

## NIVELES DE ENERGIA DE UN POZO CUANTICO DELTA DOPADO

L. M. Gaggero Sager (1), R. Pérez Alvarez (1,2) y Ch. B. Sommers (2)

(1) Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana, Cuba

(2) Laboratoire de Physique des Solides, Bat. 510, Centre d'Orsay, Université Paris Sud, Orsay, Francia.

### RESUMEN

Se presentan cálculos cuasiclásicos y en la aproximación de Thomas Fermi de los niveles de energía electrónicos de un pozo cuántico obtenido por dopamiento con impurezas donoras de una capa de un semiconductor intrínseco. Se discute la solución de la ecuación de Poisson para este sistema. Se calculan por primera vez estos niveles en estas aproximaciones para todas las concentraciones de interés práctico. Se discute la información que se puede obtener de la aproximación cuasiclásica en la suposición de que la de Thomas Fermi es correcta.

### ABSTRACT

The calculation of the energy levels of a delta doping quantum well is presented using the quasiclassical and Thomas Fermi approximations. The solutions of the Poisson equation in this system is considered. The energy levels as a function of the impurity concentration are given for the first time using in the calculation the above mentioned approximations in the range of concentration of practical interest. Supposing the Thomas Fermi

approximation is correct the discussion of what to expect for the quasiclassical is given.

## 1. INTRODUCCIÓN

A partir de los inicios de la década del 70 y teniendo como premisa básica la aparición de nuevos métodos de crecimiento de capas ultrafinas de semiconductores, ha tenido un vertiginoso desarrollo el estudio de sistemas de baja dimensionalidad sobre la base de semiconductores. Recientemente, ha aparecido una nueva clase de sistemas artificiales de esta naturaleza, creados por el dopamiento de una, o unas pocas capas atómicas [1-16]. El caso modelo (y prácticamente el único estudiado hasta el momento) es el de GaAs con una capa dopada con Si.

En [1-16] se reportan el crecimiento y algunas propiedades de transporte en este sistema. También se reportan cálculos de los niveles energéticos de electrones de conducción en el marco de diferentes modelos entre los cuales resaltan: 1) la aproximación cuasiclásica tomando el potencial como una poligonal [4], 2) la aproximación Thomas Fermi (TF) [15]. La primera de estas sólo puede ser considerada como una primera aproximación al asunto y debe discutirse qué se puede obtener de ella. La segunda sólo fue aplicada al caso en que la concentración de impurezas es de  $5,13 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , caso en el cual coincidió muy bien con cálculos autoconsistentes de Hartree. Aún cuando se considere correcto este enfoque, resta por calcular para otras concentraciones.

Es de resaltar el interés que tiene profundizar en los métodos de cálculo de los niveles electrónicos en estos sistemas, pues al tener varios niveles ocupados se hace prácticamente imprescindible un cálculo autoconsistente, o al menos que se modele convenientemente el potencial.

En el presente trabajo abordamos el estudio de la estructura electrónica del GaAs con una capa atómica dopada de impurezas donoras. En esta dirección los objetivos específicos son:

- a) Describir el potencial electrostático generado por las impurezas, sus formas asintóticas y otras.
- b) Plantear el problema de los estados confinados en el marco de la Teoría de Masa Efectiva a una banda (la de conducción del GaAs).
- c) Estudiar la solución del problema de los estados confinados más bajos con la aproximación cuasiclásica sin tomar el potencial poligonal.
- d) Calcular los niveles de energía con la aproximación TF para todo el rango de concentraciones de interés.

## 2. MODELO

Usaremos un modelo de función envolvente a una sola banda y masa efectiva no dependiente de la posición [17], es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + V(z) F(z) = \epsilon F(z) \quad (1)$$

donde  $m$  es la masa efectiva,  $\hbar$  es la constante de Planck,  $z$  la dirección de crecimiento y  $F(z)$  la envolvente asociada a la banda en cuestión. El autovalor  $\epsilon$  está relacionado con el borde de la banda  $E_0$ , la energía tridimensional  $E$  y el vector bidimensional de onda  $\vec{k}$  del movimiento paralelo a las capas dopadas a través de la relación

$$\epsilon = E - E_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2)$$

El potencial puede ser considerado como función sólo de  $z$  si la densidad de impurezas es suficientemente alta, es decir si  $a_0 > n_{2d}^{-1/2}$ , donde  $a_0$  es el radio de Bohr efectivo. Si  $a_0 \approx 100 \text{ \AA}$ , entonces  $n_{2d} > 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . En los casos vistos experimentalmente  $n_{2d}$  está entre  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  [18].

El análisis de la ecuación de Poisson para este sistema conduce a las siguientes consideraciones [19]:

- El potencial es simétrico. Los estados acotados tendrán, entonces, paridad definida respecto de la capa de impurezas.
- El potencial tiene una parte electrostática y otra proveniente de efectos de muchos cuerpos.
- En cuanto a la parte electrostática podemos separar la contribución de las cargas fijas y las móviles. Sus formas asintóticas en  $\pm \infty$  se anulan. En un entorno del origen domina la contribución de la carga fija.
- Lo anterior se expresa matemáticamente como que el potencial electrostático tiene el siguiente desarrollo alrededor del origen:

$$V(z) = V_0 + F|z| + \beta z^2 + \gamma z^4 + \dots \quad (3)$$

donde  $V_0$  es el valor del potencial en el origen y

$$F = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} n_{2d} \quad (4)$$

- Los coeficientes  $\beta$ ,  $\gamma$ , y otros se pueden escribir como derivadas sucesivas de la densidad de carga móvil, y por lo tanto, en términos de las envolventes y sus primeras derivadas. Así, por ejemplo:

$$\beta = -\frac{2\pi es}{\epsilon_r} \rho_s(0) \quad (5)$$

$$\gamma = -\frac{1}{6} \frac{\pi es}{\epsilon_r} \left. \frac{d^2 \rho_s(z)}{dz^2} \right|_{z=0} \quad (6)$$

$s$  es el signo de la carga de los portadores,  $e$  es la carga del positrón,  $\epsilon_r$  es la constante dieléctrica relativa del material,  $\rho_s$  es la densidad volumétrica de carga.

f. Para el potencial son válidas las siguientes expresiones:

$$V(z) = V_0 + \frac{2\pi e^2 \eta}{\epsilon_r} n_{2d} |z| + \frac{4\pi e \eta}{\epsilon_r} \int_0^z d\xi \int_0^\xi d\tau \rho_S(\tau) \quad (7)$$

$$V(z) = V_0 + \frac{4\pi e \eta}{\epsilon_r} \int_0^\infty d\xi \int_\xi^\infty d\tau \rho_S(\tau) - \frac{4\pi e \eta}{\epsilon_r} \int_z^\infty d\xi \int_\xi^\infty d\tau \rho_S(\tau) \quad (8)$$

De la primera se aprecia fácilmente la forma lineal del potencial en un entorno del origen. La segunda es más útil para analizar el comportamiento en  $\pm \infty$ .

Estas consideraciones nos permiten elaborar un modelo con potencial lineal ( $V(z)=V_0+F|z|$ ) o parabólico ( $V(z)=V_0+F|z|+\beta z^2$ ) que utilizaremos en el marco de la aproximación cuasiclásica.

Como expresamos en la Introducción, el otro enfoque que nos interesa es el del modelo TF elaborado por Ioratti [15] para estos sistemas. Según su trabajo, el potencial total ahora tendrá efectos de muchos cuerpos y se podrá expresar analíticamente como

$$V(z) = - \frac{\alpha^2}{(\alpha|x|+x_0)^4} \quad (9)$$

donde  $\alpha = 2/15\pi$  y  $x_0 = (\alpha^3/\pi n_{2d})^{1/5}$ . Note que  $V$  dado por (9) es el potencial expresado en unidades del Rydberg efectivo, mientras que  $x$  está en unidades del radio de Bohr efectivo; en el GaAs estos tienen, respectivamente, los valores 5.83 meV y 98.7 Å.

Consideraremos que la temperatura es igual al cero absoluto. Esto nos permite fácilmente llegar a las siguientes expresiones para la densidad de carga y el nivel de Fermi en términos de los autovalores y autofunciones de nuestro problema:

$$\rho_S(z) = - \frac{2em}{2\pi\hbar^2} \sum_{i=1}^{\infty} |F_i(z)|^2 (E_f - \epsilon_i) \theta(E_f - \epsilon_i) \quad (10)$$

$$E_f = \frac{1}{p} \sum_{i=0}^{p-1} \epsilon_i + \frac{2\pi\hbar^2}{2mp} n_{2d} \quad (11)$$

donde  $p$  es el número de minibandas ocupadas.

### 3. APROXIMACIÓN CUASICLÁSICA

Trabajaremos en la aproximación cuasiclásica de primer orden haciendo uso de la regla de Bohr-Sommerfeld [20].

Para el potencial lineal se obtiene, entonces:

$$\epsilon = (3\pi/4)^{2/3} (\hbar^2 F^2 / (2m))^{1/3} (n+1/2)^{2/3} \quad (12)$$

Para el potencial parabólico el resultado es:

$$(\epsilon/\epsilon_t)^{3/2} = 1 / \left[ 1 + 3 \sum_{j=1}^* \delta^j (\epsilon/\epsilon_t)^j / ((2j+1)(2j+3)) \right] \quad (13)$$

$\epsilon_t$  son los niveles de energía del potencial lineal (pozo triangular) y  $\delta = 4\beta\epsilon_t/F^2$ . En estas expresiones las energías están referidas al fondo del pozo.

Utilizando las fórmulas conocidas [20] para las funciones de ondas cuasiclásicas y sus derivadas, se pueden evaluar estas magnitudes en el origen y obtener así expresiones para  $\beta$ ,  $\gamma$ .

Sustituida la correspondiente a  $\beta$  en la fórmula anterior, esta expresión nos permite tener una ecuación para los niveles de energía del potencial parabólico. Dentro del marco de la aproximación cuasiclásica y de la clase de potenciales parabólicos, los niveles así obtenidos son autoconsistentes.

En [19] se presenta un análisis de la validez de la aproximación cuasiclásica en estos sistemas y modelos.

#### 4. APROXIMACION DE THOMAS FERMI

Para calcular los niveles de energía en esta aproximación hay que acudir a métodos numéricos. En nuestro caso usamos el formalismo de la matriz de transferencia [21]. Para calcularla empleamos una rutina especial de solución de ecuaciones diferenciales que tiene en cuenta la posibilidad de que el problema sea de tipo *stiff* [22]. Este detalle es importante pues nuestro potencial hace que la ecuación de Schrödinger tenga esta característica, lo cual dificulta su solución por cualquier vía.

#### 5. CONCLUSIONES

En las Figuras 1, 2 y 3 se presentan respectivamente los resultados para el estado básico, el primer estado excitado y el nivel de Fermi en función de la concentración de impurezas. Para los cálculos empleamos valores reconocidos de los parámetros del GaAs ( $m=0.067 m_0$ ,  $\epsilon_r=12.5$ ). Las cuatro curvas de cada gráfico corresponden a los siguientes casos:

- a) Aproximación cuasiclásica con potencial lineal.
- b) Aproximación cuasiclásica con potencial parabólico.
- c) Aproximación cuasiclásica con potencial poligonal [4]
- d) Aproximación TF [15]. En este último caso,  $E_f$  coincide con el borde superior del pozo.

Supondremos que la aproximación TF da correctamente los niveles de energía autoconsistentes. Lo anterior fue mostrado por Ioratti para la concentración  $5.13 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Dado el hecho de que el rango de concentraciones de interés es relativamente estrecho, y está alrededor de este valor, es presumible que TF funcionará correctamente en todo este intervalo de concentraciones. En cualquier caso, está en marcha el cálculo autoconsistente para todas las concentraciones de interés.

Es de notar que nuestros resultados cuasiclásicos coinciden en una buena medida con los de [4] a pesar de que se manobra de manera distinta con el potencial que se usa en la aproximación cuasiclásica. Es difícil discernir cuál de estas variantes es mejor pues en [4] no se dan detalles; no obstante, podemos decir que nuestra opción es implementable en una PC y que los tiempos de cálculo son de sólo algunos minutos. Una dificultad de nuestra variante es que no permite calcular los niveles por encima del primer nivel excitado, lo que hace que dé un valor más inexacto del nivel de Fermi (ver fórmula (11)).

Las variaciones del potencial tan rápidas cerca del borde del pozo hacen que sea necesario conocerlo de manera precisa para tener buenos valores de los niveles cercanos a este borde. Esto explica que distintos trabajos reporten distintos números de niveles ocupados con electrones. La solución de esta dificultad debe lograrse con cálculos autoconsistentes. De todas formas, la cantidad de electrones en estos niveles es pequeña, por lo que no ha de ser determinante su cálculo exacto para describir correctamente la mayor parte de las magnitudes físicas observables.

En general se aprecia de los gráficos que la Aproximación Cuasiclásica mejora en la medida en que empleamos potenciales más elaborados. Es de esperar entonces que se pueda usar exitosamente en otros sistemas similares como, por ejemplo, el  $\delta$ -FET [4].

Agradecemos esclarecedoras y estimulantes discusiones con los colegas F. García Moliner, Víctor Velasco y L. Chico, del CSIC, España; así como a L. Alvarez, del ICIMAF de la ACC, por proveernos del programa de solución de ecuaciones diferenciales.

### Nivel básico vs Concentración

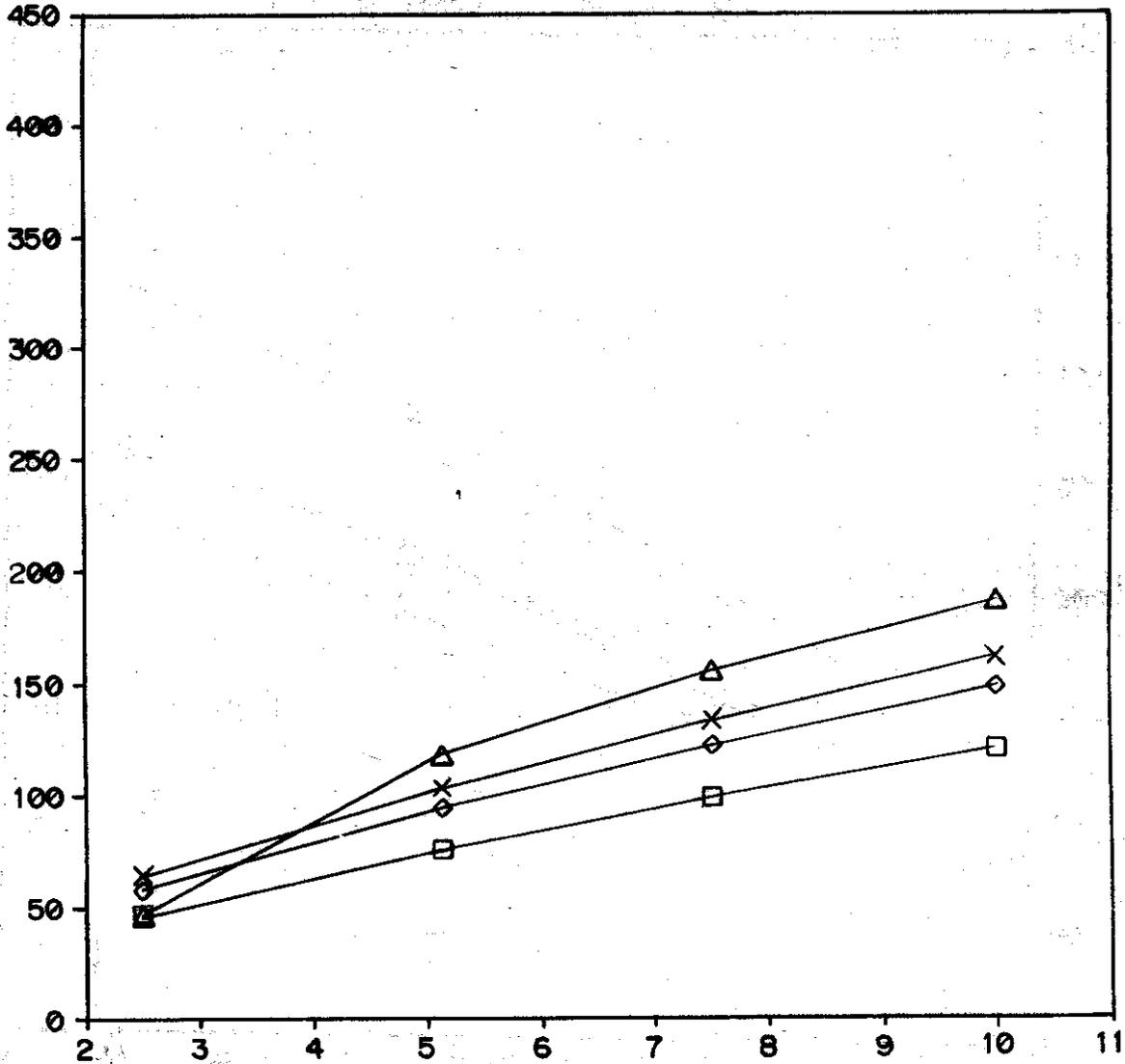


Figura 1. Dependencia de la energía del estado básico con la concentración de impurezas en la capa. La curva con cruces representa el cálculo cuasiclásico con el potencial lineal; los rombos se han usado para los resultados cuasiclásicos con el potencial parabólico; los triángulos sirven para señalar el cálculo también cuasiclásico pero con potencial poligonal; por último, los cuadrados representan la aproximación de TF. Las energías están en meV; las densidades en  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

### Estado excitado vs Concentración

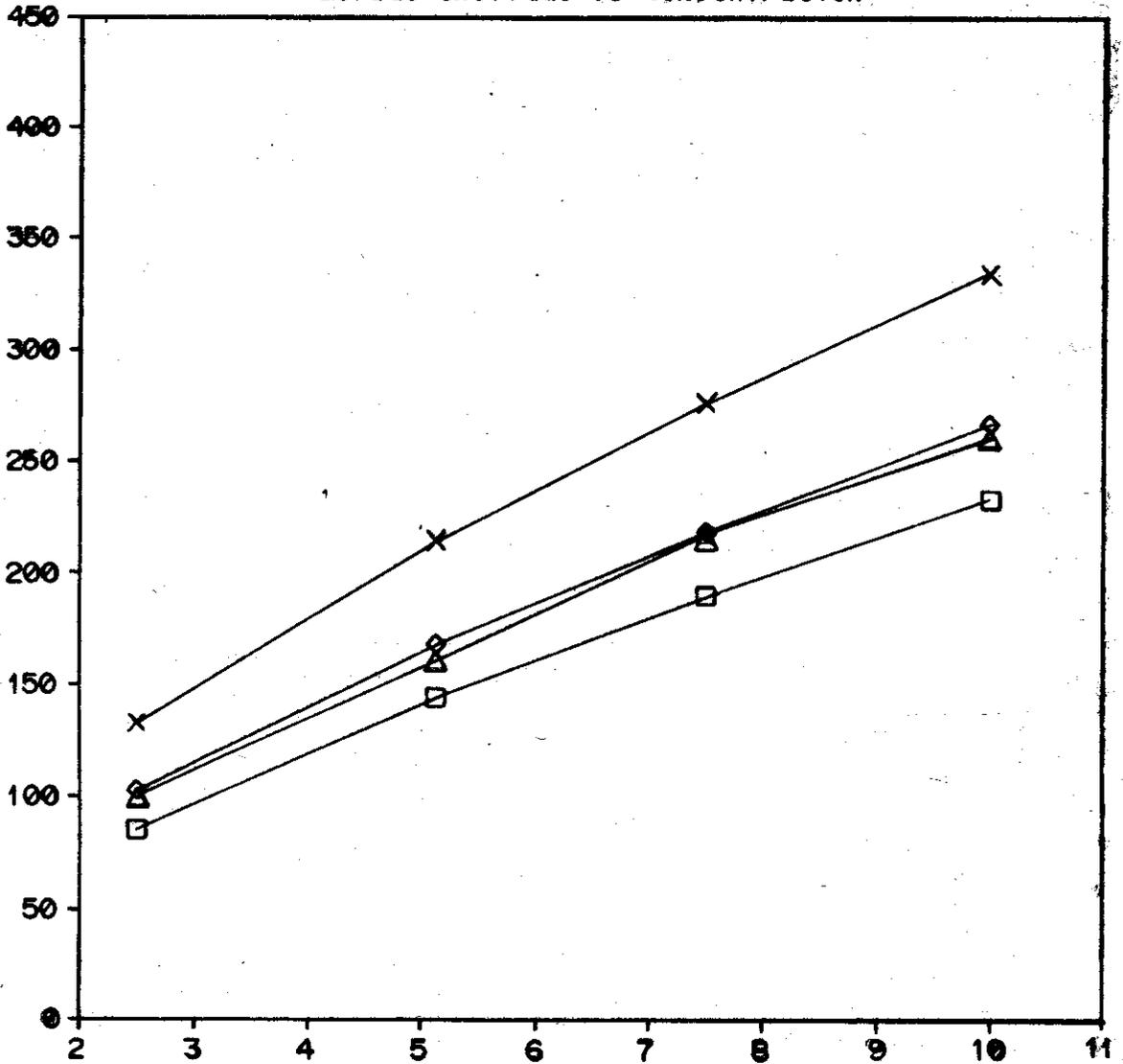


Figura 2. Dependencia de la energía del primer estado excitado con la concentración de impurezas en la capa. La curva con cruces representa el cálculo cuasiclásico con el potencial lineal; los rombos se han usado para los resultados cuasiclásicos con el potencial parabólico; los triángulos sirven para señalar el cálculo también cuasiclásico pero con potencial poligonal; por último, los cuadrados representan la aproximación de TF. Las energías están en meV; las densidades en  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Nivel de Fermi vs Concentración

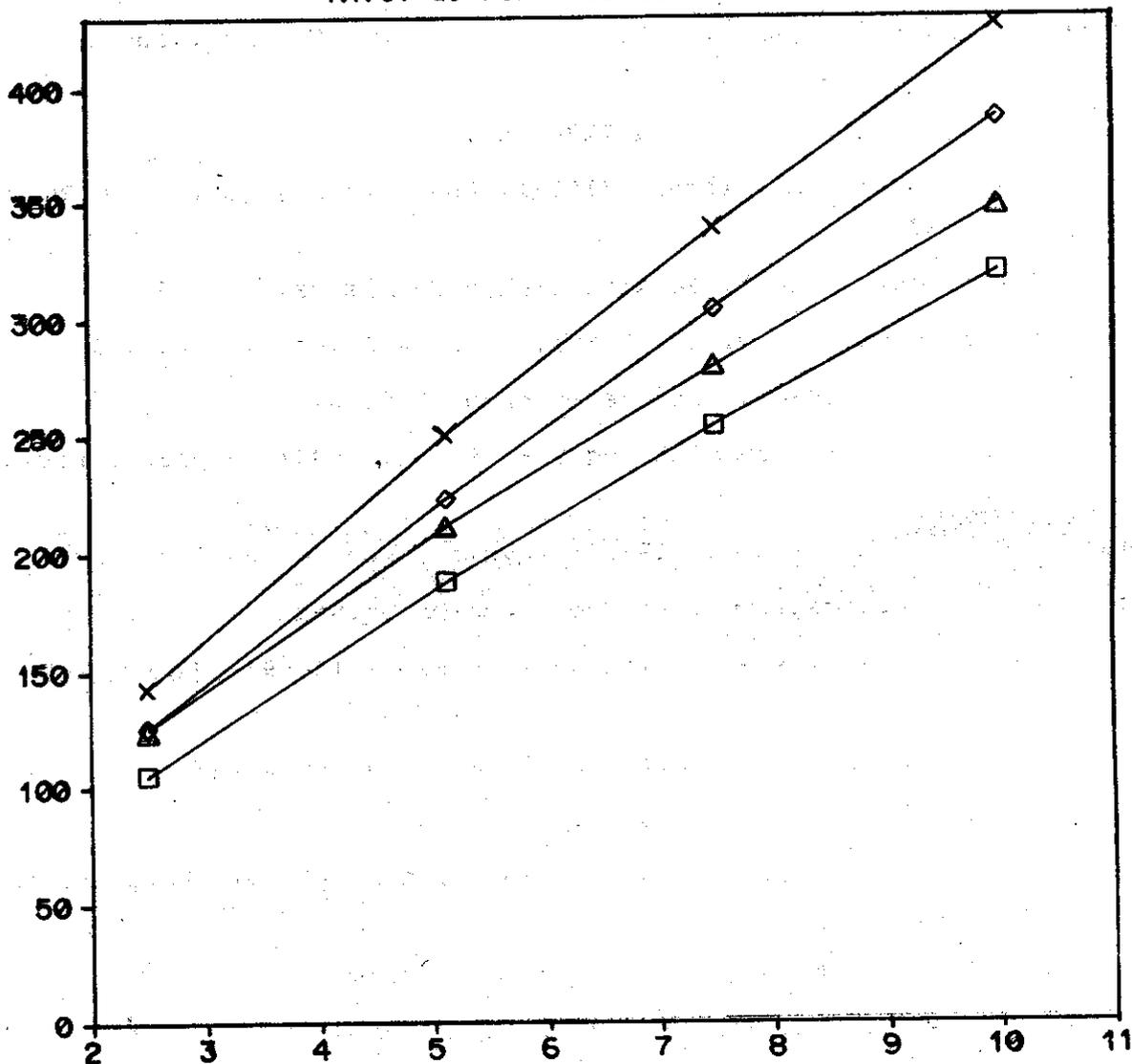


Figura 3. Dependencia de la energía del nivel de Fermi con la concentración de impurezas en la capa. La curva con cruces representa el cálculo cuasiclásico con el potencial lineal; los rombos se han usado para los resultados cuasiclásicos con el potencial parabólico; los triángulos sirven para señalar el cálculo también cuasiclásico pero con potencial poligonal; por último, los cuadrados representan la aproximación del TF. Las energías están en meV; las densidades en  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

## REFERENCIAS

- Dohler, G. (1978): Surface Science 73, 97.
- Schubert, E. F. y K. Ploog (1985): Japanese Journal of Applied Physics 24, L608.
- \_\_\_\_\_ (1985): IEEE Transactions on Electronics Devices, ED32, 1868.
- Schubert, E. F., A. Fisher y K. Ploog (1986): IEEE Transactions on Electronics Devices, ED33, 625.
- Ploog, K. (1987): Physica Scripta T19: 136.
- Ploog, K., M. Hauser y A. Fischer (1987): Inst. Phys., Conf. Ser. N. 91: Chapter 1: 27.
- Juarez, A. y A. Zehe (1987): Revista Cubana de Física, VII: 41.
- Zrenner, A., F. Koch y K. Ploog (1988): Surface Science, 196: 671.
- Perry, C. H. et al. (1988): Surface Science, 196, 677.
- Richter, J. H. Sigg, K. Von Klitzing y K. Ploog (1989): Physical Review, B 39, 6268.
- Arsenault, C. J. y M. Meunier (1989): Physical Review, B. 39, 8739.
- Peeters, F. M. y P. Vasilopoulos: Comunicación privada.
- Bendling, S., C. Zhang, K. V. Klitzing y K. Ploog (1989): Physical Review B 39, 1097.
- Wagner, J., A. Fischer y K. Ploog (1989): Physical Review B 42, 7280.
- Ioratti, I. (1990): Physical Review B 41, 8340.
- Trott, M., S. Trott, G. Teichmann y Ch. Schnittler (1990): Phys. Stat. Sol. (b) 161, K15.
- Luttinger, J. M. y W. Kohn (1955): Physical Review 97, 869.
- Ploog, K., M. Hauser y A. Fisher (1987): Appl. Phys. A, 5.
- Gaggero Sager, L. M. (1990): Tesis de Diploma, Facultad de Física, U.H.
- Davydov, A. S. (1969): Quantum Mechanics, edición R., Cuba.
- Pérez Alvarez, R. y H. Rodríguez Coppola (1988): Phys. Stat. Sol. (b) 145, 493.
- Shampine, L. F. y M. K. Gordon (1975): Computer Solution of Ordinary Differential Equations, W. H. Freeman and Company, San Francisco.

Recibido: 1/7/91