

APANTALLAMIENTO ELECTRONICO EN ESTRUCTURAS UNIDIMENSIONALES

G.A. Casas

Grupo de Aplicaciones Matemáticas y Estadísticas de la Facultad de Ingeniería (GAMEFI), Departamento de Fisicomatemática y Cátedra de Termodinámica, Departamento de Electrotecnia, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, Argentina

E.L. Peltzer y Blancá y F. Vericat*

*Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB)
UNLP-CONICET. cc. 565 - (1900) La Plata, Argentina.*

En este trabajo consideramos un método para estudiar la estructura de bandas de un sistema de electrones que se mueven en un potencial periódico (una red iónica) unidimensional. Con ese fin resolvemos autoconsistentemente la ecuación de Schroedinger para un solo electrón que siente el potencial efectivo que resulta de su interacción con el potencial periódico de la red y con el resto de los electrones. Considerando que la interacción electrón-electrón depende adecuadamente de un parámetro δ con dimensiones de longitud, podemos aplicar el método para describir la estructura de bandas en cables cuánticos de ancho δ vistos como sistemas estrictamente unidimensionales. De nuestros resultados concluimos que el apantallamiento produce una disminución del gap entre la primera y segunda banda y que este efecto aumenta al disminuir el ancho del cable.

I. INTRODUCCIÓN

El estudio de los llamados cables cuánticos - heteroestructuras semiconductoras en las cuales el movimiento de los portadores está limitado, respecto a dos de las dimensiones espaciales, a unos pocos nanómetros - han recibido en años recientes mucha atención tanto experimental como teórica [1], [2]. Algunas de las propiedades de los cables cuánticos pueden ser teóricamente estudiadas desde el punto de vista tradicional de Sommerfeld [3] según el cual un sólido puede pensarse como un líquido de fermiones (los portadores), digamos electrones o electrones y agujeros, moviéndose en un medio neutralizante continuo caracterizado por una constante dieléctrica ϵ_0 que representa a la red iónica. Así, por ejemplo, es posible reproducir [4], [5] con este enfoque resultados experimentales de dispersión inelástica de luz [6] o el tiempo de recombinación de los pares electrón-agujero obtenidos a partir de experiencias de fotoluminiscencia en cables cuánticos semiconductores [7]. Sin embargo, existen muchas otras propiedades que requieren, para ser correctamente interpretadas, de una descripción basada en la estructura de bandas.

En este trabajo consideramos el estudio de la estructura de bandas de un cable cuántico de ancho δ del orden de unas decenas de nanómetros. En rigor estamos en presencia de un sistema cuasi-unidimensional en el sentido de que, si bien existe una dirección netamente preferencial (supongámosla a lo largo del eje x) para el movimiento de los portadores, sin embargo las dimensiones transversales (en las direcciones de los ejes y y z) son no nulas. A pesar de esto, nosotros lo tomaremos como un sistema estrictamente unidimensional y el efecto de ancho finito lo tendremos en cuenta a través de un po-

tencial electrón-electrón efectivo. En la próxima sección esquematizamos el método general y en la siguiente lo aplicamos específicamente al cálculo de la estructura de bandas en cables cuánticos.

II. MÉTODO AUTOCONSISTENTE

Consideremos, primeramente, una distribución lineal de iones que generan un potencial periódico $U(x) = U(x+a)$ ($a =$ constante de la red) al que se ven sometidos N_e electrones que se mueven a lo largo de la línea. En principio supondremos que la longitud de ésta es L , de manera que la densidad global de electrones se puede escribir $n_e = N_e/L$. Sea $v_{ee}(|x_i - x_j|)$ el potencial de interacción entre dos electrones ubicados en x_i y x_j , respectivamente. Luego, si consideramos un electrón particular en la posición x , éste sentirá un potencial efectivo $V(x)$ que puede escribirse

$$V(x) = U(x) + \int_0^L v_{ee}(|x' - x|) \rho(x') dx' \quad (1)$$

donde $\rho(x)/e$ (con e la carga de un electrón) es la densidad local de electrones en x .

Siendo el potencial $U(x)$ periódico es de esperar que los electrones se distribuyan con la misma periodicidad, esto es que $\rho(x) = \rho(x+a)$ y por lo tanto también el potencial efectivo verificará $V(x) = V(x+a)$. En consecuencia las autofunciones de la ecuación de Schroedinger para un electrón en ese potencial efectivo serán funciones de onda de Bloch. Esto es, si escribimos los potenciales $U(x)$ en términos de sus componentes de Fourier:

$$U(x) = \sum_G \tilde{U}_G \exp(iGx)$$

$$\text{con } G = \pm(2\pi/a)n; \quad n \in \mathcal{N} \quad (2)$$

entonces $V(x)$ admitirá un desarrollo similar con

$$\tilde{V}_G = \tilde{U}_G + \tilde{v}_{ee}(G)\tilde{\rho}(G), \quad (3)$$

y las funciones de onda serán [8]

$$\varphi_k(x) = \sum_G C(k+G) \exp[i(k+G)x]$$

$$\text{con } k = \pm(2\pi/L)n; \quad n \in \mathcal{N} \quad (4)$$

Reemplazando $\varphi(x)$ y $V(x)$ por sus correspondientes desarrollos en la ecuación de Schroedinger obtenemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} C(k) + \sum_G \tilde{V}_G C(k-G) = E_k C(k) \quad (5)$$

En principio, resolver este sistema implica operar con una matriz infinita. Sin embargo, en los casos de interés, tanto los coeficientes de $V(x)$ como los de $\varphi(x)$ decrecen rápidamente con G y son suficientes unas pocas armónicas para obtener una buena aproximación. Hacemos notar que si consideramos un sólo electrón que se mueve en un potencial iónico representado por una sucesión de pozos y barreras cuadrados, recuperamos el conocido modelo de Kronig-Penney [9].

La solución de la Eq.(5) en el caso más general que consideramos aquí, debe ser resuelto en forma autoconsistente ya que el potencial efectivo $V(x)$ determina la distribución de carga $\rho(x)$ y ésta a su vez modifica al potencial. En efecto, en la Eq. (3) es

$$\tilde{\rho}(G) = \sum_{k \min}^{k \max} \rho_k(G) \quad (6)$$

donde, $\rho_k(G)$, la componente de Fourier de $\rho_k(x) = e.c_k \varphi_k^*(x) \varphi_k(x)$, se relaciona con las componentes de Fourier de las autofunciones $\varphi_k(x)$ según:

$$\rho_k(G) = e \sum_{G'} c_k \varphi_k^*(G) \varphi_k(G+G'). \quad (7)$$

La constante c_k se elige de manera que la densidad de partículas correspondiente, $\rho_k(x)/e$, permita obtener el número de electrones por celda considerado en el modelo:

$$\sum_{k \min}^{k \max} \int_0^a c_k \varphi_k^*(x) \varphi_k(x) dx = n_v \quad (8)$$

con n_v el número de electrones de valencia.

Con la idea de apreciar la bondad del método autoconsistente considerado, lo hemos aplicado primeramente para calcular la estructura de bandas del modelo de Kronig-Penney. De esta forma pudimos comparar nuestro método numérico con la solución exacta conocida [9]. Encontramos que unos pocos términos del desarrollo de Fourier de la energía potencial son suficientes para tener una muy buena concordancia.

III. APANTALLAMIENTO EN CABLES CUÁNTICOS

Nos interesa estudiar el efecto del apantallamiento electrónico sobre la estructura de bandas en cables cuánticos. Con ese fin aplicamos el formalismo autoconsistente descrito en la sección anterior a un modelo estrictamente unidimensional de cable en el que la red es una serie periódica de pozos y barreras del tipo Kronig-Penney y los electrones fuera del carozo interactúan a través de un potencial electrón-electrón efectivo, que tiene en cuenta el ancho del cable, de la forma [4], [10] $v_{ee}(x) = 4e^2 K_0(x/\delta)$, cuya transformada de Fourier en los vectores de la red recíproca es $\tilde{v}_{ee}(G) = 4e^2 / \sqrt{(2\delta G)^2 + 1}$. Suponemos además que cada átomo de la red contribuye con cuatro electrones a los niveles de valencia y que en el estado fundamental éstos ocupan por completo la banda de energía más baja.

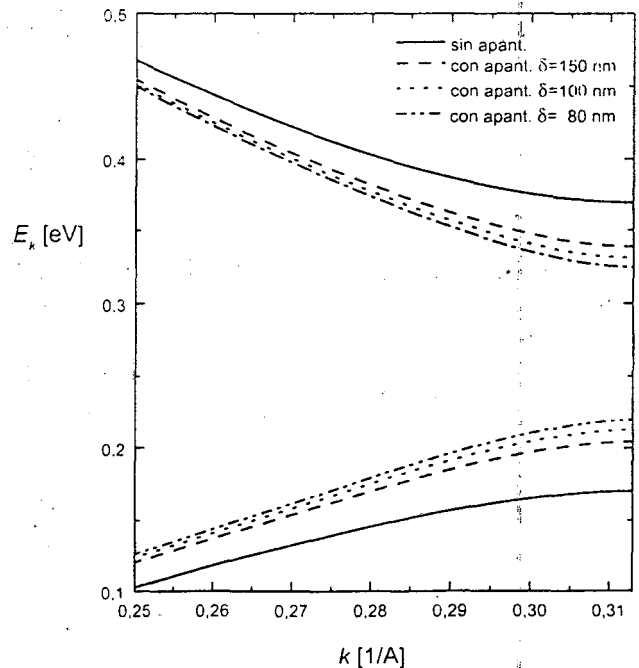


Fig.1 Primera y segunda banda en la primera zona de Brillouin en función del ancho del cable.

En la Fig.1 mostramos, para ese modelo de cable cuántico, la estructura de bandas en la primera zona de Brillouin correspondientes a diversos valores del ancho δ .

Podemos observar que el efecto más apreciable del apantallamiento es reducir el "gap" entre las dos primeras bandas siendo este efecto inversamente proporcional al ancho del cable (Fig. 2).

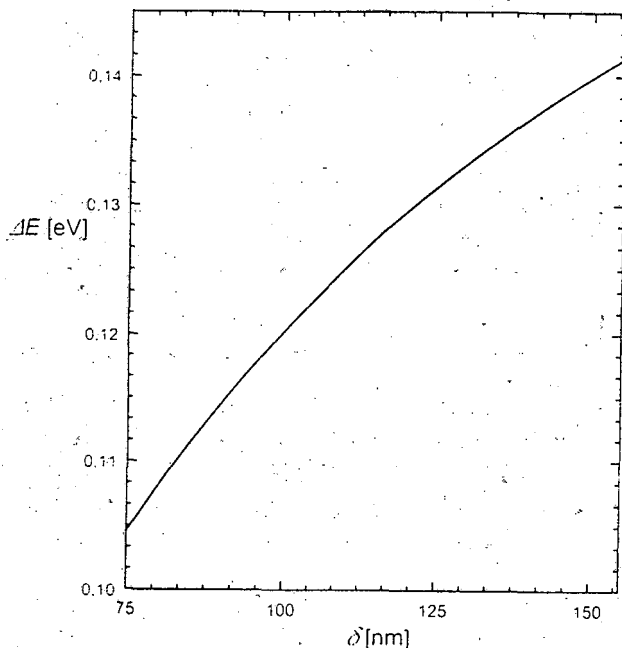


Fig.2 Diferencia de energía entre las dos primeras bandas en función del ancho del cable.

De los cálculos también pudimos observar que el potencial efectivo inducido por la densidad de carga electrónica está dominado por el primer término del desarrollo de Fourier que es prácticamente el único afectado apreciablemente por el apantallamiento.

IV. RESUMEN

En este trabajo hemos bosquejado un método autoconsistente para calcular la estructura de bandas en sistemas unidimensionales. En particular puede usarse en cables cuánticos vistos como un sistema estrictamente unidimensional en el cual los electrones interactúan a través de un potencial de pares dependiente del ancho del cable que tiene en cuenta las dimensiones finitas del mismo.

Agradecemos al Dr. A.A. Melgarejo por sus invaluables discusiones sobre cables cuánticos. Este trabajo se realizó con el apoyo de la UNLP (Proyecto ID I055), y del CONICET. E.P.B y F.V. son miembros del CONICET.

- [1] *Nanostructures, Physics and Fabrication*, editado por M.A. Reed y W.P.Kirk (Academic, Boston, 1989).
- [2] *Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures*, editado por P. Butcher, N.H. March y M.P. Tosi (Plenum Publishing Corp. New York, 1993).
- [3] A. Sommerfeld, *Naturwissenschaften* **15**, 825 (1927).
- [4] A.A. Melgarejo, *Estudio Mecánico Estadístico de Líquidos de Fermiones en 1D. Cables Cuánticos*, Tesis Doctoral, Universidad Nacional de La Plata, (1996).
- [5] A.A. Melgarejo, D.G. Renzi, C.O. Stoico y F. Vericat, *Physica E: Low dimensional systems and nanostructures*, **3**, 205 (1998).
- [6] A.R. Goñi, A. Pinczuk, J.S. Weiner, J.M. Calleja, B.S. Dennis, L.N. Pfeiffer y K.W. West, *Phys. Rev. Lett.* **67** 3298 (1991).
- [7] F. Kieseling, W. Braun, P. Ils, M. Michel, A. Forchel, I. Gyuro, M. Klenk y E. Zielinski, *Phys. Rev. B* **51**13809 (1995).
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1976).
- [9] R.L. Kronig and W.G. Penney, *Proc. Roy. Soc.* **A130**, 499 (1931).
- [10] A.A. Melgarejo y F. Vericat, *Phys. Letts. A* **226**, 101 (1997).