

# Pozo de potencial rectangular unidimensional en el modelo de dos bandas de Kane simplificado

H. Rodríguez Coppola, R. Pérez Álvarez, M. de Dios Levva  
Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

## RESUMEN

Se realiza el cálculo de los parámetros fundamentales de los estados electrónicos de espectros discreto y continuo para un pozo de potencial rectangular unidimensional en la aproximación de masa efectiva, empleando el modelo simplificado de dos bandas de Kane. Se obtienen los parámetros correspondientes al modelo de banda parabólica como caso límite. Se analizan los resultados para el caso de potencial pequeño. Se muestra que los estados de gap energético fundamental nulo en una superred con igual modelo de bandas y potencial de Krönig-Penney aparecen para valores de potencial que den lugar a coeficientes de transmisión iguales a la unidad en los pozos y barreras.

## ABSTRACT

The fundamental parameters for electronic states of the discrete and the continuous spectra are calculated for a square one dimensional potential in the effective mass approximation using the simplified two band Kane's model. The parameters corresponding to the same potential in the parabolic band model are obtained as a limiting case. The results for small height potential are analysed. The zero energy fundamental gap states in a superlattice with the same band model and a Krönig-Penney potential are shown to take place for values of the potential that give rise to transmission coefficients equal to one in the barriers and wells of the potential.

En los últimos años ha cobrado particular importancia el estudio de la estructura de bandas de las superredes. Entre las características interesantes de estos sistemas se encuentran la aparición de minizonas prohibidas, la posibilidad de cambio en la topología de la superficie de Fermi y la inversión de bandas. Asimismo, se prevén características específicas en sus propiedades ópticas y eléctricas [1-13]. Trabajos previos [12-14] indican que bajo determinadas condiciones se pueden obtener estados de gap fundamental nulo. Este resultado se ha obtenido para un potencial unidimensional de Kronig-Penney en la ecuación de Schrödinger [14] y más recientemente con el mismo potencial en el marco de la aproximación de masa efectiva para el modelo de dos bandas de Kane simplificado [12,13]. En [15] se analizan algunos aspectos que indican las posibilidades de este modelo y su comparación con otros modelos anteriores. Los estados de gap nulo se obtienen para ciertos conjuntos de valores de los parámetros que hacen caber un número entero de semilongitudes de onda en las dimensiones de los pozos y barreras del potencial de Krönig-Penney. Con vistas a esclarecer las razones físicas de tal situación nos proponemos resolver el problema de un pozo de potencial rectangular como el mostrado en la figura 1 en el modelo de dos bandas de Kane simplificado y estudiar los valores de potencial que conducen a estados dispersivos con gap nulo y su relación con las transparencias de la barrera.

En el siguiente epígrafe se plantea el problema y las líneas fundamentales que permiten su solución. Más adelante, en sendos epígrafes se estudian los estados de espectros discreto y continuo. Por último se discuten los resultados y se dan las conclusiones.

## 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Como fue demostrado en [13] la ecuación de movimiento del sistema en la aproximación de masa efectiva para el modelo de dos bandas de Kane simplificado, bajo condiciones bastante generales, se puede llevar a la forma:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}} + V(Z) & iPk_Z \\ -iPk_Z & -\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}} + V(Z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

siendo:

$$\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}} = \sqrt{(\frac{1}{2}\epsilon_0)^2 + P^2 k_1^2} ; k_1^2 = k_x^2 + k_y^2 ; k_Z = -i \frac{d}{dz}$$

donde P es un parámetro del orden  $10^{-8}$  eV-cm;  $i$  es la unidad imaginaria y  $k_x, k_y$  las componentes del vector de onda perpendiculares a la dirección en que varía el potencial aplicado.

Esta ecuación de movimiento tiene una forma análoga a la ecuación de

Dirac, jugando aquí el papel de  $mc^2$  el valor  $\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}}$ .

El potencial  $V(Z)$  considerado (ver figura 1), deberá satisfacer que su ancho  $a$  sea mucho mayor que la constante de la red cristalina  $a_0$  y que tenga variación suave en estas dimensiones para que sea aplicable la aproximación de masa efectiva. La altura del potencial es  $2V_0$ .

Para facilitar el trabajo se pasa a unidades energéticas relativas, en cuyo caso (1) se convierte en el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho}{a}\right) \left[1+v(Z)-\epsilon\right] \Psi_1 + \frac{d\Psi_2}{dz} &= 0 \\ -\frac{d\Psi_1}{dz} + \left(\frac{\rho}{a}\right) \left[v(Z)-1-\epsilon\right] \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

siendo:

$$\rho = \frac{\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}} a}{p} ; \epsilon = \frac{E}{\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}}} ; v(Z) = \frac{V(Z)}{\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}}} \text{ Luego } v_0 = \frac{V_0}{\frac{1}{2}\epsilon_{\text{eff}}} \quad (3)$$

El sistema (2) se resuelve con las condiciones de frontera de continuidad del "spinor" en los puntos de salto del potencial. Teniendo en cuenta que el potencial divide al espacio en la dirección  $z$  en tres regiones, que designaremos con números romanos, las soluciones son:

- Primera componente de "spinor":

$$\begin{aligned} \Psi_{1I}(Z) &= \frac{1}{\gamma_1} \left( A_I e^{ikZ} - B_I e^{-ikZ} \right) \\ \Psi_{1II}(Z) &= \frac{1}{\gamma_2} \left( A_{II} e^{ik_2 Z} - B_{II} e^{-ik_2 Z} \right) \\ \Psi_{1III}(Z) &= \frac{1}{\gamma_1} \left( A_{III} e^{ikZ} - B_{III} e^{-ikZ} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

- Segunda componente del "spinor".

$$\begin{aligned} \Psi_{2I}(Z) &= A_I e^{ikZ} + B_I e^{-ikZ} \\ \Psi_{2II}(Z) &= A_{II} e^{ik_2 Z} + B_{II} e^{-ik_2 Z} \\ \Psi_{2III}(Z) &= A_{III} e^{ikZ} + B_{III} e^{-ikZ} \end{aligned} \quad (5)$$

donde:

$$\begin{aligned} k^2 &= \left(\frac{\rho}{a}\right)^2 \left[ (\epsilon - v_0)^2 - 1 \right] \\ k_2^2 &= \left(\frac{\rho}{a}\right)^2 \left[ (\epsilon + v_0)^2 - 1 \right] \end{aligned} \quad (6)$$

$$\gamma_1 = \frac{\rho(\epsilon - v_0 - 1)}{iak} \quad (7)$$

$$\gamma_2 = \frac{\rho(\epsilon + v_0 - 1)}{iak_2}$$

Para resolver el problema con las condiciones de frontera empleamos la matriz de transferencia [16], M, que será aquí:

$$\begin{pmatrix} A_I \\ B_I \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{III} \\ B_{III} \end{pmatrix} \quad (8)$$

con elementos matriciales

$$\begin{aligned} M_{11} &= 2e^{ika} \left[ -i \left( \frac{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}{\gamma_1 \gamma_2} \right) \text{sen } ak_2 + 2 \cos k_2 a \right] \\ M_{22} &= 2e^{-ika} \left[ i \left( \frac{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}{\gamma_1 \gamma_2} \right) \text{sen } ak_2 + 2 \cos k_2 a \right] \\ M_{12}^* &= M_{21} = 2i \left( \frac{\gamma_1^2 - \gamma_2^2}{\gamma_1 \gamma_2} \right) \text{sen } ak_2 \end{aligned} \quad (9)$$

y esta matriz permite hacer el análisis de los diferentes estados electrónicos.

El esquema de bandas cuasi-clásico se ilustra en la figura 2, donde se muestran las regiones espaciales en que el potencial divide la dirección  $z$  y los rangos de energía en que aparecen estados electrónicos con diferente carácter del espectro, especificados para  $v_0 < 1$  y  $v_0 > 1$ .

### 3. ESTADOS DE ESPECTRO DISCRETO

Los estados de espectro discreto se caracterizan por  $k$  imaginario (regiones I y III), y sus exponenciales correspondientes serán reales, lo que obliga a que los coeficientes  $A_I$  y  $B_{III}$  sean nulos y los estados localizados. De (9) se obtiene una ecuación trascendente para la energía que será:

$$\tan ak_2 = \frac{2 \left( \frac{\gamma_1}{\Gamma_2} \right)}{1 - \left( \frac{\gamma_1}{\Gamma_2} \right)^2} \quad (10)$$

$$\text{si: } \gamma_1 = \frac{\left( \frac{\rho}{a} \right) (1 + v_0 - \epsilon)}{|k|} > 0 ; \quad \Gamma_2 = \frac{\left( \frac{\rho}{a} \right) (\epsilon + v_0 - 1)}{k_2} > 0 \quad \text{y } \gamma_2 = -i \Gamma_2$$

De esta ecuación, después de algunos manejos algebraicos, se puede obtener:

$$ak_2 = m\pi - 2 \operatorname{sen}^{-1} \left\{ \frac{ak_2}{\sqrt{4\rho^2 v_0}} \sqrt{\frac{\epsilon - v_0 + 1}{\epsilon + v_0 + 1}} \right\} \text{ si } m=1,2,3\dots \quad (11)$$

A partir de este resultado y de las posteriores para espectro continuo pueden obtenerse los resultados de un potencial similar en la aproximación de banda parabólica, que corresponde a la ecuación de Schrödinger [18]. Las condiciones para este paso son hacer el cambio  $\epsilon = \epsilon' + 1$  y asumir  $|\epsilon' - v_0| \ll 1$ , lo que significa considerar estados cuya energía difiere del borde de la banda de conducción en una magnitud pequeña comparada con el gap energético.

Un resultado igual a (10) puede obtenerse partiendo de la relación de dispersión del problema de Kröniq-Penney en el modelo de dos bandas de Kane simplificado, ya presentado [17], haciendo tender a infinito la distancia entre pozos de potencial.

Se calcularon los estados correspondientes al límite de potencial pequeño ( $v_0 \rightarrow 0$ ). En este caso se obtienen dos niveles energéticos dados por:

$$\epsilon \approx \begin{cases} 1 + v_0 - 2\rho^2 \rho_0^2 \\ -1 + v_0 + 2\rho^2 \rho_0^2 \end{cases} \quad (12)$$

que son uno próximo a la banda de conducción y otro a la banda de valencia. Estos estados, al igual que los de espectro continuo, dependen de  $k_x$ , que toma valores continuos, dado que en cualquier dirección perpendicular a la dirección  $z$  el electrón se mueve "libremente". De esta forma en (10) se obtendrá una solución diferente para cada valor de  $k_x$ , lo que provoca que los estados "localizados" obtenidos no lo sean completamente y tengan carácter cuasi-resonante.

#### 4. ESTADOS DE ESPECTRO CONTINUO

Los estados de espectro continuo se caracterizan por tener  $k$  real (regiones I y III), y los estudiaremos calculando el coeficiente de transmisión del pozo de potencial, considerando un flujo unitario que viaja hacia la derecha. Empleando (9) se obtiene:

$$D(\epsilon) = \frac{4\gamma_1^2 \gamma_2^2}{(\gamma_1 - \gamma_2)^2 \operatorname{sen} ak_2 + 4\gamma_1^2 \gamma_2^2} \quad (13)$$

Este resultado es igualmente válido en la banda de valencia en la región de energías en que el potencial se comporta como una barrera ( $-1 - v_0 < \epsilon < -1 + v_0$ ), con la diferencia de que  $k_x$  será imaginario y la función seno del denominador pasa a seno hiperbólico.

(13) es similar al resultado que se obtiene para el pozo de potencial rectangular en la aproximación de banda parabólica (ecuación de Schrödinger), teniendo como diferencia que donde aquí aparecen  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$ , en el coeficiente Schrödinger aparecen  $k_{1S}$  y  $k_{2S}$  respectivamente (la S como subíndice indica que corresponden a los parámetros de la solución de Schrödinger) [18]. Es fácil probar que bajo la aproximación  $\epsilon' = \epsilon + 1$ ;  $|\epsilon' - v_0| \ll 1$  se produce la transformación  $\gamma_1 \rightarrow k_{1S}$  y  $\gamma_2 \rightarrow k_{2S}$ , lo que comprueba el resultado.

Haciendo el análisis para el caso límite  $v_0 \rightarrow 0$  se obtiene:

$$D(\epsilon) \approx \frac{1}{\frac{4\rho^2 v_0^2}{(\epsilon - v_0)^2} + 1} \quad (14)$$

El coeficiente correspondiente a  $v_0 \rightarrow 0$  en el caso Schrödinger es:

$$D(\epsilon) \approx \frac{1}{\frac{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) a^2 v_0^2}{E - v_0} + 1} \quad (15)$$

que como puede verse, tienen correspondencia de forma y (14) pasa a (15) en la forma ya conocida.

De (13) se observa que el valor  $D(\epsilon) = 1$  se alcanza cuando sea  $ak_2 = n\pi$  con  $n = 1, 2, \dots$ , esto es, cuando cabe un número entero de veces la semilongitud de onda en el ancho del pozo. De (7) se ve que  $ak_2 = n\pi$  conduce a:

$$\epsilon + v_0 = \pm \sqrt{1 + \left(\frac{n\pi}{\rho}\right)^2} \quad \text{si } n = 1, 2, \dots \quad (16)$$

cuya importancia veremos posteriormente.

## 5. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

En primer lugar las soluciones obtenidas son válidas para los casos  $v_0 < 1$  y  $v_0 > 1$  en los siguientes rangos de energía:

a) Caso  $v_0 < 1$  :

- El resultado (10) es válido para  $1 - v_0 < \epsilon < 1 + v_0$
- El resultado (13) es válido para  $\epsilon > -1 + v_0$  y  $\epsilon < -1 - v_0$ , asimismo este resultado con  $k_2$  imaginario es válido para  $-1 - v_0 < \epsilon < 1 - v_0$

b) Caso  $v_0 > 1$  :

- El resultado (10) es válido para  $-1 + v_0 < \epsilon < 1 + v_0$
- El resultado (13) es válido para  $\epsilon > 1 + v_0$  y  $\epsilon < -1 - v_0$ , asimismo es válido en  $1 - v_0 < \epsilon < v_0 - 1$ , y con  $k_2$  imaginario es válido para  $-1 - v_0 < \epsilon < 1 - v_0$ .

Del análisis realizado hasta aquí es factible ver que para el caso  $v_0 > 1$  en el rango de energías  $1 - v_0 < \epsilon < v_0 - 1$  se produce el contacto entre las bandas de conducción y valencia del semiconductor. En este caso se tiene una barrera de potencial para el electrón en la banda de valencia con coeficiente de transmisión dado por (13). Este coeficiente es la unidad cuando se cumpla  $ak_2 = n\pi$ , de donde se obtiene (16).

En [13] se obtiene que el espectro energético de la superred es simétrico respecto al valor  $\epsilon=0$  y que los estados de gap nulo aparecen para dicho valor de energía y para los valores de potencial dado por:

$$V_n(k) = \sqrt{(\frac{1}{2}\epsilon_{eff})^2 + p^2 \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} \quad (17)$$

que como se observa es el mismo resultado (16) si en él se hace  $\epsilon=0$  y se pasa a unidades absolutas de energía. De lo anterior se deduce que los estados de gap nulo aparecen como resultado de que las barreras y pozos de potencial tienen coeficiente de transmisión unidad y el electrón se mueve, para esa energía, como una partícula libre.

#### BIBLIOGRAFÍA

- [1] Keldysh, L.W.  
Fiz. Tverdovo Tela 6, 2265 (1962).
- [2] Esaki, L. and R. Tsu  
IBM J. Res. Dev. 14, 61 (1970).
- [3] Brandt, N.B.; E.R. Ivon; S.M. Shudinov and H.D. Yakovlev  
Pisma o Zh. Exper. y Teor. Fiz. 15, 204 (1972).
- [4] Döhler, G.H.  
J. Vac. Sci. Technol. 16, 851 (1979).
- [5] Döhler, G.H. and K. Ploog  
Prog. Crystal Growth Charact. 2, 145 (1979).
- [6] Ramonov, Yu. A.  
Fiz. Tej. Poluprov. 5, 1434 (1971).
- [7] Shik, A. Ya.  
Fiz. Tej. Poluprov. 8, 1841 (1974).
- [8] Maslov, V.N.  
Nieorganich. Mat. 13, 1133 (1977).
- [9] Shik, A. Ya.  
Fiz. Tej. Poluprov. 7, 361 (1973).
- [10] Ando, T. and S. Mori  
J. Phys. Soc. Japan 47, 1518 (1979).
- [11] Gaponov, S.V.; B.M. Luskin and M.N. Salashenko  
Pisma o Zh. Eksper y Teor. Fiz. 5, 516 (1979).
- [12] Dios, M. de; R. Pérez y J. López  
Rev. Cub. de Fis. I, 107 (1981).
- [13] Dios, M. de; R. Pérez  
Rev. Cub. de Fis. I, 81 (1981).
- [14] Tron Lin, S. and J. Smith  
Am. J. Phys. 3, 193 (1980).

[15] Dios, M. de y R. Pérez  
(por publicar).

[16] Smith, R.A.  
Wave Mechanics of Crvstallines Solids. London Chapinan and Hall  
(1961).

[17] Dios, M. de y R. Pérez y J. López  
Evento Científico de la U.H., 1981.

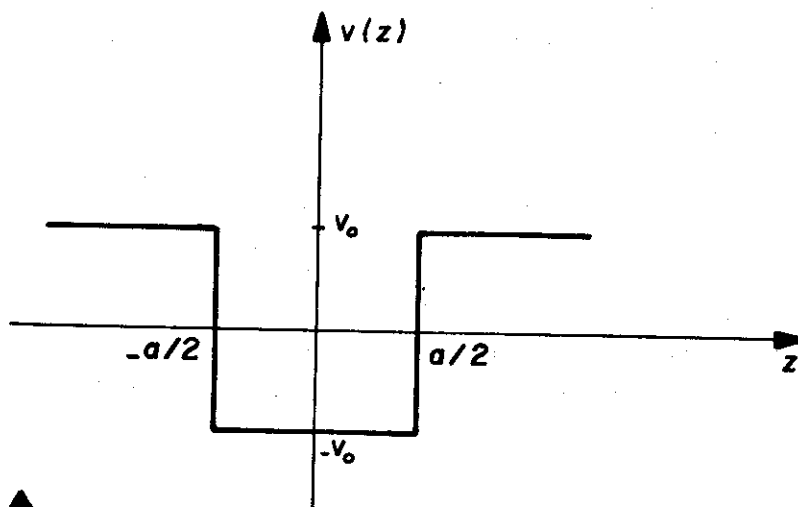


Figura 1: Potencial  $V(z)$  considerado. Ancho  $a$  y altura  $2V_0$ .

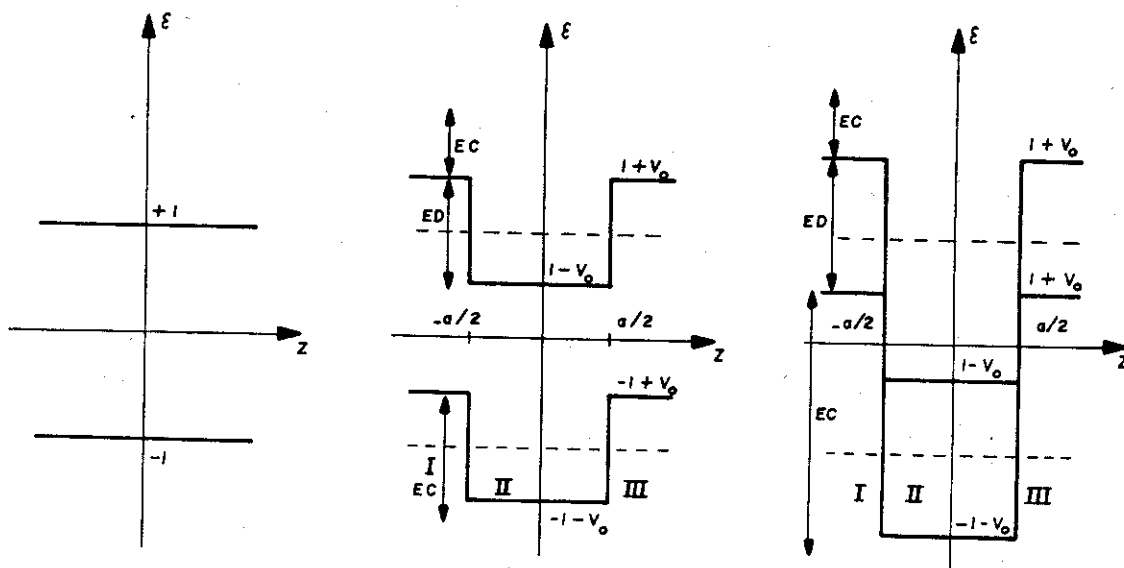


Figura 2.

Esquema cuasi-clásico de las bandas energéticas en unidades relativas de energía. (a) Sin potencial aplicado. (b) Con potencial aplicado y tal que  $V_0 < 1$ , (c) Con potencial aplicado y tal que  $V_0 > 1$ . Nota: Los números romanos en (b) y (c) indican las regiones espaciales en que el potencial divide la dirección  $z$ . Las abreviaturas E.C. y E.D. corresponden a Espectro Continuo y Espectro Discreto respectivamente