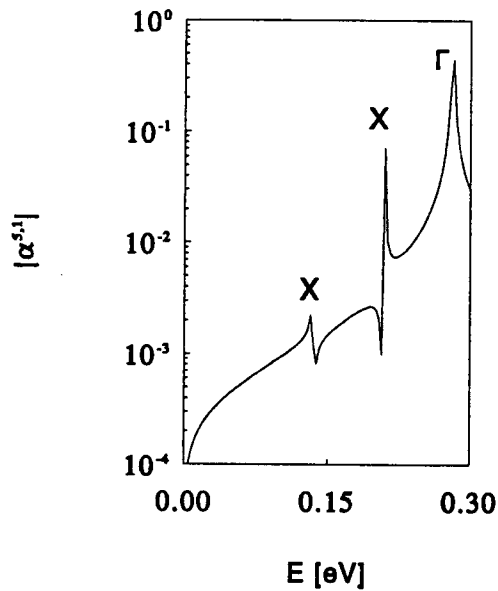


Figuur 3.2.2 Schematische voorstelling van een dubbele-potentiaalbarrière opgebouwd uit GaAs en AlAs.

Doordat "X-elektronen" in de AlAs-laag en " Γ -elektronen" in de GaAs-laag resoneren, kunnen we de ligging van deze resonantieniveaus onafhankelijk van elkaar beïnvloeden. Zo zal het verbreden van de AlAs-laag leiden tot een verlaging van de X-resonantie. Evenzo verschuiven de Γ -resonanties naar een lagere energie als de GaAs-laag wordt verbreed.

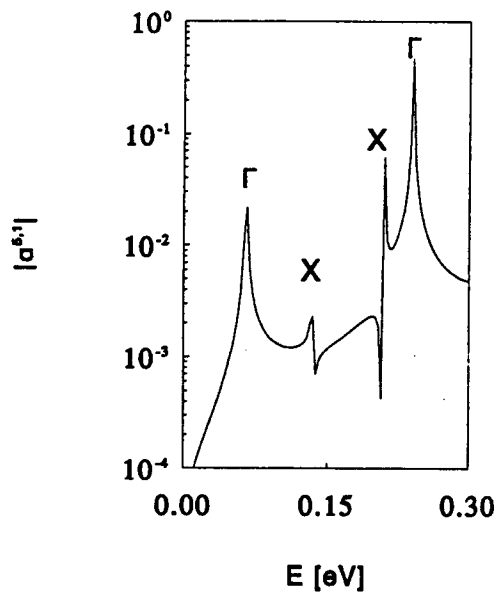
Als illustratie van dit fenomeen hebben we enkele transmissiekaracteristieken van verschillende symmetrische dubbele-barrièrestructuren berekend. Als inkomend kanaal kiezen we steeds het kanaal behorend bij de Γ -elektronen in de eerste laag ($\alpha^{1,1}=1$; $\alpha^{1,s}=0$ voor $s=2$ t/m 13), en berekenen we de absolute waarde $\alpha^{5,1}$ als functie van de energie bij verschillende breedten van de AlAs- en GaAs-laag.

De transmissiekaracteristiek voor een symmetrische dubbele-barrièrestructuur opgebouwd uit $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ staat weergegeven in figuur 3.2.3a. Uit deze grafiek maken we op dat er 3 transmissiepieken optreden waarvan de eerste twee X-resonanties zijn en de derde transmissiepiek een Γ -resonantie is.



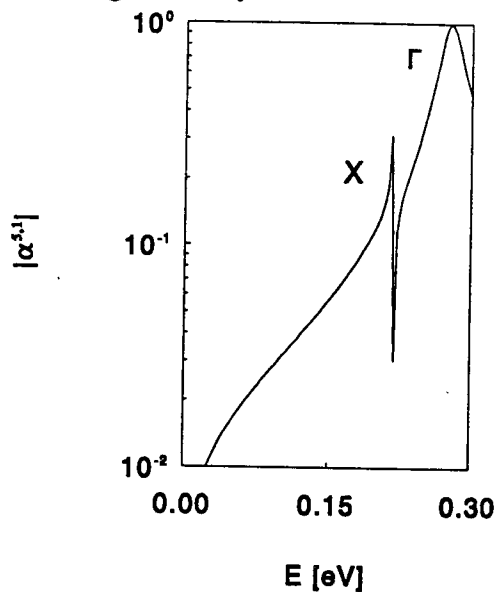
Figuur 3.2.3a De absolute waarde van de ontwikkelingscoëfficiënt van een getransmitteerde elektron door een symmetrische dubbele-barrièrestructuur opgebouwd uit 8 monolagen GaAs en 8 monolagen AlAs.

We verbreden nu de GaAs-laag van 8 naar 24 monolagen waarbij we AlAs-laag constant houden en berekenen de transmissiekarakteristiek. Uit figuur 3.2.3b maken we op dat de X-resonantie op hun plaatst zijn gebleven, tevens zien we dat de Γ -resonanties in energie zijn verlaagd.



Figuur 3.2.3b De ontwikkelingscoëfficiënt van een getransmitteerd elektron door een dubbele-barrièrestructuur opgebouwd uit 24 monolagen GaAs en 8 monolagen AlAs.

Als laatste voorbeeld berekenen we de transmissiekarakteristiek van een symmetrische dubbele-barrièrestructuur opgebouwd uit $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_4$. Het verkleinen van de AlAs-breedte heeft (zie figuur 3.2.3c) als consequentie dat de X-resonantie in energie worden verhoogd, terwijl de Γ -resonantie bij nagenoeg dezelfde energie optreedt.



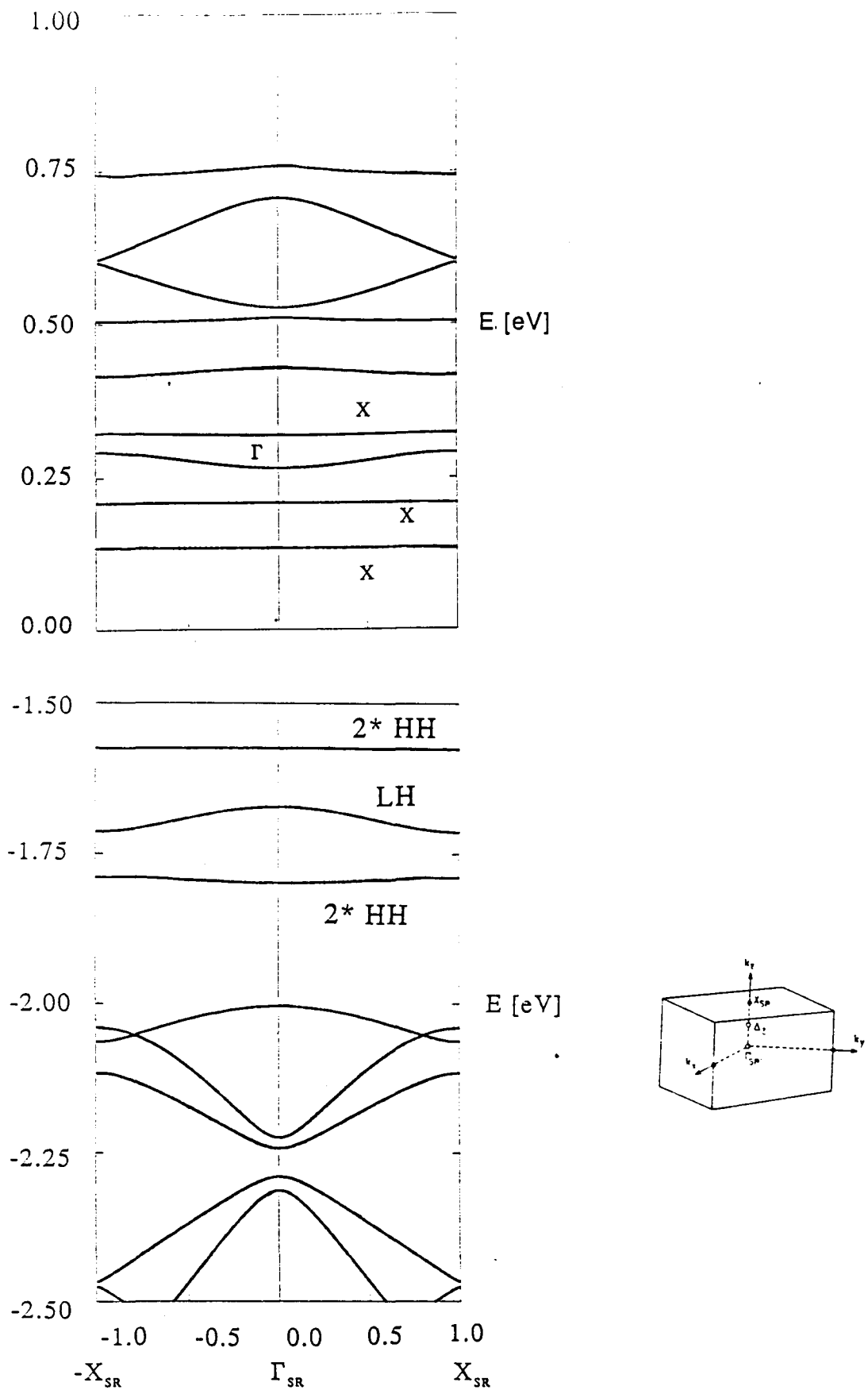
Figuur 3.2.3c De ontwikkelingscoëfficiënt van een getransmitteerd elektron door een dubbele barrièrestructuur opgebouwd uit 8 monolagen GaAs en 4 monolagen AlAs.

Als we nu stapsgewijs de heterostruktuur uitbreiden van een symmetrisch dubbele-barrièrestructuur tot een symmetrische structuur bestaande uit meerdere lagen GaAs en AlAs dan zal elk transmissiepiek zich ontwikkelen tot een Blochband. De transmissiekaracteristieken van deze systemen zullen we niet behandelen omdat we dit in het voorafgaande hoofdstuk uitvoerig hebben behandeld voor $(\text{GaAs})_m(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_n$ -heterostructuren.

In figuur 3.2.4 staat de dispersierelatie van een $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ -superrooster weergegeven. Deze is berekend met de eigenwaarden van de transmissiematrix van de super-eenheidscel. De bulkgolffuncties zijn berekend met 27 vlakke golven. De 27 reciproke roostervectoren die bij deze vlakke golven behoren leiden weer tot 13 projecties op het xy-vlak. In de berekening hebben we 5 $\underline{K}_{\parallel}$ -vectoren meegenomen. Dit leidt dan weer tot tien kanalen (vijf naar links- en vijf naar rechts gaande kanalen). De berekeningen zijn uitgevoerd met $k_{\perp} \approx 0$. Merk op dat in het valentiebandenergie regime de structuur van de dispersierelatie van $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ -superroosters kwalitatief dezelfde is als die van $(\text{GaAs})_{10}(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_{10}$ -superroosters. Men treft allereerst een tweevoudig ontaarde zware-gatenband daarna een lichte-gatenband gevolg door een tweevoudig ontaarde zware-gatenband.

In tegenstelling tot het valentieband energie regime vertonen deze systemen in het conductieband energie regime een duidelijk verschil. In een symmetrische dubbele-barrièrestructuur $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ treden naast Γ -transmissiepieken ook X-transmissiepieken op. Als we nu stapsgewijs een heterostruktuur bestaande uit een symmetrische dubbele barrière-structuur laten groeien tot een symmetrische structuur bestaande uit meerdere barrières dan zal elke transmissiepiek verbreden tot een Blochband. De zo ontstane conductiebanden kunnen we dan ook karakteriseren als Γ -banden of X-banden.

In figuur 3.2.4 staat ook het karakter van de energiebanden voor een superrooster met $m=n=8$ monolagen aangegeven. Deze zijn bepaald uit de eigenvectoren van de transmissiematrix van de super-eenheidscel. Merk op dat de onderste twee conductiebanden een X-karakter dragen terwijl de derde conductieband een Γ -karakter draagt.



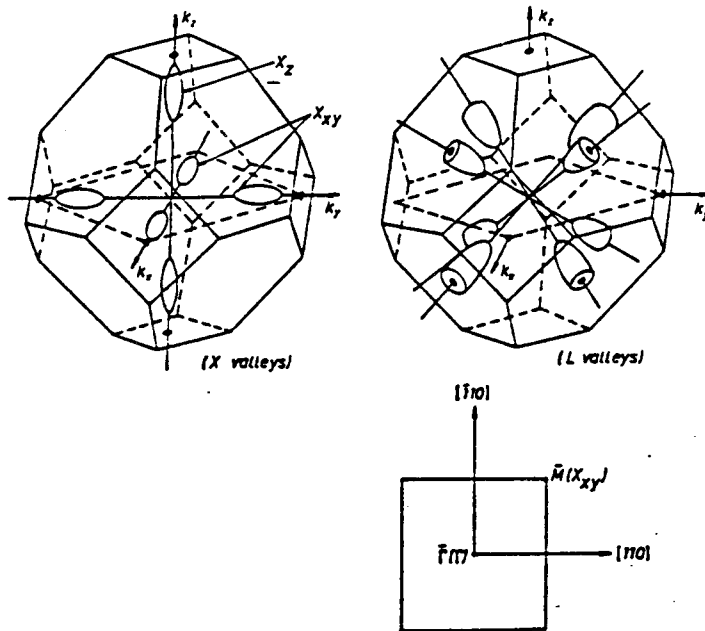
Figuur 3.2.4 Energiebandenstructuur van $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ superrooster in de $[001]$ -richting tussen $-X_{\text{sr}}$ en X_{sr} in eenheden van $\frac{2\pi}{L}$.

H 3.2.2 TYPE I EN TYPE II SUPERROOSTERS

In het voorafgaande hebben we bandenstructuren van $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$ -superrooster bij $\underline{k}_1 \approx (0,0)$ berekend. We moeten ons afvragen of bij een andere keuze van \underline{k}_1 een conductieband van het superrooster gevonden kan worden die lager in energie gelegen is dan bij $\underline{k}_1 = (0,0)$. In de literatuur worden drie \underline{k}_1 punten aangewezen die hiervoor in aanmerking komen;

$\underline{k}_1 = (0,0)$	de bijbehorende X-banden worden aangeduid als X_z
$\underline{k}_1 = (\pm 1,0); (0,\pm 1)$	” ” ” ” ” ” ” X_{xy}
$\underline{k}_1 = (\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$	” ” ” ” ” ” ” L

Als de laagste conductieband van superroosters Γ -karakter heeft dan classificeert men deze structuren als type I. Als de laagste conductieband van superroosters X_z - dan wel X_{xy} - of L karakter heeft, dan classificeert men deze structuren als type II.

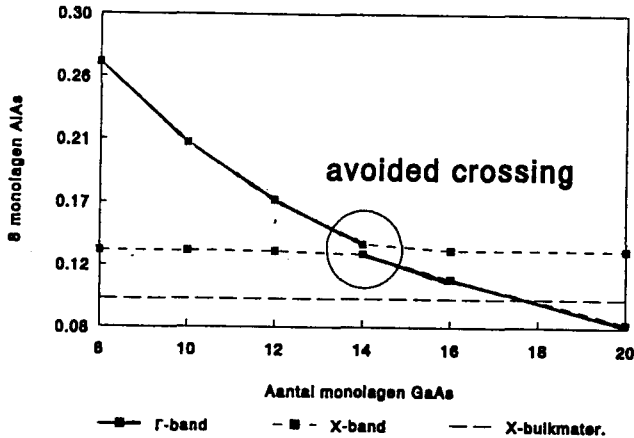


Figuur 3.2.5 Γ -, X- en L-punt in de 1^e Brillouin-zone van zincblende structuren.

In dit verslag beperken we de classificatie tot type I en II bij $\underline{k}_1 = (0,0)$. We kunnen immers vaststellen of bij $\underline{k}_1 = (0,0)$ de onderste conductieband van het Γ of van het X_z type is.

Beschouw nogmaals figuur 3.2.4. Zoals eerder is opgemerkt, zijn de onderste twee conductiebanden van het X_z -type, daarna volgt een conductieband die van het Γ -type is. Als we nu de GaAs-laag van 8 monolagen naar m -monolagen verbreden, dan verwachten we dat de Γ -conductieband bij een gegeven m onder de X_z -conductieband daalt zodat deze (de Γ -conductieband) de laagste conductieband vormt.

In grafiek 3.2.6 staat de verschuiving van de onderkant van de Γ -band als functie van het aantal monolagen GaAs (bij 8 monolagen AlAs en $\underline{k}_1 \approx (0,0)$).

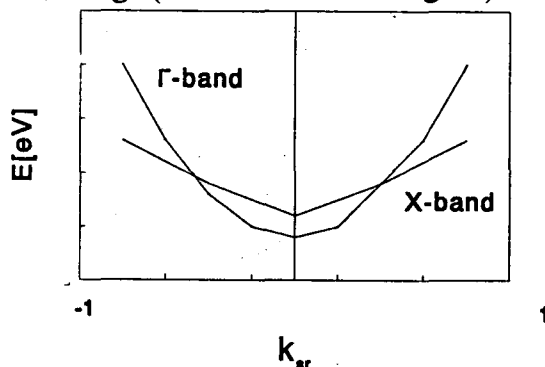


Figuur 3.2.6 De verschuiving van de onderkant van de Γ -band als functie van het aantal monolagen GaAs bij 8 monolagen AlAs.

Uit bovenstaande grafiek maken we het volgende op:

1° Bij een breedte van 16 monolagen of meer van de GaAs-laag ligt de onderkant van de Γ -band lager dan de onderkant van X_z -conductieband.

2° Verder maken we op dat bij een breedte van 14 monolagen van de GaAs-laag de Γ -conductieband en de X -conductieband de neiging vertonen om elkaar af te stoten. Dit verschijnsel noemt men "avoided crossing". Bij deze configuratie ($m=14$ $n=8$) kunnen we geen duidelijk onderscheid maken tussen de Γ -conductieband en X_z -conductieband. Nader onderzoek leert dat de Γ -band de X_z -band overlapt. Dit wil zeggen dat het energie-interval van de X_z -conductieband tussen de onderkant en bovenkant van de Γ -band ligt (zie onderstaande figuur).



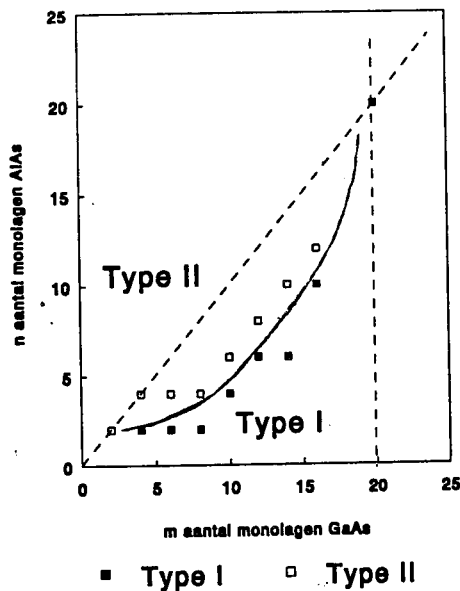
Figuur 3.2.7 Schematische voorstelling van de Γ -band en de X -band.

3^e

In deze grafiek is tevens de onderkant van de conductieband bij het X-punt van het *bulk* materiaal AlAs aangegeven. Merk op dat de Γ -conductieband (van het superrooster) voor $m=20$ onder dit minimum is gedaald. Als we ons realiseren dat de X_z -conductiebanden nooit onder dit energieniveau kunnen liggen, immers deze energie vormt de onderkant van de potentiaalput die de X_z -elektronen ondervinden, dan wordt het duidelijk dat de laagste conductieband voor een superrooster $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ met $m \geq m_{\text{kritisch}} = 20$ voor een willekeurige n *altijd* van het Γ -type is.

Om nu de exacte waarde van het aantal monolagen van de GaAs-laag (m) bij een gegeven aantal monolagen van AlAs (n) waarbij de Γ -conductieband onder de X_z -conductieband daalt te bepalen, moeten we voor elke configuratie (m,n) afzonderlijk de ligging van de energiebanden berekenen zoals hierboven is aangegeven. Dit wil zeggen dat we voor elke configuratie het karakter van de onderste conductieband bepalen uit de eigenvectoren van de transmissiematrix van de super-eenheidscel. De resultaten van deze bepalingen staan weergegeven in grafiek 3.2.8 .

Merk op dat de bovengrens van $m_{\text{kritisch}} = 20$ pas relevant wordt als $n \geq 20$ (zie grafiek 3.2.8). De scheidingslijn, die aangeeft bij welke configuratie (m,n) de laagste conductieband van het X_z -type overgaat in het Γ -type, is dan een rechte lijn. Voor $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superrooster met $m < 20$ en $n < 20$ is de scheidingslijn gekromd en deze ligt rechts van de rechte $m = n$ (zie figuur 3.2.8). De verklaring hiervan ligt verscholen in de energiebandenstructuur van GaAs en AlAs. Beschouw een symmetrische dubbele-barrièrestructuur. Aangezien het X-minimum een grotere effectieve massa heeft dan het Γ -minimum zal de X-type gebonden toestand altijd bij $n = m$ lager liggen dan de Γ -type gebonden toestand.



Figuur 3.2.8 Classificatie diagram

Zoals vermeld blijkt uit onze berekeningen dat voor m groter of gelijk aan 20 monolagen $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters altijd van het type I zijn (onafhankelijk van n). In tegenstelling hiermee beweert Ihm [ref. 12] dat de gevonden experimentele waarde van m , waarbij het superrooster van type II overgaat in type I, gelijk is aan 10.

Deze discrepantie tussen onze berekende m_{kritisch} en de experimenteel gemeten waarde heeft te maken met de keuze van de bandoffset. In onze berekening hebben we de volgende experimenteel gevonden regel aangehouden:

$$\Delta E_c = 0.65 * (E_{\text{AlAs}}^{\text{gap}} - E_{\text{GaAs}}^{\text{gap}}) \quad (3.2.2)$$

In de literatuur [ref.21] wordt de volgende waarde gegeven voor het energieverval tussen het X_1 -minimum en Γ -minimum in AlAs-bulkmateriaal:

$$E_c^\Gamma - E_c^{X_1} = -0.8646 \text{ [eV]} \quad (3.2.3)$$

De berekende bandgaps van de bulkmaterialen staan weergegeven in onderstaande tabel.

	Berekend met 27 vlakke golven	Literatuur
$E^{\text{gap}} \text{ GaAs}$	1.49 [eV]	* 1.424 [eV]
$E^{\text{gap}} \text{ AlAs}$	2.98 [eV]	** 2.95 [eV]

*Tabel 3.2.1 Energiegaps in GaAs en AlAs berekend met 27 vlakke golven gebruik makend van de pseudopotentialvormfactoren zoals gegeven in tabel 2.1, en de in de literatuur gegeven waarde door *Casye en Panish [ref 4] ** Stukel en Euwema [ref 22].*

We merken op dat het verschil tussen de door ons berekende bandgaps en de gemeten bandgaps wordt veroorzaakt door het feit dat we in onze berekeningen de invloed van de spin-baan koppeling hebben verwaarloosd en doordat we de berekeningen beperkt hebben tot 27 vlakke golven.

Met bovenstaande gegevens berekenen we de waarde van het X_1 -bulkminimum (E^{X_1}) in de AlAs-laag:

$E^{X_1} = 0.10 \text{ [eV]}$ berekend met de waarde van de middelste kolom van tabel 3.2.1

$E^{X_1} = 0.13 \text{ [eV]}$ berekend met de waarde van de rechtse kolom van tabel 3.2.1

We passen nu onze programmatuur zodanig aan dat de waarde van het X_1 -minimum overeenkomt met de experimenteel gevonden waarde van E^{X_1} . Dit kunnen we op verschillende wijzen doen. Als we veronderstellen dat formule 3.2.3 correct is dan

moeten we formule 3.2.2 zodanig aanpassen dat geldt:

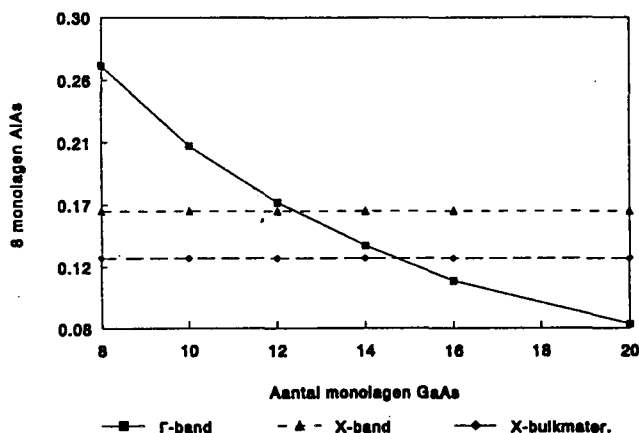
$$\Delta E_c = 0.67 * (E_{AlAs}^{gap} - E_{GaAs}^{gap}) \quad (3.2.4)$$

Vervolgens berekenen we van het $(GaAs)_m(AlAs)_8$ -superrooster de ligging van de onderkant van de laagste gelegen X-miniband.

	$E^{X_1} = 0.10$ [eV]	$E^{X_1} = 0.13$ [eV]
X-miniband	0.1342 [eV]	0.1635 [eV]
Γ -miniband	0.266 [eV]	0.269 [eV]

Tabel 3.2.2 De ligging van de onderkant van zowel de Γ -miniband als de X-miniband bij verschillende waarden van E^{X_1} .

We zien uit bovenstaande tabel dat de onderkant van de laagste X-miniband als deze berekend wordt met de gecorrigeerde bandoffset, 0.03 [eV] naar boven is verschoven. Tevens merken we op dat de Γ -miniband nagenoeg op zijn plaats is gebleven. Dit heeft als consequentie dat $m_{kritisch}$ kleiner wordt. Om nu een idee te verkrijgen over $m_{kritisch}$ bij de nu gekozen bandoffset, veronderstellen we dat de Γ -minibanden voor $(GaAs)_m(AlAs)_8$ -superroosters niet van plaats veranderen. Met andere woorden in grafiek 3.2.6 veranderen de Γ -banden niet van plaats. Echter de X_1 -minibanden van bovengenoemde superroosters liggen in goede orde benadering bij een energie van 0.164 [eV] (zie tabel 4.2). In onderstaande grafiek hebben we dit grafisch uitgezet.



Figuur 3.2.9 Geëxtrapoleerde waarden van de onderkant van de Γ -minibanden en X-minibanden van $(GaAs)_m(AlAs)_8$ -superrooster als functie m bij de volgende keuzen van de bandoffset:

$$\Delta E_c = 0.67 * (E_{AlAs}^{gap} - E_{GaAs}^{gap})$$

Uit figuur 3.2.9 maken we op dat $m_{kritisch}$ nu gelijk is aan 15 monolagen. We leiden uit dit voorbeeld af dat een kleine verandering in de bandoffset grote invloed heeft op $m_{kritisch}$.

H 4 DISCUSSIE

In de voorgaande hoofdstukken is een model ontwikkeld waarmee bandenstructuren van superroosters berekend kunnen worden. We hebben met dit model bandenstructuren van $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters berekend en geconfronteerd met de transmissiekarakteristieken welke berekend zijn met het scatteringsmatrixformalisme. Tevens hebben we verschillende configuraties (m,n) superroosters geclassificeerd in type I en type II. Enkele conclusies, discussies en aanbevelingen voortvloeiend uit dit onderzoek komen in dit hoofdstuk aan bod.

1) In het door ons ontwikkelde formalisme worden de bandenstructuren van superroosters direct verkregen uit de eigenwaarden van de transmissiematrix van de super-eenheidscel. In het scatteringsformalisme moet men vanuit de verkregen transmissiekarakteristiek een vertaalslag maken om de bandenstructuur te bepalen.

2) In het scatteringsformalisme worden, wanneer 13 2D-Fouriercomponenten in de ontwikkeling van de golffuncties worden gebruikt, de transmissiekarakteristieken numeriek stabiel berekend zolang de breedte van de lagen niet groter is dan 280 monolagen.

3) In de bandenstructuurberekeningen van $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters bij $\underline{k}_\parallel=(0,0)$ is het voldoende om de bulkgolffuncties te ontwikkelen in slechts 5 2D-Fouriercomponenten, ongeacht de breedte van de lagen.

4) Het transmissiematrixformalisme om bandenstructuren van bovengenoemde superroosters te berekenen is, wanneer 5 2D-Fouriercomponenten in de ontwikkeling van de golffunctie worden gebruikt, numeriek instabiel als de lagen breder zijn dan 20 monolagen.

5) Uit onze berekeningen blijkt dat voor m (m_{kritisch}) groter of gelijk aan 20 monolagen $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ -superroosters altijd van het type I zijn (onafhankelijk van n). De experimentele gevonden waarde van m waarbij bovengenoemde superroosters overgaan van type I naar type II blijkt gelijk te zijn aan 10. We hebben laten zien dat dit verschil tussen de door ons berekende m_{kritisch} en de experimenteel m_{kritisch} kan worden verkleind door een geschikte keuze van de bandoffset.

REFERENTIELIJST

- [1] Baldereschi et al ; *J. Phys. C: Solid State Phys.* 10 4709 (1977)
- [2] Brabers J.; *Coherent Electrontransport in GaAs/AlAs superroosters;*
Afstudeerverslag TUE (1991)
- [3] Brand S. Monaghan S, Szydlik ; *Semicond. Sci. Technol.* 2 123 (1987)
- [4] Casey Jr H.C. , Panish M.B ; *Heterostructure (Academic, New York)*
Deel A (1978).
- [5] Cuypers J.; *Scattering of electrons at heterostructure interfaces; Proefschrift*
TUE (1992)
- [6] Danan et all; *Phys. Rev. B* 35 6207 (1987)
- [7] Dawson P. , Foxon C.T. , Kesteren H.W. van ; *Semicond. Sci. Technol.* 5 54
(1990)
- [8] Edwards G , Inkson J ; *Semicond. Sci. Techn.* 5 1023 (1990)
- [9] Esaki E. , Tsu R. ; *J. Res. Develop. IBM (1990)*
- [10] Finkman et all ; *Appl. Phys. Lett.* 49 1299 (1986)
- [11] Gell M.A. et all ; *Phys. Rev. B* 35 1196 (1987)
- [12] Haeringen W. van , Lenstra D. ; *Dictaat, Quantumtheorie van de vaste stof I.*
- [13] Ihm J. ; *Appl. Phys. Lett.* 50 1068 (1987)
- [14] Ikonik Z. , Srivastava G.P., Inkson J.C. ; *Phys. Rev. B* 46 15150 (1992)
- [15] Ikonik Z. , Inkson J.C. , Srivastava G.P.; *Semicond. Sci. Technol.* 7 648 (1992)
- [16] Ko D.Y.K. , Edwards G. , Inkson J.C , *Semicond. Sci. Technol.* 5 200 (1990)
- [17] Marsh A.C. Inkson J.C. ; *Semicond. Sci. Technol.* 1 285 (1986)
- [18] Merzbacher E. ; *Quantum Mechanics (Wiley, New York, 1970)*
- [19] Pulsford et all; *Phys. Rev. Lett.* 63 2284 (1989)
- [20] Scalbert D. et all ; *Solid State Communications,* 70 945 (1989)

- [21] Schulman and T.C. McGill T.C , *Phys. Rev. Let.* 39 1680 (1977)
- [22] Stukel D.J. , Euwema R.N. ; *Phys. Rev.* 188 1193 (1969)
- [23] Ting D.Z.Y. , Yia-Chung Chang ; *Phys. Rev. B* 36 4359 (1987)
- [24] Wanda Andreoni , R. Car ; *Phys. Rev. B* 21 3334 (1980)

APPENDIX

Vanwege het feit dat computers met een eindige nauwkeurigheid rekenen, kunnen bij het berekenen van bepaalde grootheden onacceptabele afrondfouten worden gemaakt. In de numerieke wiskunde staan twee begrippen centraal die met deze problematiek te maken hebben, n.l. numerieke stabiliteit en het conditie-getal. In de numerieke wiskunde kent men verschillende algoritmen die numeriek stabiel zijn. Deze staan de programmeur ter beschikking in b.v. de NAG-bibliotheek. We zullen daarom niet op deze algoritmen ingaan. Waar we wel bij zullen stilstaan is of een probleem goed geconditioneerd aan de NAG-routines wordt aangeleverd.

BEREKENINGEN VAN TRANSMISSIE GROOTHEDEN VAN SUPERROOSTERS

Zoals in hoofdstuk 2 is aangestipt, levert het berekenen van de transmissiekansen in heterostructuren numerieke problemen op. Als eenvoudigste illustratie hiervan berekenen we de transmissie door N één-dimensionaal identieke rechthoekige barrières, voor energieën kleiner dan de hoogte van de potentiaalberg. We veronderstellen dat een elektron in de laag j voldoet aan de effectieve massa vergelijking:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^{*j}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V^j(x) \right\} f^j(x) = E f^j(x) \quad (\text{A1})$$

met

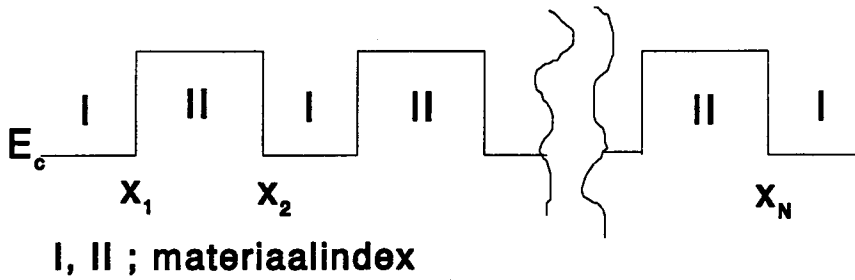
$$V^j(x) = \begin{cases} 0 & \text{voor } j = 1, 3, 5 \\ V & \text{voor } j = 2, 4, 6, \end{cases} \quad (\text{A2})$$

Waarbij $f^j(x)$ de zgn. envelope-functies zijn van de golffunctie $\psi^j(x)$ [ref. 5]. De oplossing van bovenstaande vergelijking luidt:

$$f^j(x) = e^{ik^j x} \alpha^{j \rightarrow} + e^{-ik^j x} \alpha^{j \leftarrow} \quad (\text{A3})$$

$$k^j = k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2 m^{\text{eff},1} E} \quad \text{voor } j = 1, 3, 5 \dots \quad (\text{A4})$$

$$k^j = \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2 m^{\text{eff},2} (V-E)} \quad \text{voor } j = 2, 4, 6, \dots \quad (\text{A5})$$



Figuur A1 Schematische voorstelling van een superrooster.

Aan de interfaces eisen we dat de golffuncties continu en continu differentieerbaar aan elkaar aansluiten.

Voor $x = x_1$ geldt:

$$e^{ikx_1} \alpha^{1,\rightarrow} + e^{-ikx_1} \alpha^{1,\leftarrow} = e^{-\kappa x_1} \alpha^{2,\rightarrow} + e^{\kappa x_1} \alpha^{2,\leftarrow} \quad (\text{A6a})$$

$$ik e^{ikx_1} \alpha^{1,\rightarrow} - ik e^{-ikx_1} \alpha^{1,\leftarrow} = -\kappa e^{-\kappa x_1} \alpha^{2,\rightarrow} + \kappa e^{\kappa x_1} \alpha^{2,\leftarrow} \quad (\text{A6b})$$

Voor $x = x_2$ geldt:

$$e^{-\kappa x_2} \alpha^{2,\rightarrow} + e^{\kappa x_2} \alpha^{2,\leftarrow} = e^{ikx_2} \alpha^{3,\rightarrow} + e^{-ikx_2} \alpha^{3,\leftarrow} \quad (\text{A7a})$$

$$-\kappa e^{-\kappa x_2} \alpha^{2,\rightarrow} + \kappa e^{\kappa x_2} \alpha^{2,\leftarrow} = ike^{ikx_2} \alpha^{3,\rightarrow} - ike^{-ikx_2} \alpha^{3,\leftarrow} \quad (\text{A7b})$$

.....

Voor $x = x_N$ geldt:

$$e^{-\kappa x_N} \alpha^{N,\rightarrow} + e^{\kappa x_N} \alpha^{N,\leftarrow} = e^{ikx_N} \alpha^{N+1,\rightarrow} + e^{-ikx_N} \alpha^{N+1,\leftarrow} \quad (\text{A8a})$$

$$-\kappa e^{-\kappa x_N} \alpha^{N,\rightarrow} + \kappa e^{\kappa x_N} \alpha^{N,\leftarrow} = ik e^{ikx_N} \alpha^{N+1,\rightarrow} - ik e^{-ikx_N} \alpha^{N+1,\leftarrow} \quad (\text{A8b})$$

Herschrijven in matrixvorm, elimineren van $(\alpha^{j,\rightarrow}, \alpha^{j,\leftarrow})$ met $j \neq 1$ en $j \neq N+1$ geeft de volgende relatie tussen $\alpha^{N+1,\rightarrow}, \alpha^{N+1,\leftarrow}, \alpha^{1,\rightarrow}, \alpha^{1,\leftarrow}$.

$$\begin{pmatrix} \alpha^{N+1,\rightarrow} \\ \alpha^{N+1,\leftarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikx_N} & e^{-ikx_N} \\ ik e^{ikx_N} & -ik e^{-ikx_N} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\kappa x_N} & e^{\kappa x_N} \\ -\kappa e^{-\kappa x_N} & \kappa e^{\kappa x_N} \end{pmatrix} \dots \dots \dots$$

$$\dots \begin{pmatrix} e^{ikx_2} & e^{-ikx_2} \\ ike^{ikx_2} & -ike^{-ikx_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\kappa x_2} & e^{\kappa x_2} \\ -\kappa e^{-\kappa x_2} & \kappa e^{\kappa x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\kappa x_1} & e^{\kappa x_1} \\ -\kappa e^{-\kappa x_1} & \kappa e^{\kappa x_1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & e^{-ikx_1} \\ ike^{ikx_1} & -ike^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{1,\rightarrow} \\ \alpha^{1,\leftarrow} \end{pmatrix}$$

(A9)

De transmissiecoëfficiënt is, voor structuren waarbij laag N+1 = laag 1, als volgt gedefinieerd:

$$t_{coeff.} = \left| \frac{\alpha^{N+1,\rightarrow}}{\alpha^{1,\rightarrow}} \right| \tag{A10}$$

De randvoorwaarde voor $x \rightarrow \infty$ en $x \rightarrow -\infty$ leveren de volgende eis op voor de coëfficiënten van de golf functies :

$$\alpha^{1,\rightarrow} = 1 \qquad \alpha^{N+1,\leftarrow} = 0$$

zodat de transmissiecoëfficiënt wordt gegeven door:

$$t_{coeff.} = |\alpha^{N+1,\rightarrow}| \tag{A11}$$

Om deze numeriek te berekenen moeten we bovenstaande matrixvergelijking helemaal uitvermenigvuldigen. Dit levert dan twee vergelijking met twee onbekenden $(\alpha^{N+1,\rightarrow}, \alpha^{1,\leftarrow})$ waaruit de transmissiecoëfficiënt te berekenen is.

Het uitvermenigvuldigen geeft numerieke problemen omdat de rechtstreekse inversie van de matrix

$$\underline{\underline{M}}^j = \begin{pmatrix} e^{-\kappa x_j} & e^{\kappa x_j} \\ -\kappa e^{-\kappa x_j} & \kappa e^{\kappa x_j} \end{pmatrix} \quad (\text{A12})$$

voor $e^{\kappa x_j}$ zeer groot, numeriek onuitvoerbaar is.

We herschrijven daarom bovenstaande matrixvergelijking op de volgende wijze:

$$\begin{pmatrix} e^{ikx_N} \alpha^{N+1, \rightarrow} \\ e^{-ikx_N} \alpha^{N+1, \leftarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\kappa(x_N - x_{N-1})} & 0 \\ 0 & e^{\kappa(x_{N-1} - x_N)} \end{pmatrix} \dots \\ \dots \begin{pmatrix} e^{ik(x_3 - x_2)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(x_3 - x_2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\kappa(x_2 - x_1)} & 0 \\ 0 & e^{\kappa(x_2 - x_1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & \alpha^{1, \rightarrow} \\ e^{-ikx_1} & \alpha^{1, \leftarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{A13})$$

Op deze wijze hebben we het probleem dat de matrix M niet inverteerbaar is voor $e^{\kappa x_j}$ groot, omzeilt. We hebben n.l. de matrix M opgesplitst in twee matrices

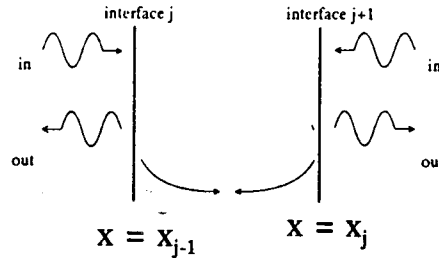
waarbij de grote en kleine getallen ($e^{\kappa x_j}$, $e^{-\kappa x_j}$) in een diagonaalmatrix staan, die analytisch geïnverteerd is. Deze procedure is nog steeds niet numeriek stabiel. Dit komt doordat we veel matrices numeriek moeten doorvermenigvuldigen waarbij naast grote getallen ook kleine getallen voorkomen, er kunnen dan onacceptabele fouten ontstaan t.g.v. het cijferverlies. Om de procedure numeriek stabiel te maken zou men de grote getallen op de een of ander manier moeten zien te vermijden.

Doordat de matrices

$$\begin{pmatrix} e^{ik^i(x_j - x_{j-1})} & 0 \\ 0 & e^{-ik^i(x_j - x_{j-1})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -ik^j & ik^j \end{pmatrix} \quad (\text{A14})$$

niet commuteren lukt het niet om de diagonaalmatrices helemaal naar achteren door te schuiven, zodat deze procedure waarschijnlijk niet numeriek stabiel te krijgen is.

Een ander algoritme dat wel numeriek stabiel te formuleren is, is het scatteringsmatrixalgoritme. In dit algoritme worden de nulpunten van de naar rechts gaande kanalen op de plaatsen $x = x_{j-1}$ gedefinieerd, terwijl de nulpunten van de naar links gaande kanalen op de posities $x = x_j$ gedefinieerd zijn (zie figuur A2).



Figuur A2 Keuze van de nulpunten voor zowel de naar linksgaande kanalen als de naar rechtsgaande kanalen.

Met andere woorden, we herschrijven de golffunctie in de j -de laag op de volgende wijze:

$$\begin{aligned} \psi^j(x) &= e^{ik^i x_j} \alpha^{j,\rightarrow} + e^{-ik^i x_j} \alpha^{j,\leftarrow} = e^{ik^i x_{j-1}} e^{ik^i (x-x_{j-1})} \alpha^{j,\rightarrow} + e^{-ik^i x_j} e^{-ik^i (x-x_j)} \alpha^{j,\leftarrow} \\ &= e^{ik^i x} \beta^{j,\rightarrow} + e^{-ik^i x} \beta^{j,\leftarrow} \end{aligned} \quad (\text{A15})$$

Waarbij de volgende substitutie is gemaakt:

$$x_r \rightarrow x - x_{j-1} \quad \text{met} \quad \beta^{j,\rightarrow} = e^{ik^i x_{j-1}} \alpha^{j,\rightarrow} \quad (\text{A16})$$

$$x_l \rightarrow x - x_j \quad \text{met} \quad \beta^{j,\leftarrow} = e^{-ik^i x_j} \alpha^{j,\leftarrow} \quad (\text{A17})$$

De randvoorwaarden kunnen we dan als volgt noteren:

Aan het 1^e interface geldt:

$$e^{ikW_0} \beta^{1,\rightarrow} + \beta^{1,\leftarrow} = \beta^{2,\rightarrow} + e^{-\kappa W_1} \beta^{2,\leftarrow} \quad (\text{A18a})$$

$$ik e^{ikW_0} \beta^{1,\rightarrow} - ik \beta^{1,\leftarrow} = -\kappa \beta^{2,\rightarrow} + \kappa e^{-W_1} \beta^{2,\leftarrow} \quad (\text{A18b})$$

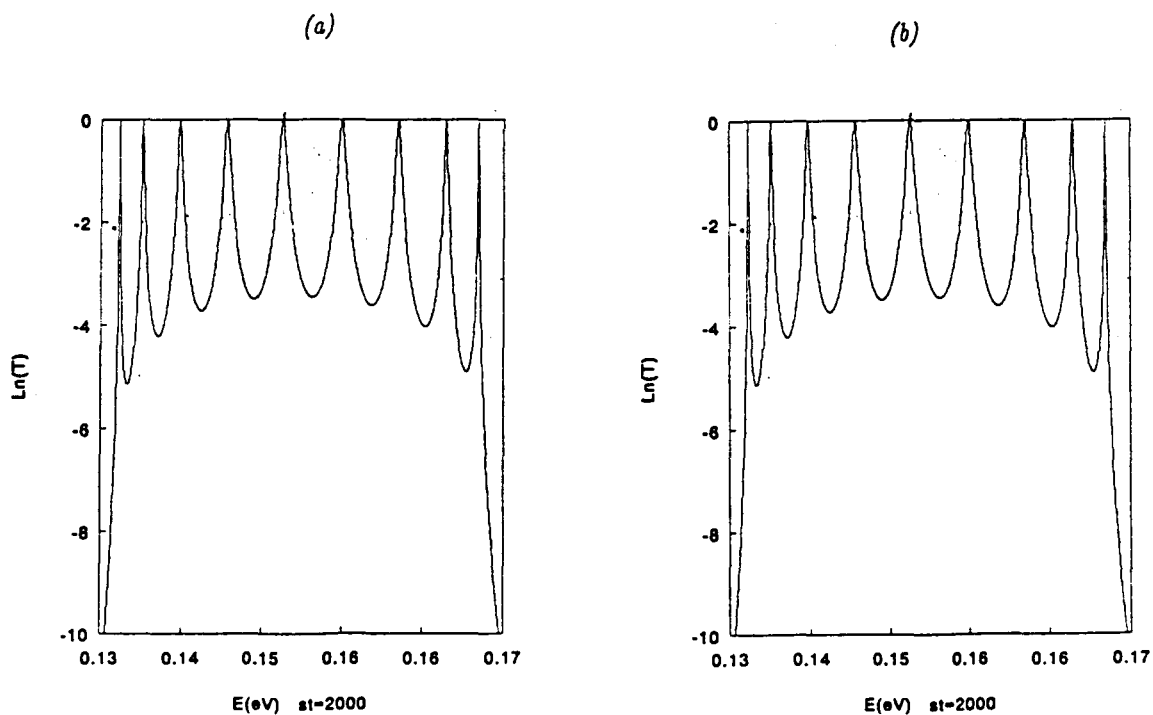
Aan het 2^e interface geldt:

$$e^{-\kappa W_2} \beta^{2,\rightarrow} + \beta^{2,\leftarrow} = \beta^{3,\rightarrow} + e^{ikW_3} \beta^{3,\leftarrow} \quad (\text{A19a})$$

$$-\kappa e^{-\kappa W_2} \beta^{2,\rightarrow} + \kappa \beta^{2,\leftarrow} = ik \beta^{3,\rightarrow} - ik e^{ikW_3} \beta^{3,\leftarrow} \quad (\text{A19b})$$

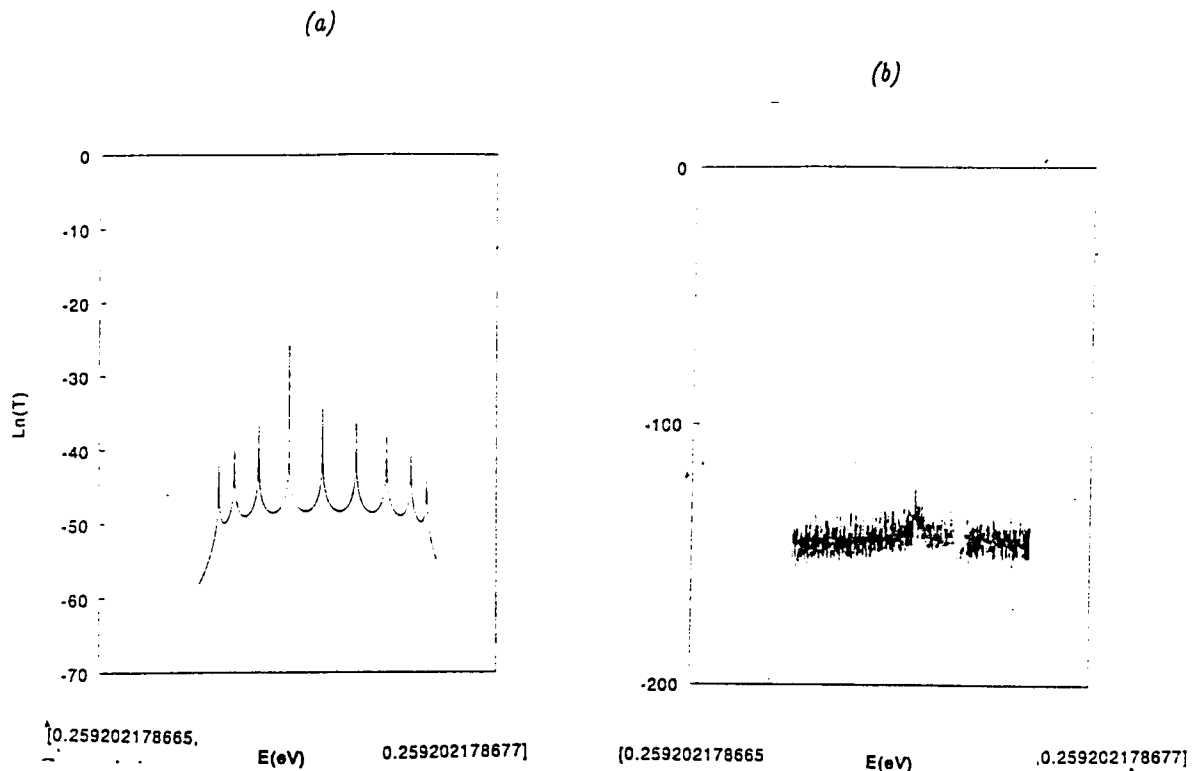
siecoëfficiënt berekent die gelijk aan nul is.

Als illustratie van de numerieke problemen die bij het berekenen van de transmissiecoëfficiënten ontstaan dient onderstaande voorbeeld. Voor de hoogte van de potentiaalbarrière kiezen we in eerste instantie 1 [eV], en we berekenen de transmissiecoëfficiënt door 10 potentiaalbarrières waarbij we de effectieve massa's in alle lagen gelijk stellen aan $0.067 m_0$. De breedte van de potentiaalbarrière respectievelijk potentiaalput is gelijk aan 17 \AA en 45 \AA . In deze configuratie ontstaan twee Blochbanden in het energie-interval tussen 0 [eV] en 1 [eV]. In figuur staat weergegeven de natuurlijke logaritme van de transmissiecoëfficiënt als functie van de energie in de eerste Blochband. Uit de figuren A3 maken we op dat beide methoden hetzelfde resultaat geven. Er ontstaan zoals verwacht 9 transmissiepieken in de eerste Blochband.



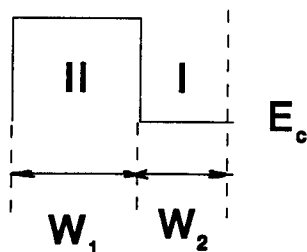
Figuur A3 Transmissie karakteristieken, van een structuur bestaande uit 10 potentiaalbarrières met potentiaalbarrièrehoogte van 1 [eV], berekent met de scatteringsmatrixmethode (a) en met de transmissiematrixmethode (b).

We verhogen nu de potentiaalbarrière tot 100 [eV] en berekenen opnieuw de transmissiecoëfficiënt. Merk op dat de berekeningen m.b.v. transmissiematrixmethode onbetrouwbaar zijn. Immers we moeten 9 transmissiepieken vinden. Wat we echter vinden is numerieke ruis. De resultaten met behulp van de scatteringsmethode zijn echter wel betrouwbaar. Ten eerste vinden we 9 transmissiepieken en ten tweede deze liggen binnen het energie-interval van de eerste Blochband zoals die ook volgt uit het Kronig-Penney model [ref.18] .



Figuur A4 Transmissie karakteristieken van een structuur bestaande uit 10 potentiaalbarrières met potentiaalbarrière hoogte van 100 [eV], berekend met de scatteringsmatrixmethode (a) en met de transmissiematrixmethode (b).

Een ander numeriek punt dat de aandacht vraagt is de berekening van bandenstructuur van superroosters. We definiëren de superéénheidscel op dezelfde wijze zoals dat in hoofdstuk 2 ook hebben gedaan.



Figuur A5 Schematische voorstelling van de superéénheidscel.

$$\underline{A}^{j+2N} = \underline{T}_{uc}^N \underline{A}^j \quad (\text{A23})$$

met

$$\underline{T}_{uc} = \begin{pmatrix} e^{ik W_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik W_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\kappa W_1} & 0 \\ 0 & e^{\kappa W_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \quad (\text{A24})$$

en

$$\begin{pmatrix} A^{j,\rightarrow} \\ A^{j,\leftarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik x_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik x_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{j,\rightarrow} \\ \alpha^{j,\leftarrow} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} A^{j+1,\rightarrow} \\ A^{j+1,\leftarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik x_{j+2}} & 0 \\ 0 & e^{-ik x_{j+2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{j+2,\rightarrow} \\ \alpha^{j+2,\leftarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{A25})$$

De reële bandenstructuur van superroosters wordt gegeven door die eigenwaarden van bovenstaande matrix die in absolute zin gelijk aan 1 zijn (zie hoofdstuk 2).

$$\underline{T}_{uc} \underline{A}_{ev} = t \underline{A}_{ev} \quad (\text{A26})$$

Om nu het cijferverlies tengevolge van deze matrixvermenigvuldiging te minimaliseren schrijven we de eigenwaardenvergelijking als een generaliseerd eigenwaardenprobleem op:

$$\begin{pmatrix} e^{ikW_2} & 0 \\ 0 & e^{-ikW_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix} \underline{A}_{ev} = t \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\kappa W_1} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa W_1} \end{pmatrix} \underline{A}_{ev}$$

(A27)

De F02GJF-routine van NAG-bibliotheek berekent de eigenwaarden van een generaliseerd eigenwaardeprobleem.

We besluiten deze appendix met het geven van enkele conclusies die betrekking hebben op de numerieke problemen bij het berekenen van de transmissiekarakteristieken en bandenstructuren.

De berekeningen van de transmissiekansen door superroosters bestaande uit een eindig aantal lagen (zie hoofdstuk 3), zijn uitgevoerd met de scatteringsmatrix methode. Deze methode is zoals we hiervoor hebben gedemonstreerd numeriek stabiel. Het nadeel van deze methode is dat alle randvoorwaarden in een matrix \underline{D}^{uit} worden geformuleerd. Doordat de geheugenruimte van een computer gelimiteerd is, kunnen we niet de transmissiekansen van een superroosters bestaande uit willekeurig aantal lagen berekenen. Merk op dat de matrix \underline{D}^{uit} een complexebandmatrix is. Wanneer we hier gebruikt van maken blijkt dat de geheugenruimte die men voor deze matrix moet reserveren als men gebruikt maakt van de F04NAF-routine, gelijk is aan.

$$(9 * M - 2) * (N_{uc} - 1) * 2 * M * 16 \quad [bytes]$$

Hierbij is

M - aantal \underline{K}_1 -vectoren

N_{uc} - aantal superéénheidscellen

Stel dat we 16 Mb aan geheugen ter beschikking hebben en dat $M=5$, dan kunnen we met deze methode de transmissiekansen door 2300 barrières berekenen. Als we ons realiseren dat in de praktijk superroosters worden vervaardigd die dit aantal bij lange na niet halen, dan mogen we stellen dat het bezwaar dat aan de scatteringsmatrixmethode kleeft irrelevant is.

De bandenstructuren zoals behandeld in hoofdstuk 3 zijn berekend met de F04NAF NAG-routine. Deze routine berekent de eigenwaarden van een gegeneraliseerde eigenwaarde probleem. Experimenteel is gevonden dat deze routine verkeerde eigenwaarden berekend voor een superrooster opgebouwd uit GaAs en AlAs bij een breedte van de GaAs-laag van 25 monolagen met de subset van 5 \underline{K}_1 -vectoren.

Dit heeft weer te maken met het feit dat naast grote ook kleine getallen in de matrices, waarvan de eigenwaarde bepaald moet worden, voorkomen. Deze problemen zijn echter wat betreft de classificatie van superroosters in type 1 of 2 van ondergeschikt belang. Uit onze berekeningen blijkt dat voor een breedte groter of gelijk aan 20 monolagen de onderste conductieband altijd van het gamma type is, zodat superroosters met 20 of meer monolagen GaAs altijd van het type 1 is.