

Espectro energético y masas ciclotrónicas en pozos cuánticos de GaAlAs-GaAs-GaAlAs

J. Sabin del Valle

Departamento de Física Teórica, Instituto Superior Pedagógico, *Enrique José Varona*, Cuba

M. de Dios Leyva y J. López Gondar

Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Se estudian el espectro energético, las masas efectivas ciclotrónicas y el desplazamiento del mínimo de conductividad negativa en pozos cuánticos simétricos GaAlAs-GaAs-GaAlAs, sometidos a la acción de un campo magnético perpendicular a las interfases. El análisis se lleva a cabo en los marcos de la aproximación de las funciones envolventes y usando los modelos parabólico (P) y no-parabólico (NP) de bandas.

Los cálculos numéricos dan como resultado que las masas efectivas ciclotrónicas bidimensionales (m_{2D}) obtenidas se encuentran entre las masas efectivas de los materiales constituyentes. Se realiza finalmente una comparación entre los resultados teóricos aquí obtenidos y los valores experimentales reportados recientemente en el estudio de las características $I - V$ y $dI/dV - V$ para el efecto túnel magneto-resonante en estas estructuras.

ABSTRACT

Energy spectrum, cyclotron effective masses and the shift of the negative conductivity minimum are studied in symmetric GaAlAs-GaAs-GaAlAs quantum

wells, placed under the action of a magnetic field perpendicular to the interfaces. The analysis is carried out in the framework of the envelope-function approximation and using the parabolic and nonparabolic band models. According to the numerical results accomplished the cyclotron two-dimensional effective masses are between the effective masses of the host materials. Finally, a comparison is made between the theoretical results obtained here and the experimental values, recently reported in the study of the I - V and dI/dV - V characteristics for the resonant magnetotunneling effect in these structures.

I. INTRODUCCIÓN

En una reciente comunicación [1] se establecieron algunas propiedades de las m_{2D} del GaAs en pozos cuánticos simétricos $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ (B-A-B), sometidos a la acción de un campo magnético intenso H perpendicular a las interfases, utilizando el formalismo de las funciones envolventes en la aproximación p. de bandas.

En el presente trabajo, siguiendo el mismo formalismo, se considera también la aproximación NP de bandas. En este caso los efectos de no-parabolicidad serán incorporados utilizando un hamiltoniano análogo al relativista de Dirac.

Todo lo anterior está motivado por la importancia que tienen los valores de m_{2D} cuando se analizan las características I-V y dI/dV-V en esos sistemas [2].

Los objetivos de este trabajo son: encontrar los niveles de energía en los pozos cuánticos; analizar las características de las m_{2D} ; estudiar el desplazamiento del mínimo de conductividad negativa con el aumento del campo magnético y hacer una comparación de los valores obtenidos con los resultados experimentales reportados en [2].

II. ECUACIONES DEL MOVIMIENTO Y EXPRESIONES PARA LOS NIVELES DE ENERGÍA

Consideremos el pozo cuántico simétrico no dopado B-A-B en presencia de H a lo largo de la dirección de crecimiento (z).

En la aproximación P la ecuación del movimiento es [3]:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\phi}{dz} (z) \right] + \left[U(z) + \frac{eH\hbar}{cm(z)} (n+1/2) \right] \phi(z) = E \phi(z) \quad (1)$$

donde $m(z)$ es la masa efectiva (dependiente de z) que toma los valores m_A y m_B en los materiales A y B respectivamente; $U(z)$ la energía potencial con valores 0 en A y U_0 en B; $\phi(z)$ la función envolvente; E la energía; e el valor absoluto de la carga del electrón; \hbar la constante de Dirac; c la velocidad de la luz y n el número cuántico de Landau.

Siguiendo el método señalado en [1], la ecuación para los niveles de energía en el pozo cuántico es:

$$\tan(ak_A/2) = \begin{cases} \frac{k_B}{r_{21} k_A} & \text{para estados pares} \\ -\frac{r_{21} k_A}{k_B} & \text{para estados impares} \end{cases} \quad (2)$$

donde $k_A = \sqrt{(2 m_A / \hbar^2) [E - e H \hbar (n + 1/2) / c m_A]}$;

$k_B = \sqrt{(2 m_B / \hbar^2) [U_0 + e H \hbar (n + 1/2) / c m_B - E]}$; $r_{21} = m_B / m_A$ y a es el ancho del pozo.

Mientras que en la aproximación NP, la ecuación del movimiento es [4]:

$$\left\{ P \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \hat{K} + P \begin{bmatrix} 0 & iI \\ -iI & 0 \end{bmatrix} \hat{k}_z + Eg(z) / 2 \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} + U(z) I_4 \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3)$$

donde $\hat{K} = \begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix} (\hat{k}_x - \alpha y) + \begin{bmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{bmatrix} \hat{k}_y$; $\alpha = eH/\hbar c$; $\sigma_{x,y}$ son las matrices

de Pauli; I e I_4 son las matrices unidad 2x2 y 4x4 respectivamente; $\psi(\vec{r})$ una matriz columna constituida por cuatro funciones envolventes; P el parámetro de Kane, que consideraremos el mismo en ambos materiales e igual al valor medio entre P_A y P_B ($P_{A,B} = \sqrt{\hbar^2 E_{A,B} / 2m_{A,B}}$); $Eg(z)$ una función que toma los valores E_A y E_B en A y B respectivamente y $\hat{k}_{x,y,z} = -i\hbar/\partial_{x,y,z}$

La ecuación para los niveles de energía puede obtenerse directamente de la ley de dispersión reportada en [4], tomando el límite $b \rightarrow \infty$ y efectuando la sustitución $K^2 \rightarrow K_n^2 = 2eH(n+1)/\hbar c$. Eligiendo como origen de energía el fondo de la banda de conducción de A queda:

$$\tan(ak_A) = \frac{2P^2 \tilde{k}_A \tilde{k}_B}{E(E-U_0+E_B) + (E-U_0)(E+E_A) - 2P^2 K_n^2} \quad (4)$$

donde $\tilde{k}_A = 1/P \sqrt{E(E+E_A) - P^2 K_n^2}$ y $\tilde{k}_B = 1/P \sqrt{(U_0-E)(E-U_0+E_B) + P^2 K_n^2}$

III. CONDUCTIVIDAD NEGATIVA

En los experimentos de [2] se disponía de electrodos n^+ -GaAs a cada lado de la estructura B-A-B, entre los cuales se aplicaba una diferencia de potencial. Por la simetría del sistema la caída de potencial V entre el centro del pozo y un electrodo es la mitad de la caída de potencial entre electrodos. En estos sistemas se conserva la energía y la componente transversal del cuasimomento (o el número cuántico de Landau en presencia de campo magnético).

Si bajo la acción de un campo magnético fijo, V se hace crecer, se llega a un valor crítico de la caída de potencial ($V_c(H)$) en que el estado básico de los niveles de Landau en el pozo, coincide con el fondo de la banda de conducción del electrodo. Cuando esto ocurre, para un pequeño incremento de V la conservación de n evitará el efecto túnel y la corriente disminuye abruptamente, dando lugar a la conductividad negativa, con un mínimo en la característica $dI/dV \sim -V$.

Bajo las anteriores consideraciones se puede encontrar una expresión para $V_c(H)$

$$E(0) - eV_c(H) = \gamma e H h / c (1/m_{3D} - 1/m_{2D}) \quad (5)$$

donde $E(0)$ es el nivel de energía del estado básico en el pozo con $H=0$; m_{3D} es la masa efectiva tridimensional en el electrodo; $\gamma=1/2$ para la aproximación P y $\gamma=1$ para la NP.

De (5) es fácil ver que si $H=0$ ó $m_{2D}=m_{3D}$ entonces $E(0) = eV_c(0)$, donde $V_c(0)$ es el valor del potencial crítico sin campo magnético aplicado. Si $H \neq 0$ y $m_{2D} \neq m_{3D}$ entonces $V_c(H) > V_c(0)$ ($V_c(H) < V_c(0)$) cuando $m_{2D} < m_{3D}$ ($m_{2D} > m_{3D}$).

IV. RESULTADOS NUMÉRICOS Y DISCUSIÓN

En los experimentos llevados a cabo en [2] se trabajó con muestras con concentración de Al, $x=0.4$, y se estudiaron en ausencia de campo magnético dos pozos; uno con $a=40 \text{ \AA}$ y un solo nivel de energía de 0.128 eV , el otro con $a=60 \text{ \AA}$ y niveles de energía de 0.056 y 0.217 eV .

Para los cálculos numéricos aquí realizados tomamos $m_A=0.066m_0$ (m_0 es la masa del electrón libre), $m_B=0.101m_0$ y $x=0.4$ que son los mismos valores considerados en [2], $a=20, 30, 40$ y 60 \AA . Usamos $E_A=1.518 \text{ eV}$ y $E_B=2.009 \text{ eV}$ que se tomaron según [5] y $P=9.0331 \text{ eV-\AA}$ es el valor medio entre P_A y P_B . U_0 se estimó de acuerdo con diferentes reglas: $U_0=0.417 \text{ eV}$ (Dingle[6]); 0.319 eV (Wang[7]); 0.280 eV (Miller[8]).

En la tabla 1 se muestran los niveles de energía $E_i(0)$ de los estados cuánticos en el pozo con $H=0$, calculados para diferentes anchos según los dos modelos. Una comparación de los niveles de energía calculados para los pozos de 40 y 60 \AA con los resultados experimentales de [2] muestra que todas las reglas dan valores aceptables, pero la de Dingle en el caso $a=40 \text{ \AA}$ y la de Miller para $a=60 \text{ \AA}$ dan los $E_i(0)$ más cercanos a los experimentales. También se observa que para todas las reglas, con el modelo NP, se obtienen valores más próximos a los de [2] para el nivel de energía en el pozo con $a=40 \text{ \AA}$ y del nivel excitado $(-e)$ con $a=60 \text{ \AA}$ (donde el resultado del cálculo con la regla de Miller coincide con el experimental reportado en [2]).

Tabla 1. Niveles de energía en eV para la aproximación parabólica (P) y no-parabólica (NP) en ausencia de campo magnético para diferentes anchos (a) del pozo Al_{0.4}Ga_{0.6}As-GaAs-Al_{0.4}Ga_{0.6}As. En el caso del pozo de 60 Å se incluyen los niveles básicos (b) y el excitado (e).

a (Å)	Dingle		Wang		Miller	
	P	NP	P	NP	P	NP
20	0.230	0.235	0.193	0.197	0.177	0.180
30	0.162	0.166	0.140	0.144	0.131	0.133
40	0.119	0.122	0.106	0.108	0.099	0.101
60(b)	0.072	0.073	0.065	0.066	0.062	0.063
60(e)	0.270	0.255	0.250	0.230	0.235	0.217

Utilizando ambos modelos, para cada regla, y distintos anchos con n variando de 0 a 3, se hallaron los niveles de energía $E_{ni}(H)$ con campos entre 4.8 y 22 T (intervalo en que se trabajó en [2]). Las m_{2D} se calcularon por la relación [1]:

$$m_{2D} = \frac{eHh(n + \gamma)}{c[E_{ni}(H) - E_1(0)]} \quad (6)$$

En la expresión (6) para $E_1(0)$ se usaron los valores de la tabla 1.

La figura 1 muestra los valores de m_{2D} para distintos valores del campo magnético en el caso de la regla de Wang para ambos modelos, $a=40$ Å y n variando de 0 a 3. En la aproximación P los resultados para distintos n se superponen entre sí, dando origen prácticamente, a una recta horizontal la cual se muestra en dicha figura por el símbolo p. Esto evidencia que según este modelo, m_{2D} prácticamente no depende de H ni de n, cuestión discutida analíticamente en [1]. Por otra parte, en la aproximación NP hay una débil dependencia con H y con n, observándose divergencia de las líneas a medida que el campo es más intenso.

La figura 2 muestra también los valores de m_{2D} para distintos valores del campo magnético, en este caso para las tres reglas, $n=0$ y 3, $a=40$ Å y los dos modelos. Un análisis de esta figura evidencia que m_{2D} depende débilmente de la regla considerada.

Si se usan distintos anchos los resultados son cualitativamente los mismos que los de las figuras 1 y 2. Sin embargo, desde un punto de vista cuantitativamente, para ambos modelos y todas las reglas, m_{2D} aumenta a medida que el ancho del pozo disminuye. Esto último se puede observar en la figura 3, en que sólo hemos incluido, para simplificarla, algunos resultados para $n=0$ y la regla de Wang.

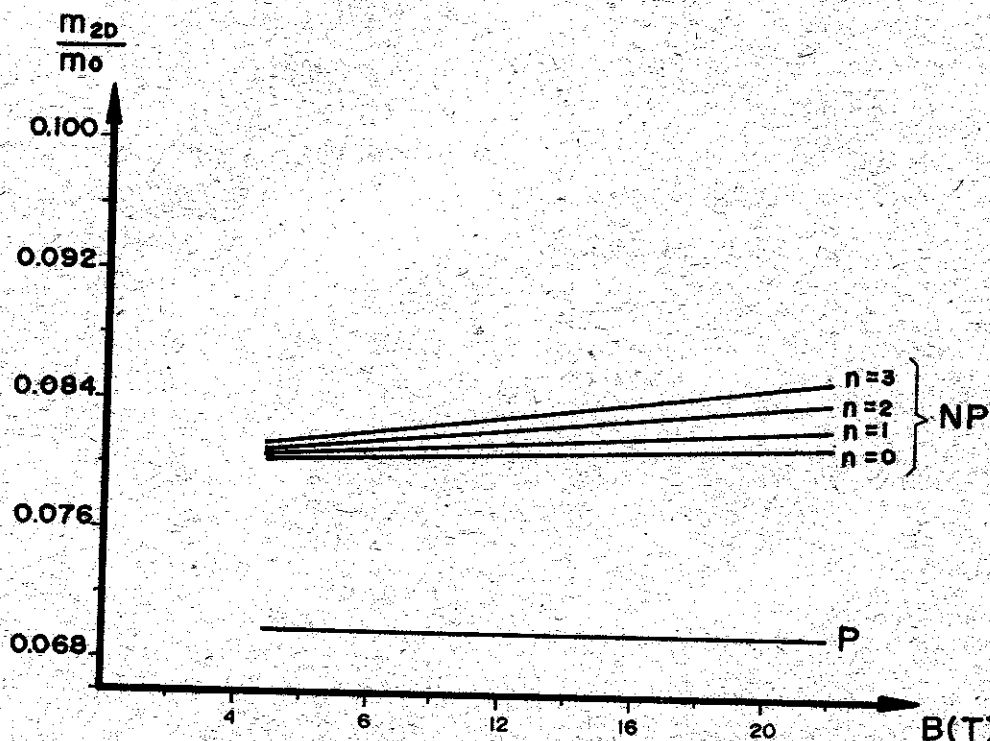


Figura 1. m_{2D}/m_0 como función del campo magnético aplicado perpendicularmente a las interfaces para un pozo cuántico de $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As-GaAs-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ con ancho de 40 Å. Se reportan los resultados según la regla de Wang para los 4 primeros niveles de Landau ($n=0, \dots, 3$) utilizando el modelo parabólico (P) y el no-parabólico (NP) de bandas.

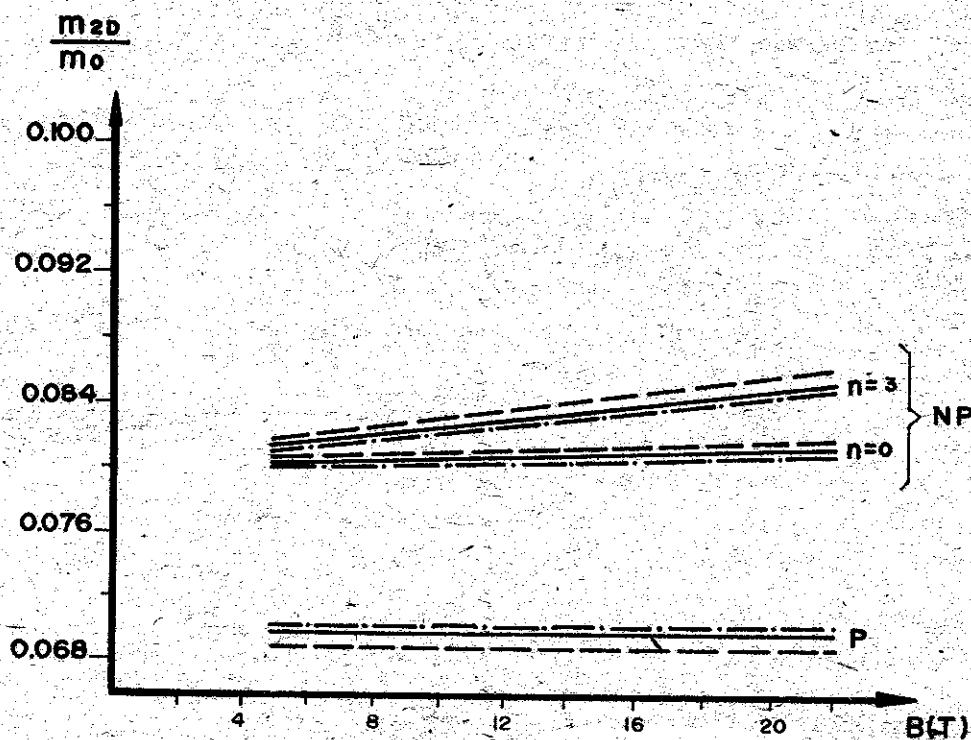


Figura 2. m_{2D}/m_0 para iguales características del campo y el mismo pozo que en la figura 1. Se incluyen los resultados para el primer y cuarto nivel de Landau utilizando las reglas de Dingle (—) y Miller (---).

Es de destacar que las m_{2D} calculadas se encuentran entre m_A y m_B en todos los casos.

Por otro lado, en [2] se obtuvo una expresión para los mínimos de la característica $dI/dV - V$ y se determinó que para el pozo con $a=40 \text{ \AA}$, $m_{2D}/m_0=0.063\pm 0.002$. Si se considera (5) para $m_{2D}=0.063m_0$ y $\gamma=1/2$, los valores $E(0)-eV_c(H)$ son negativos, tomando para $H=22 \text{ T}$ el valor $-9.19 \times 10^{-4} \text{ eV}$. Es decir, que de acuerdo con lo discutido en la sección III la caída de potencial crítico con campo magnético aplicado se desplaza hacia valores mayores con respecto al que se tiene en ausencia de H. Esto contrasta con el desplazamiento del mínimo de conductividad negativa obtenido a través de nuestros cálculos, ya que en todos los casos obtuvimos valores de m_{2D} mayores que m_{3D} . Si esto ocurre, entonces $E(0)-eV_c(H) > 0$, o sea $V_c(H) < V_c(0)$.

En la figura 4 se presentan los resultados del cálculo numérico de $E(0)-eV_c(H)$ en función del campo magnético, para el pozo en $a=40 \text{ \AA}$. Se observa que $E(0)-eV_c(H)$ es sustancialmente menor para el modelo P que para el NP.

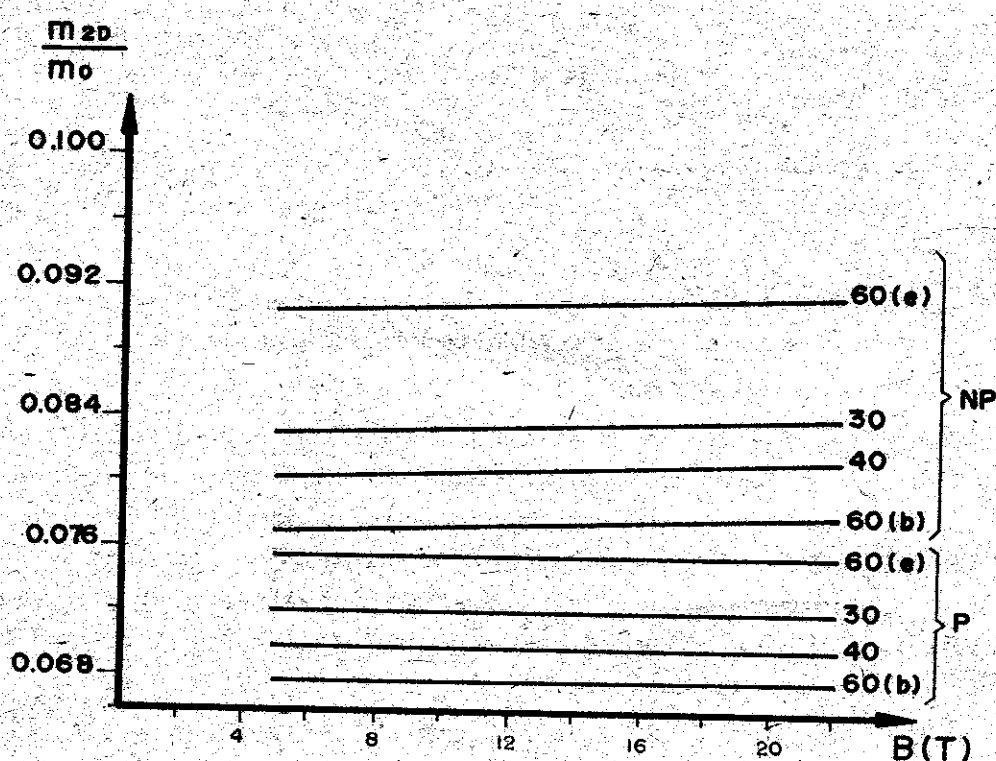


Figura 3. m_{2D}/m_0 para las mismas características del campo de las figuras anteriores y pozos de $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}-\text{GaAs}-\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ pero distintos anchos ($a=30, 40$ y 60 \AA) según la regla de Wang, $n=0$.

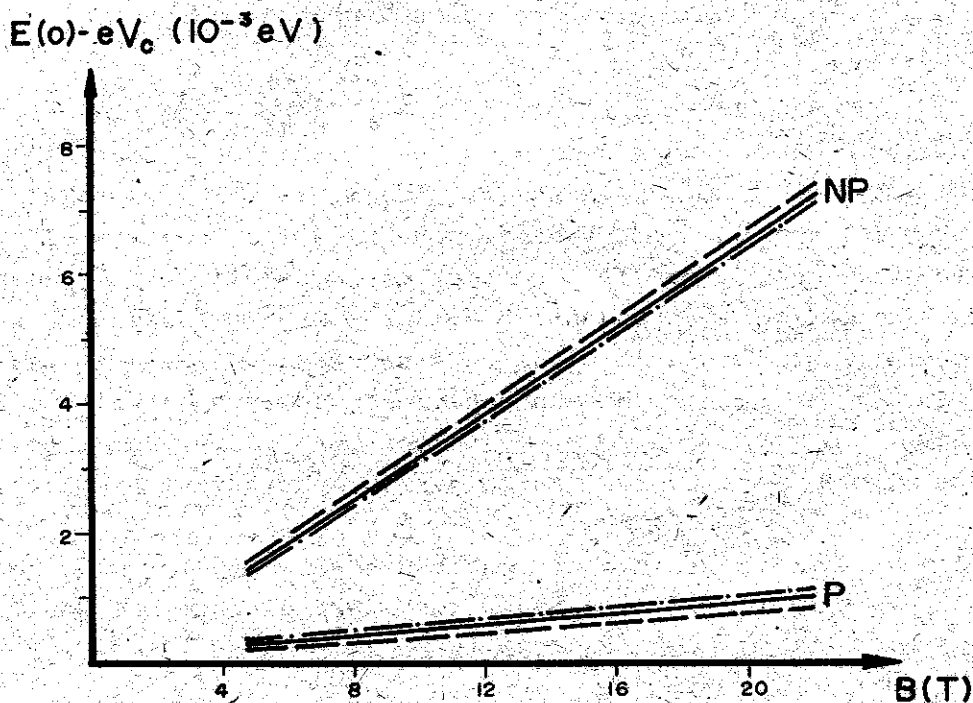


Figura 4. Valores de $E(0) - eV_c$ como función del campo magnético usando la expresión (5) del texto para el pozo $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}-\text{GaAs}-\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ de 40 Å de ancho según las reglas de Dingle (---), Wang (—) y Miller (-.-).

V. CONCLUSIONES

Usando los modelos P y NP de bandas se han realizado cálculos numéricos para efectuar la comparación con los resultados de experimentos recientes en la observación del efecto tunel magneto resonante [2].

Se puede destacar, que los valores de los niveles de energía de los estados cuánticos en el pozo con $H=0$ calculados, se encuentran cercanos a los reportados en [2]. Por otro lado, dentro de los marcos de los modelos utilizados las m_{2D} calculadas están entre los valores de las masas efectivas de los materiales constituyentes y consecuentemente el valor calculado del potencial crítico en presencia de H es menor que el potencial crítico para $H=0$. Esto último discrepa de los resultados experimentales de [2] que reporta m_{2D} menor que la masa efectiva tridimensional del GaAs (una caída de potencial crítico en presencia de H mayor que cuando $H=0$). La solución de la discrepancia en los valores de m_{2D} estaría aparejada con la explicación del desplazamiento experimental del mínimo de conductividad negativa. Estudios en cuanto a posibles mecanismos que provoquen una reducción de la masa ciclotrónica bidimensional en estos sistemas, se están realizando actualmente.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 Sabín del Valle, J., M. de Dios Leyva y J. López Gondar
Rev. Cub. de Física. En vías de publicación.
- 2 Méndez, E. E., L. Esaki y W. I. Wang
Phys. Rev. B 33, 2893 (1986).
- 3 Dios Leyva, M. de, J. Sabín del Valle y J. López Gondar
Phys. stat. sol. (b) 134, 615 (1986).
- 4 Dios Leyva, M. de, R. P. Alvarez y J. L. Gondar
Phys. stat. sol. (b) 125, 221 (1984).
- 5 Pearah, P. J., W. T. Masselink, J. Klem, T. Hederson y H. Morkoc
Phys. Rev. B 32, 3857 (1985).
- 6 Dingle, R.
Festkörperprobleme XV (Advances in Solid State Physics), H.J. Queisser,
ed. (Pergamon-Vieweg, Braunschweig, 1975) Vol. 15, p. 21.
- 7 Wang, W., E. E. Méndez y F. Stern
Appl. Phys. Lett. 45, 639 (1984).
- 8 Miller, R. C., D. C. Kleinman y A. C. Gossard
Phys. Rev. B. 29, 7085 (1984).