

ENERGÍA DE ENLACE PARA UNA IMPUREZA DONADORA POCO PROFUNDA EN HILOS CUÁNTICOS RECTANGULARES DE GaAs BAJO PRESIÓN HIDROSTÁTICA

J. C. Vásquez, A. Montes, A. L. Morales y C. A. Duque
Instituto de Física, Universidad de Antioquia, AA 1226, Medellín, Colombia

RESUMEN

En la aproximación de masa efectiva y usando el método variacional se calcula la energía de enlace de una impureza donadora poco profunda en un hilo cuántico de GaAs con sección transversal rectangular bajo presión hidrostática. Los resultados son para diferentes posiciones de la impureza y tamaños de la sección transversal del hilo. Los aspectos más generales que han sido observados pueden ser resumidos así: 1) la energía de enlace decrece con el desplazamiento de la impureza hacia las paredes del hilo, 2) para una sección transversal fija, la energía de enlace se incrementa con el incremento de la presión hidrostática y 3) en los casos límite del tamaño de la sección transversal del hilo, los resultados están en buen acuerdo con reportes previos en pozos cuánticos y sistemas hidrogenoides 3D.

I. Introducción. Actualmente la tecnología ha puesto énfasis en la fabricación de heteroestructuras semiconductoras y para ello las ha fabricado con alta precisión mediante diferentes técnicas. Estas estructuras han sido sometidas a perturbaciones externas con la finalidad de sintonizar los diferentes estados electrónicos; una de estas perturbaciones es la aplicación de presiones externas a estas estructuras, de allí el interés en este trabajo.

En la última década ha sido estudiado por varios autores el efecto de la presión hidrostática sobre sistemas de baja dimensionalidad [1-4]. En particular, se ha mostrado que los efectos de la presión hidrostática sobre la energía de enlace para impurezas donadoras crece con el aumento de la presión externa.

En el presente trabajo se hace un estudio teórico de la energía de enlace para el estado fundamental de una impureza donadora poco profunda un hilo cuántico de GaAs de sección transversal rectangular bajo el efecto de presión hidrostática. Se reporta la energía de enlace para diferentes secciones transversales, presiones externas aplicadas y diferentes posiciones de la impureza. En la sección 2 se presenta el marco teórico del problema, en la sección 3 los resultados y discusión y en la sección 4 se dan las conclusiones finales.

II. Marco teórico. En la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano para una impureza donadora en un hilo cuántico de sección transversal rectangular de GaAs bajo los efectos de presión hidrostática (P) está dada por [5]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)}\nabla^2 + V(x,y) - \frac{e^2}{\varepsilon(P)r}, \quad (1)$$

donde r es la distancia entre los portadores y la impureza, $m(P)$ y $\varepsilon(P)$ son la masa efectiva y la constante dieléctrica en el hilo, en función de la presión [6, 7]. $V(x, y)$ es el potencial que confina a la impureza donadora en el hilo, el cuál está definido como cero dentro del hilo e infinito fuera del mismo.

La función de onda variacional se escoge como el producto entre la solución exacta del Hamiltoniano en la ecuación (1) sin el término de Coulomb y el estado 1s del átomo de hidrógeno en el cuál el radio de Bohr se reemplaza por un parámetro variacional. Para el estado tipo 1s, la función de prueba es [8]

$$\varphi(x, y) \propto N \cos\left(\frac{\pi x}{L_X(P)}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L_Y(P)}\right) \exp(-\lambda r) \quad (2)$$

La energía de enlace para el estado fundamental de impureza se define como

$$E_b = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*(P)} \left(\frac{1}{L_X^2(P)} + \frac{1}{L_Y^2(P)} \right) - \min_{\lambda} \langle H \rangle \quad (3)$$

III. Resultados y Discusión. La presión hidrostática afecta varios parámetros del hilo, los cuales intervienen en la ecuación 3 para el cálculo de la energía de enlace. La masa efectiva en el hilo aumenta aproximadamente en forma lineal con la presión y por lo tanto, la energía de enlace disminuye debido a una mayor curvatura en la banda parabólica. La constante dieléctrica en cambio, decrece exponencialmente con la presión, luego el potencial electrostático aumenta resultando un mayor confinamiento que incrementa el valor de la energía de enlace. La sección transversal decrece cuadráticamente con la presión y aunque este cambio no es muy acentuado siendo del orden del 1%, la reducción del tamaño del hilo implica un mayor confinamiento, es decir una mayor energía de enlace. Sin embargo, entrar a determinar la competencia de los tres parámetros de manera simultánea en la ecuación (3) no es posible, pues entran de manera complicada y por eso su efecto en conjunto se analiza en las gráficas.

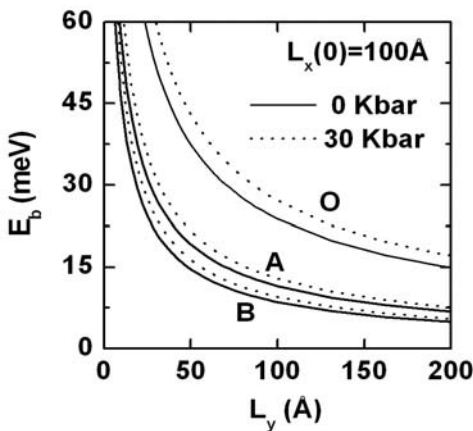


Figura 1. Energía de enlace de una impureza donadora en un hilo de sección transversal rectangular de GaAs de lado \$L_x\$ constante bajo efecto de presión hidrostática y en función de la longitud \$L_y\$. Los resultados son para dos valores de la presión hidrostática (0 y 30 kbar) para tres posiciones diferentes de la impureza: centrada en la sección transversal (O), centrada sobre la pared \$L_y\$ (A) y sobre una esquina de la sección transversal (B).

En la Fig. 1 se muestra como para una misma posición de la impureza la energía de enlace sufre un leve incremento con la presión hidrostática. Además, en el límite de \$L_y\$ tendiendo a cero la energía de enlace tiende a infinito, como es de esperarse en un modelo de confinamiento infini-

to. Adicionalmente, al hacerse tender L_y a infinito, la energía decrece hasta alcanzar el valor correspondiente a un pozo cuántico de ancho L_x .

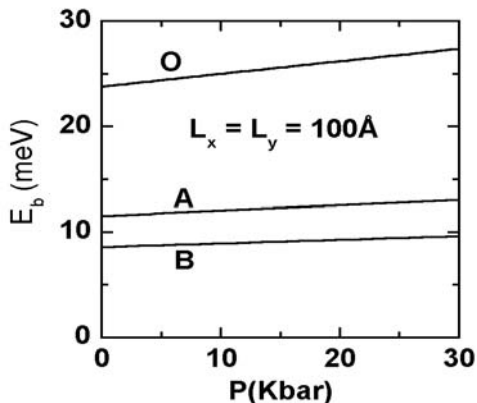


Figura 2. Energía de enlace para una impureza donadora para un hilo cuántico de GaAs de sección transversal cuadrado de lado 100 Å en función de la presión hidrostática. Las posiciones de la impureza son las mismas de aquellas de la figura 1.

En la fig. 2 observamos que la dependencia de la energía de enlace con la presión para una posición fija de la impureza es de carácter lineal y que su pendiente es pequeña lo cual indica que los efectos de presión confinan levemente el sistema. El hecho de que el mayor coeficiente de presión corresponda a impurezas en la posición centrada (O) se deriva de que la presión aplicada está reduciendo la distancia desde la impureza hasta cada una de las cuatro caras del hilo, mientras que en la posición centrada en una cara (A) solo se acercan más a la impureza tres de las caras, lo que implica un confinamiento de presión menor que en (O). De igual modo, si la impureza se halla en una esquina de la sección transversal (B) el confinamiento es debido a las dos caras que forman el vértice opuesto, por lo tanto esta energía se afecta menos por la presión que en las otras dos posiciones de impureza.

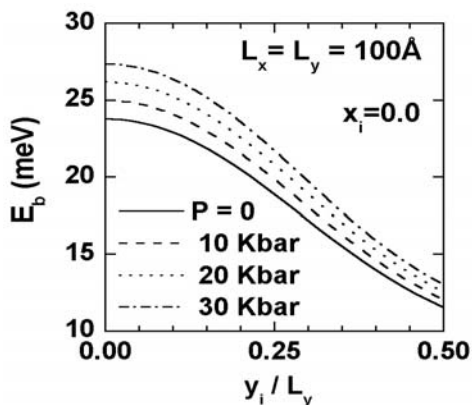


Figura 3. Energía de enlace para una impureza donadora poco profunda en un hilo cuántico de GaAs de sección transversal rectangular en función del cociente y_i / L_y siendo y_i la posición de la impureza a lo largo de la dirección L_y . Diferentes valores de presión hidrostática son considerados (0, 10, 20 y 30 kbar)

La fig. 3 es definitiva para mostrar que en contraste con lo que ocurre en materiales homogéneos, en un sistema de baja dimensionalidad, como en un hilo cuántico, existe una notable dependencia de la energía de enlace respecto a la posición de la impureza. Esto también se evidencia en las figs. 1 y 2, donde las energías de enlace en las posiciones A y B se encuentran claramente separadas de su valor en la posición O. Lo que muestra entonces la figura 3 es que la probabilidad del electrón se halla acotada por la barrera, y cambiando la posición de la impureza, se cambia su geometría aumentando su separación media, lo que disminuye la interacción electrostática y por tanto la energía de enlace. De hecho, para valores de L_y muy grandes, la función de onda de la impureza, y por tanto el valor de energía de enlace, se parecen a las de estados hidrogenoides $1s$ (posición O), $2p_x$ (posición A) y $3d_{xy}$ (posición B). Precisamente debido al comportamiento de las funciones de distribución electrónica para diferentes posiciones de la impureza como se muestran en las figuras 1 y 2, la energía de enlace para la posición en el centro (O) es mayor que la energía de enlace para la posición en el centro de una de las caras (A) y para la posición en el vértice (B) y a su vez la energía de enlace para la posición en (A) es mayor que (B).

IV. Conclusiones. En la aproximación de masa efectiva y usando el método variacional se ha calculado la energía de enlace de una impureza donadora poco profunda en un hilo cuántico de GaAs de sección transversal rectangular bajo presión hidrostática. Se ha encontrado que la energía de enlace se incrementa linealmente con la presión hidrostática. Además, claramente se observa la fuerte dependencia de la energía de enlace con la posición de la impureza, hallando que es mayor sobre el centro y disminuye al acercar la impureza a las fronteras del hilo. Finalmente, se verifica que el confinamiento en un sistema 1D, como el hilo, es mayor que en sistemas de mayor dimensionalidad como un pozo (2D), por tanto el valor de la energía de enlace en el hilo es mayor que en el pozo y aumenta al disminuir su sección transversal.

Agradecimientos Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el CODI-Universidad de Antioquia y Colciencias (Proyecto 1115-05-11502). J. C. Vásquez agradece a la Universidad de Antioquia y al Grupo de Estado Sólido por su vinculación al programa “joven investigador”.

Referencias

- [1] M. Elasby, J. Phys. Condens. Matter 6, 10025 (1994).
- [3] A. L. Morales, A. Montes, S. Y. López, and C. A. Duque, J. Phys. Condens. Matter 14, 987 (2002).
- [4] S. Y. López, N. Porras-Montenegro, and C. A. Duque, Phys. Stat. Sol. (c) 0, 648 (2003).
- [5] A. L. Morales, A. Montes, S. Y. López, N. Raigoza, and C. A. Duque, Phys. Stat. Sol. (c) 0, 652 (2003).
- [6] A. Montes, A. L. Morales and C. A. Duque, Surf. Rev. and Lett. 9, N 5 & 6 1753-1756 (2002).
- [7] H. J. Ehrenreich, J. Appl. Phys 32, 2155 (1961); D. E. Aspnes, Phys Rev. B 14, 5331 (1976); S. Adachi, J. Appl. Phys 58, R1 (1985).
- [8] G. A. Samara, Phys Rev. B 27, 3494 (1983).
- [9] J. A. Brum, Solid State Commun. 54, 179 (1985).