

# CALCULO DEL GAP DE ENERGIA EN CABLES CUANTICOS DE SILICIO.

G.A.Casas<sup>1</sup>, E.L. Peltzer y Blancá<sup>2,3</sup>, F. Vericat<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Aplicaciones Matemáticas y Estadísticas de la Facultad de Ingeniería (GAMEFI), Universidad Nacional de La Plata

<sup>2</sup>Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB) CONICET-UNLP.

<sup>3</sup>Cátedra de Termodinámica, Departamento de Electrotecnia, Facultad de Ingeniería, UNLP

[vericat@iflysib.unlp.edu.ar](mailto:vericat@iflysib.unlp.edu.ar)

En este trabajo desarrollamos un procedimiento para calcular la estructura de bandas de un cable cuántico de sección transversal  $\delta \times \delta$ , resolviendo la ecuación de Schrödinger de una partícula en una dimensión. El efecto de confinamiento se tiene en cuenta mediante potenciales efectivos electrón-electrón y electrón-ión que consideran el ancho  $\delta$  del cable, mientras que los efectos de apantallamiento electrónico son tratados en forma autoconsistente. Aplicamos el método para describir un cable cuántico de silicio orientado según la dirección [001]. Calculamos el ancho de banda prohibida para diferentes valores del parámetro  $\delta$ . Los valores obtenidos están en razonable acuerdo con los calculados con métodos más elaborados. A diferencia del Si en su fase cúbica hemos obtenido para los cables cuánticos estudiados un gap directo en  $k=0$  en concordancia con los trabajos previos mencionados.

## I. INTRODUCCION

El silicio poroso obtenido por anodización de las pastillas en soluciones de HF pueden modelizarse como un arreglo de cables cuánticos aislados entre sí, con anchos menores a los  $30 \text{ \AA}$ . La estructura así formada presenta propiedades de luminiscencia en el espectro visible, lo que la hace muy interesante para aplicaciones opto-electrónicas. Explicar el por qué de esta propiedad de fotoluminiscencia ha despertado, por lo tanto, el interés de numerosos investigadores.

En este trabajo realizamos el cálculo de la estructura de bandas para un cable cuántico de silicio de sección  $\delta \times \delta$ , transversal a la dirección preferencial de movimiento de los electrones. En nuestro modelo adoptaremos como tal la dirección [001] del silicio cristalino.

La estructura de bandas y el correspondiente ancho de la banda prohibida (gap), se calcularon sobre la base del método explicado en un trabajo anterior<sup>(1)</sup>. Éste consiste, básicamente, en la resolución autoconsistente de la ecuación de Schrödinger para un solo electrón que se mueve en un potencial periódico efectivo. Este potencial considera la interacción con el resto de los electrones a través de la densidad electrónica y tiene en cuenta el efecto de confinamiento mediante la inclusión del ancho del cable como un parámetro.

Diversos autores han calculado el gap mencionado utilizando métodos más elaborados, como por ejemplo cálculos ab-initio y otros basados en Hamiltonianos tipo "tight-binding"<sup>(2,5)</sup>.

## II. DESARROLLO TEÓRICO

Consideramos un cable de silicio orientado a lo largo del eje  $z$ . El potencial efectivo experimentado por un electrón debido a la red periódica de iones y al resto de los electrones se puede escribir

$$V(z) = V_N(z) + \int v_{ee}(z-z') \rho(z') dz' \quad (1)$$

El primer término de (1) representa el potencial efectivo o promedio sobre el eje del cable debido a los iones (núcleos y electrones de "carozo"), considerados como cargas puntuales  $+4e$  ubicadas en los sitios de la red cristalina del Si. El segundo término es el potencial de interacción del electrón considerado con el resto de los electrones libres. Aquí  $v_{ee}(z)$  representa la interacción efectiva entre electrones. Este potencial incluye al ancho  $\delta$  del cable como parámetro de manera de tener en cuenta los efectos de confinamiento. El potencial  $V(z)$  es periódico en  $z$ . El periodo es el lado  $a$  de la red cúbica de Si ( $a=5.43 \text{ \AA}$ ).

Con el método explicado en Ref.(1), se resuelve la ecuación de Schrödinger unidimensional para el potencial periódico  $V(z)$  y se obtienen los autovalores en función de  $k$  y las correspondientes funciones de onda  $\psi_i(z)$ . Éstas son entonces utilizadas para calcular la densidad electrónica  $\rho(z) = \sum_i |\psi_i(z)|^2$ , se evalúa el segundo término de (1) y se repite el cálculo hasta obtener la autoconsistencia.

El potencial que siente un electrón en el punto  $(x,y,z)$  debido a un núcleo ubicado en  $(X_i, Y_j, Z_k)$  es:

$$V_{Nijk}(x,y,z) = \frac{4e}{\epsilon} \frac{1}{|R_{ijk}|} \quad (2)$$

$$\text{donde } |R_{ijk}| = \sqrt{(X_i - x)^2 + (Y_j - y)^2 + (Z_k - z)^2}$$

Para obtener  $V_N(x,y,z)$ , hay que sumar la contribución de todos los iones del sistema ubicados sobre un paralelepípedo de sección  $\delta \times \delta$  y no limitado según el eje  $z$  del cable. Para ello se utilizó una macrocelda de volumen  $\delta \times \delta \times a$  (ver Fig.1) que se repite en forma periódica. Para evitar la singularidad del potencial coulombiano, usamos un modelo del tipo "empty core". En nuestro caso consideramos  $V_N(|R_{ijk}|) = 0$  para  $|R_{ijk}| < 0.4 \text{ \AA}$ .

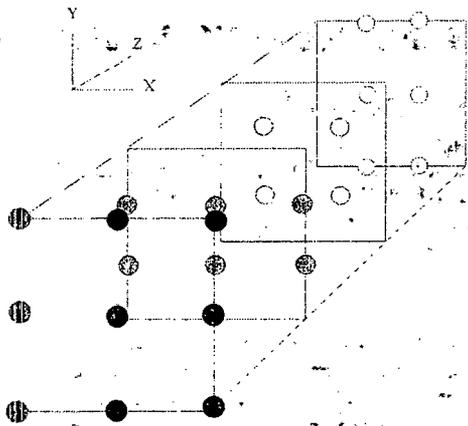


Figura 1: Porción de la macrocelda mostrando los planos con átomos que tienen coordenada  $z=0, 0.25, 0.5$  y  $0.75$  (en unidades de  $a$ ). Las dimensiones transversales son  $\delta \times \delta$  con  $\delta=7.69 \text{ \AA}$ .

Hemos aplicado el método a cables de anchos  $7.69 \text{ \AA}$  y  $15.4 \text{ \AA}$ , de modo que las macroceldas correspondientes tienen, respectivamente,  $3 \times 3$  y  $4 \times 4$  átomos en el plano  $(x, y, 0)$ . En la figura 1 se muestra la disposición espacial de los iones para el caso del cable más delgado. Puede observarse que la macrocelda considerada involucra 25 átomos dispuestos en cuatro planos cuya distancia al plano  $(x, y, 0)$  son  $0, 0.25, 0.5$  y  $0.75$  (en unidades de  $a$ ) respectivamente. Para  $\delta=15.4 \text{ \AA}$  la macrocelda tiene 81 átomos.

Para calcular el potencial promedio que sienten los electrones sobre el eje  $z$  se considera que los mismos están confinados en las direcciones  $x, y$  por una función de onda de la forma:

$$\phi(x, y) = (2/\delta) \cos(\pi y/\delta) \cos(\pi x/\delta) \quad (3)$$

Consecuentemente

$$V_N(z) = (4/\delta^2) \times$$

$$\sum_{ijk} \int_{-\delta/2}^{\delta/2} \cos^2\left(\frac{\pi y}{\delta}\right) \cos^2\left(\frac{\pi x}{\delta}\right) V_{Nijk}(x, y, z) dx dy \quad (4)$$

Para evaluar el segundo término de (1) se utilizó el potencial de la Ref. (6):

$$\tilde{v}_{ee}(G, \delta) = (e/\epsilon) \times$$

$$\int_0^1 K_0(G\delta u) \left[ 2 - (1-u) \cos(2\pi u) + \frac{3}{2\pi} \sin(2\pi u) \right] du \quad (5)$$

donde  $K_0(x)$  es la función de Bessel modificada de orden cero y  $G = \pm n2\pi/a$  son los vectores de la red recíproca. La densidad es  $\rho(z) = \sum_G \rho(G) e^{iGz}$ , tiene componentes en el espacio recíproco que son  $\rho(G) = \sum_k C_k \rho_k(G)$ .

Esta suma debe realizarse sobre todos los estados  $k$

ocupados por los electrones de valencia en el estado fundamental, es decir que involucra a todos los electrones libres del sistema. Las funciones de onda se normalizan de forma tal que  $\int \sum_G \rho(G) e^{iGz} dz = N$  ( $N$  = número de electrones de la macrocelda).

### III. RESULTADOS

En la Fig. 2 se muestra la estructura de bandas para el cable con  $\delta=7.69 \text{ \AA}$ . Se ha graficado  $E(k)$  en la zona reducida para las primeras cinco bandas. El gap se encuentra entre la cuarta y quinta banda. El máximo de la banda de valencia y el mínimo de la de conducción se encuentran ambos en  $k=0$  determinando un gap directo a diferencia del gap indirecto observado en la fase cúbica del silicio. Este resultado concuerda con los mostrados en las Refs. (2-5).

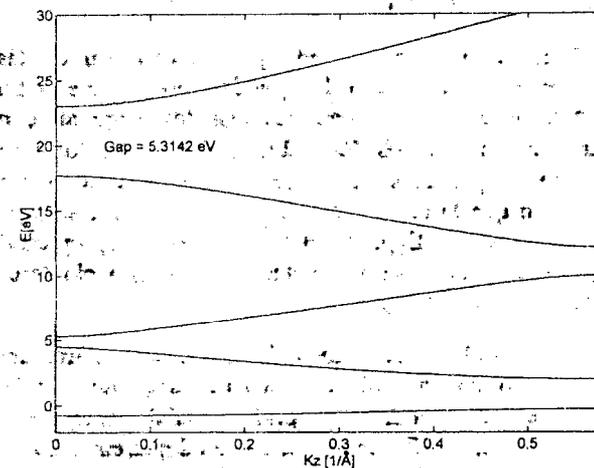


Figura 2: Cinco primeras bandas del cable cuántico de silicio con  $\delta=7.69 \text{ \AA}$ . Se indica el gap entre la cuarta y quinta banda para  $k=0$ .

En la Tabla I, se comparan los gaps de energía  $\Delta E$  calculados en este trabajo con los obtenidos en las Refs. (2-5) a partir de métodos más elaborados.

TABLA I

$\delta$	$\Delta E$ [eV]				
	Este trabajo	Ref.2	Ref.3	Ref.4	Ref.5
$7.69$ (a)	5.3	2.3	3.8	4.1	3.1
$15.4$ (b)	3.2	1.5	2.25	2.5	2.06
a/b	1.65	1.53	1.68	1.64	1.5

Si bien las diferencias en valores absolutos son apreciables, la relación entre los anchos de banda para los valores de  $\delta$  considerados, concuerda razonablemente bien con las calculadas por los autores referenciados. Además, en todos los casos, se aprecia una dependencia inversa del gap con el ancho del cable.

#### IV. CONCLUSIONES

En este trabajo describimos algunas propiedades electrónicas de cables cuánticos de silicio mediante un procedimiento sencillo que involucra la solución de la ecuación de Schrödinger para un electrón en un potencial periódico efectivo unidimensional. Este potencial tiene en cuenta efectos de apantallamiento, debidos al resto de los electrones y también del confinamiento causado por el tamaño transversal finito del cable.

Los cálculos muestran un gap directo cuyo valor relativo y dependencia con  $\delta$  están de acuerdo con cálculos basados en métodos tight-binding y ab-initio.

#### AGRADECIMIENTOS

Deseamos agradecer a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCYT); al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y a la Universidad Nacional de La Plata (UNLP) por su apoyo (PICT 03-04517; PIP 4690; Subsidio I055).

E.L.PyB y F.V son investigadores del CONICET.

#### Referencias

- 1- Casas, G.A., Peltzer y Blancá, E.L. y Vericat, F. Anales AFA, 10, 228 (1998).
- 2- Buda, F., Kohanoff, M., Parrinello, M. Phys. Rev. Lett. 69, 1272 (1992).
- 3- Sanders, G., Chung-Chang, Y., Phys. Rev. B 45, 9202 (1992)
- 4- Read, A., Needs, R, Nash, K. Kanham, L., Calcott, P. and Qteish, A. Phys. Rev. Lett. 69, 1232 (1992).
- 5- Ohno, T., Shiraishi, K. and Ogawa, T., Phys. Rev. Lett. 69, 2400 (1992).
- 6- Hu, B. and Das Sarma, S. Phys. Rev. B 48, 5496 (1993).

CEILAP  
CITEFA - CONICET  
ZUFRIATEGUI Y VARELA  
1603 - VILLA MARTELLI  
REPUBLICA ARGENTINA