CARTA AL EDITOR

ESTADOS DE GAP-NULO EN SUPER-REDES

Melquiades de Dios L.
Rolando Pérez A.
J.L. Gondar
Universidad de La Habana, Habana, Cuba

ABSTRACT

The possibility of zero-gap existence in superlattices is studied using the simple square potential well and the simplified two band Kane models. It is shown that when the effective periodic potential amplitude V_o is equal to or greater than a certain value V_c, which we will call the critical value, all of the superlattice states are zero-gap states. When $V_o > V_c$ the valence and conduction bands touch at more than one point of the new Brillouin zone.

RESUMEN

Utilizando el modelo simple de pozos potenciales cuadrados y el modelo simplificado de dos bandas de Kane, se estudia la posibilidad de existencia de gap directo nulo en super-redes. Se demuestra que cuando la amplitud del potencial periódico efectivo V_o es igual o mayor que un cierto valor V_c, al que denominaremos valor crítico, todos los estados de la super-red son de gap-nulo. Es más, para $V_o > V_c$, las bandas de valencia y conducción se tocan en más de un punto de la nueva zona de Brillouin.

Entre las propiedades específicas de la estructura de banda de super-redes están la existencia de minizonas [1] y la posibilidad de cambio de topología de la superficie de Fermi [2]. No obstante, aún restan por aclarar algunas cuestiones importantes. Una de ellas es la posibilidad de existencia de gap directo nulo y sus propiedades. Para analizar tal posibilidad es necesario suponer que la amplitud V_o del potencial periódico de la super-red sea del orden del gap E_g del semiconductor (consideramos super-redes creadas en un mismo semiconductor simple). Por este motivo es necesario utilizar, como ecuación del movimiento del electrón, la ecuación de masa efectiva para el caso de varias bandas próximas. Por simplicidad utilizaremos el modelo simplificado de dos bandas de Kane. Además, supondremos que el potencial $V(z)$ de la super-red tiene período $2a$, es igual a V_o para $-a < z < 0$ e igual a $-V_o$ para $0 < z < a$.

La ecuación de masa efectiva, en el modelo simplificado de Kane, se puede tomar igual en forma a la ecuación relativista de Dirac [3] con potencial $V(z)$. En [3] fue demostrado que esta ecuación se puede llevar

al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}\mathcal{E}_g + V(z) & PK + iP\hat{k}_z \\ PK - iP\hat{k}_z & -\frac{1}{2}\mathcal{E}_g + V(z) \end{bmatrix} \Psi(z) = E\,\Psi(z) \qquad (1),$$

donde P es un parámetro del orden de 10^{-8} eV-cm; $K = \pm\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, k_x, k_y son las componentes transversales del cuasi-impulso; E la energía y $\Psi(z)$ la función de onda, la cual se puede escribir de la forma $\Psi(z) = U(z)\exp(ikz)$. Siendo k el cuasi-impulso a lo largo del eje de la super-red; U(z) periódica con período 2a; $\hat{k}_z = -i\frac{d}{dz}$

La continuidad de U(z) en $z = 0$ unida a la condición $U(-a) = U(a)$ conduce a la siguiente relación de dispersión

$$\cos(2ak) = \cos(ak_1)\cos(ak_2) - Q\frac{\operatorname{sen}(ak_1)}{ak_1}\,\frac{\operatorname{sen}(ak_2)}{ak_2} \qquad (2)$$

donde

$$ak_1 = \rho(K)\sqrt{(\varepsilon - v - 1)(\varepsilon - v + 1)} \qquad ak_2 = \rho(K)\sqrt{(\varepsilon + v - 1)(\varepsilon + v + 1)}$$

$$Q = \rho^2(K)\left[\varepsilon^2 - v^2 - 1\right] \qquad \rho(K) = \frac{a\mathcal{E}_{eff}}{2P} \qquad \varepsilon = \frac{E}{\mathcal{E}_{eff}/2}$$

$$v = \frac{V_o}{\mathcal{E}_{eff}/2} \qquad \left(\frac{\mathcal{E}_{eff}}{2}\right)^2 = \left(\frac{\mathcal{E}_g}{2}\right)^2 + P^2K^2$$

Como la ecuación (2) es invariante ante el cambio de ε por $-\varepsilon$ la estructura de banda tiene simetría especular y, la banda de valencia y la de conducción se tocarán cuando $\varepsilon = 0$. Esta es la condición para la ocurrencia de gap directo nulo. De (2) se deriva que tales estados solamente ocurren cuando $k = 0$ y para los siguientes valores de V_o

$$W_n = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{ell}}{2}\right)^2 + P^2\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} \qquad \text{con } n = 1, 2, \ldots \qquad (3)$$

Limitaremos la discusión al caso $n = 1$. De (3) sigue que W_1 es una función continua y creciente de K, cuyo valor mínimo, al cual llamaremos potencial crítico y denotaremos por V_c, se obtiene para $K = 0$. Esto implica que para $V_o \geqslant V_c$ la super-red es un semiconductor de gap-nulo y, para $V_o < V_c$ un semiconductor propiamente dicho.

Aquí es interesante notar que para $V_o > V_c$ la banda de valencia y la de conducción se tocan en infinitos puntos (sobre una circunferencia).

Desde un punto de vista geométrico la reconstrucción del espectro es como sigue: a medida que V_o aumenta las bandas de valencia y conducción se aproximan y, para $V_o = V_c$ se tocan en el centro de la nueva zona de Brillouin (contacto puntual). Si Vo continúa aumentando, dichas bandas se alejan una de otra en el centro de la zona y, se continuarán tocando sobre la circunferencia determinada por (4) para el valor de $V_o > V_c$ elegido. El radio de esta circunferencia aumenta a medida que Vo aumenta.

Si se toma $\varepsilon_g/2 = 10^{-2}$ eV; $\pi/a = 10^6$ cm^{-1} y $P = 10^{-8}$ eV-cm se obtiene $V_c = \sqrt{2}\, 10^{-2}$ eV $\approx \varepsilon_g/2$

Por último aclararemos que tal situación física se puede lograr experimentalmente, por ejemplo cuando una onda longitudinal de sonido de gran intensidad es creada en un semiconductor de banda estrecha (suficientemente puro y para temperaturas suficientemente bajas).

En una publicación posterior se aclararán otras cuestiones vinculadas con las propiedades de la estructura de banda de las super-redes para $V_o \approx V_c$.

BIBLIOGRAFIA

1. L. W. Keldysh, Fiz. Tverdogo Tela, 6, 2265 (1962)
2. N. B. Brandt, E. R. Ioon, S. M. Chudinov, H. D. Yakovlev. Pisma v Zh. Eksperim. y Teoret. Fiz. 15, 204 (1972)
3. Vea en este mismo número el trabajo titulado "Distribución de potencial en p-n-diodo-túnel", por Melquiades de Dios L y S.D. Beneslaskii.