

Comunicación corta. Acerca de la obtención de las condiciones de Gap nulo en superredes

M. de Dios Leyva y J.L. Gondar, Dpto. de Física Teórica, Universidad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Utilizando el modelo parabólico de bandas y una distribución rectangular de energía potencial, se ilustra la aplicación del método de la matriz de transferencia al cálculo de las condiciones de gap nulo en una superred binaria. Se resalta la utilidad de este método para discutir el fenómeno de inversión de bandas en superredes.

ABSTRACT

Using a parabolic band model and a rectangular distribution of potential energy we show how to use the transference matrix method to obtain the zero energy gap conditions in a binary superlattice. We also point up the convenience of this method to discuss the band inversion in superlattices.

En el estudio de las condiciones de gap nulo en superredes con potenciales rectangulares se han utilizado dos métodos. Ambos hacen uso de la simetría del potencial. En uno de ellos [1] tales condiciones se establecen por consideraciones geométricas o físicas y, al parecer, su utilización en el caso en que la masa efectiva del electrón dependa de la posición, no garantiza la obtención de todas las condiciones de gap nulo [2]. El segundo método [2], utilizable también en la situación de masa efectiva variable y de energía potencial no necesariamente rectangular, requiere el cálculo de las funciones de onda ψ y sus derivadas en un punto específico de la superred. Tal cálculo no solamente resulta a veces laborioso, sino

que su utilización en el caso en que la función de onda tenga varias componentes (funciones envolventes) [3,4] no es evidente.

El propósito de esta nota consiste en puntualizar que el método de la matriz de transferencia no solamente permite superar las dificultades anteriores (en superredes con potenciales rectangulares), sino que ofrece la posibilidad de analizar sistemáticamente el fenómeno de inversión de bandas en tales superredes [4,5].

Consideremos, por ejemplo, una superred formada por los semiconductores I y II (ver figura 1): el semiconductor I tiene espesor d_1 y masa efectiva m_1 , mientras que el semiconductor II es de espesor d_2 y masa efectiva m_2 . En la aproximación de bandas parabólicas para ambos materiales la ecuación de Schrodinger adopta la forma [2]

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right] + \left[U(z) + \frac{\hbar^2}{2m(z)} k_1^2 \right] \Psi(z) = E\Psi(z) \quad (1)$$

donde E es la energía, $\Psi(z)$ la función de onda (envolvente). $m(z)$ da la dependencia espacial de la masa efectiva y $k_I^2 = k_x^2 + k_y^2$ es el módulo al cuadrado del vector de onda en la dirección perpendicular al eje de la superred; $U(z)$ lo consideraremos nulo en el material I e igual a U_0 en el II. Eligiendo el sistema de coordenadas como se ilustra en la figura 1, las condiciones de contorno serán [2]:

$$\psi \left(\frac{d_1}{2} - \right) = \psi \left(\frac{d_1}{2} + \right) \quad \text{y} \quad \psi' \left(\frac{d_1}{2} - \right) = r\psi' \left(\frac{d_1}{2} + \right) \quad (2)$$

donde $r = \frac{m_1}{m_2}$. Utilizando (2) y el teorema de Bloch, el método de la matriz de transferencia [6] permite escribir la relación de dispersión en las formas equivalentes

$$\sin^2 \frac{1}{2} qd = -rQR \quad (3)$$

$$\cos^2 \frac{1}{2} qd = rPS \quad (4)$$

donde q es el vector de onda a lo largo del eje de la superred,

$$d = d_1 + d_2 \quad \text{y}$$

$$\begin{aligned} P &= \cos \frac{k_1 d_1}{2} \cos \frac{k_2 d_2}{2} - \frac{k_1}{rk_2} \sin \frac{k_1 d_1}{2} \sin \frac{k_2 d_2}{2} \\ Q &= \frac{1}{k_1} \sin \frac{k_1 d_1}{2} \cos \frac{k_2 d_2}{2} + \frac{1}{rk_2} \cos \frac{k_1 d_1}{2} \sin \frac{k_2 d_2}{2} \\ R &= -\frac{k_1}{r} \sin \frac{k_1 d_1}{2} \cos \frac{k_2 d_2}{2} - k_2 \cos \frac{k_1 d_1}{2} \sin \frac{k_2 d_2}{2} \\ S &= \frac{1}{r} \cos \frac{k_1 d_1}{2} \cos \frac{k_2 d_2}{2} - \frac{k_2}{k_1} \sin \frac{k_1 d_1}{2} \sin \frac{k_2 d_2}{2} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{Adem\'as } \hbar^2 k_1^2 = 2m_1 \left[E - \frac{\hbar^2}{2m_1} k_1^2 \right] \text{ y } \hbar^2 k_2^2 = 2m_2 \left[E - U_0 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_2} \right]$$

Las funciones de onda, en la celda primitiva de la superred, se pueden escribir en cualquiera de las dos formas equivalentes:

$$\psi_{nq}(z) = \begin{cases} A_{nq} \left[\cos k_1 z + i \frac{\sin qd}{2rQS} \frac{\sin k_1 z}{k_1} \right]; & |z| \leq \frac{d_1}{2} \\ A_{nq} \left[\left(P + i \frac{\sin qd}{2rs} \right) \cos k_2 \left(z - \frac{d}{2} \right) + \left(R + i \frac{\sin qd}{2rQ} \right) \frac{\sin k_2 \left(z - \frac{d}{2} \right)}{k_2} \right]; & \end{cases} \quad (7)$$

$$\frac{d_1}{2} \leq z \leq d_2 + \frac{d_1}{2}$$

$$\psi_{nq}(z) = \begin{cases} B_{nq} \left[\frac{i \sin qd}{2rPR} \cos k_1 z + \frac{\sin k_1 z}{k_1} \right]; & |z| \leq \frac{d_1}{2} \\ B_{nq} \left[\left(Q + \frac{i \sin qd}{2rR} \right) \cos k_2 \left(z - \frac{d}{2} \right) + \left(S + \frac{i \sin qd}{2rP} \right) \frac{\sin k_2 \left(z - \frac{d}{2} \right)}{k_2} \right]; & \end{cases}$$

$$\frac{d_1}{2} \leq z \leq d_2 + \frac{d_1}{2} \quad (8)$$

donde A_{nq} y B_{nq} son constantes de normalizaci3n. El comportamiento de $\psi(z)$ fuera de esta regi3n viene dado por la condici3n de Bloch. Un an3lisis detallado de las propiedades de la estructura de bandas que resulta de las relaciones anteriores para $r=1$ se realiz3 en [5]. Aqu3 s3lo deseamos puntualizar lo siguiente: los ceros de Q y R (P y S) determinan la posici3n de los niveles de energ3a y la simetr3a de las funciones de onda correspondientes en el centro (frontera) de la zona de Brillouin de la superred; adem3s, aquellos valores de energ3a donde simult3neamente $Q=R=0$ o $P=S=0$ corresponden a niveles doblemente degenerados y, en consecuencia, permiten obtener las condiciones de gap nulo en el centro y la frontera de la zona de Brillouin respectivamente. De estas 3ltimas relaciones se obtienen f3cilmente todas las condiciones reportadas en [2]. Es obvio que si se sigue el movimiento de los ceros de estas funciones, como funci3n de U_0 ; d_1 y d_2 ; alrededor de los estados de gap nulo, se puede estudiar sistem3ticamente la posibilidad de ocurrencia del fen3meno de inversi3n de bandas. Destacaremos, finalmente, que el procedimiento descrito puede extenderse f3cilmente a diferentes condiciones de contorno y modelos de dos o m3s bandas [4].

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Lin. S. y J. Smit
Am. J. Phys. 48, No. 3, 193 (1980).
- [2] Milanovic, V. y D. Tjapkin
Phys. Stat. Sol.(b) 110, 687 (1982).
- [3] Dios, M. de; R. Pérez y J.L. Gondar
Rev. Cub. de Fis. 1. 107 (1980).
- [4] Dios, M. de y R. Pérez
Rev. Cub. de Fis. 1 No. 3, 81 (1981).
- [5] Babakhanyan, E.A. y Yu. V. Kononets
Phys. Stat. Sol.(b) 98, 59 (1980).
- [6] Smith, R.A.
Wave Mechanics of Crystalline Solids. London:
Chapman and Hall, 1961.

Recibido 12 de marzo de 1984.

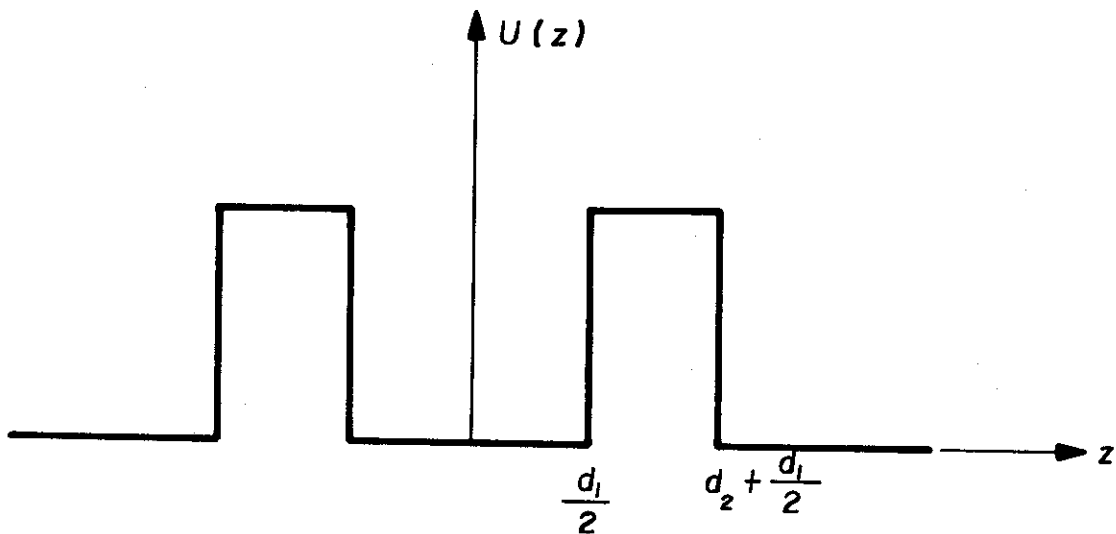


Figura 1. Distribución rectangular de potencial en una superred binaria de período $d=d_1 + d_2$.