Inversión de bandas en superredes inducida por un campo magnético.

J.Sabín del Valle
Departamento de Física Teórica, I.S.P. "E.J.Varona"

M.de Dios Leyva y J.López Gondar
Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se analizan las propiedades de simetría y la posibilidad de inversión de bandas en las superredes GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ en presencia de un campo magnético aplicado a lo largo del eje de la superred. Se demuestra que a medida que la intensidad del campo magnético aumenta ocurre, en general, el fenómeno de inversión de bandas.

1. INTRODUCCIÓN

Al estudio de las superredes se ha dedicado una atención creciente en los últimos años. Sin embargo, hay aspectos de interés que han sido estudiados relativamente poco; uno de ellos es el relacionado con las condiciones de gap energético nulo. En /1/ se hizo un estudio de tales condiciones usando un modelo parabólico de banda en la aproximación de masa efectiva. En /2/ se demostró, usando el modelo de dos bandas de Kane y la aproximación de masa efectiva, que a medida que los parámetros de la superred varían ocurre el fenómeno de inversión de bandas.

Ya en un trabajo anterior /3/ analizamos las posibilidades que brinda el campo magnético de inducir o destruir los estdos de gap nulo.

Nuestro propósito en el presente trabajo es presentar una demostración del fenómeno de inversión de bandas en superredes del tipo I (tal es el caso de GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$) inducido por un campo magnético uniforme. Utilizaremos la aproximación de masa efectiva y un modelo de banda parabólico para los materiales que conforman la superred, el cual es apropiado en este sistema físico.

2. RELACIÓN DE DISPERSIÓN Y FUNCIONES DE ONDA

Consideremos una superred compuesta de dos materiales que tendrán, respectivamente, anchos a y b, masas efectivas m_1 y m_2, y la energía potencial U(z) la supondremos nula en el primer material, e igual a U en el segundo. El campo lo supondremos aplicado a lo largo del eje z de la superred (perpendicular a las interfases). En estas condiciones, el papel que jugaba el módulo al cuadrado de la componente transversal del cuasi-impulso en el caso sin campo lo pasa ahora a jugar el campo magnético a través de la expresión $k_\perp^2 = \frac{2eH}{\hbar c}(n_L + \frac{1}{2})$, donde e es el valor absoluto de la carga del electrón, H el valor del campo magnético, $\hbar$ la constante de Dirac, c la velocidad de la luz y n_L el número cuántico de Landau. Así, la ecuación de movimiento reportada en /1/ quedará para el caso del campo magnético.

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m(z)}\frac{d\varphi(z)}{dz}\right]+\left[U(z)+\frac{\hbar eH}{m(z)c}(n_L+1/2)\right]\varphi(z) = E\,\varphi(z) \tag{1}$$

donde $\varphi(z)$ es la función de onda envolvente y E la energía.

Para el análisis de la simetría de las soluciones de (1) es más cómodo emplear el método de la matriz de transferencia /4/ bajo la condición de que $\varphi(z)$ satisface el teorema de Bloch y que tanto $\varphi(z)$ como $\frac{1}{m(z)}\frac{d\varphi(z)}{dz}$ son funciones continuas. Esto conduce a que la relación de dispersión y la función de onda puedan escribirse de dos formas equivalentes

$$\mathrm{sen}^2(kd/2) = -\,Mq(E)r(E) \tag{2}$$

$$\cos^2(kd/2) = Mp(E)s(E) \tag{3}$$

donde k es el vector de onda a lo largo del eje de la superred; d=a+b;

$$\begin{aligned}
p(E) &= \cos(k_1a/2)\cos(k_2b/2) - (k_1/k_2)M'\,\mathrm{sen}(k_1a/2)\,\mathrm{sen}(k_2b/2)\\
q(E) &= (1/k_1)\,\mathrm{sen}(k_1a/2)\cos(k_2b/2)+(1/k_2)M'\cos(k_1a/2)\,\mathrm{sen}(k_2b/2)\\
r(E) &= -\,k_2\cos(k_1a/2)\,\mathrm{sen}(k_2b/2) - k_1M'\,\mathrm{sen}(k_1a/2)\cos(k_2b/2)\\
s(E) &= -(k_2/k_1)\,\mathrm{sen}(k_1a/2)\,\mathrm{sen}(k_2b/2)+M'\cos(k_1a/2)\cos(k_2b/2)
\end{aligned} \tag{4}$$

siendo $k_1 = \sqrt{\frac{2m_1E}{\hbar^2} - \frac{2eH(n_L+1/2)}{\hbar c}}$; $k_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E-U)}{\hbar^2} - \frac{2eH(n_L+1/2)}{\hbar c}}$;

$M = (m_1/m_2)$ y $M' = M^{-1}$

$$\varphi(z)=\begin{cases} A\left[\cos(k_1 z) + \dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Mqs}\,\dfrac{\mathrm{sen}(k_1 z)}{k_1}\right] & \text{si } |z|\leq a/2 \\ A\left[\left(p+\dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Ms}\right)\cos(k_2(z-d/2))+\left(r+\dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Mq}\right)\dfrac{\mathrm{sen}(k_2(z-d/2))}{k_2}\right] & \\ \qquad \text{si } a/2\leq z\leq b+a/2 & \end{cases} \tag{5}$$

$$\varphi(z)=\begin{cases} B\left[\dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Mrp}\cos(k_1 z) + \dfrac{\mathrm{sen}(k_1 z)}{k_1}\right] & \text{si } |z|\leq a/2 \\ B\left[\left(q+\dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Mr}\right)\cos(k_2(z-d/2))+\left(s+\dfrac{i\,\mathrm{sen}(kd)}{2Mp}\right)\dfrac{\mathrm{sen}(k_2(z-d/2))}{k_2}\right] & \\ \qquad \text{si } a/2\leq z\leq b+a/2 & \end{cases} \tag{6}$$

A y B son constantes de normalización. Las expresiones (5) y (6) determinan las funciones envolventes en una celda simple elemental de la superred. La condición de Bloch determina estas funciones en las otras celdas elementales. (5) es útil cuando $q\neq 0$ y $s\neq 0$, mientras que la relación (6) es útil cuando $r\neq 0$ y $p\neq 0$.

De (2) ó (3) se obtiene que los valores máximo y mínimo de las sub-bandas ocurren en el centro y en la frontera de la zona de Brillouin de la superred. Estos valores vienen determinados por los ceros de $r(E)$ y $q(E)$ para el centro de la zona y por los ceros de $p(E)$ y $s(E)$ para la frontera. De (5) y (6) puede verse que las funciones de onda en $k=0$ son pares si $r(E)=0$ y $q(E)\neq 0$, mientras que son impares si $r(E)\neq 0$ y $q(E)=0$. En $k=\pi/d$ son pares si $s(E)\neq 0$ y $p(E)=0$ e impares si $s(E)=0$ y $p(E)=0$. En estos casos las sub-bandas no se tocan unas con otras. Las sub-bandas se tocan en $k=0$ cuando $r(E)=q(E)=0$ y se tocan en $k=\pi/d$ cuando $p(E)=s(E)=0$. Esto corresponde a la degeneración accidental de las sub-bandas. De estas dos condiciones y de (4) se obtienen las primeras y segundas condiciones de gap nulo, respectivamente

$$ak_1 = n\pi \quad \text{y} \quad bk_2 = m\pi\ ; \tag{7}$$

$$k_1 = Mk_2 \quad \text{y} \quad ak_1 + bk_2 = N\pi\ , \tag{8}$$

donde n, m y N son números enteros mayores que cero, tales que: (a) en el centro de la zona n y m son ambos pares o impares y N es par; (b) en la frontera n y m son de paridad opuesta y N impar. Ya anteriormente /3/ se dieron algunos resultados que se pueden obtener del análisis de (7) y (8), entre otros que el campo magnético al variar puede inducir o destruir estados de gap nulo.

3. INVERSIÓN DE BANDAS

Para demostrar la inversión de bandas de acuerdo con las primeras condiciones (con las segundas se hace análogamente), analicemos el comportamiento de las sub-bandas en la vecindad de los estados de gap nulo, caracterizados por los valores críticos de la energía y el campo magnético que denotaremos E_c y H_c, respectivamente, y que pueden obtenerse de (7). Para el centro de la zona desarrollamos q(E) y r(E) dadas por (4) en potencias de $(E-E_c)$ y $(H-H_c)$ hasta términos de primer orden, obteniéndose:

$$E_1 = E_c + \frac{e\hbar(n_L+1/2)}{c}\left[\frac{M'nc_1b+Mmc_2a}{m_2bnc_1+m_1amc_2}\right](H-H_c) \qquad (9)$$

$$E_2 = E_c + \frac{e\hbar(n_L+1/2)}{c}\left[\frac{c_1am + c_2bn}{c_1amm_1+c_2bnm_2}\right](H-H_c) \qquad (10)$$

donde $c_1 = \dfrac{a^2m_1}{n\pi\hbar^2}$; $c_2 + \dfrac{b^2m_2}{m\pi\hbar^2}$

La expresión (9) da los ceros de r(E) para n,m pares o los ceros de q(E) para n, m impares; (10) da los ceros de r(E) para n, m impares o los ceros de q(E) para n, m pares. De aquí en adelante suponemos que $amm_1 \neq bnm_2$, ya que en el caso contrario no ocurre el fenómeno de inversión de bandas. Si ahora desarrollamos (2) en potencias de $(E-E_c)$, $(H-H_c)$ y k hasta términos de segundo orden, encontramos que

$$E_{\pm} = E_c + A_1(H-H_c) \pm \sqrt{A_2^2\,(H-H_c)^2 + A_3^2\,k^2} \qquad (11)$$

donde

$$A_1 = \frac{\dfrac{e\hbar(n_L+1/2)}{c}\left[\dfrac{c_1^2}{m_1} + \dfrac{c_2^2}{m_2} + \left(M'\dfrac{bn}{am} + M\dfrac{am}{bn}\right)\dfrac{c_1c_2}{2}\left(\dfrac{1}{m_2}+\dfrac{1}{m_2}\right)\right]}{c_1^2 + c_2^2 + \left(M'\dfrac{bn}{am} + M\dfrac{am}{bn}\right)c_1c_2}$$

$$A_2 = \frac{\dfrac{e\hbar(n_L+1/2)}{c}\;\dfrac{c_1c_2}{2}\left(\dfrac{1}{m_1}-\dfrac{1}{m_2}\right)\left[\dfrac{(m_2bn)^2-(m_2am)^2}{m_1amm_2bn}\right]}{c_1^2 + c_2^2 + \left(M'\dfrac{bn}{am} + M\dfrac{am}{bn}\right)c_1c_2}$$

$$A_3 = \frac{d}{\left[c_1^2 + c_2^2 + \left(M'\dfrac{bn}{am} + M\dfrac{am}{bn}\right)c_1\,c_2\right]^{1/2}}$$

En (11) E_+ y E_- determinan las sub-bandas superior e inferior respectivamente en la vecindad de k=0. Como vemos $A_1 > 0$, mientras que A_2 suponiendo que $m_1 \neq m_2$ y que $a\,m\,m_1 \neq b\,n\,m_2$ puede ser positiva o negativa.

Si $m_1<(>)\ m_2$ y $m_2\ b\ n>(<)\ m_1\ a\ m$ entonces $A_2>0$, pero si $m_1<(>)\ m_2$ y $m_2 b\ n<(>)\ m_1\ a\ m$ entonces $A_2<0$. Tomando $k=0$ en (11) obtenemos

$$\text{Si } A_2>0:\ \text{Para } H<H_c \quad E_+=E_2 \text{ y } E_-=E_1 \qquad \text{Para } H>H_c \quad E_+=E_1 \text{ y } E_-=E_2 \tag{12}$$

$$\text{Si } A_2<0:\ \text{Para } H<H_c \quad E_+=E_1 \text{ y } E_-=E_2 \qquad \text{Para } H>H_c \quad E_+=E_2 \text{ y } E_-=E_1 \tag{13}$$

Teniendo presente esto y la conexión de los ceros de r(E) y q(E) con las simetrías de las funciones de onda se llega a la conclusión de que con el aumento del campo magnético las sub-bandas superior e inferior de paridades opuestas se acercan cuando $H < H_c$, se tocan para el valor crítico H_c y se alejan con paridades opuestas a las anteriores para $H > H_c$. Es decir que si antes del toque la superior era par y la inferior impar, después la superior es impar y la inferior par. Este fenómeno es denominado inversión de bandas. Para el borde de la zona de Brillouin se trabaja análogamente. Esta vez con p(E) y s(E) entonces (9) da los ceros de p(E) para n par y m impar o los ceros de s(E) para n impar y m par; (10) da los ceros de p(E) para n impar y m par y los ceros de s(E) para n par y m impar. Desarrollando (3) de la misma forma que se hizo con (2) se obtiene una expresión cuya única diferencia con (11) está en que k^2 aparece ahora sustituido por θ^2, donde $\theta=(k-\pi/2)$. Como este análisis se efectúa en el borde de la zona, al tomar $k=\pi/d$ se tiene $\theta=0$ y se obtienen los resultados (12) y (13). Análogamente por la conexión de los ceros de p(E) y s(E) con las simetrías de las funciones de onda se ve claro que hay también intercambio de las simetrías para el borde de la zona.

4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos en el presente trabajo ofrecen una imagen clara acerca del vínculo existente entre propiedades de simetría de las funciones envolventes y las propiedades específicas del espectro energético en presencia de un campo magnético. Los mismos pueden ser utilizados para el análisis de diferentes magnitudes físicas y, en especial, las propiedades magneto-ópticas de las superredes consideradas.

BIBLIOGRAFÍA

/1/ Milanović, V. y D.Tjapkin
phys. stat. sol.(b) 110, 687 (1982).

/2/ de Dios Leyva, M. y J.López Gondar
phys. stat. sol.(b) 128, No.2 (1985).

/3/ Sabín del Valle, J., L.Gondar, Melquiades de Dios L. y Rolando Pérez A.
Revista Cubana de Física (en proceso de publicación).

/4/ Smith, R.A.
Wave Mechanics of Crystalline Solids (Chapman and Hall, London, 1961).