

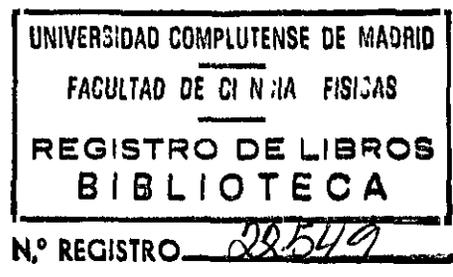
71-1993/17

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS



EL GAS ELECTRÓNICO CONFINADO EN SISTEMAS SEMICONDUCTORES CUÁNTICOS

MEMORIA
presentada por
LEONOR CHICO GÓMEZ
para optar al grado de
DOCTORA EN CIENCIAS FÍSICAS



Director:
Dr. FEDERICO GARCÍA MOLINER
Profesor de Investigación
INSTITUTO DE CIENCIA DE MATERIALES, CSIC
Madrid, 1993

71-1993/17

A mi familia

Agradecimientos

En primer lugar, quiero expresar mi agradecimiento al Prof. Federico García Moliner, director de esta tesis, sin el cual no habría sido posible la realización de este trabajo. Tanto a él como al Prof. Victor Velasco les agradezco la oportunidad que me han brindado de trabajar en su grupo, las sugerencias e ideas que han compartido conmigo y la confianza que han depositado en mí.

Hay tres personas a las que tengo que citar por orden alfabético, porque no sé por quién empezar: el Dr. Włodzimierz Jaskólski, la Dra. Carmen Muñoz y el Prof. Rolando Pérez Álvarez. Su ayuda y apoyo durante estos cuatro años han sido esenciales para la realización de esta tesis.

Al Prof. Javier Piqueras, como mi tutor en el Departamento de Física de Materiales, le agradezco su ayuda en los trámites relacionados con la presentación de esta tesis.

La ayuda de Nacho Reguera ha resultado crucial para que esta memoria sea legible.

De una u otra manera, otras muchas personas han tenido gran importancia en el desarrollo de este trabajo. En especial me gustaría mencionar a mis colegas becarios del 123, Abdellah, Antonio, Carlos, Cristina y Robín. Conocerlos ha sido una de las cosas buenas que me han ocurrido durante “el periodo de disfrute de la beca”.

Aunque ya los conocía de antes, también han sido muy importantes en estos años Isabel, Marga, Leonor y Agustín.

Finalmente, quisiera agradecer a Rodolfo¹ y a mi familia toda la paciencia y el apoyo que me han prestado durante estos años (bueno, y los anteriores).

¹Lo de Rodolfo no tiene nombre.

Índice

1	Introducción	3
1.1	Materiales III-V volúmicos	4
1.2	Heteroestructuras de semiconductores	7
1.2.1	Pozos cuánticos y superredes estructurales	8
1.3	Homoestructuras cuánticas: sistemas dopados	11
1.4	Relaciones de dispersión en un punto de alta simetría: método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. . .	13
1.4.1	Aproximación de masa efectiva en semiconductores volúmicos . .	13
1.4.2	Aproximación de funciones envolventes en heteroestructuras de semiconductores	15
1.5	Sistemas dopados: cálculo autoconsistente de la estructura electrónica y la población	19
1.5.1	Interacción de canje y correlación	21
1.6	Motivación	22
2	Técnicas de cálculo	25
2.1	El Método de Empalme de Funciones de Green	26
2.1.1	Condiciones de empalme en sistemas continuos	30
2.1.2	Formulación para intercaras acopladas	33
2.2	El Método de Matriz de Transferencia Completa	38
2.2.1	Aplicación a potenciales periódicos: superredes	40
2.3	Función de Green y Matriz de Transferencia	41
3	Pozos cuánticos estructurales con modulación de dopado	47

3.1	Pozos cuánticos $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con modulación de dopado de Si . . .	49
3.1.1	Determinación del nivel de Fermi: las impurezas de Si en $Al_xGa_{1-x}As$	53
3.2	Cálculo autoconsistente de la población y estructura electrónica	58
3.3	Resultados	59
3.3.1	Dependencia de los parámetros estructurales	60
3.3.2	Comparación con datos experimentales	71
4	Pozos δ: confinamiento del gas electrónico por dopado	75
4.1	El gas electrónico atrapado en el potencial producido por las impurezas .	77
4.2	Distribución de la población electrónica en subbandas	81
4.3	Resultados. Comparación con sistemas experimentales	86
5	Superredes δ	95
5.1	Planteamiento del problema	96
5.2	Comportamiento tridimensional frente a cuasibidimensional:	99
5.3	Información experimental	104
6	Pozos estructurales con dopado δ externo	109
6.1	Motivación experimental	109
6.2	Planteamiento estadístico: Factores que determinan el nivel de Fermi . .	113
6.3	Resultados y comentarios	114
7	Superredes estructurales con dopado δ	127
7.1	Estructura electrónica y potencial de las superredes $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con dopado δ de Si	128
7.2	Discusión de los resultados	131
8	Conclusiones	145
	Bibliografía	149

Capítulo 1

Introducción

Al comienzo de la década de los 70, la predicción por Esaki y Tsu [1] de nuevos dispositivos basados en sistemas artificiales de semiconductores, como el oscilador de Bloch, y la invención de una nueva técnica experimental, la epitaxia de haces moleculares [2], marcaron el inicio del desarrollo explosivo de la física de las estructuras artificiales de semiconductores.

Sin embargo, las propuestas de fabricación de sistemas artificiales de semiconductores por sus posibles aplicaciones prácticas son muy anteriores: en 1951, Shockley [3] sugería el uso de heterouniones de semiconductores para mejorar el funcionamiento de su transistor; en 1957 Kroemer [4] propuso la idea de un semiconductor de discontinuidad de banda variable, modificando gradualmente su composición, y en 1963 [5], sugirió que la corriente umbral de los láseres de semiconductores que se estaban comenzando a fabricar bajaría confinando los portadores en una región de discontinuidad de banda pequeña rodeada por regiones barrera, de discontinuidad de banda mayor. Aunque estas propuestas iban en la línea del diseño de nuevos materiales que mejoraran las características de los dispositivos electrónicos, la idea de fabricar un material en que se pusiera de manifiesto el efecto cuántico de tamaño, y su aplicación a la fabricación de dispositivos electrónicos es posterior, y se debe a Esaki y Tsu [1], quienes vislumbraron la posibilidad de fabricar una superred de materiales semiconductores, mostrando teóricamente las nuevas propiedades de estos nuevos sistemas. Pero no fue hasta 1974 cuando Esaki *et al.* [6] lograron la primera evidencia experimental de un efecto cuántico en una superred: explicaron las

oscilaciones en la conductividad diferencial en la dirección de crecimiento de la superred como consecuencia del efecto túnel resonante de los electrones a través de las barreras de potencial. Ese mismo año, Dingle *et al.* [7] mostraron directamente en sus experimentos de absorción óptica la cuantización de los niveles de energía en pozos cuánticos.

La mayor parte de los sistemas laminares de semiconductores estudiados están basados en $GaAs$ y la aleación $Al_xGa_{1-x}As$. Esto se debe, por un lado, a que se conoce mucho mejor la cinética del crecimiento de los materiales III-V que la de otros semiconductores compuestos; por otro lado, para las aplicaciones prácticas es necesario que el semiconductor tenga una discontinuidad de banda grande, alta movilidad y que su crecimiento con impurezas p y n sea fácilmente controlable. La condición de la discontinuidad de banda grande elimina muchos semiconductores elementales, salvo el Boro, el Fósforo y el Selenio; el requisito de la movilidad alta elimina este último y casi todos los semiconductores compuestos; sólo el $GaAs$ y el InP tienen movilidades mayores que el Si . El Fósforo es muy reactivo; esto deja el $GaAs$ y a su aleación $Al_xGa_{1-x}As$ como candidatos más idóneos. Además, sus parámetros de red son tan similares que pueden construirse láminas de espesores grandes sin que las tensiones generen defectos en las heteroestructuras basadas en ellos. En resumen, los materiales III-V, y en particular el $GaAs$ y el $Al_xGa_{1-x}As$, reúnen los requisitos idóneos para la fabricación de dispositivos cuánticos de semiconductores, y por consiguiente han sido los más ampliamente utilizados. A continuación se describen las principales características físicas de estos materiales.

1.1 Materiales III-V volúmicos

Los compuestos III-V cristalizan en la estructura zincblenda, que consiste en dos redes cúbicas centradas en las caras (fcc) desplazadas una de otra una distancia igual a un cuarto de la diagonal principal del cubo (figura 1.1 (a)), en las que las posiciones de una de las redes fcc están ocupadas por los cationes, y las posiciones de la otra por los aniones. La red recíproca de la zincblenda es cúbica centrada en el cuerpo (bcc), y su primera Zona de Brillouin es un octaedro truncado, mostrada en la figura 1.1(b), en la que se indican sus principales puntos de simetría. En los compuestos III-V hay 8 electrones externos que forman los enlaces químicos y son responsables de las propiedades

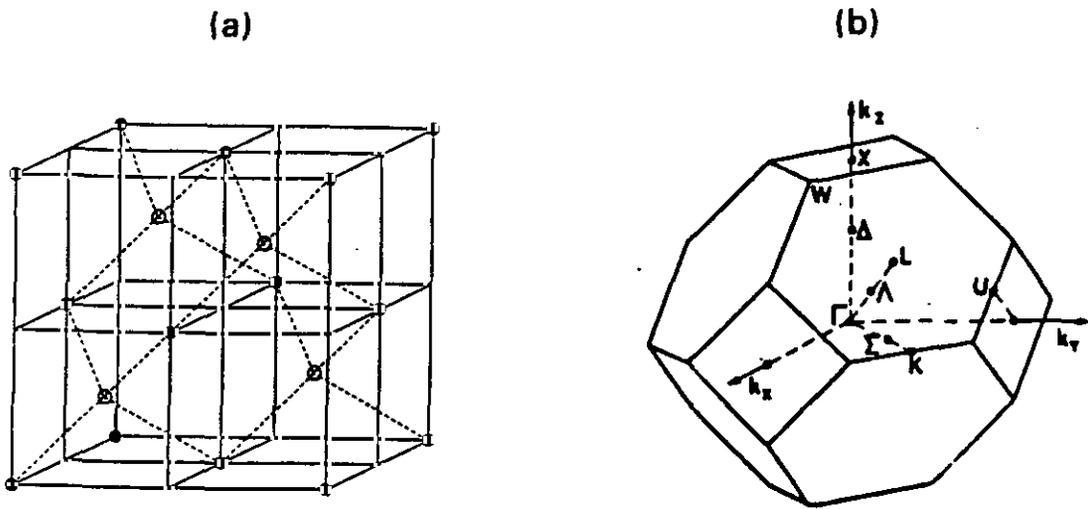


Figura 1.1 : (a): Celda cúbica convencional de la zincblenda; (b): Primera zona de Brillouin de la red cúbica centrada en las caras.

ópticas en torno a la banda prohibida y de transporte electrónico de estos materiales. Se produce una hibridación de los orbitales s y p de los electrones externos (3 provenientes del catión y 5 del anión), con lo que se forman enlaces tetraédricos entre un tipo de átomo y sus 4 próximos vecinos, que son del otro tipo. Los orbitales s enlazantes están muy fuertemente ligados y ocupados por 2 electrones por celda unidad. Los orbitales p enlazantes están ocupados por los 6 electrones restantes, y los orbitales antienlazantes permanecen vacíos. Como hay un número enorme de celdas unidad en el cristal, los niveles enlazantes y antienlazantes se ensanchan, dando lugar a las bandas del cristal. *Grosso modo*, puede decirse que las 3 bandas de valencia más altas (de huecos pesados, ligeros y desdoblada por espín, en orden decreciente de energía) se originan a partir de los orbitales p enlazantes, y la banda de conducción más baja suele provenir del orbital s antienlazante (tal es el caso del $GaAs$).

En todos los compuestos III-V el borde superior de la banda de valencia se halla muy próximo al punto Γ de la zona de Brillouin. Considerando el acoplamiento espín-órbita, las bandas de huecos pesados y ligeros están degeneradas en Γ (figura 1.2). El borde inferior de la banda de conducción de los materiales III-V se halla bien en el punto Γ , bien cerca de los puntos X o L . En general, cuanto más pesado es el catión, más probable

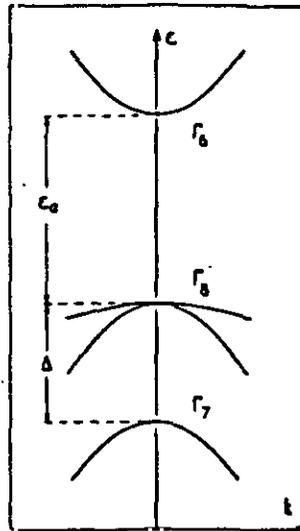


Figura 1.2 : Estructura de bandas de un semiconductor III-V con discontinuidad de banda directa en un entorno del centro de la zona de Brillouin.

es hallar el borde de la banda de conducción cerca del punto Γ . Así, el *GaAs* lo tiene en Γ , mientras que el *AlAs* lo tiene próximo al punto X .

Como se ha comentado anteriormente, se pueden hacer aleaciones de los compuestos III-V, como la citada $Al_xGa_{1-x}As$, que está formada a partir del *GaAs* y el *AlAs*. Esta aleación no es periódica: los cationes *Ga* y *Al* se distribuyen aleatoriamente en las posiciones de la subred fcc catiónica. Sin embargo, los estados electrónicos de la aleación pueden describirse por medio de la aproximación de cristal virtual, que consiste en reemplazar el cristal aperiódico por un potencial promedio. De esta manera pueden definirse masas efectivas, bandas, funciones de Bloch, y la aleación se trata como un material periódico. Si los dos compuestos binarios tienen bandas prohibidas similares, la banda prohibida de sus aleaciones varía linealmente con x . Si las bandas prohibidas o las constantes de red son muy diferentes, la variación de la banda prohibida de las aleaciones es no lineal [16].

1.2 Heteroestructuras de semiconductores

Existen en la literatura gran número de referencias en las que estos sistemas se estudian con detalle; los libros de B. Vinter [8] y G. Bastard [9] son una excelente introducción al tema. El propósito de este apartado es presentar una descripción somera y cualitativa de las heteroestructuras de semiconductores, sin pretender en ningún momento que sea rigurosa y ni mucho menos exhaustiva, para lo cual los libros anteriormente mencionados y los trabajos citados en ellos son de gran utilidad, y a la vez una muestra del interés que despiertan estas estructuras en la actualidad.

Las técnicas de epitaxia actuales permiten el crecimiento de materiales semiconductores cristalinos a capas prácticamente sin defectos. En particular, esta técnica ha hecho posible el crecimiento de láminas de un semiconductor sobre otro distinto, de modo que la intercara entre ambos presenta muy pocos defectos. Esto es posible si la estructura cristalina de los dos semiconductores no es muy diferente; en caso contrario la epitaxia es imposible. Si los parámetros de red de los dos materiales que forman la intercara son muy distintos, se producen tensiones en ésta, de manera que no pueden creerse láminas de gran espesor sin que se produzcan dislocaciones.

Debido a la redistribución de carga que se produce en la intercara, los bordes de banda de los dos semiconductores se desplazan uno respecto del otro. Esta diferencia de energías se conoce como discontinuidad de banda; sólo puede calcularse con modelos microscópicos muy elaborados, que dan errores del orden de 0.1 eV o más, aunque las tendencias son predichas correctamente.

Atendiendo a la posición relativa de los bordes de la banda de conducción inferior y de valencia superior, las heteroestructuras de semiconductores se clasifican en dos tipos. Se llaman heterouniones de tipo I a aquéllas en las que los bordes de las bandas de conducción y valencia del material de banda prohibida menor se hallan en la banda prohibida del semiconductor de banda prohibida mayor (figura 1.3(a)). En las heterouniones de tipo II la energía del borde de la banda de valencia del material de banda prohibida menor corresponde a una energía permitida de la banda de valencia del material de banda prohibida mayor (figura 1.3(b)). Las heterouniones $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ son de tipo I.

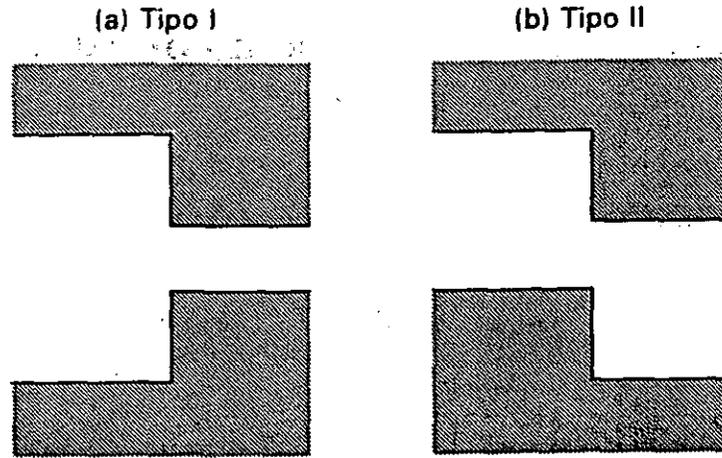


Figura 1.3 : Perfiles de los potenciales de las bandas de conducción y valencia de heterouniones simples; (a): tipo I; (b): tipo II.

1.2.1 Pozos cuánticos y superredes estructurales

Si se crecen sucesivamente varias láminas de diferentes semiconductores, pueden fabricarse una gran variedad de estructuras, como los pozos cuánticos y las superredes, en las que se ponen de manifiesto efectos cuánticos de tamaño. Un pozo cuántico estructural está formado por una lámina delgada de un semiconductor A (el pozo) emparedada entre dos láminas (las barreras) de un semiconductor diferente B, de modo que el borde de banda del material de pozo tiene una energía inferior a la del borde de la banda del material barrera (figura 1.4(a)). Las barreras pueden estar formadas por materiales distintos, siempre que la energía del borde de la banda del material de pozo sea inferior a las de los dos materiales barrera. Decimos que este pozo cuántico es estructural para destacar que está formado por la alternancia de láminas de semiconductores diferentes, distinguiéndolo así de los pozos y superredes de dopado, que se describen más adelante. Un portador en esta heteroestructura siente un potencial atractivo en la zona A, y si su energía asociada al movimiento en la dirección de crecimiento z es menor que la energía del borde de banda en las barreras, su vector de onda en dicha dirección k_z está cuantizado y sólo toma valores discretos. Por encima del borde de la banda de la barrera

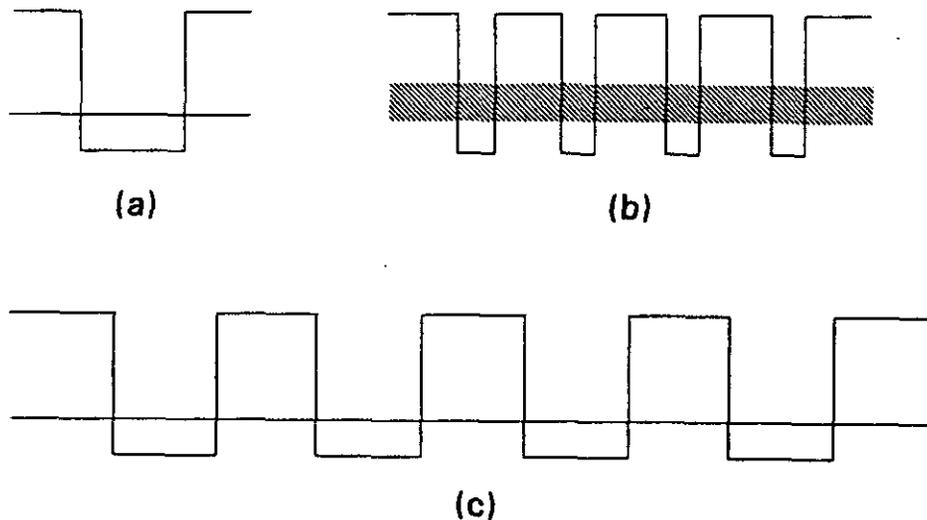


Figura 1.4 : Perfiles de potencial de diferentes tipos de heteroestructuras:
 (a): pozo cuántico simple; (b): superred; (c): pozo cuántico múltiple.

todos los valores del vector de onda k_z están permitidos. En el plano xy perpendicular a la dirección de crecimiento el movimiento de los portadores es libre, de modo que un portador confinado en el pozo tiene una energía suma de una parte discreta debida a la cuantización de k_z y de un término de energía cinética en el plano xy , que toma un continuo de valores.

Para que los efectos cuánticos sean apreciables, el ancho del pozo (longitud de la capa A) ha de ser mucho menor que el recorrido libre medio del portador en dicho material, de modo que los valores discretos de k_z estén apreciablemente separados.

La superred estructural más sencilla consiste en una sucesión infinita de pozos cuánticos de material A separados por barreras B, de la forma A-B-A-B... (figura 1.4(b)). En una superred, existe una periodicidad adicional en el sistema, mayor que la de la celda unidad primitiva de sus constituyentes. Esta definición de superred es puramente cristalográfica; desde el punto de vista de la estructura electrónica, suele reservarse el término superred para los sistemas en los que el recorrido libre medio del electrón es menor que el periodo de la superred, de manera que se manifiestan los efectos cuánticos de tamaño. En las

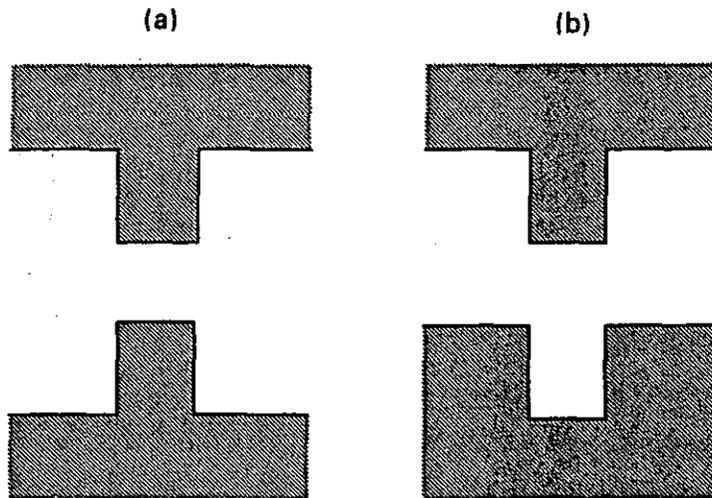


Figura 1.5 : Perfiles de los potenciales de las bandas de conducción y valencia de 2 tipos de pozos cuánticos, clasificados atendiendo al tipo de heterouniones que los forman; (a): tipo I; (b): tipo II.

superredes k_z , toma valores continuos en intervalos permitidos de energía (minibandas) separados por intervalos de energías prohibidas, de manera análoga a las bandas permitidas y prohibidas de los cristales volúmicos. Si las barreras son muy anchas, prácticamente no hay acoplamiento entre pozos: los anchos de las minibandas son inapreciables. Tales sistemas se conocen como pozos cuánticos múltiples (figura 1.4(c)).

Los pozos cuánticos y superredes pueden clasificarse atendiendo a la naturaleza de las heterouniones que los forman. Un pozo cuántico B-A-B es de tipo I(II) cuando la intercara entre los materiales A y B es de tipo I(II). En un pozo cuántico B-A-B de tipo I, el material A es un pozo tanto para electrones como para huecos (figura 1.5(a)). Si la heterounión es de tipo II (figura 1.5(b)), el material A es un pozo para electrones, pero una barrera para los huecos, de manera que los portadores de distinto signo se hallan espacialmente separados.

Si se consideran sistemas con 3 ó más componentes, es posible construir heteroestructuras en las que haya uniones de tipo I y II entre sus distintos componentes. A estos sistemas se les llama de tipo III o politipo. Sólo con 3 componentes las posibilidades son muchas: si la unión A-B es de tipo I y la B-C de tipo II, las secuencias A-B-C, A-C-B-C,

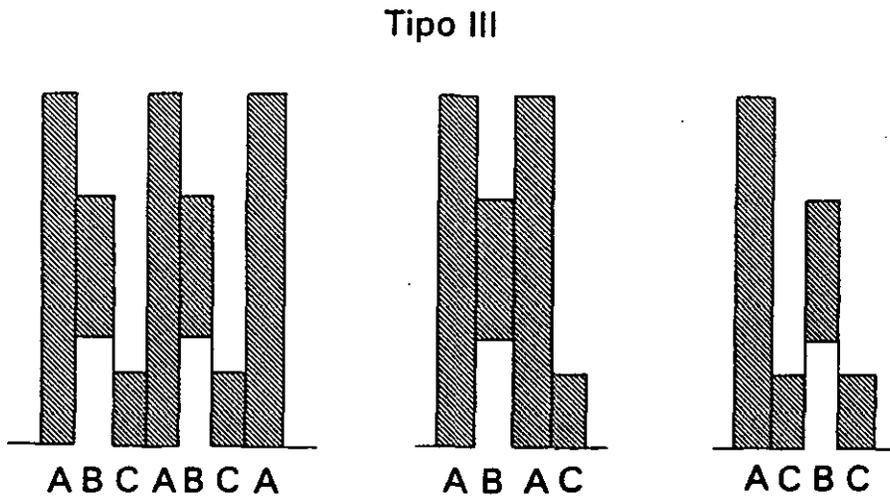


Figura 1.6 : Perfiles de potencial de diferentes heteroestructuras de tipo III.

A-B-A-B-C... tienen perfiles de banda muy diferentes (figura 1.6), que no pueden lograrse en sistemas de dos componentes.

1.3 Homoestructuras cuánticas: sistemas dopados

Es posible fabricar una superred variando periódicamente el dopado de un solo tipo de semiconductor: las superredes $n-i-p-i$ están compuestas por capas de un mismo semiconductor dopadas n y p separadas por capas sin dopar (i por intrínsecas). Los electrones de las zonas n -dopadas se transfieren a las zonas p -dopadas, de modo que la distribución no homogénea de carga produce un potencial que modula el perfil de las bandas (figura 1.7). Si la superred está compensada (es decir, hay la misma cantidad de impurezas donadoras que de aceptoras) el cambio en el perfil de las bandas se debe a las impurezas ionizadas. Si hay exceso de un tipo de impureza, los portadores se acumulan en las capas dopadas: los electrones se confinan en las zonas n y los huecos en las zonas p , y la presencia de portadores modifica a su vez el perfil de las bandas.

La primera superred $n-i-p-i$ fue construida por Döhler [10] en 1972, y ya señalaba entonces la ventaja principal de estas homoestructuras cuánticas: la posibilidad de modificar muy fácilmente la población de portadores, el ancho de la banda prohibida y otras

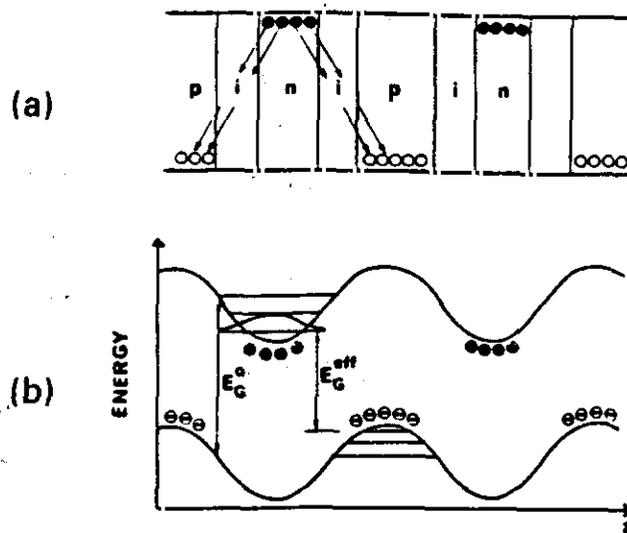


Figura 1.7 : Estructuras *n-i-p-i*; (a): secuencia de crecimiento del sistema; (b): variación de la discontinuidad de banda resultante.

propiedades, debido a que el potencial se debe a la presencia de cargas cuya distribución y densidad pueden cambiarse. Por el contrario, en las heteroestructuras no dopadas el potencial depende del alineamiento de las bandas de los materiales que la constituyen, que es un valor fijo para cada pareja de materiales.

Igualmente, es posible fabricar un pozo cuántico dopando selectivamente un semiconductor: las impurezas cumplen en este caso la doble función de modular el potencial debido al campo electrostático que producen e introducir portadores en la estructura. Para que los efectos cuánticos de confinamiento sean apreciables, la modulación ha de producirse en una región de longitud menor que el recorrido libre medio del electrón en el material. Los pozos y las superredes delta son ejemplos de este tipo de homoeestructuras cuánticas, en los que el espesor de la zona dopada intenta reducirse al máximo; idealmente, el ancho de la lámina dopada sería 0, lo que supone una distribución espacial de impurezas como una δ de Dirac, de ahí el nombre de las estructuras.

1.4 Relaciones de dispersión en un punto de alta simetría: método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se utiliza para describir las bandas de energía y funciones de onda de los semiconductores cristalinos cerca de los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin, por medio de teoría de perturbaciones. Utiliza la forma de Bloch de las funciones de onda en un potencial periódico. Otros métodos semiempíricos, como el de combinación lineal de orbitales atómicos o el método de pseudopotenciales, dan una buena descripción de toda la zona de Brillouin. Sin embargo, tal conocimiento no es necesario para el estudio de la mayoría de las propiedades electrónicas de los semiconductores, que suelen estar gobernadas por los estados del borde inferior de la banda de conducción y los superiores de las bandas de valencia, para los que sirve una descripción local de la estructura de bandas. En el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ basta conocer un número pequeño de parámetros, como discontinuidades de banda y masas efectivas, para lograr tal descripción. Una buena introducción al método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en semiconductores volúmicos es la realizada por Kane [11]; para su aplicación a heteroestructuras de semiconductores puede verse la referencia [12].

1.4.1 Aproximación de masa efectiva en semiconductores volúmicos

En un cristal volúmico la ecuación de Schrödinger monoeléctronica es

$$H\psi = \left(\frac{p^2}{2m_0} + V_{\text{xtal}}(\mathbf{r}) \right) \psi = E\psi \quad (1.1)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre, V_{xtal} es el potencial periódico cristalino y se han despreciado los términos relativista y de acoplamiento espín-órbita. Este hamiltoniano es invariante bajo traslaciones en la red cristalina, de modo que el vector de onda cristalino \mathbf{k} es un buen número cuántico; por consiguiente, las autofunciones del hamiltoniano pueden escogerse de manera que sean simultáneamente autofunciones del operador de traslación $T_{\mathbf{d}}$ en la red,

$$T_{\mathbf{d}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{d}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

esto es, pueden elegirse como funciones de Bloch:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función que tiene la periodicidad del cristal.

Sustituyendo (1.3) en (1.1) se tiene

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V_{\text{xtal}}(\mathbf{r}) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Para un \mathbf{k} dado, el conjunto de todos los $u_{n\mathbf{k}}$ es completo para funciones con la periodicidad del cristal. Por tanto, escogiendo $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, la función de onda para cualquier \mathbf{k} puede expresarse en términos de los $u_{n\mathbf{k}_0}$,

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

Si se define

$$H_{\mathbf{k}_0} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V_{\text{xtal}} \quad (1.6)$$

la ecuación (1.4) puede escribirse

$$\left\{ H_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

que multiplicada por $u_{n'\mathbf{k}_0}^*$ e integrada sobre la celda unidad (en la que las $u_{n\mathbf{k}_0}$ están normalizadas) da la siguiente ecuación de autovalores:

$$\sum_{n'} \left[\left\{ E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right\} \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] c_{n'n} = E_n(\mathbf{k}) c_{n'n} \quad (1.8)$$

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int_{\text{celda unidad}} u_{n'\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

La ecuación (1.8) es válida para todo \mathbf{k} , aunque es útil cuando $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}_0$, de modo que los términos no diagonales

$$\frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \quad (1.9)$$

son pequeños y pueden tratarse como una perturbación de $H_{\mathbf{k}_0}$. En el caso de una sola banda, usando teoría de perturbaciones de segundo orden, la ecuación (1.8) da

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \quad (1.10)$$

válida en un entorno de \mathbf{k}_0 . Normalmente el punto \mathbf{k}_0 es un extremo, por lo que el término lineal en $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ es 0; usando ejes principales, queda

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(k_i - k_{0i})^2}{m_i} \quad (1.11)$$

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \quad (1.12)$$

m_i son las masas efectivas en las direcciones de simetría, y \mathbf{u}_i los versores de dichas direcciones. En un sistema isótropo las tres masas efectivas son iguales, y (1.11) se reduce a

$$E_n(k) = E_n(k_0) + \frac{\hbar^2(k - k_0)^2}{2m^*} \quad (1.13)$$

que es la energía de una partícula libre de masa m^* . El efecto del potencial cristalino y del resto de las bandas queda englobado en la masa efectiva.

1.4.2 Aproximación de funciones envolventes en heteroestructuras de semiconductores

Si se forma una heteroestructura con semiconductores de constante de red y estructura de bandas similares, se puede utilizar la aproximación de funciones envolventes para construir los autoestados del sistema. En principio, la función de onda del sistema puede desarrollarse en las partes periódicas de las funciones de Bloch de los bordes considerados dentro de cada material; si la heteroestructura está formada por capas de materiales A y B,

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_i F_i^{(A)}(\mathbf{r}) u_{i\mathbf{k}_0}^{(A)}(\mathbf{r}) & (\mathbf{r} \in A), \\ \sum_i F_i^{(B)}(\mathbf{r}) u_{i\mathbf{k}_0}^{(B)}(\mathbf{r}) & (\mathbf{r} \in B). \end{cases} \quad (1.14)$$

donde $F_i^{A(B)}(\mathbf{r})$ es la función envolvente en el material A(B).

La aproximación fundamental en el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para heteroestructuras se basa en la similaridad de las estructuras de bandas y constantes de red de los materiales que la constituyen, y consiste en suponer que las funciones de Bloch de estos materiales son iguales:

$$u_{i\mathbf{k}_0}^{(A)}(\mathbf{r}) = u_{i\mathbf{k}_0}^{(B)}(\mathbf{r}) = u_{i\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (1.15)$$

de modo que la función de onda de la heteroestructura puede escribirse

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i F_i(\mathbf{r}) u_{i\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (1.16)$$

Como en la práctica la suma en (1.16) tiene un número finito de sumandos, tal descripción es válida en un entorno de \mathbf{k}_0 .

Si se supone que la intercara entre los medios A y B es perfectamente abrupta, esta función de onda es un autoestado del hamiltoniano

$$H = H_A \theta(z \in A) + H_B \theta(z \in B) \quad (1.17)$$

donde $H_{A(B)}$ es el hamiltoniano de volumen del material A(B), y $\theta((z \in A(B)))$ es igual a 1 si $z \in A(B)$ e igual a 0 en caso contrario. Si existe un potencial externo de variación lenta en la escala del parámetro de red del cristal, la ecuación para las funciones envolventes es como (1.8), más el término V_{ext} . Este potencial puede deberse a la presencia de cargas (portadores o impurezas) en el sistema. En el caso de una banda, la ecuación para las funciones envolventes en cada medio es la ecuación de Schrödinger con el potencial V_{ext} , sustituyendo la masa del electrón libre por la masa efectiva en el material considerado, y tomando en cada medio como origen de energía el autovalor de $u_{n\mathbf{k}_0}$, $E_{n\mathbf{k}_0}$. La diferencia $E_{n\mathbf{k}_0(A)} - E_{n\mathbf{k}_0(B)}$ es la discontinuidad de banda, la distancia entre los bordes de banda de los dos materiales que forman la estructura. Al resolver el problema de autovalores aparece en la ecuación de Schrödinger con masa efectiva como un potencial $V_{A(B)}$ constante a trozos que condensa la información sobre el rearrreglo microscópico que se produce en una intercara:

$$\left(\frac{p^2}{2m_{A(B)}^*} + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{A(B)} \right) F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in A(B). \quad (1.18)$$

El cálculo de los autovalores y autoestados de la heteroestructura puede considerarse un problema de empalme de las soluciones de dos problemas volumicos, para lo cual es muy adecuado el Método de Empalme de Funciones de Green [13, 14], o como la solución de una ecuación de Schrödinger válida en los dos medios, en la que la masa efectiva depende de la posición. En heteroestructuras laminares de materiales isótropos la masa efectiva depende únicamente de la posición en la dirección de crecimiento, que a partir de ahora llamamos z . Si se sustituye sin más en la ecuación (1.18) m^* por $m^*(z)$ el hamiltoniano no es hermítico. La hermitización más comúnmente usada en el modelo a una banda es el hamiltoniano de Ben Daniel-Duke [15]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \mathbf{p} \cdot \frac{1}{m^*(z)} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \right) F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}). \quad (1.19)$$

Las dos técnicas de solución han de llevar al cumplimiento de las condiciones físicas de conservación de la probabilidad y de la corriente de probabilidad en las intercaras, que en términos de las funciones envolventes equivale a

$$F(z_0 - \epsilon) = F(z_0 + \epsilon), \quad \frac{F'(z_0 - \epsilon)}{m_A^*} = \frac{F'(z_0 + \epsilon)}{m_B^*}; \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad (1.20)$$

donde z_0 es la posición de la intercara entre el material A ($z_0 < 0$) y B ($z_0 > 0$).

Si no existe un potencial exterior que altere su simetría, los sistemas laminares de materiales isótropos crecidos en la dirección z son invariantes bajo traslaciones en el plano xy , por lo que el vector de onda $\boldsymbol{\kappa}$ en dicho plano es un buen número cuántico, y la envolvente $F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{r})$ puede escogerse de la forma

$$F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{A}} F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(z) \quad (1.21)$$

donde $\boldsymbol{\rho}$ es el vector posición paralelo a las intercaras, A el área de normalización en el plano xy y ν es un índice que etiqueta los estados según su vector de onda en la dirección z . A $F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(z)$ se le llama también función envolvente; sustituyendo (1.21) en la ecuación (1.18) se ve que verifica en cada medio la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{\kappa}^2}{2m^*} \right) F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(z) = E_\nu F_{\nu\boldsymbol{\kappa}}(z). \quad (1.22)$$

Resolviendo esta ecuación se obtienen las funciones envolventes y autoenergías del sistema. Como existe invariancia bajo traslaciones en el plano xy , el potencial que aparece en la ecuación (1.22) sólo depende explícitamente de z : el movimiento de los electrones en el plano xy es libre. El potencial $V(z)$ contiene un término que da cuenta del alineamiento relativo de las bandas de los dos semiconductores, y si se dopa el sistema sin alterar su simetría, tendría otro término $V_{ext}(z)$ de potencial electrostático producido por las impurezas y los portadores provenientes de éstas.

Si la masa efectiva fuera constante en toda la heteroestructura, bastaría resolver la ecuación (1.22) para $\boldsymbol{\kappa} = 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) F_\nu(z) = E_\nu F_\nu(z) \quad (1.23)$$

y añadir el término de energía cinética en el plano xy , $\frac{\hbar^2 \boldsymbol{\kappa}^2}{2m^*}$, a E_ν , que es autovalor de la energía asociado al movimiento en la dirección z .

Si el potencial $V(z)$ es periódico, por ejemplo, si el sistema estudiado es una superred, es posible escoger las funciones envolventes del problema como estados Bloch en la dirección z . El espectro de este hamiltoniano unidimensional, como comentábamos antes, está formado por minibandas permitidas separadas por intervalos de energías prohibidas. En este caso, respecto del movimiento en la dirección z , etiquetaremos los autoestados y autovalores con dos índices: uno discreto, j , que indica la minibanda a la que pertenece la energía en cuestión, y uno continuo, q , que indica el valor del vector de onda en la dirección z de dicho estado.

De esta manera, la función envolvente $F_{jq\kappa}(\mathbf{r})$ sería

$$F_{jq\kappa}(\mathbf{r}) = C \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{A}} F_{jq\kappa}(z). \quad (1.24)$$

C es una constante que se determina al fijar la normalización de la función envolvente $F_{jq\kappa}(z)$ y A es el área de normalización de la onda plana $e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho}}$.

La envolvente $F_{jq\kappa}(z)$ verifica en cada medio la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E_j(\kappa, q) \right) F_{jq\kappa}(z) = 0 \quad (1.25)$$

y cumple las condiciones de continuidad (1.20) asociadas con las conservación de la probabilidad y de la corriente de probabilidad en las intercaras del sistema.

Fijemos la constante de normalización de la función envolvente. Si Ω es el volumen de la muestra, se tiene que

$$\int_{\Omega} d\mathbf{r} |F_{jq\kappa}(\mathbf{r})|^2 = \int_{\Omega} d\mathbf{r} \left| C \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{A}} F_{jq\kappa}(z) \right|^2 = 1. \quad (1.26)$$

La envolvente $F_{jq\kappa}(z)$ puede escogerse de modo que cumpla la propiedad de Floquet-Bloch, $F_{jq\kappa}(z + nd) = e^{inqd} F_{jq\kappa}(z)$, y esté normalizada a un periodo de la superred:

$$\int_0^d |F_{jq\kappa}(z)|^2 dz = 1. \quad (1.27)$$

Entonces, si N es el número de periodos de la superred ($N \rightarrow \infty$),

$$\int_{\Omega} d\mathbf{r} |F_{jq\kappa}(\mathbf{r})|^2 = C^2 \cdot N \int_0^d |F_{jq\kappa}(z)|^2 dz = 1, \quad (1.28)$$

con lo que la función envolvente queda completamente determinada, salvo una fase trivial:

$$F_{jq\kappa}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{N \cdot A}} F_{jq\kappa}(z). \quad (1.29)$$

1.5. Sistemas dopados: cálculo autoconsistente de la estructura electrónica y la población

Como en el caso de los pozos cuánticos, si la masa efectiva es constante a lo largo de todo el sistema, la relación de dispersión en el plano xy es parabólica, y las envolventes no dependen de κ . Entonces, las autofunciones y autovalores de la ecuación (1.25) son

$$F_{jq\kappa}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\kappa \cdot \rho}}{\sqrt{N \cdot A}} F_{jq}(z); \quad E_j(\kappa, q) = \varepsilon_j(q) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}. \quad (1.30)$$

$\varepsilon_j(q)$ es la energía asociada al movimiento en la dirección z , y $\hbar^2 \kappa^2 / 2m^*$ es la energía del movimiento en el plano xy , que es puramente cinética. $F_{jq}(z)$ satisface la ecuación (1.25), sustituyendo $E_j(\kappa, q)$ por $\varepsilon_j(q)$. Para un κ dado hay valores permitidos (minibandas) y prohibidos de la energía. No son bandas permitidas y prohibidas en sentido estricto, pues en cada valor permitido $\varepsilon_j(q)$ comienza un continuo de energías dado por la relación de dispersión parabólica $\hbar^2 \kappa^2 / 2m^*$; a partir de $\varepsilon_1(0)$ todas las energías son permitidas si no se restringen los valores de κ .

1.5 Sistemas dopados: cálculo autoconsistente de la estructura electrónica y la población

A $T = 0K$ las heteroestructuras descritas anteriormente no tienen portadores. Una manera de poblar estas estructuras es dopándolas, lo que permite tener portadores libres a bajas temperaturas en equilibrio térmico. Los portadores se mueven libremente en el plano xy , pero sienten un potencial que los confina en la dirección z de crecimiento, lo que cuantiza su vector de onda en dicha dirección. Los portadores y las impurezas ionizadas crean un potencial electrostático que altera el perfil plano de la banda, y consiguientemente los niveles de energía respecto del sistema des poblado. Por tanto, para describir adecuadamente el espectro y el perfil de la banda de la heteroestructura es necesario resolver autoconsistentemente las ecuaciones de Schrödinger y de Poisson del sistema. Tal solución supone lo siguiente: conocidas las funciones envolventes de los estados ocupados de la heteroestructura, así como las correspondientes autoenergías y el nivel de Fermi del sistema, se tiene la densidad local de carga producida por los portadores:

$$\rho_c(\mathbf{r}) = -2e \sum_j \sum_{\kappa} f(E_j(\kappa)) |F_{j\kappa}(\mathbf{r})|^2 =$$

$$= -2e \sum_j \sum_{\kappa} f(E_j(\kappa)) |F_{j\kappa}(z)|^2 = \rho_e(z), \quad (1.31)$$

donde $f(E)$ es la función de distribución de Fermi. Como la función envolvente viene dada por la expresión (1.21), la densidad de carga depende sólo de la coordenada z . $\rho_e(z)$ produce un potencial Hartree, solución de la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2}{dz^2} V_e(z) = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \rho_e(z), \quad (1.32)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío y ϵ_r es la constante dieléctrica relativa del material; para abreviar haremos $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$. La integral doble que resuelve esta ecuación puede transformarse en una simple. Tomemos el origen $z = 0$ en el plano de simetría del sistema; si el sistema es simétrico, como todos los estudiados en esta memoria, se tiene entonces que $V_e'(0) = 0$; salvo una constante de integración, que fija el origen de energías, se tiene que el potencial producido por los electrones es

$$V_e(z) = \frac{e}{\epsilon} \int_0^z d\xi \int_0^\xi d\xi' \rho_e(\xi'). \quad (1.33)$$

esta integral puede evaluarse por partes: definiendo

$$U(\xi) \equiv \int_\xi^\infty d\xi' \rho_e(\xi'); \quad dU(\xi) = -\rho_e(\xi) d\xi, \quad (1.34)$$

se tiene

$$\begin{aligned} V_e(z) &= \frac{e}{\epsilon} \int_0^z d\xi U(\xi) = \frac{e}{\epsilon} \left\{ [\xi U(\xi)]_0^z - \int_0^z \xi \rho_e(\xi) d\xi \right\} = \\ &= \frac{e}{\epsilon} \left\{ zU(z) - \int_0^z \xi \rho_e(\xi) d\xi \right\} = \frac{e}{\epsilon} \int_0^z (z - \xi) \rho_e(\xi) d\xi, \end{aligned} \quad (1.35)$$

lo cual simplifica la evaluación numérica del potencial electrostático producido por los electrones.

El potencial Hartree $V_e(z)$ sumado al potencial constante a trozos de la heteroestructura $V_b(z)$ y al producido por las impurezas ionizadas $V_{imp}(z)$, ha de ser igual al potencial $V(z)$ que aparece en la ecuación de Schrödinger:

$$V(z) = V_e(z) + V_{imp}(z) + V_b(z). \quad (1.36)$$

Cuando se cumple esta condición, se tiene la solución autoconsistente de problema.

1.5.1 Interacción de canje y correlación

A las densidades areales de portadores que suelen alcanzarse en los sistemas cuánticos descritos anteriormente, la interacción de canje y correlación puede ser importante. Una manera sencilla de incluir los efectos de canje y correlación es mediante la Aproximación de Funcional Local de Densidad, basada en la Teoría del Funcional de Densidad desarrollada por Kohn y Sham [18]. Hohenberg y Kohn demostraron en 1965 que todas las propiedades físicas del estado fundamental de un sistema de muchos cuerpos en interacción se pueden determinar a partir de su densidad de partículas $n(\mathbf{r})$. En este formalismo, las autoenergías y autoestados del sistema se obtienen a partir de una ecuación para una partícula, introducida por Kohn y Sham, que es una ecuación de Schrödinger con un término adicional en el potencial, que da cuenta de la interacción de canje y correlación. Este potencial es un funcional desconocido de la densidad. La aproximación más sencilla es la del Funcional Local de Densidad, que consiste en hacer

$$V_{xc}(\mathbf{r}) \equiv \mu_{xc}[n_0 = n(\mathbf{r})] \quad (1.37)$$

donde μ_{xc} es la energía de canje y correlación de un gas homogéneo de partículas, en la que se sustituye la densidad constante n_0 por la densidad $n(\mathbf{r})$ para dar cuenta de la no homogeneidad del gas.

Hay diferentes parametrizaciones del funcional V_{xc} , que consisten en distintas interpolaciones de los resultados de la teoría en los límites de baja y alta densidad del gas electrónico; las diferencias cuantitativas entre las distintas parametrizaciones son pequeñas. En esta memoria utilizaremos una parametrización del funcional local V_{xc} debida a Hedin y Lundqvist [19]:

$$V_{xc}(z) = - \left[1 + 0.7734x \ln(1 + x^{-1}) \right] \frac{2}{\pi \alpha r_s} Ry^*, \quad (1.38)$$

donde $x \equiv r_s/21$,

$$r_s \equiv r_s(z) = \left(\frac{4}{3} \pi a^* n(z) \right)^{-1/3}, \quad (1.39)$$

y a^* , Ry^* son el radio de Bohr y el Rydberg efectivos, respectivamente:

$$a^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^2}{m^*e^2}; \quad Ry^* = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r a^*}. \quad (1.40)$$

En los sistemas en los que hay una variación de la composición, puede hacerse $\epsilon_r \equiv \epsilon_r(z)$; $m^* = m^*(z)$ en la expresión del funcional de canje y correlación. En las estructuras basadas en $GaAs$ y $Al_xGa_{1-x}As$ este efecto es pequeño, debido a la semejanza de las constantes dieléctricas y masas efectivas de los dos materiales.

En principio esta aproximación es válida para sistemas casi homogéneos; sin embargo, se utiliza ampliamente en la descripción del gas electrónico en pozos cuánticos y superredes con resultados satisfactorios, aunque no se ha justificado rigurosamente su validez para este tipo de sistemas, que en general no tienen precisamente densidades electrónicas muy homogéneas.

La inclusión de los efectos de canje y correlación en el estudio del gas electrónico que puebla un sistema cuántico de semiconductores, como un pozo cuántico o una superred, descrito por una ecuación de Schrödinger de la forma (1.18), supone añadir al potencial (1.36) el funcional (1.38), de modo que el potencial $V_S(z)$ que aparece en la ecuación de Schrödinger es

$$(1.41) \quad V_S(z) = V_b(z) + V_e(z) + V_{imp}(z) + V_{xc}(z).$$

Dentro de esta aproximación, las soluciones de la correspondiente ecuación de Schrödinger tienen en cuenta efectos colectivos, aun cuando se trata en principio de una ecuación monoeléctrica.

1.6. Motivación

En esta memoria se estudia la estructura electrónica de distintos pozos cuánticos y superredes basados en $GaAs$ y $Al_xGa_{1-x}As$ y dopados con Si . Como decíamos en el apartado 1.5, el dopado de las estructuras introduce cargas en el sistema, que alteran el perfil de las bandas, lo que hace necesaria la resolución autoconsistente del problema. Para la descripción de superredes o pozos cuánticos desdoblados no es necesario tal esquema, y estos sistemas han sido estudiados con otro tipo de modelos. En el grupo en el que he desarrollado este trabajo se han resuelto distintos problemas de estructura electrónica, pero siempre en sistemas desdoblados, en los que no es necesario un cálculo autoconsistente. Nosotros nos centraremos en el estudio de sistemas poblados

con electrones, despreciando el efecto de las demás bandas, pero describiendo los efectos de combamiento del perfil de la banda producido por la presencia de portadores.

Como explicábamos en los apartados anteriores, el *GaAs*, el *AlAs* y sus aleaciones son los materiales más ampliamente usados para la fabricación de dispositivos cuánticos; la posibilidad de poder comparar nuestros resultados con datos experimentales es uno de los motivos que justifican esta elección. En el caso de los pozos estructurales con dopado δ en la barrera, la motivación para nuestro estudio es la búsqueda de una explicación para los resultados experimentales obtenidos en estos sistemas.

Por otro lado, las características de estos materiales hacen que un modelo a una banda sea más que suficiente para explicar las propiedades del gas electrónico que puebla este tipo de estructuras. Centraremos nuestro estudio en los efectos relacionados con el potencial electrostático producido por portadores e impurezas ionizadas, que son los más relevantes en estos sistemas, despreciando el acoplamiento con otras bandas.

El esquema de la memoria es el siguiente: en este primer capítulo hemos presentado un breve resumen del tipo de sistemas de semiconductores entre los que se hallan los estudiados en esta memoria, así como del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que emplearemos para la descripción de su estructura electrónica. Como ya hemos visto en apartado 1.5, para tal descripción es necesario resolver autoconsistentemente las ecuaciones de Schrödinger y Poisson. En el capítulo 2 se explican dos formalismos generales de resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas como las que aparecen en el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que es el empleado en esta memoria, el Método de Empalme de Funciones de Green y el Método de Matriz de Transferencia. Como veremos, el primero es muy adecuado para el estudio de sistemas multicapa, como son los pozos cuánticos y las superredes. Respecto del Método de Matriz de Transferencia, su implementación numérica es muy sencilla, de ahí que se haya relacionado con el Método de Empalme de Funciones de Green con vista a su aplicación práctica en problemas que han de ser resueltos numéricamente.

Los capítulos 3 a 7 describen nuestros resultados para los distintos sistemas. En el capítulo 3 se estudian pozos con modulación de dopado; la información experimental sobre la población de estos sistemas es muy abundante y permite una comparación muy amplia con nuestros resultados. Los capítulos 4 y 5 están dedicados a los pozos y superredes δ , sistemas en los que el dopado produce el potencial que confina a los portadores. En

estos casos la densidad areal total está dada por la densidad de impurezas del sistema, por lo que nuestros resultados se contrastan con medidas experimentales de la ocupación de las subbandas en el caso de los pozos, y con espectros de fotoluminiscencia en el caso de las superredes, que dan una indicación de las posiciones relativas de las minibandas ocupadas.

En los capítulos 6 y 7 se estudian pozos cuánticos y superredes con dopado δ . Nuestros resultados explican los altos valores de la densidad areal de portadores observados experimentalmente en los pozos con dopado δ en las barreras; respecto de las superredes, presentamos un estudio más realista de la estructura electrónica de estos sistemas, que han sido abordados en la literatura utilizando modelos muy sencillos, sin tener en cuenta la modificación de la estructura electrónica que producen las cargas en estas estructuras. En el capítulo 8 se exponen las conclusiones derivadas de este trabajo.

Capítulo 2

Técnicas de cálculo

Como hemos visto en el capítulo anterior, el cálculo de la estructura electrónica de los sistemas estudiados en esta memoria supone la solución de la ecuación de Poisson y de la ecuación de Schrödinger. Hemos visto que para el modelo empleado a lo largo de la tesis, la solución de la ecuación de Poisson se reduce a calcular una integral simple. Numéricamente esto no presenta ninguna dificultad.

El cálculo de las autofunciones y autovalores de la ecuación de Schrödinger es más complejo; en particular, en las heteroestructuras de semiconductores los coeficientes de dicha ecuación diferencial no son continuos, lo cual complica su solución. En este capítulo describimos los métodos empleados para la solución de este problema, el Método de Empalme de Funciones de Green y la Técnica de Matriz de Transferencia, exponiéndolos desde la perspectiva de la resolución de nuestro problema concreto. El Método de Empalme de funciones de Green sirve para solucionar problemas de empalme no sólo en medios continuos, descritos en términos de ecuaciones diferenciales, sino también para problemas discretos. Las referencias obligadas para una visión completa de estas técnicas son los libros de García Moliner y Flores [13], García Moliner y Velasco [14] y el artículo de Mora *et al.* [20].

2.1 El Método de Empalme de Funciones de Green

Dado un problema físico descrito por la ecuación de autovalores

$$(E - H)\psi = 0 \quad (2.1)$$

y ciertas condiciones de contorno, se define la función de Green G del problema como la que verifica

$$(E - H)G = I \quad (2.2)$$

y las mismas condiciones de contorno, donde H es el hamiltoniano del problema, I el operador identidad y E , ψ son los correspondientes autovalores y autofunciones. Si se elige la representación espacial, la ecuación (2.2) se escribe

$$(E - H(\mathbf{r}))G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.3)$$

y la representación espectral de la función de Green es

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_j \frac{\psi_j(\mathbf{r})\psi_j^\dagger(\mathbf{r}')}{E - E_j}. \quad (2.4)$$

Como H es un operador hermítico, sus autovalores son reales. Por tanto, $G(E)$ es analítica si $\text{Im } E \neq 0$. Los autovalores discretos de H son polos simples de $G(E)$; el espectro continuo σ_c del Hamiltoniano se halla en un corte de $G(E)$, de modo que si $E \in \sigma_c(H)$, los límites $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(E \pm i\epsilon)$ no coinciden. Físicamente suele adoptarse como definición de $G(E)$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(E + i\epsilon), \quad (2.5)$$

la llamada función de Green causal. En tal caso, la conjugación que aparece en (2.4) debe entenderse en el siguiente sentido: si ψ es un vector columna de la forma $\mathbf{a}(E) + i\mathbf{b}(E)$, donde hemos hecho explícita la dependencia en el autovector, ψ^\dagger es un vector fila $\mathbf{a}^T(E) - i\mathbf{b}^T(E)$, donde no se conjuga el autovalor E . En lo sucesivo denotaremos esta conjugación explícita, que llamaremos transconjugación, como ψ_c^T .

Muchos de los problemas de interés en la física del estado sólido están relacionados con la existencia de superficies e intercaras. En particular, en el estudio de cualquier excitación elemental de los pozos cuánticos y superredes estructurales que hemos descrito

someramente en el capítulo anterior aparece el problema de la intercara. El Método de Empalme de Funciones de Green es un método general, que no depende del problema físico estudiado, que permite construir la función de Green de un sistema a partir de las funciones de Green de los medios que lo constituyen, empalmándolas en la intercara entre dichos medios.

En principio este método es aplicable a cualquier tipo de problema de empalme, independientemente de la forma de la intercara; sin embargo, nos limitaremos por simplicidad a superficies planas, y usaremos una notación adecuada para la descripción de sistemas continuos, como los estudiados en esta memoria, en los que en general H es un operador diferencial de segundo orden, y G es el resolvente de dicho operador. En tal caso, (2.3) es un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas. Por lo demás, la discusión presentada en este apartado es válida para medios discretos y cualquier superficie de empalme [14].

Escogemos las coordenadas de manera que los planos donde se realiza el empalme son $z = \text{const.}$ La ecuación (2.3) es en principio en derivadas parciales; haciendo su transformada de Fourier en las variables x e y , el operador gradiente $\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ se transforma en $(i\kappa, \partial_z)$, de modo que (2.3) queda como un sistema de ecuaciones diferenciales en la variable z , dependiente del vector de onda en el plano xy , κ . Si el sistema es de N ecuaciones, el hamiltoniano es un operador diferencial matricial $N \times N$ en la variable z dependiente de κ , H , y la función de Green G es también una matriz $N \times N$ $G(E, \kappa; z, z')$. En lo sucesivo la dependencia en E, κ se sobreentiende.

Supongamos conocidas las funciones de Green de dos medios volúmicos 1 y 2, que denotaremos por G_1, G_2 . Interesa construir la función de Green del sistema compuesto por los dos medios 1 y 2 unidos en la superficie S , que como se comentó anteriormente, supondremos plana y situada en $z = 0$. Un esquema de esta situación se muestra en la figura 2.1. Indicamos con el subíndice μ la pertenencia al medio μ y con $\bar{\mu}$ la pertenencia al medio complementario (si $\mu = 1$, entonces $\bar{\mu} = 2$). Si se produce una excitación elemental en el punto $z' \in \mu$, en el medio volúmico μ se propaga a $z \in \mu$ según $G_\mu(z, z')$. Pero si el sistema es compuesto, la amplitud en $z \in \mu$ incluye el efecto de la reflexión en

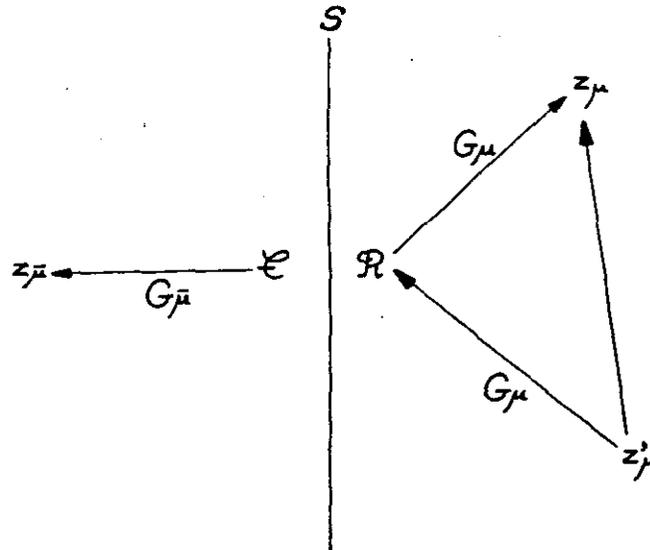


Figura 2.1 : Esquema de un sistema compuesto formado por dos medios unidos en una intercara plana.

S , de modo que la función de Green del sistema compuesto es

$$G_S(z, z') = G_\mu(z, z') + G_\mu(z, 0)\mathcal{R}G_\mu(0, z') \quad (z, z' \in \mu). \quad (2.6)$$

si los dos puntos z, z' pertenecen al mismo medio; la amplitud en un punto situado en el medio $\bar{\mu}$ viene dada por

$$G_S(z, z') = G_{\bar{\mu}}(z, 0)\mathcal{T}G_\mu(0, z') \quad (z \in \bar{\mu}, z' \in \mu). \quad (2.7)$$

\mathcal{R} y \mathcal{T} son objetos definidos en la intercara y representan el efecto de la superficie (reflexión y transmisión, respectivamente) a todo orden de teoría de perturbaciones. Escribiremos los objetos evaluados en una intercara, como \mathcal{R} y \mathcal{T} , en tipo caligráfico; si se trata de una función de Green, se omitirán sus argumentos z y z' .

Si se evalúan las ecuaciones (2.6) y (2.7) en la superficie de empalme, se tiene

$$G_S = G_\mu + G_\mu \mathcal{R} G_\mu, \quad (2.8)$$

$$G_S = G_{\bar{\mu}} \mathcal{T} G_\mu, \quad (2.9)$$

de donde pueden despejarse \mathcal{R} y \mathcal{T} :

$$\mathcal{R} = G_\mu^{-1}(G_S - G_\mu)G_\mu^{-1}, \quad (2.10)$$

$$\mathcal{T} = G_{\bar{\mu}}^{-1}G_S G_\mu. \quad (2.11)$$

Por consiguiente, basta conocer \mathcal{G}_S para evaluar \mathcal{R} y \mathcal{T} , y con estos objetos puede calcularse $\mathbf{G}_S(z, z')$:

$$\mathbf{G}_S(z, z') = \begin{cases} \mathbf{G}_\mu(z, z') + \mathbf{G}_\mu(z, 0)\mathcal{G}_\mu^{-1}(\mathcal{G}_S - \mathcal{G}_\mu)\mathcal{G}_\mu^{-1}\mathbf{G}_\mu(0, z') & (z, z' \in \mu) \\ \mathbf{G}_{\bar{\mu}}(z, 0)\mathcal{G}_{\bar{\mu}}^{-1}\mathcal{G}_S\mathcal{G}_\mu^{-1}\mathbf{G}_\mu(0, z') & (z \in \bar{\mu}, z' \in \mu). \end{cases} \quad (2.12)$$

Si en la ecuación anterior se hace $z = 0$ se tiene

$$\mathcal{G}_\mu^{-1}\mathbf{G}_\mu(0, z') = \mathcal{G}_S^{-1}\mathbf{G}_S(0, z') \quad (2.13)$$

y haciendo $z' = 0$,

$$\mathbf{G}_\mu(z, 0)\mathcal{G}_\mu^{-1} = \mathbf{G}_S(z, 0)\mathcal{G}_S^{-1}. \quad (2.14)$$

Estas identidades serán de utilidad más adelante.

A la vista de la representación espectral de la función de Green, es claro que para estados ligados no degenerados E_i , puede obtenerse el autovalor correspondiente calculando el residuo de \mathbf{G}_S a la energía correspondiente al autovalor E_i . De (2.12) se tiene

$$\psi_S(z) = \mathbf{G}_\mu(z, 0)\mathcal{G}_\mu^{-1}\psi_S(0) - \mathbf{G}_\mu(z, 0)\mathcal{G}_S^{-1}\psi_S(0), \quad (2.15)$$

donde se ha utilizado la identidad (2.13). El primer sumando en (2.12) no contribuye porque E_i es un autovalor correspondiente a un estado ligado, que no está en el espectro del hamiltoniano del medio μ . Si se evalúa $\psi_S(z)$ en la intercara,

$$\psi_S(0) = \psi_S(0) - \mathcal{G}_\mu\mathcal{G}_S^{-1}\psi_S(0), \quad (2.16)$$

así que para las energías de los estados ligados no degenerados del sistema compuesto se verifica

$$\mathcal{G}_\mu\mathcal{G}_S^{-1}\psi_S(0) = 0. \quad (2.17)$$

Al ser E_i una autoenergía correspondiente a un estado ligado, en general $\det \mathcal{G}_\mu^{-1} \neq 0$, con lo que se tiene

$$\mathcal{G}_S^{-1}\psi_S(0) = 0, \quad (2.18)$$

sistema de ecuaciones homogéneo que tiene solución distinta de la trivial si y sólo si

$$\det \mathcal{G}_S^{-1} = 0. \quad (2.19)$$

Esta ecuación permite calcular los autovalores del problema de empalme. La evaluación de \mathcal{G}_S requiere un análisis de las condiciones de empalme en la intercara y depende del modelo empleado para describir el problema físico; en cualquier caso sólo supone cálculos en la superficie, y como se comentó anteriormente, con \mathcal{G}_S se obtiene la función de Green del sistema completo, a partir de la cual pueden calcularse todas las magnitudes físicas de interés del problema. Ésta es la ventaja principal del Método de Empalme de Funciones de Green.

2.1.1 Condiciones de empalme en sistemas continuos

El análisis hasta aquí realizado es totalmente general: no se refiere a ningún sistema físico en concreto y es válido tanto para medios continuos como discretos, aunque se ha escogido una notación adecuada para sistemas continuos, como son los estudiados en esta memoria.

En este apartado se estudian las reglas de empalme para sistemas continuos descritos por ecuaciones diferenciales de segundo orden. Es en estas ecuaciones y en las correspondientes condiciones de contorno donde se encierra la física de cada modelo concreto.

Supongamos que nuestro modelo viene descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden de la forma

$$\left[\frac{d}{dz} \left(M \frac{d}{dz} + P \right) + Y \frac{d}{dz} + W \right] \psi = 0 \quad (2.20)$$

Si integramos esta ecuación entre $-\eta$ y $+\eta$ y tomamos el límite $\eta \rightarrow 0$, se tiene

$$[M\psi' + P\psi]_{+0} - [M\psi' + P\psi]_{-0} = 0, \quad (2.21)$$

esto es, la forma lineal $M\psi' + P\psi$ ha de ser continua para todo z , pues la integración realizada puede hacerse en torno a cualquier plano $z = \text{const}$. La continuidad de la forma lineal tiene significado físico, que se halla implícito en la forma del sistema de ecuaciones diferenciales escogido para describir el problema. En nuestro caso no es un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, sino una sola, que es la de Schrödinger, para la cual tenemos

$$M = \frac{\hbar^2}{2m^*}; \quad W = E - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*} - V; \quad P = Y = 0, \quad (2.22)$$

donde tanto m^* como V pueden depender de z . Entonces, la forma lineal continua asociada a la ecuación diferencial es

$$\frac{1}{m^*} \frac{d\psi}{dz} \quad (2.23)$$

que físicamente supone la conservación del operador densidad de corriente de probabilidad.

La condición de continuidad que acabamos de derivar en términos de ψ y ψ' tiene su contrapartida en el lenguaje de las funciones de Green, aunque ahora se trata de una condición de discontinuidad. Sea un problema dado por el sistema de ecuaciones diferenciales anterior (2.20) y ciertas condiciones de contorno; la función de Green de este problema es la que verifica la ecuación

$$\left[\frac{d}{dz} \left(M \frac{d}{dz} + P \right) + Y \frac{d}{dz} + W \right] G(z, z') = I \delta(z, z'). \quad (2.24)$$

Es conveniente introducir las siguientes definiciones:

$$'G^{(\pm)}(z) = \lim_{z' \rightarrow z \pm 0} \frac{\partial G(z, z')}{\partial z}, \quad (2.25)$$

que evaluadas en $z = 0$ se denotan simplemente por $'G^{(\pm)}$.

Haciendo $z' = 0$ en (2.24) e integrando en z desde $-\eta$ a $+\eta$ y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$, se obtiene

$$[\mathcal{M}(+0) 'G^{(-)} + \mathcal{P}(+0) \mathcal{G}] - [\mathcal{M}(-0) 'G^{(+)} + \mathcal{P}(-0) \mathcal{G}] = I. \quad (2.26)$$

Si se define la forma diferencial $\mathcal{A}(z, z')$ asociada al sistema de ecuaciones diferenciales (2.20) como

$$\mathcal{A}(z, z') = \left[M \frac{d}{dz} + P \right] G(z, z'), \quad (2.27)$$

la ecuación (2.26) se escribe en función de $\mathcal{A}(z, z')$ de la siguiente forma:

$$\mathcal{A}(+0) - \mathcal{A}(-0) = I. \quad (2.28)$$

Nótese que

$$\mathcal{A}(\pm 0) = \lim_{z \rightarrow \pm 0} \mathcal{A}(z, 0) = \mathcal{M}(\pm 0) 'G^{(\mp)} + \mathcal{P}(\pm 0) \mathcal{G}; \quad (2.29)$$

de modo que resulta natural definir

$$\mathcal{A}^{(\pm)} \equiv \mathcal{A}(\mp 0), \quad (2.30)$$

así que la condición de continuidad en términos de ψ y su derivada se convierte en una condición de discontinuidad en términos de la función de Green y consiguientemente, de su forma lineal asociada:

$$\mathcal{A}^{(+)} - \mathcal{A}^{(-)} = -I. \quad (2.31)$$

Estas condiciones de discontinuidad pueden usarse de dos maneras diferentes: si se aplican a un solo medio, que puede ser no homogéneo, pero sin discontinuidades (esto es, \mathbf{M} y \mathbf{P} son funciones continuas), de (2.26) se obtiene la condición de salto

$$'G^{(+)} - 'G^{(-)} = -\mathcal{M}^{-1} \equiv \mathbf{s}, \quad (2.32)$$

que en términos de ψ equivale a la condición de continuidad

$$\psi'(+0) = \psi'(-0); \quad (2.33)$$

si se aplican a un medio compuesto, formado por la unión de dos medios continuos 1 y 2 unidos por una intercara en $z = 0$, se tiene

$$(s_1^{-1} 'G_S^{(+)} - \mathcal{P}_1 G_S) - (s_2^{-1} 'G_S^{(-)} - \mathcal{P}_2 G_S) = I, \quad (2.34)$$

que equivale a la condición de continuidad

$$\frac{\psi_S'(-0)}{m_1^*} = \frac{\psi_S'(+0)}{m_2^*}. \quad (2.35)$$

La expresión (2.34) puede usarse para obtener la fórmula de empalme en función de G_S : si se deriva la identidad (2.13) en el medio 1 ($z \leq 0$) y se toma el límite $z \rightarrow -0$,

$$'G_S^{(+)} = G_1^{(+)} G_1^{-1} G_S. \quad (2.36)$$

Haciendo lo mismo en el medio 2 ($z \geq 0$); $z \rightarrow -0$,

$$'G_S^{(-)} = G_2^{(-)} G_2^{-1} G_S; \quad (2.37)$$

sustituyendo estas últimas identidades en (2.34) se obtiene

$$\left[(s_1^{-1} 'G_1^{(+)} - \mathcal{P}_1 G_1) G_1^{-1} - (s_2^{-1} 'G_2^{(+)} - \mathcal{P}_2 G_2) G_2^{-1} \right] G_S = I, \quad (2.38)$$

que es la fórmula de empalme buscada; en términos de la forma lineal $\mathbf{A}(z, z')$ se expresa de modo más compacto:

$$\mathcal{G}_S^{-1} = -(\mathcal{A}_1^{(+)} \mathcal{G}_1^{-1} - \mathcal{A}_2^{(-)} \mathcal{G}_2^{-1}). \quad (2.39)$$

En particular, si $\mathcal{P}_1 = \mathcal{P}_2$, como en el caso que nos ocupa, se tiene

$$\mathcal{G}_S^{-1} = s_1^{-1} {}'\mathcal{G}_1^{(+)} \mathcal{G}_1^{-1} - s_2^{-1} {}'\mathcal{G}_2^{(-)} \mathcal{G}_2^{-1}. \quad (2.40)$$

Si los medios 1 y 2 son homogéneos, la función de Green de cada uno de ellos puede calcularse analíticamente; cada \mathbf{G}_μ es la correspondiente al medio μ infinito. Pero en el caso de sistemas no homogéneos, no es en principio evidente qué medio infinito debe suponerse para el cálculo de las \mathbf{G}_μ . La respuesta viene dada por la expresión de \mathbf{G}_S , la ecuación (2.12): sirve cualquier medio cuya función de Green coincida con \mathbf{G}_μ cuando sus argumentos estén en el medio μ . Por ejemplo, si $\mu = 1$, exigiremos que \mathbf{G}_1 sea regular en $-\infty$, pero no es importante su comportamiento en $+\infty$; puede escogerse cualquier condición de contorno en la superficie de empalme, siempre que no sea de barrera infinita, puesto que queremos empalmar dos medios finitos. El mismo razonamiento se aplica a la función de Green del medio 2; salvo la anulación de ${}'\mathcal{G}_1^{(+)}$, ${}'\mathcal{G}_2^{(-)}$, puede escogerse cualquier valor de estas derivadas en la intercaras, respetando el cumplimiento de la condición de salto de la función de Green. A la vista de la ecuación (2.40) se ve que es conveniente escoger ${}'\mathcal{G}_1^{(+)} = s_1$, ${}'\mathcal{G}_2^{(-)} = -s_2$, con lo que si $\mathcal{P}_1 = \mathcal{P}_2$, \mathcal{G}_S^{-1} es simplemente

$$\mathcal{G}_S^{-1} = \mathcal{G}_1^{-1} + \mathcal{G}_2^{-1}. \quad (2.41)$$

2.1.2 Formulación para intercaras acopladas

Uno de los grandes atractivos del Método de Empalme de Funciones de Green es que permite una formulación compacta de los problemas en los que hay que realizar el empalme en varias intercaras, como ocurre en los pozos cuánticos, barreras y superredes de semiconductores, por señalar sistemas como los estudiados en esta memoria. De hecho, hay una gran variedad de problemas de interés físico que tienen una estructura a capas del tipo 1- l -2- r -3, esto es, tres medios separados por dos superficies, que denotaremos por l (izquierda) y r (derecha). En tal estructura puede definirse un dominio interior, el

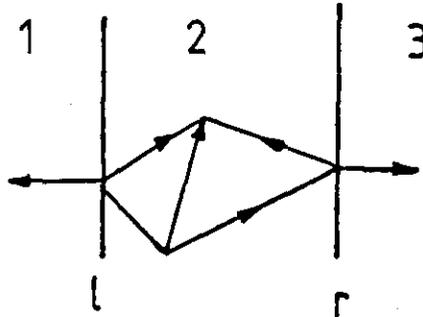


Figura 2.2 : Esquema de un sistema laminar compuesto formado por tres medios.

formado por el medio 2, emparedado por las dos superficies l y r , y un dominio exterior, formado por dos zonas desconexas, los medios 1 y 3, de modo que estos dos dominios se hallan separados por la superficie de empalme, que definimos como el conjunto de las dos superficies l y r (figura 2.2). Si $G_j(z, z')$ es la función de Green del medio j , que verifica el sistema de N ecuaciones diferenciales (2.24) más las correspondientes condiciones de contorno, definimos las siguientes matrices \tilde{G} , de dimensión $2N \times 2N$, a partir de las proyecciones de las funciones de Green en la superficie de empalme:

$$\tilde{G}_i = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{2l} & \mathcal{G}_2(l, r) \\ \mathcal{G}_2(r, l) & \mathcal{G}_{2r} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

para el dominio interior, y en el dominio exterior definimos

$$\tilde{G}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{1l} & 0 \\ 0 & \mathcal{G}_{3r} \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

de modo que construiremos la proyección de la función de Green del sistema compuesto, definida como

$$\tilde{G}_S = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{S1} & \mathcal{G}_S(l, r) \\ \mathcal{G}_S(r, l) & \mathcal{G}_{Sr} \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

a partir de los objetos \tilde{G}_i, \tilde{G}_e .

Supongamos que se produce una excitación elemental en el punto z situado en el medio 2 (por claridad, indicaremos con un subíndice el medio o dominio en el que se halla el punto); tal como se indica en la figura 2.2, la amplitud que produce esta perturbación en el punto z' perteneciente al medio 2 viene dada por

$$\mathbf{G}_S(z_2, z'_2) = \mathbf{G}_2(z_2, z'_2) + (\mathbf{G}_2(z_2, l), \mathbf{G}_2(z_2, r)) \tilde{\mathbf{R}} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2(l, z'_2) \\ \mathbf{G}_2(r, z'_2) \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

expresión análoga a la obtenida en el problema de una sola intercara. $\tilde{\mathbf{R}}$ es un objeto definido en la superficie de empalme, formada por las intercara l y r , y da cuenta de las reflexiones en las dos intercara a todo orden de teoría de perturbaciones. Como las matrices $\tilde{\mathbf{G}}$, $\tilde{\mathbf{R}}$ es de dimensión $2N \times 2N$. Si el punto z se halla en el dominio exterior, puede llegarse a una expresión similar a la del caso de intercara simple introduciendo los vectores fila y columna \mathbf{G}_e , análogos a los usados en (2.45), que verifiquen

$$\mathbf{G}_e(z_1, l) = (\mathbf{G}_1(z_1, l), \mathbf{o}); \quad \mathbf{G}_e(l, z'_1) = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(l, z'_2) \\ \mathbf{o} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

proyectando en la intercara l , y

$$\mathbf{G}_e(z_3, r) = (\mathbf{o}, \mathbf{G}_3(z_3, r)); \quad \mathbf{G}_e(r, z'_3) = \begin{pmatrix} \mathbf{o} \\ \mathbf{G}_3(r, z'_3) \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

si se proyecta en la intercara r , de modo que las ecuaciones que dan cuenta de la propagación de un estímulo producido en el dominio interior al dominio exterior se pueden condensar como

$$\mathbf{G}_S(z_e, z'_2) = (\mathbf{G}_e(z_e, l), \mathbf{G}_e(z_e, r)) \tilde{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2(l, z'_2) \\ \mathbf{G}_2(r, z'_2) \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

Con esta notación, las proyecciones en la superficie de empalme de las ecuaciones (2.45) y (2.48) se escriben

$$\tilde{\mathbf{G}}_S = \tilde{\mathbf{G}}_2 + \tilde{\mathbf{G}}_2 \tilde{\mathbf{R}} \tilde{\mathbf{G}}_2 \quad (2.49)$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_S = \tilde{\mathbf{G}}_e \tilde{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{G}}_e, \quad (2.50)$$

de donde pueden despejarse $\tilde{\mathcal{R}}$ y $\tilde{\mathcal{T}}$:

$$\tilde{\mathcal{R}} = \tilde{\mathcal{G}}_2^{-1}(\tilde{\mathcal{G}}_S - \tilde{\mathcal{G}}_2)\tilde{\mathcal{G}}_2^{-1} \quad (2.51)$$

$$\tilde{\mathcal{T}} = \tilde{\mathcal{G}}_e^{-1}\tilde{\mathcal{G}}_S\tilde{\mathcal{G}}_i^{-1}, \quad (2.52)$$

que sustituidos en (2.45) y (2.48) nos dan las ecuaciones de la función de Green del sistema completo en términos de sus proyecciones en la superficie de empalme, expresiones análogas a las obtenidas para la intercara simple en virtud de la notación compacta escogida:

$$\mathbf{G}_S(z_2, z'_2) = \mathbf{G}_2(z_2, z'_2) + \quad (2.53)$$

$$(\mathbf{G}_2(z_2, l), \mathbf{G}_2(z_2, r)) \tilde{\mathcal{G}}_2^{-1}(\tilde{\mathcal{G}}_S - \tilde{\mathcal{G}}_2)\tilde{\mathcal{G}}_2^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2(l, z'_2) \\ \mathbf{G}_2(r, z'_2) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G}_S(z_e, z'_2) = (\mathbf{G}_e(z_e, l), \mathbf{G}_e(z_e, r)) \tilde{\mathcal{G}}_e^{-1}\tilde{\mathcal{G}}_S\tilde{\mathcal{G}}_i^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2(l, z'_2) \\ \mathbf{G}_2(r, z'_2) \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

De manera análoga se obtienen las expresiones para \mathbf{G}_S cuando el punto inicial se halla en el dominio exterior. Se tiene por tanto una formulación idéntica a la del caso de una sola intercara, sustituyendo las medios 1 y 2 por los dominios interior y exterior.

El estudio de las funciones de onda de los estados ligados del sistema compuesto es de gran interés. De acuerdo con la notación empleada, se define la función de onda proyectada en la superficie de empalme como

$$\tilde{\psi}_S = \begin{pmatrix} \psi_{Sl} \\ \psi_{Sr} \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

donde ψ_{Sl} , ψ_{Sr} son los vectores de onda (de N componentes) evaluados en las intercaras l y r respectivamente. De la ecuación (2.54) se tiene una expresión análoga a (2.13):

$$\tilde{\mathcal{G}}_2^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{G}}_2(l, z'_2) \\ \tilde{\mathcal{G}}_2(r, z'_2) \end{pmatrix} = \tilde{\mathcal{G}}_S^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{G}}_S(l, z'_2) \\ \tilde{\mathcal{G}}_S(r, z'_2) \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

que permite escribir (2.54) como

$$\mathbf{G}_S(z_2, z'_2) = \mathbf{G}_2(z_2, z'_2) + (\mathbf{G}_2(z_2, l), \mathbf{G}_2(z_2, r)) \tilde{\mathcal{G}}_2^{-1}(\tilde{\mathcal{G}}_S - \tilde{\mathcal{G}}_2)\tilde{\mathcal{G}}_S^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_S(l, z'_2) \\ \mathbf{G}_S(r, z'_2) \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Evaluando el residuo de esta última ecuación a la energía correspondiente a un estado ligado, se tiene la función de onda de dicho estado; evaluándola en la superficie de empalme tenemos

$$\tilde{\psi}_S = \tilde{\psi}_S \tilde{G}_2^{-1} \tilde{G}_S^{-1} \tilde{\psi}_S, \quad (2.58)$$

de donde el sistema de ecuaciones de empalme es

$$\tilde{G}_S^{-1} \tilde{\psi}_S = 0, \quad (2.59)$$

con solución no trivial si

$$\det \tilde{G}_S^{-1} = 0. \quad (2.60)$$

Este resultado es formalmente idéntico al obtenido para la superficie simple; lo utilizaremos para el cálculo de los estados ligados del sistema compuesto.

La fórmula para \tilde{G}_S se obtiene de manera análoga a la seguida en el caso de la intercara simple. Utilizando las siguientes definiciones

$$\begin{aligned} {}^l\tilde{G}_i &= \begin{pmatrix} {}^l\mathcal{G}_{2l}^{(-)} & {}^l\mathcal{G}_2(l, r) \\ -{}^l\mathcal{G}_2(r, l) & -{}^l\mathcal{G}_{2r}^{(+)} \end{pmatrix}, & {}^l\tilde{G}_e &= \begin{pmatrix} {}^l\mathcal{G}_{1l}^{(+)} & 0 \\ 0 & -{}^l\mathcal{G}_{3r}^{(-)} \end{pmatrix}, \\ \tilde{S}_e &= \begin{pmatrix} \mathcal{S}_1 & 0 \\ 0 & \mathcal{S}_3 \end{pmatrix}, & \tilde{S}_i &= \begin{pmatrix} \mathcal{S}_2 & 0 \\ 0 & \mathcal{S}_2 \end{pmatrix}, \\ \tilde{P}_e &= \begin{pmatrix} \mathcal{P}_1 & 0 \\ 0 & -\mathcal{P}_3 \end{pmatrix}, & \tilde{P}_i &= \begin{pmatrix} \mathcal{P}_2 & 0 \\ 0 & -\mathcal{P}_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

y partiendo de las configuraciones (z_1, z'_2) , (z_2, z'_2) con $z_2 > z'_2$, se imponen las condiciones de empalme en la intercara l , y en los casos (z_3, z'_2) , (z_2, z'_2) con $z_2 < z'_2$ se realiza el empalme en la intercara r . Todas las expresiones resultantes se condensan en la notación compacta de matrices $2N \times 2N$:

$$\left[(\tilde{S}_e^{-1} {}^l\tilde{G}_e^{(+)} - \tilde{P}_e \tilde{G}_e) \tilde{G}_e^{-1} - (\tilde{S}_i^{-1} {}^l\tilde{G}_i^{(+)} - \tilde{P}_i \tilde{G}_i) \tilde{G}_i^{-1} \right] \tilde{G}_S = I, \quad (2.62)$$

que es la fórmula de empalme buscada; si $\tilde{P}_e = \tilde{P}_i$,

$$\tilde{G}_S^{-1} = \tilde{S}_e^{-1} {}^l\tilde{G}_e^{(+)} \tilde{G}_e^{-1} - \tilde{S}_i^{-1} {}^l\tilde{G}_i^{(-)} \tilde{G}_i^{-1}. \quad (2.63)$$

Como en el caso de la intercara simple, es posible escoger unas G_μ que simplifiquen esta última expresión: tomando

$$'G_{1l}^{(+)} = s_1, 'G_{2l}^{(-)} = -s_2, 'G_{2r}^{(+)} = s_2, 'G_{3r}^{(-)} = -s_3 \quad (2.64)$$

la ecuación (2.63) queda

$$\tilde{G}_S^{-1} = \tilde{G}_e^{-1} + \tilde{G}_i^{-1}, \quad (2.65)$$

y la ecuación secular se reduce a

$$\det |\tilde{G}_e + \tilde{G}_i| = 0. \quad (2.66)$$

Todas estas expresiones son iguales a las obtenidas en el caso de la intercara simple, sin más que sustituir las funciones definidas en el medio 1(2) por sus equivalentes en el dominio $e(i)$ según las definiciones dadas más arriba.

2.2 El Método de Matriz de Transferencia Completa

Consideremos un sistema de N ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden con coeficientes variables, de la forma

$$A f'' + B f' + (C - EI) f = 0. \quad (2.67)$$

A, B, C son matrices $N \times N$, y $f(z)$ un vector de N componentes. Este sistema puede transformarse en un sistema de $2N$ ecuaciones de primer orden

$$F' = P F, \quad (2.68)$$

donde

$$P = \begin{pmatrix} 0 & I \\ A^{-1}(EI - C) & -A^{-1}B \end{pmatrix}; \quad F = \begin{pmatrix} f \\ f' \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

F es un vector columna de $2N$ componentes, y P una matriz $2N \times 2N$. La matriz de transferencia completa del sistema se define como

$$F(z) = M(z, z_0) F(z_0), \quad (2.70)$$

es decir, aquélla que transfiere el valor de la solución \mathbf{F} a cualquier punto z . Se llama completa porque transfiere tanto la amplitud \mathbf{f} como la derivada \mathbf{f}' del sistema de ecuaciones inicial, para distinguirla de la matriz que transfiere sólo amplitudes.

Si los coeficientes del sistema de ecuaciones diferenciales son constantes, se tiene que

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \exp \{ \mathbf{P}(z - z_0) \}. \quad (2.71)$$

Si los coeficientes no son constantes, puede introducirse un retículo lo suficientemente fino como para que los coeficientes puedan considerarse constantes en cada celdilla, de modo que en cada intervalo del retículo se verifique la ecuación (2.71). De esta forma, $\mathbf{M}(z, z_0)$ se construye multiplicando las matrices así obtenidas:

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{M}(z, z - \Delta) \mathbf{M}(z - \Delta, z - 2\Delta) \cdots \mathbf{M}(z_0 + \Delta, z_0). \quad (2.72)$$

Para que los resultados numéricos tengan una precisión aceptable, esta aproximación requiere la introducción de un gran número de puntos en el retículo de integración. En el caso de coeficientes no constantes es preferible obtener la matriz de transferencia integrando numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales (2.68), tomando como funciones iniciales la base canónica $\{\mathbf{F}_j(z_0)\}$, definida como

$$F_{ij}(z_0) = \delta_{ij} \quad (2.73)$$

donde j es el índice de vector e i indica la componente de cada vector; los $\mathbf{F}_j(z)$ resultantes son las columnas de la matriz $\mathbf{M}(z, z_0)$:

$$\{\mathbf{M}(z, z_0)\}_{ij} = F_{ij}(z). \quad (2.74)$$

Ésta es la técnica que hemos empleado para calcular la matriz de transferencia. En particular, en los problemas estudiados en esta memoria, para resolver la correspondiente ecuación diferencial hemos usado un método *corrector* en el esquema Adams-Moulton [21]; los 3 primeros puntos necesarios para hacer la primera corrección se han calculado usando un Runge-Kutta de cuarto orden.

2.2.1 Aplicación a potenciales periódicos: superredes

Si los coeficientes del sistema de ecuaciones (2.67) son periódicos en la dirección z , con periodo d , pueden escogerse soluciones que verifiquen la propiedad de Bloch:

$$\begin{pmatrix} f_q(z+d) \\ f'_q(z+d) \end{pmatrix} = e^{iqd} \begin{pmatrix} f_q(z) \\ f'_q(z) \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

En términos de la matriz de transferencia tenemos

$$\mathbf{M}(z+d, z)\mathbf{F}_q(z) = e^{iqd}\mathbf{F}_q(z), \quad (2.76)$$

esto es, las soluciones buscadas son autovectores de la matriz de transferencia; los autovalores cumplen

$$\det(\mathbf{M}(z+d, z) - \lambda\mathbf{I}) = 0. \quad (2.77)$$

En particular, los sistemas estudiados en esta memoria se describen por modelo de funciones envolventes a una banda, una ecuación de Schrödinger; tal ecuación diferencial de segundo orden supone una matriz de transferencia 2×2 . En este caso los autovalores $\lambda_1 = e^{iq_1d}$, $\lambda_2 = e^{iq_2d}$ verifican

$$\lambda^2 - \text{tr}\mathbf{M}(z+d, z)\lambda + \det\mathbf{M}(z+d, z) = 0; \quad (2.78)$$

como $\det\mathbf{M} = \lambda_1\lambda_2 = 1$ y $\text{tr}\mathbf{M} = \lambda_1 + \lambda_2$, la ecuación de autovalores queda

$$\cos(qd) = \frac{1}{2}\text{tr}\mathbf{M}(z+d, z); \quad (2.79)$$

como \mathbf{M} depende de la energía, esta última expresión nos da la relación de dispersión de una ecuación de Schrödinger unidimensional con un potencial periódico, $E = E(q)$.

Como \mathbf{M} depende de la energía, los valores $\varepsilon_j(q)$ permitidos son aquéllos para los que

$$\left| \frac{1}{2}\text{tr}\mathbf{M} \right| \leq 1. \quad (2.80)$$

Con los valores de E , q así obtenidos se integra la ecuación (2.67). Para ello se necesitan los valores iniciales de f_q , f'_q . Como las funciones escogidas cumplen la propiedad de Bloch, se tiene

$$\mathbf{M}(z_0+d, z_0) \begin{pmatrix} f_q(z_0) \\ f'_q(z_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{AA} & m_{AD} \\ m_{DA} & m_{DD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_q(z_0) \\ f'_q(z_0) \end{pmatrix} = e^{iqd} \begin{pmatrix} f_q(z_0) \\ f'_q(z_0) \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

así que

$$f'_q(z_0) = \frac{(e^{iqd} - m_{AA})}{m_{AD}} f_q(z_0). \quad (2.82)$$

Tomando un valor arbitrario para $f_q(z_0)$, su derivada viene dada por la ecuación anterior; con la matriz de transferencia podemos hallar el valor de la envolvente sin normalizar y su derivada en cualquier punto.

2.3 Función de Green y Matriz de Transferencia

El Método de Empalme de Funciones de Green es de gran utilidad cuando se conocen las funciones de Green de los medios constituyentes del sistema compuesto. En la práctica hay muchas situaciones en las que se desconoce la forma de la función de Green; en sistemas no homogéneos, como los que se describen en esta memoria, ni siquiera los coeficientes del sistema de ecuaciones diferenciales tienen expresión analítica, puesto que se evalúan numéricamente en cada ciclo del cálculo. En tales casos, la función de Green de cada uno de los medios ha de calcularse numéricamente, lo cual es generalmente una tarea numérica de envergadura.

Por otro lado, el Método de Matriz de Transferencia es una herramienta de gran utilidad práctica en el cálculo numérico. La relación entre ambos métodos proporciona una técnica para la evaluación numérica de Funciones de Green en términos de matrices de transferencia, que explota las ventajas formales del primero y computacionales del segundo.

Supongamos que nuestro modelo se describe con un sistema de N ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas como (2.20) y las correspondientes condiciones de contorno. Denotemos por $\psi_k(z)$ una base de soluciones del problema; la representación espectral de G viene dada por

$$G(E, z, z') = \sum_{k=1}^N \frac{\psi_k(z)\psi_k^\dagger(z')}{E - E_k}. \quad (2.83)$$

Como se indicaba en el apartado anterior, la matriz de transferencia del sistema de

ecuaciones diferenciales verifica

$$\mathbf{M}(z, z_0) \begin{pmatrix} \psi_k(z_0) \\ \psi'_k(z_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{AA}(z, z_0) & \mathbf{M}_{AD}(z, z_0) \\ \mathbf{M}_{DA}(z, z_0) & \mathbf{M}_{DD}(z, z_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_k(z_0) \\ \psi'_k(z_0) \end{pmatrix} \quad (2.84)$$

\mathbf{M} tiene dimensión $2N \times 2N$, de modo que las cajas $\mathbf{M}_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = A, D$) son de dimensión $N \times N$. Por compacidad en la notación, se define el vector de $2N$ componentes

$$\mathbf{F}(z) \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{F}_A(z_0) \\ \mathbf{F}_D(z_0) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_k(z_0) \\ \psi'_k(z_0) \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

de modo que

$$\mathbf{F}_\alpha(z) = \sum_{\beta=A,D} \mathbf{M}_{\alpha\beta}(z, z_0) \mathbf{F}_\beta(z_0). \quad (2.86)$$

En particular, se tiene que

$$\psi_k(z) = \mathbf{F}_A(z) = \sum_{\beta=A,D} \mathbf{M}_{A\beta}(z, z_0) \mathbf{F}_\beta(z_0) \quad (2.87)$$

Nótese que derivando esta ecuación, se obtiene

$$\frac{d}{d\zeta} \mathbf{M}_{A\alpha}(\zeta, z_0) = \mathbf{M}_{D\alpha}(\zeta, z_0). \quad (2.88)$$

De acuerdo con la definición de vector transconjugado introducida en el apartado 2.1, se define la matriz transconjugada de la siguiente manera: si $\mathbf{m}(E)$ es una función compleja de una variable compleja E ,

$$\mathbf{m}(E) = \mathbf{a}(E) + i\mathbf{b}(E) \quad (2.89)$$

donde \mathbf{a} , \mathbf{b} son funciones reales de la variable compleja E , su transconjugada \mathbf{m}_c^T es

$$\mathbf{m}_c^T(E) = \mathbf{a}^T(E) - i\mathbf{b}^T(E) \quad (2.90)$$

donde la variable E no se conjuga, para mantener la definición de función de Green causal introducida en el apartado 2.1. En particular, si E es real, \mathbf{m}_c^T es igual a la adjunta de \mathbf{m} , \mathbf{m}^\dagger . De esta manera es posible escribir la función de Green como combinación lineal de matrices de transferencia:

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \sum_{\alpha\beta} \mathbf{M}_{A\alpha}(z, z_0) \mathbf{C}_{\alpha\beta}^< \mathbf{M}_{cA\beta}^T(z', z_0) & (z \leq z') \\ \sum_{\alpha\beta} \mathbf{M}_{A\alpha}(z, z_0) \mathbf{C}_{\alpha\beta}^> \mathbf{M}_{cA\beta}^T(z', z_0) & (z \geq z'). \end{cases} \quad (2.91)$$

Como la matriz de transferencia únicamente depende de la forma del sistema de ecuaciones, toda la información relativa a las condiciones de contorno se halla en los coeficientes $C_{\alpha\beta}^<$, $C_{\alpha\beta}^>$.

Además de las derivadas $'\mathcal{G}^{(\pm)}$, interesa definir

$$^{(\pm)}\mathcal{G}' = \lim_{z \rightarrow z_0 \pm 0} \left[\frac{\partial \mathcal{G}(z, z')}{\partial z'} \right]_{z'=z_0}, \quad (2.92)$$

y de manera análoga a lo hecho con $'\mathcal{G}^{(\pm)}$, si se evalúa (2.24) en $z = 0$ y se integra en z' se obtiene una expresión similar a (2.32):

$$^{(+)}\mathcal{G}' - ^{(-)}\mathcal{G}' = -\mathcal{M}^{-1} = \mathbf{s}. \quad (2.93)$$

Veamos cómo se determinan los coeficientes $C_{\alpha\beta}^<$, $C_{\alpha\beta}^>$ para un medio arbitrario. En primer lugar, la función de Green es continua, por lo que su valor en z_0 no depende de cómo se tomen los límites $z, z' \rightarrow z_0$. Por consiguiente, evaluando las dos expresiones de (2.91) en z_0 , se tiene

$$\mathcal{G} = C_{AA}^< = C_{AA}^> = C_{AA}, \quad (2.94)$$

así que sólo hay un coeficiente C_{AA} . Derivando (2.91) y evaluando las derivadas en z_0 ,

$$'\mathcal{G}^{(+)} - '\mathcal{G}^{(-)} = C_{DA}^< - C_{DA}^> = \mathbf{s}, \quad (2.95)$$

y de las condiciones de regularidad de la función de Green y sus derivadas en $\pm\infty$ se obtienen otras 6 ecuaciones, que con la anterior, determinan completamente los 7 $C_{\alpha\beta}$, y por tanto permiten calcular la función de Green de un medio arbitrario a partir de la matriz de transferencia.

Si se tiene un sistema compuesto formado por dos medios, el procedimiento es similar. Por simplicidad en la notación, omitimos los subíndices de medio en los coeficientes $C^>, C^<$ y en las matrices de transferencia, y denotamos la matriz transconjugada como μ :

$$M_{\alpha\beta}^T(z, z_0) \equiv \mu_{\alpha\beta}(z, z_0). \quad (2.96)$$

Escogiendo $'\mathcal{G}_1^{(-)} = 0$, con lo que $'\mathcal{G}_1^{(+)} = \mathbf{s}_1$, se tiene

$$C_{DA}^> = 0; \quad C_{DA}^< = \mathbf{s}_1. \quad (2.97)$$

Imponiendo regularidad en $-\infty$,

$$G_1(0, -\infty) = 0 \implies C_{AD}^> = -m_{AA}^{-1}(-)\mu_{AD}(-)s_1\mu_{AA}(-)\mu_{AD}^{-1}(-) \quad (2.98)$$

$$G_1(-\infty, 0) = 0 \implies C_{AA} = -m_{AA}^{-1}(-)\mu_{AD}(-)s_1 = G_1. \quad (2.99)$$

Para el medio 2, se escoge $G_1^{(-)} = 0$, e imponiendo regularidad en $+\infty$, se obtienen los coeficientes para G_2 ; en particular,

$$C_{AA} = m_{AA}^{-1}(+)m_{AD}(+)s_2 = G_2. \quad (2.100)$$

Con las expresiones así obtenidas puede calcularse la función de Green del sistema compuesto; en particular, con (2.99) y (2.100) basta para obtener G_S (véase la ecuación (2.41)).

Si se trata de un sistema formado por 3 medios, como por ejemplo un pozo cuántico, que es un caso que nos interesa, el análisis es idéntico para el cálculo de los coeficientes en el dominio externo, (i.e., de G_1 y G_3): se escoge $G_1^{(-)} = 0$, $G_3^{(+)} = 0$ y se impone la condición de regularidad en $-\infty$ para G_1 y en $+\infty$ para G_3 ; las expresiones finales son respectivamente como (2.99, 2.100), sin más que sustituir $z_0 = 0$ por l para el medio 1 y por r para el medio 3.

Queda por determinar la función de Green del dominio interior. Ahora hacemos

$$m(l, r) = m; \quad \mu(l, r) = \mu \quad (2.101)$$

Escogiendo $G_l^{(+)} = 0$, y por la condición de salto, se tiene

$$C_{DA}^< = 0; \quad C_{DA}^> = s \quad (2.102)$$

La anulación de $G_l^{(+)}$ implica que

$$G(l, r) = 0 \implies C_{DD}^< = 0. \quad (2.103)$$

Respecto de la intercara r , tomando $G_r^{(-)} = 0$,

$$C_{DD}^> = s\mu_{AA}\mu_{AD}^{-1} - m_{AD}^{-1}m_{AA}s; \quad (2.104)$$

por la condición de salto, $G_r^{(-)} = s$, de donde

$$C_{AD}^< = m_{DA}^{-1}(s - m_{DD}s\mu_{AA})\mu_{AD}^{-1}. \quad (2.105)$$

Como $\mathcal{G}_r^{(-)} = 0$, se tiene que $\mathcal{G}(r, l) = 0$, lo cual proporciona otra ecuación para determinar los coeficientes $C_{\alpha\beta}$:

$$C_{AA} = \mathbf{m}_{DA}^{-1} \mathbf{m}_{DD} \mathbf{s}. \quad (2.106)$$

Finalmente, de la condición de salto aplicada a las derivadas $(\pm)\mathcal{G}$, se obtiene

$$C_{AD}^> = C_{AD}^< + \mathbf{s}, \quad (2.107)$$

lo que completa el conjunto de ecuaciones necesarias para calcular los $C_{\alpha\beta}$ y construir $\tilde{\mathcal{G}}_2$ a partir de las matrices de transferencia:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{2l} &= \mathbf{m}_{DA}^{-1} \mathbf{m}_{DD}; & \mathcal{G}_{2l} &= \mathbf{m}_{DA}^{-1}; \\ \mathcal{G}_2(l, r) &= \mathbf{m}_{DA}^{-1} \mathbf{s}_2; \\ \mathcal{G}_2(r, l) &= (\mathbf{m}_{AA} \mathbf{m}_{DA}^{-1} \mathbf{m}_{DD} - \mathbf{m}_{DA}) \mathbf{s}_2. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Con estas expresiones puede construirse $\tilde{\mathcal{G}}_S$; en nuestro caso, calculamos los autoestados del pozo cuántico a partir de la fórmula

$$\det \tilde{\mathcal{G}}_S^{-1} = 0; \quad (2.109)$$

conocidas las energías de los estados ligados, integramos la ecuación de Schrödinger para obtener las correspondientes autofunciones, que nos dan la densidad local de estados a esas energías. También podría evaluarse directamente \mathcal{G}_S y obtener de ella la densidad de estados en energías, lo cual es de utilidad en modelos descritos por sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas. En nuestro caso, puesto que el modelo a una banda empleado a lo largo de esta memoria supone la resolución de una ecuación diferencial, resulta más conveniente utilizar el método de empalme de funciones de Green para la determinación de las autoenergías y calcular con la técnica de matriz de transferencia las autofunciones correspondientes, lo que en este modelo simple resulta más ventajoso desde el punto de vista computacional. Pero no podemos dejar de resaltar que es posible realizar todo el cálculo dentro del formalismo de funciones de Green. La conveniencia de una u otra estrategia depende esencialmente del modelo concreto escogido.

Capítulo 3

Pozos cuánticos estructurales con modulación de dopado

Los pozos cuánticos con modulación de dopado son unas estructuras de gran interés tanto por sus aplicaciones prácticas (principalmente en la construcción de dispositivos microelectrónicos de alta movilidad) como por la gran variedad de fenómenos físicos de interés básico que se manifiestan en ellos, como el efecto Hall cuántico entero y fraccionario. Aunque pueden fabricarse pozos de muy diversos semiconductores, en esta memoria nos ocuparemos de los pozos de materiales III-V, y en concreto de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$.

Un pozo cuántico de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ está formado por una lámina de $GaAs$ emparedada entre dos láminas de $Al_xGa_{1-x}As$, de modo que el fondo de la banda de conducción del $GaAs$ se halla en la banda prohibida del ternario. La heterounión $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ es de tipo I, de modo que el $GaAs$ es un pozo tanto para electrones como para huecos. Un electrón en la banda de conducción del $GaAs$ con energía próxima al fondo de ésta no puede escapar hacia el volumen del ternario; se halla confinado en la capa de $GaAs$ y por tanto su movimiento en la dirección perpendicular a las intercaras está cuantizado, mientras que paralelamente a las intercaras su movimiento es libre.

En ausencia de impurezas no hay portadores en la heteroestructura, pero si se dopa el sistema, éste se puebla, bien con electrones o bien con huecos, según se utilicen impurezas donadoras o aceptoras. Se forma por tanto un gas bidimensional de portadores en la capa de $GaAs$. Si el número de impurezas y portadores es apreciable, producen un potencial

electrostático que altera el perfil de las bandas de valencia y conducción. Para determinar la densidad de portadores es necesario resolver autoconsistentemente las correspondientes ecuaciones de Schrödinger y Poisson del problema.

La modulación del dopado consiste en dopar selectivamente una zona de la heteroestructura, normalmente la barrera, dejando el resto de la estructura libre de impurezas, al menos nominalmente. Si el dopado selectivo se hace en la barrera, debido a la discontinuidad de banda en la heterounión los portadores se transfieren de los estados ligados de impurezas en la barrera al fondo de la banda del material de pozo. Así se logra separar espacialmente impurezas y portadores, lo cual reduce la dispersión por las impurezas y mejora la movilidad del gas bidimensional de portadores. Se consigue una separación mayor, y por consiguiente una mayor reducción en la dispersión por impurezas, introduciendo entre las zonas dopadas y el pozo con los portadores capas de material barrera sin dopar; que se conocen como capas espaciadoras [22]. A temperaturas bajas las impurezas son la principal fuente de dispersión de los portadores, de ahí la importancia de alejarlas de la capa de confinamiento. El radio de Bohr de una impureza de *Si* en *GaAs* es de unos 100 Å; si se introduce en una heteroestructura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ una capa espaciadora de 100 Å entre el pozo y la zona dopada, se reduce considerablemente la dispersión por impurezas y por tanto aumenta la movilidad de los portadores.

Para dar una idea de la importancia del dopado modulado y de la separación espacial entre electrones e impurezas, conviene mostrar algunos valores de la movilidad para diferentes tipos de heteroestructuras:

En una superred de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ dopada uniformemente con *Si* con una densidad de 10^{18} cm^{-3} , la movilidad paralela a las intercaras es $\mu \simeq 3 \times 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. En las primeras superredes con modulación de dopado y una capa espaciadora entre el canal de *GaAs* y las impurezas ya se consiguieron movilidades de $\mu \simeq 1.5 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$. Mejorando la calidad de las intercaras y aumentando la separación de las impurezas Störmer *et al.* [22] informan de movilidades a $T = 4K$ de $\mu \simeq 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$. Sus datos indican un aumento monótono de la movilidad con el espesor de la capa espaciadora L_S cuando ésta varía de 0 a 150 Å. Sin embargo, la movilidad también depende de la densidad electrónica areal, la cual acaba disminuyendo ligeramente si se aumenta demasiado L_S . Störmer *et al.* no detectan este efecto porque se restringen a un rango de valores de L_S demasiado

estrecho.

En este capítulo presentamos un estudio de la influencia de los distintos parámetros estructurales de los pozos cuánticos con modulación de dopado en el espectro y distribución del gas cuasibidimensional de electrones. Se ha prestado especial atención al problema del nivel de Fermi en estructuras, relacionado con las impurezas donadoras empleadas para poblar el sistema. Por otro lado, existe un buen número de resultados experimentales que hemos comparado con nuestros cálculos. Parte de estos resultados han sido objeto de una publicación [23].

3.1 Pozos cuánticos $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con modulación de dopado de Si

La configuración estudiada es la siguiente: un pozo cuántico de $GaAs$ de ancho L_W con barreras de $Al_xGa_{1-x}As$ dopadas con Si con una densidad N_D separadas del pozo por sendas capas espaciadoras simétricas de espesor L_S del material ternario sin dopar. Se supone que las capas dopadas se extienden indefinidamente.

Las impurezas de Si en $GaAs$ o en sus aleaciones con Al ocupan las posiciones del Ga , que es un elemento del grupo III, comportándose como un donador monovalente. Los niveles de las impurezas de Si en $Al_xGa_{1-x}As$ están cerca del borde de la banda de conducción, y dependen de la fracción de Al . El nivel de Fermi de la heteroestructura es el resultante de la alineación de los niveles de Fermi del $GaAs$ y del ternario $Al_xGa_{1-x}As$ dopado con Si , que es el que fija el nivel de Fermi de la heteroestructura: a $T = 0K$ la banda de conducción del $GaAs$ está vacía; al formarse la heteroestructura, el fondo de la banda de conducción del $GaAs$ tiene una energía menor que el fondo de la banda de conducción del ternario y que los niveles de impureza, con lo que algunas de éstas se ionizan, transfiriéndose los electrones al $GaAs$ hasta alcanzar el nivel de Fermi del ternario, fijado por las impurezas de Si .

Como la banda prohibida del $GaAs$ es bastante ancha (1.52 eV a 4K), y la banda prohibida de las aleaciones $Al_xGa_{1-x}As$ es aún mayor, es una aproximación razonable para el estudio de los electrones considerar únicamente la banda de conducción, esto es,

utilizar un modelo a una sola banda y despreciar el acoplamiento con los huecos.

Se han estudiado aleaciones $Al_xGa_{1-x}As$ con $x \leq 0.4$ en las barreras, de modo que el mínimo de la banda de conducción de los materiales de pozo y barrera se halla en el punto Γ ; de esta forma puede utilizarse un modelo de funciones envolventes en torno a dicho punto para estudiar los estados electrónicos de las heterouniones formadas por estos dos materiales. Para la diferencia entre las bandas prohibidas del $GaAs$ y el $Al_xGa_{1-x}As$ se ha utilizado la fórmula empírica $\Delta E_g = (1155x + 370x^2)$ meV [24]; un 60% de esta discontinuidad corresponde a la banda de conducción y el 40% restante a la banda de valencia (60%/40%) [25], de modo que la profundidad del pozo electrónico es $U = 0.6\Delta E_g$. Las masas efectivas se toman como $m_{GaAs}^* = 0.0665m_0$, $m_x^* = (0.0665 + 0.0835x)m_0$ [26], donde m_0 es la masa del electrón libre. Estos datos son los usados para los sistemas estudiados en la memoria.

Como se vio en el primer capítulo, las funciones envolventes electrónicas del pozo cuántico verifican en cada medio la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E_\nu + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*} \right) F_{\nu\kappa}(z) = 0 \quad (3.1)$$

La solución del problema completo se obtiene empalmando las soluciones de la ecuación de Schrödinger en cada medio, esto es, imponiendo las condiciones de contorno adecuadas. Éstas se infieren de las condiciones físicas de continuidad de la densidad de probabilidad y de la corriente de probabilidad, que suponen en términos de funciones envolventes imponer la continuidad de la función envolvente y su derivada dividida por la masa efectiva en las intercaras:

$$\begin{aligned} F_{\nu\kappa}(z_l - \epsilon) &= F_{\nu\kappa}(z_l + \epsilon), & \frac{F'_{j\kappa}(z_l - \epsilon)}{m_x^*} &= \frac{F'_{j\kappa}(z_l + \epsilon)}{m_{GaAs}^*}, & (\epsilon \rightarrow 0) \\ F_{\nu\kappa}(z_r - \epsilon) &= F_{\nu\kappa}(z_r + \epsilon), & \frac{F'_{\nu\kappa}(z_r - \epsilon)}{m_{GaAs}^*} &= \frac{F'_{\nu\kappa}(z_r + \epsilon)}{m_x^*}, & (\epsilon \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde z_l y z_r son las posiciones de las intercaras derecha e izquierda respectivamente.

Para estados ligados del pozo, que son los que interesan en el estudio de su población electrónica a temperaturas bajas, E_ν toma valores discretos; son los estados ligados del pozo unidimensional en la dirección z . Para hacer más patente el carácter discreto del espectro electrónico en el rango de energías de interés, etiquetaremos en lo sucesivo

los estados con el índice j , que toma valores en los números naturales. Cada uno de los E_ν discretos es el fondo de una subbanda parabólica, de un continuo de energía cinética bidimensional. Las correspondientes funciones envolventes tienen una amplitud evanescente en la barrera; se anulan para $z \rightarrow \pm\infty$:

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} F_{j\kappa}(z) = 0 \quad (3.3)$$

y son de cuadrado integrable, de modo que puede escogerse la normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |F_{j\kappa}(z)|^2 dz = 1. \quad (3.4)$$

Las condiciones de contorno, empalme y normalización determinan completamente salvo fase la función envolvente.

Si la masa efectiva fuera constante en todo el sistema, como se comentaba en el apartado 1.4.2, bastaría empalmar las ecuaciones a $\kappa = 0$ para hallar los autovalores E_j , que es la parte unidimensional no trivial del problema, o equivalentemente, englobar el término $\hbar^2 \kappa^2 / 2m^*$ en el autovalor:

$$E_j(\kappa) = E_j + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*} \quad (3.5)$$

E_j es la energía asociada al movimiento en la dirección z , y $\hbar^2 \kappa^2 / 2m^*$ es la energía del movimiento en el plano xy , que es puramente cinética; la función envolvente en tal caso no depende de κ , sino únicamente de E_j .

Debido a la diferencia entre las masas efectivas del $GaAs$ y el $Al_xGa_{1-x}As$ en estricto rigor hay que resolver la ecuación de Schrödinger para cada valor de κ . Nosotros consideraremos masas efectivas diferentes para $\kappa = 0$, y supondremos para $\kappa \neq 0$ una dependencia parabólica de la energía en κ , tomando $m^* = m_{GaAs}^*$, de modo que los fondos de las subbandas se determinan teniendo en cuenta la diferencia entre las masas efectivas de pozo y barrera, pero despreciando la no parabolicidad en la relación de dispersión inducida por tal diferencia.

Por tanto, tomaremos las funciones envolventes y sus correspondientes autoenergías iguales a

$$F_{\kappa j}(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\kappa \cdot \rho} F_j(z); \quad E_j(\kappa) = E_j + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}, \quad (3.6)$$

donde A es un área de normalización, κ y ρ son vectores bidimensionales, j es el índice de subbanda y m^* se toma siempre como la masa efectiva en el material de pozo, $GaAs$. Esto simplifica el cálculo con una aproximación muy aceptable que supone que, habiendo obtenido los autovalores con una regla de empalme que da cuenta de la diferencia de masas efectivas, las autofunciones de interés están siempre muy localizadas en el pozo y la penetración en la barrera es siempre muy pequeña. La diferencia de masas efectivas puede ser importante para la determinación de los autovalores E_j del movimiento cuantizado unidimensional, pero puede ignorarse en el movimiento libre bidimensional en el canal del pozo.

Con los autovalores y autofunciones, se puede hallar la densidad electrónica de carga $\rho_e(\mathbf{r})$: sustituyendo (3.6) en (1.31), y pasando al continuo en la variable κ ,

$$\sum_{\kappa} \longrightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2\kappa, \quad (3.7)$$

se tiene

$$\rho_e(z) = \frac{-2e}{(2\pi)^2} \sum_j \int d^2\kappa |F_j(z)|^2 f\left(E_j + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m^*}\right) \quad (3.8)$$

donde se ve explícitamente que la densidad electrónica depende sólo de la coordenada z . Haciendo el cambio de variable

$$\omega = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m^*}, \quad (3.9)$$

esto es,

$$d^2\kappa = 2\pi\kappa d\kappa = \pi d(\kappa^2) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \pi d\omega, \quad (3.10)$$

se tiene

$$\begin{aligned} \rho_e(z) &= -\frac{em^*}{\pi\hbar^2} \sum_j |F_j(z)|^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\exp\left(\frac{E_j + \omega - E_F}{k_B T}\right) + 1} = \\ &= -\frac{em^*}{\pi\hbar^2} k_B T \sum_j |F_j(z)|^2 \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_j}{k_B T}\right)\right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

que en el límite $T \rightarrow 0$ es

$$\lim_{T \rightarrow 0} \rho_e(z) = -\frac{em^*}{\pi\hbar^2} \sum_j |F_j(z)|^2 (E_F - E_j) \theta(E_F - E_j). \quad (3.12)$$

En realidad, la magnitud que se compara más directamente con los experimentos es la densidad electrónica areal (número de electrones por unidad de área) N_S , pues se obtiene

a partir de medidas Hall. En el caso de que haya más de una subbanda ocupada, sus poblaciones pueden obtenerse de medidas Shubnikov-de Haas. Los valores de la densidad areal de electrones no dependen prácticamente de la temperatura en el rango de 0 a 100 K [27]; como los experimentos con los que hemos comparado los cálculos fueron realizados a $T \leq 77K$, la influencia de la temperatura no es importante, por lo que hemos tomado $T = 0K$, centrándonos en el efecto de los parámetros estructurales en la densidad areal, que es mucho más importante.

La densidad local de la subbanda j a $T = 0K$ es

$$\rho_{ej}(z) = -\frac{em^*}{\pi\hbar^2}|F_j(z)|^2(E_F - E_j)\theta(E_F - E_j), \quad (3.13)$$

de modo que su densidad areal se obtiene simplemente integrando en la variable z esta expresión y dividiendo por la carga del electrón:

$$N_{Sj} = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho_{ej}(z) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}(E_F - E_j). \quad (3.14)$$

La densidad areal total se obtiene sumando a todas las subbandas ocupadas:

$$N_S = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho_e(z) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sum_j (E_F - E_j)\theta(E_F - E_j). \quad (3.15)$$

3.1.1 Determinación del nivel de Fermi: las impurezas de Si en $Al_xGa_{1-x}As$

La determinación del nivel de Fermi en un pozo cuántico con dopaje modulado es por tanto específica del material volúmico dopado de la barrera. Es en éste donde se fija E_F , que por consiguiente es un dato de entrada del cálculo autoconsistente. Por tanto, para el estudio de la variación del nivel de Fermi de un pozo cuántico con la temperatura basta con conocer la variación del mismo en el $Al_xGa_{1-x}As$ volúmico dopado con Si .

En un semiconductor n -dopado en equilibrio térmico, la concentración de electrones libres depende crucialmente de la energía de ionización E_D de la impureza. Si la compensación es despreciable, esto es, si

$$N_D \gg (N_D/2) \exp(-E_D/k_B T) \gg N_A, \quad (3.16)$$

donde N_D y N_A son respectivamente las concentraciones de impurezas donadoras y aceptoras del semiconductor, la concentración de electrones libres es

$$n \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{N_C N_D}}{2} \exp\left(-\frac{E_D}{2k_B T}\right), \quad (3.17)$$

donde N_C es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción,

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.18)$$

Suponiendo una energía de ionización $E_D = 10$ meV, típica de un nivel hidrogénico (también llamado ligero), el factor $\exp(-E_D/2k_B T)$ es 0.82 a 300K y 0.47 a 77K. Sin embargo, para un nivel profundo, por ejemplo $E_D = 100$ meV, $\exp(-E_D/2k_B T)$ es 0.14 a 300K y 5×10^{-4} a 77K. Por tanto, la concentración de electrones libres a temperatura ambiente es aproximadamente un orden de magnitud menor —y a la temperatura del nitrógeno líquido cuatro órdenes de magnitud menor— que en un semiconductor con un nivel de impureza ligero.

Al dopar $Al_x Ga_{1-x} As$ con $x > 0.22$ con impurezas de tipo n , como Si , Sn y Te , se observa que la concentración de electrones libres en la aleación a temperatura ambiente es mucho menor que la concentración de impurezas N_D , debido al atrapamiento de electrones en un nivel profundo. La dependencia de la concentración de este nivel profundo con N_D hizo pensar a Lang *et al.* [28] que se debía a la asociación de un átomo donador (D) con un defecto de origen desconocido (X), de ahí que estos niveles se conozcan con el nombre de niveles DX.

Los centros DX son los responsables del efecto llamado fotoconductividad persistente a bajas temperaturas. Cuando se expone la muestra a la luz a bajas temperaturas, los centros DX se ionizan, pasando a la banda de conducción. Al cesar la iluminación de la muestra los electrones permanecen en la banda de conducción, y la fotoconductividad decae muy lentamente. Esto indica la existencia de una barrera no sólo para la emisión de electrones, sino también para su captura. Una muestra que presenta fotoconductividad persistente se halla fuera del equilibrio, y tal estado puede durar minutos o días. Por consiguiente, la concentración de electrones libres en la muestra depende de su historia previa.

Además del nivel DX la impureza de Si produce un nivel ligero de carácter hidrogénico. Los niveles ligeros no varían su energía de ionización con la fracción de Al ; sin embargo, los niveles DX sí. Para $x \leq 0.22$ el nivel DX es resonante con la banda de conducción, siendo $E_{DX} > E_C$. Para estos valores de la concentración de Al el nivel de Fermi en el $Al_xGa_{1-x}As$ dopado con Si viene fijado por el nivel hidrogénico E_h del Si . Al aumentar x el nivel DX entra en la banda prohibida y es necesario aclarar el origen de los centros DX para hacer el tratamiento estadístico adecuado del semiconductor, esto es, para determinar correctamente el nivel de Fermi.

La observación del nivel DX en $GaAs$, bien sea como un estado resonante en la banda de conducción o como un estado en la banda prohibida bajo la aplicación de presión hidrostática, ha permitido concluir que el nivel DX es un estado del átomo donador aislado, y no un complejo donador-defecto. La aplicación de presión hidrostática al $GaAs$ reduce la distancia interatómica, modificando la posición energética de los valles de la bandas de conducción de manera análoga a la adición de Al al $GaAs$, pero sin cambiar la naturaleza química de los átomos que rodean a los donadores. Cuando se aplica una presión hidrostática suficiente al $GaAs$, se observa tanto fotoconductividad persistente como un pico en el espectro DLTS¹ característico de los niveles DX. Por otro lado, se han observado estados de impureza de tipo hidrogénico asociados con los mínimos Γ y X de la banda de conducción en $Al_xGa_{1-x}As$ tras la fotoionización de los centros DX. Estos resultados sugieren que los niveles DX y los hidrogénicos provienen del mismo tipo de impureza [30].

Suponiendo por tanto que el semiconductor esté dopado con una sola especie de impurezas de densidad volúmica N_D con varios estados posibles $\{E_r\}$ de degeneraciones $\{g_r\}$, la fracción de impurezas ionizadas N_D^+ es

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + \sum_r g_r \exp\left(\frac{E_F - E_{Dx}}{k_B T}\right)}. \quad (3.19)$$

¹DLTS son las siglas de Deep Level Transient Spectroscopy [29], técnica experimental empleada para la detección de trampas en semiconductores. Se utiliza para obtener información de los niveles de impureza en la zona de agotamiento de una barrera Schottky o una unión $p-n$. Si se inyectan portadores en la muestra, se modifica la ocupación de los niveles de impureza en la zona de agotamiento y por consiguiente varía su capacitancia. El estudio del transitorio de la capacitancia permite obtener información sobre las energías de activación de las trampas.

Por otro lado, la concentración de electrones en la banda de conducción de $Al_xGa_{1-x}As$ viene dada por

$$n_0 = N_C F_{1/2}(\eta), \quad (3.20)$$

donde N_C es la densidad efectiva de estados dada por (3.18) y $F_{1/2}(\eta)$ es la integral de Fermi de orden 1/2:

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\varepsilon-\eta} + 1} \quad (3.21)$$

siendo $\varepsilon = E/k_B T$, $\eta = E_F/k_B T$. El nivel de Fermi se halla imponiendo neutralidad de carga: si la temperatura no es muy alta y no se pasa al régimen de conducción intrínseca del semiconductor, la contribución de los electrones provenientes de la banda de valencia es despreciable y entonces la densidad de impurezas ionizadas ha de ser igual al número de electrones en la banda de conducción. Si además $E_F - E_C < k_B T$, esto es, si el semiconductor no está degenerado, la integral de Fermi $F_{1/2}(\eta)$ puede aproximarse por e^η . La densidad de electrones en la banda de conducción será $n_0 = N_C e^\eta$. Se tiene en tal caso

$$n_0 = N_C e^{(E_F - E_C)/k_B T} = N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_{DX} e^{\frac{E_F - E_{DX}}{k_B T}} + g_h e^{\frac{E_F - E_h}{k_B T}}} \quad (3.22)$$

de donde se tiene que el nivel de Fermi es

$$E_F = E_C - k_B T \ln \left\{ \frac{N_C}{2N_D} + \sqrt{\left(\frac{N_C}{2N_D} \right)^2 + \frac{N_C}{N_D} [g_h e^{(E_C - E_h)/k_B T} + g_{DX} e^{(E_C - E_{DX})/k_B T}]} \right\} \quad (3.23)$$

Atendiendo a la concentración de Al en la aleación, pueden distinguirse tres posibilidades:

- (i) Si la fracción molar de Al es pequeña ($x < 0.22$), el nivel DX es resonante con la banda de conducción, y

$$E_C - E_{DX} \ll E_C - E_h \quad (3.24)$$

de modo que la exponencial $e^{(E_C - E_{DX})/k_B T}$ puede despreciarse frente a $e^{(E_C - E_h)/k_B T}$, y E_F se calcula como si el Si tuviera únicamente un nivel ligero.

- (ii) Si ($x > 0.22$) y $E_C - E_{DX} \gg E_C - E_h$, la exponencial dominante en (3.23) es $e^{(E_C - E_{DX})/k_B T}$, y E_F se calcula como si sólo hubiera un nivel profundo DX.
- (iii) Para $x \simeq 0.2$ los niveles hidrogénico y DX están próximos en energía y cercanos al borde de la banda de conducción, así que ambos han de tenerse en cuenta al calcular E_F .

En resumen, en los casos (i) y (ii),

$$E_F = E_C - k_B T \ln \left\{ \frac{N_C}{2N_D} + \sqrt{\left(\frac{N_C}{2N_D}\right)^2 + \frac{N_C}{N_D} g_D \exp(E_C - E_D)/k_B T} \right\} \quad (3.25)$$

donde D indica el correspondiente nivel de impureza: para (i) es h ; para (ii) es DX . En el límite $T \rightarrow 0K$

$$E_F = \frac{E_C + E_D}{2}, \quad (3.26)$$

que coincide con el nivel de Fermi de un semiconductor con un solo tipo de impureza donadora monovalente y sin impurezas aceptoras. En el caso (iii) puede usarse la misma expresión, pero ahora

$$E_D = -\frac{1}{2} \lim_{T \rightarrow 0} k_B T \ln [g_{DS} \exp(-E_{DS}/k_B T) + g_{DX} \exp(-E_{DX}/k_B T)], \quad (3.27)$$

que depende de la alineación relativa de los niveles de impurezas, pero no de sus respectivas degeneraciones. Esta expresión para un solo nivel de impureza es análoga a la llamada aproximación de un solo nivel o de nivel donador equivalente, introducida por Watanabe *et al.* [31], que tomando en consideración los niveles DX e hidrogénico, calcularon una sola energía de activación equivalente que diera cuenta de la densidad electrónica medida en $Al_xGa_{1-x}As$, lo cual supone hacer un promedio de las energías de los dos niveles ligero y DX, como hemos indicado en (3.27). Ésta es la solución adoptada por Hihara *et al.* [32] para fijar el nivel de Fermi en un cálculo autoconsistente en heterouniones simples. Hirakawa *et al.* [33] consideran igualmente un solo nivel de impureza: toman como E_D la diferencia en energía entre el borde de la banda de conducción del $Al_xGa_{1-x}As$ volúmico

n -dopado y su nivel de Fermi, pues en un semiconductor n -dopado con un fondo de impurezas aceptoras el nivel de Fermi coincide con el nivel de la impureza donadora.

En esta memoria se emplean los valores de E_h y E_{DX} dados por Chand *et al.* [34]: $E_h = 10$ meV, $E_{DX} = (707x - 146)$ meV.

Conocido E_F , hay que determinar las autofunciones y los autovalores electrónicos, y con éstos la densidad electrónica local $n(z)$ y la densidad electrónica areal N_S . Ésta se determina experimentalmente con medidas Hall. Cuando hay más de una subbanda ocupada, sus poblaciones pueden determinarse con medidas Shubnikov-de Haas, así que cuando haya más de una subbanda ocupada, se estudiará la población de cada subbanda separadamente.

3.2 Cálculo autoconsistente de la población y estructura electrónica

La presencia de portadores en el pozo cuántico altera considerablemente su perfil de potencial, que a su vez resultará en unos autovalores y autofunciones distintos al resolver la ecuación de Schrödinger, lo cual hace necesaria una solución autoconsistente del problema. Para iniciar el cálculo se supone una solución inicial, bien de la ecuación de Poisson (un potencial) o de la ecuación de Schrödinger (una densidad de carga). Si no se tiene una solución aproximada para el potencial, como por ejemplo el resultado autoconsistente de un sistema similar, puede tomarse como primera solución de la ecuación de Poisson un perfil de potencial cuadrado, que corresponde al pozo despoblado. La aproximación de orden 0 analítica para el potencial dada en [35] es útil en la práctica salvo para valores muy pequeños (menores que 100 Å) o muy grandes de L_W (mayores que 300 Å), para los que el potencial de esta aproximación no tiene estados ligados, en cuyo caso hay que empezar usando el pozo cuadrado como primera aproximación a la solución del problema. Si se disponen de resultados autoconsistentes de sistemas similares, lo más adecuado es utilizarlos como aproximación inicial, lo cual puede disminuir considerablemente el tiempo de cálculo, según cuán parecidas sean las dos soluciones. Si se calcula la solución de un sistema considerando efectos de canje y correlación a partir de la solución autoconsistente

del mismo sin incluir dichos efectos, se necesitan muy pocas iteraciones para lograr la autoconsistencia.

Para resolver la ecuación de Schrödinger se ha utilizado una combinación de SGFM y matriz de transferencia, como se explica en el apartado 2.1.3; las referencias originales para esta técnica son [36] y [37].

Como se explicaba en el apartado 2.1.1, los autovalores discretos del problema unidimensional E_j son los ceros de $\det \mathcal{G}_j^{-1}$. Una vez determinados, las correspondientes autofunciones se calculan integrando la ecuación de Schrödinger a la energía E_j utilizando la técnica de matrices de transferencia descrita en 2.1.2.

Con las funciones de onda normalizadas se calcula la densidad local de carga en el sistema, que se emplea: (i) como término fuente en la ecuación de Poisson, de la cual se obtiene el potencial electrostático; (ii) en el funcional de canje y correlación V_{xc} . Para la ecuación de Poisson se procede de la manera acostumbrada, tomando la constante dieléctrica como $\epsilon = 12.5$, correspondiente al *GaAs*, y despreciando la discontinuidad dieléctrica en las intercaras, la cual no es muy importante para un cálculo a frecuencia 0. Para V_{xc} se utiliza el funcional de Hedin-Lundqvist [19]. Por supuesto, esto no es más que una aproximación, pero la práctica demuestra [38, 39] que funciona bien incluso en sistemas con densidades de carga fuertemente no homogéneas.

Los nuevos valores de los potenciales estructural, electrostático y de canje y correlación determinan un nuevo potencial total $V(z)$ con el que se inicia un nuevo ciclo en el proceso de autoconsistencia, iterando hasta que la solución converja. En este cálculo se ha obtenido una precisión de $0.01 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ en los valores de N_S , que son del orden de $10^{11} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

3.3 Resultados

Como resultado de los cálculos autoconsistentes se obtienen los autovalores E_j , fondos de las subbandas 2D ocupadas, las correspondientes funciones envolventes y el perfil de potencial del pozo cuántico. Con las autoenergías y las funciones envolventes es posible calcular la densidad electrónica local del sistema o la de cada subbanda, e integrándolas, la densidad areal total y la densidad areal de cada subbanda. Estas magnitudes pueden

compararse directamente con medidas experimentales. Para algunos casos se han realizado los cálculos incluyendo y sin incluir los efectos de canje y correlación, lo que permite apreciar su importancia en estos sistemas.

3.3.1 Dependencia de los parámetros estructurales

Las tablas 3.1 a 3.5 muestran las energías de los fondos de las subbandas ocupadas E_j y las densidades areales N_S calculadas autoconsistentemente para una serie de pozos en los que se varía sistemáticamente la longitud del pozo L_W , la capa espaciadora L_S y la fracción de Al en la barrera x . Cada tabla muestra los resultados para L_W variable, con x y L_S fijos. L_W toma valores entre 50 y 300 Å, L_S entre 100 y 200 Å, y x entre 0.1 y 0.3.

Al aumentar el ancho del pozo, se observa inicialmente un aumento de la población. Tal comportamiento es de esperar, pues un pozo cuadrado (despoblado) es tanto más atractivo cuanto mayor es su ancho y la altura de la barrera. Sin embargo, en un pozo poblado esto no ocurre indefinidamente: al aumentar la densidad electrónica del pozo, aumenta también la densidad de impurezas ionizadas en las barreras, que crean un potencial creciente en éstas cuyo efecto es subir el fondo del pozo hacia el borde de la banda de conducción, acercándolo al nivel de Fermi y disminuyendo su capacidad para atrapar electrones, de ahí que la densidad electrónica areal se mantenga prácticamente constante. Este comportamiento se observa en todos los casos estudiados.

Todos los pozos estudiados con $L_W = 100$ Å tienen una sola subbanda ocupada. Aumentando L_W , mientras sólo hay una subbanda ocupada, la población aumenta debido a que el fondo de la subbanda va bajando respecto de E_F , y llega un punto en que N_S se hace constante, pues el potencial repulsivo debido a la densidad electrónica en el pozo impide el descenso del fondo de la subbanda y por tanto el aumento de su población. Esta tendencia se observa especialmente en los pozos con $x = 0.1$ y $L_W = 150-250$ Å (tablas 3.4 y 3.5), aunque de los valores de las densidades areales para los pozos con $x = 0.2-0.3$ y $L_W = 100-150$ Å (tablas 3.1 y 3.2) se infiere un comportamiento similar. A partir de este punto, el aumento de L_W va acompañado de la disminución de $E_F - E_0$, y acaba por producir la ocupación de una nueva subbanda, lo que en todos los casos salvo en los

$L_w(\text{\AA})$	$E_j(\text{sin xc})$	$N_s(\text{sin xc})$	$E_j(\text{xc})$	$N_s(\text{xc})$
50	-33.8	9.4	-37.1	10.3
100	-41.0	11.4	-43.8	12.2
150	-1.76	0.5	-2.8	0.8
	-40.4	11.2	-41.9	11.7
200		11.7		12.4
	-11.9	3.3	-13.2	3.7
	-32.1	8.9	-33.2	9.2
250		12.2		12.9
	-16.8	4.7	-18.2	5.1
	-27.6	7.7	-28.5	7.9
		12.4		13.0
300	-19.4	5.4	-20.8	5.8
	-25.1	7.0	-25.9	7.2
		12.4		13.0

Tabla 3.1 : Energías de los fondos de las subbandas ocupadas E_j y sus respectivas densidades areales N_s calculadas para pozos de ancho L_w variable, manteniendo fijos $x = 0.3$ y $L_S = 100 \text{ \AA}$. Las energías se miden desde el nivel de Fermi y están en meV; las densidades areales se dan en 10^{11} cm^{-2} . Los cálculos se han realizado incluyendo y sin incluir los efectos de canje y correlación; se indican en la tabla como "xc" y "sin xc" respectivamente. Si hay más de una subbanda ocupada, se da la densidad areal total debajo de las densidades areales parciales.

$L_W(\text{Å})$	$E_j(\sin xc)$	$N_S(\sin xc)$	$E_j(xc)$	$N_S(xc)$
100	-30.4	8.4	-33.1	9.2
150	-31.2	8.7	-33.5	9.3
200	-6.4	1.8	-7.6	2.1
	-26.2	7.3	-27.3	7.6
		9.1		9.7
250	-11.0	3.1	-12.3	3.4
	-22.2	6.2	-23.1	6.4
		9.2		9.8
300	-13.5	3.8	-14.8	4.1
	-19.8	5.5	-20.6	5.7
		9.3		9.8

Tabla 3.2 : Igual que en la tabla anterior, con $x = 0.2$, $L_S = 100 \text{ Å}$.

$L_W(\text{Å})$	$E_j(\sin xc)$	$N_S(\sin xc)$	$E_j(xc)$	$N_S(xc)$
100	-13.3	3.7	-15.6	4.3
150	-14.4	4.0	-16.5	4.6
200	-14.5	4.0	-16.3	4.5
250	-1.5	0.4	-2.5	0.7
	-13.3	3.7	-14.3	3.9
		4.1		4.6
300	-3.8	1.1	-4.8	1.3
	-11.4	3.2	-12.2	3.4
		4.2		4.7

Tabla 3.3 : Lo mismo que en las tablas anteriores, con $x=0.1$, $L_S = 100 \text{ Å}$.

L_w	$E_j(\sin xc)$	$N_s(\sin xc)$	$E_j(xc)$	$N_s(xc)$
100	-10.3	2.9	-12.1	3.4
150	-11.4	3.2	-13.0	3.6
200	-11.7	3.2	-13.0	3.6
250	-11.6	3.2	-12.8	3.6
300	-1.7	0.5	-2.4	0.7
	-10.1	2.8	-10.8	3.0
		3.3		3.7

Tabla 3.4 : Lo mismo que en las tablas anteriores, con $x = 0.1$, $L_S = 150 \text{ \AA}$.

L_w	$E_j(\sin xc)$	$N_s(\sin xc)$	$E_j(xc)$	$N_s(xc)$
100	-8.4	2.3	-9.8	2.7
150	-9.5	2.6	-10.7	3.0
200	-9.7	2.7	-10.8	3.0
250	-9.7	2.7	-10.7	3.0
290	-9.7	2.7	-0.4	0.1
			-10.2	2.9
		2.7		3.0
300	-0.4	0.2	-0.8	0.2
	-9.3	2.6	-9.9	2.7
		2.8		3.0

Tabla 3.5 : Como en las tablas anteriores, con $x = 0.1$ y $L_S = 200 \text{ \AA}$.

pozos con $L_S = 200 \text{ \AA}$ (tabla 3.5) supone un nuevo incremento de la densidad areal.

Al aumentar L_W en estos pozos con dos subbandas ocupadas se observa el mismo comportamiento de saturación en la densidad electrónica: tras un aumento inicial de la densidad, ésta se hace casi constante. Sin embargo, las energías de los fondos de las subbandas cambian: $E_F - E_0$ disminuye y $E_F - E_1$ aumenta al ensancharse el pozo; los fondos de las subbandas se van acercando, y sus poblaciones se van por tanto igualando (véanse por ejemplo los resultados para $L_W = 200\text{-}300 \text{ \AA}$ en las tablas 3.1 y 3.2). Es de suponer que para L_W mucho mayores, la situación corresponda a dos heterouniones acopladas.

La variación de las poblaciones y los fondos de las subbandas con la fracción de *Al* se infiere de las tablas 3.1 a 3.3. El parámetro estructural del pozo que más varía con x es la altura de la barrera V_b . A mayor fracción de *Al*, mayor barrera de potencial, y más atractivo resulta el pozo a igualdad de los demás parámetros estructurales: en efecto, las densidades electrónicas areales aumentan con x , y la segunda subbanda comienza a poblarse a menor L_W cuanto mayor es x : para $x = 0.3$ (tabla 3.1) hay una subbanda ocupada en el pozo con $L_W = 150 \text{ \AA}$, mientras que si $x = 0.1$ la población de la segunda subbanda ocurre para L_W entre 200 y 250 \AA (tabla 3.3).

El efecto del cambio de la capa espaciadora se observa en las tablas 3.3 a 3.5. Para todos los pozos estudiados, aumentar L_S tiene como consecuencia una disminución de la población del pozo. El aumento de L_S supone que a igual número de impurezas ionizadas, el aumento del potencial en la capa espaciadora (prácticamente lineal) es mayor, y por tanto es menor la diferencia en energía entre el fondo del pozo y el nivel de Fermi, es decir, el pozo resulta menos atractivo y tiene una densidad electrónica areal menor. Esto se hace patente en que la segunda subbanda del pozo con $L_W = 250 \text{ \AA}$ está poblada si $L_S = 100 \text{ \AA}$ (tabla 3.3), pero no si L_S es mayor: la segunda subbanda comienza a poblarse antes cuanto menor es la capa espaciadora.

En la tabla 3.1 se presentan los resultados para un conjunto de pozos con $x = 0.3$, $N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $L_S = 100 \text{ \AA}$ y L_W variable, entre 50 y 300 \AA . Como era de esperar, al aumentar la longitud del pozo de 50 a 200 \AA éste se hace más atractivo, lo cual se manifiesta en un aumento de la población del pozo. Pero como se comentó anteriormente,

el aumento de la densidad electrónica areal produce una subida del potencial repulsivo dentro del pozo, y el consiguiente incremento del número de impurezas ionizadas supone un aumento del potencial repulsivo en las barreras, disminuyendo así la fuerza atractiva del pozo. Por este motivo la tendencia al incremento en la densidad electrónica areal observada en los pozos con L_W entre 50 y 200 Å se frena en los pozos con L_W entre 200 y 300 Å. De hecho la densidad areal N_S de los pozos con L_W igual a 200 y 300 Å es la misma, $12.97 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

La figura 3.1 muestra el potencial autoconsistente total para el pozo de $L_W = 100$ Å, junto con la densidad de probabilidad —proporcional a la densidad local de carga electrónica— y los fondos de las dos primeras subbandas. Hay sólo una subbanda ocupada correspondiente al estado fundamental del pozo cuántico 1D en la dirección z ; el primer estado excitado está muy por encima del nivel de Fermi.

A partir de $L_W = 150$ Å hay dos subbandas ocupadas. Para $L_W = 150$ Å, su población es bastante desigual: el 94 % de la población total del pozo corresponde a la subbanda fundamental. Al aumentar el ancho del pozo, la densidad areal de las subbandas se va igualando, lo cual responde a un acercamiento en energías de los fondos de las subbandas. La figura 3.2 presenta los resultados para el pozo con $L_W = 200$ Å. Los fondos de las subbandas ocupadas están más próximos que en el pozo con $L_W = 150$ Å (véase la tabla 3.1). Los resultados comienzan a desviarse del esquema habitual para pozos cuadrados: la tercera subbanda se halla bastante más alejada de la segunda que las dos primeras entre sí, y la densidad de probabilidad de la subbanda fundamental tiene su máximo aplanado, indicando la tendencia del gas electrónico a dividirse en dos al aumentar la longitud del pozo. Este resultado es del todo patente en la figura 3.3, que muestra los resultados para $L_W = 300$ Å. Ahora la densidad de probabilidad de la subbanda fundamental tiene dos máximos simétricos cercanos a las intercaras y un mínimo local en el centro del pozo. Los fondos de las dos primeras subbandas están muy próximos; a la vista de la figura 3.3, esta estructura podría considerarse como dos heterouniones simples acopladas; las dos subbandas corresponderían al desdoblamiento en dos estados, simétrico y antisimétrico, del estado fundamental de la heterounión simple.

La figura 3.4 muestra la densidad electrónica total $n_e(z)$ en los tres casos de las figuras 3.1, 3.2 y 3.3. En el pozo con $L_W = 100$ Å el máximo de la densidad electrónica está

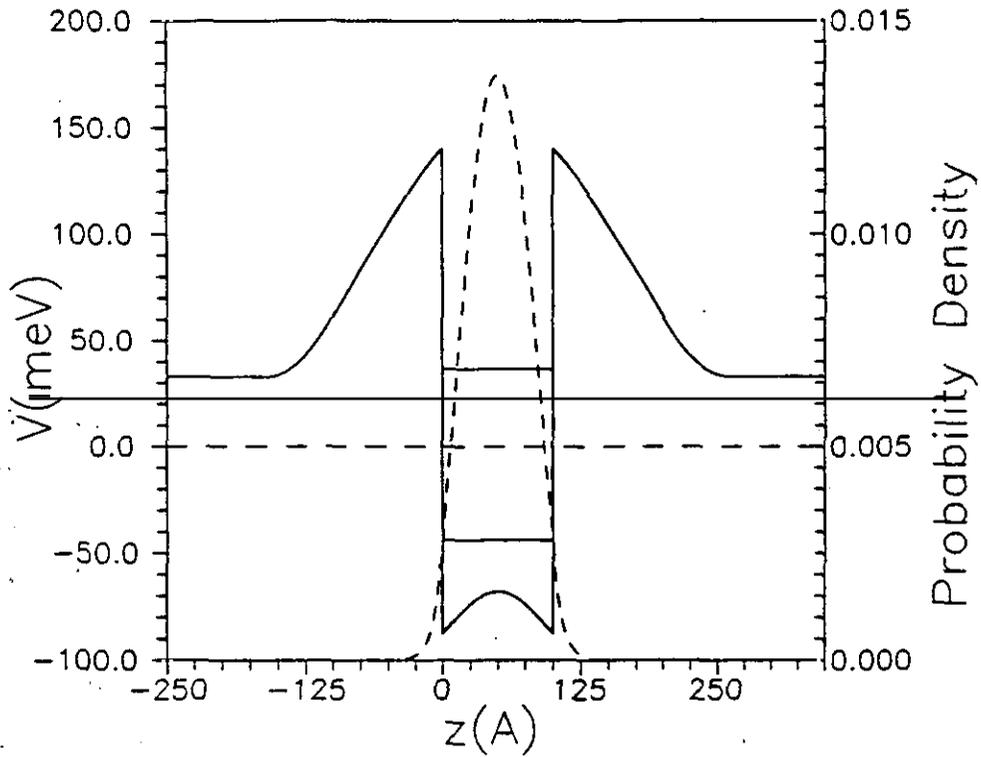


Figura 3.1 : Perfil del potencial (línea continua), densidad de probabilidad de la subbanda fundamental (línea de trazos cortos) y nivel de Fermi (línea de trazos largos) de un pozo con $x = 0.3$, $L_W = 100 \text{ \AA}$, $L_S = 100 \text{ \AA}$ y $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Las energías de los fondos de las dos primeras subbandas se indican con sendas líneas rectas. Sólo la subbanda fundamental está poblada.

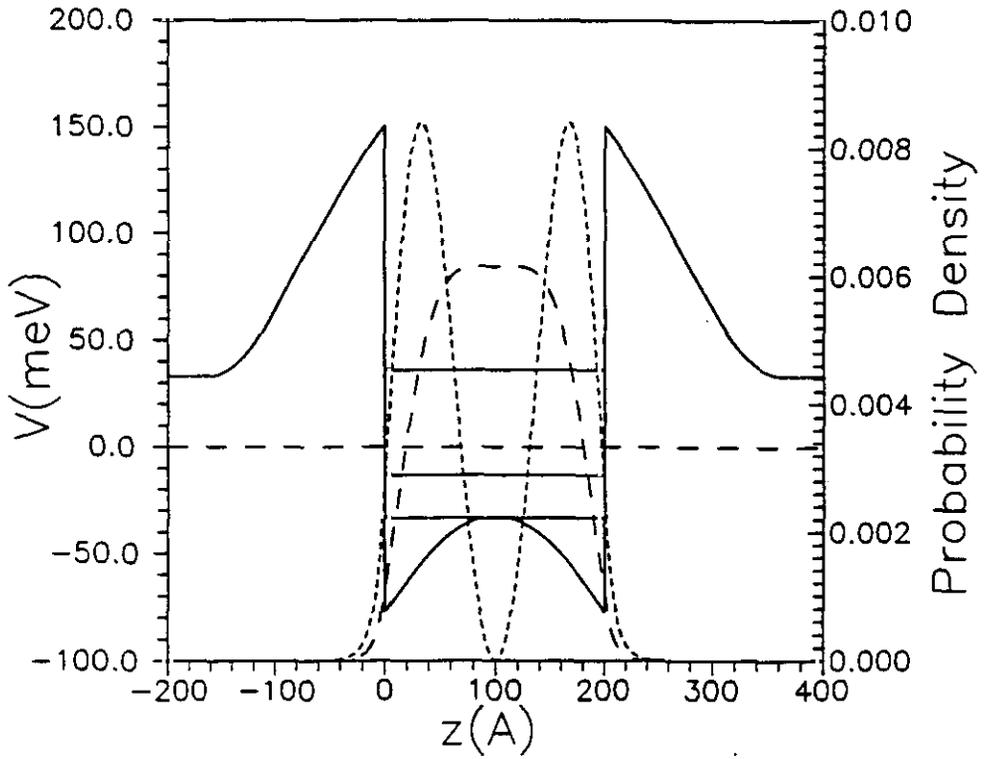


Figura 3.2 : Igual que en la figura 3.1, con $L_w = 200$ Å.

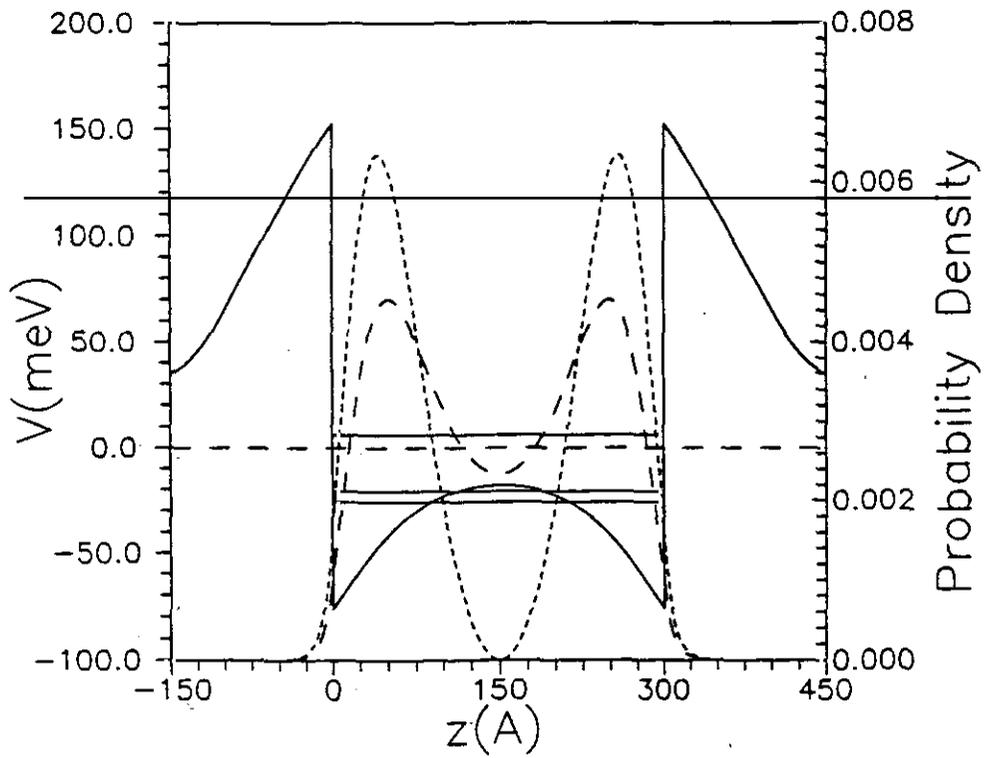


Figura 3.3 : Igual que en las figuras anteriores, con $L_w = 300 \text{ \AA}$. En este caso la subbanda fundamental tiene los máximos cerca de las intercaras del pozo.

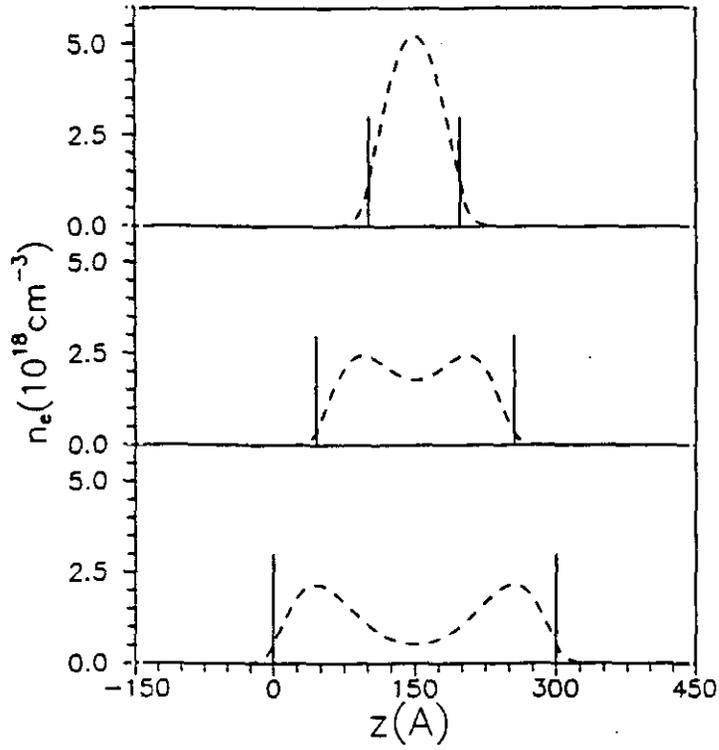


Figura 3.4 : Densidad electr3nica local, correspondiente a los pozos de las figuras 3.1, 3.2 y 3.3.

en el centro del pozo, pero ya en el pozo con $L_W = 200 \text{ \AA}$ se observan dos máximos de la densidad electrónica cerca de las intercaras, lo cual no se infiere claramente de las densidades de probabilidad de las subbandas dibujadas en la figura 3.2; de hecho, hay una densidad electrónica apreciable en el centro del pozo. Para $L_W = 300 \text{ \AA}$ los dos máximos de la densidad electrónica son muy pronunciados y puede hablarse de dos gases cuasibidimensionales confinados junto a las intercaras.

En pozos atractivos, con una fracción de Al grande, el desdoblamiento del gas electrónico bidimensional en dos gases cercanos a las intercaras se manifiesta claramente en el rango de L_W considerado. En pozos con x menor hay que ampliar este rango a valores mayores de L_W , ya que este desdoblamiento se debe al propio potencial electrostático repulsivo producido por los electrones, que es suficiente para confinar los dos gases cerca de las intercaras cuando la densidad electrónica es alta, lo cual, si x y L_S son fijos, se logra aumentando el ancho del pozo. Harris *et al.* [40] hacen un estudio similar para pozos con $x=0.25$, comparando con sus propios resultados experimentales, y concluyen que la separación del gas electrónico en dos gases cuasibidimensionales se da para $L_W \geq 450 \text{ \AA}$.

La interacción de canje y correlación depende de la dimensión del sistema estudiado, siendo mayor para dimensiones bajas; al aumentar la dimensión del sistema, su importancia disminuye. Respecto del gas electrónico, a densidades bajas la interacción de canje es despreciable, y domina el efecto de la correlación [41]. A densidades metálicas los efectos del canje y de la correlación se cancelan, por lo que el gas de electrones de un metal se describe correctamente como un gas ideal. A densidades intermedias no se produce tal cancelación, como ocurre en los gases electrónicos que pueblan los sistemas cuasibidimensionales de semiconductores, en los que tanto por las densidades areales del gas como por la dimensión del sistema, este efecto puede ser relevante.

En las tablas 3.1 a 3.5 se muestran los valores de los cálculos Hartree además de los resultados considerando el efecto del canje y la correlación. Aunque la variación en la densidad areal total es mayor en los sistemas más poblados, no puede decirse lo mismo respecto de la diferencia relativa entre las densidades areales, que a igualdad del resto de los parámetros, es mayor para valores de x pequeños, lo cual significa que la interacción de canje y correlación es mayor en los pozos menos poblados, dentro de los rangos de

valores aquí estudiados, de 10^{11} a 10^{12} cm^{-2} .

Para x fijo, la importancia relativa del canje y correlación disminuye al aumentar la longitud del pozo. Este efecto tiene que ver tanto con la dimensión del sistema, más alejado del caso bidimensional ideal al aumentar L_W , como con el aumento de la densidad que se produce al aumentar el ancho del pozo. La misma tendencia se observa al variar L_S , dejando L_W y x fijos; los sistemas con densidades menores son aquéllos en los que el efecto del canje y la correlación es mayor. Por consiguiente, podemos decir que las densidades areales obtenidas en estos sistemas son lo suficientemente altas como para que un aumento de N_S produzca una disminución del efecto del canje y la correlación.

En estos sistemas el nivel de Fermi está fijo respecto del borde inferior de la banda de conducción del material barrera. Por tanto, al incluir el efecto del canje y correlación, que en esta aproximación viene dado por un funcional definido negativo, el potencial del sistema se hace más atractivo, con lo que el sistema tiene una población mayor. Esto se observa en todos los resultados obtenidos, en los que las energías del fondo de las subbandas de los pozos son inferiores en los resultados con canje y correlación que en los resultados Hartree. Por tanto, las densidades areales de las subbandas N_{S_j} en los cálculos Hartree se subestiman; y este efecto es más notable en los pozos con una subbanda ocupada que en los que tienen dos. Puesto que las densidades N_{S_j} a $T = 0K$ son proporcionales a $E_F - E_j$, se ha de observar la misma tendencia respecto de las posiciones de los fondos de las subbandas. En efecto, en todas las tablas se observa que al aumentar L_W , mientras sólo hay una subbanda ocupada, la diferencia $E_j(\sin xc) - E_j(\sin xc)$ es prácticamente constante; al aparecer la segunda subbanda, estas diferencias se reducen aproximadamente a la mitad. En los casos en que hay dos subbandas ocupadas, la diferencia $E_2 - E_1$ apenas varía del caso Hartree al cálculo con canje y correlación; esto implica que en propiedades que impliquen sólo estas diferencias de energías, como transiciones intersubbanda, dicho efecto no es importante.

3.3.2 Comparación con datos experimentales

En la tabla 3.6 se recogen los datos y resultados para varios pozos cuánticos con modulación de dopado que han sido estudiados experimentalmente. El acuerdo general entre

	x	N_D	L_s	L_W	$N_s(\text{exp})$	$E_i(\sin xc)$	$N_s(\sin xc)$	$E_j(xc)$	$N_s(xc)$
(1)	0.12	1.0	51	245	7.6 ^a	-7.2 -18.2	7.0	-8.9 -19.5	7.9
(2)	0.12	1.0	99	244	5.6 ^a	-3.1 -15.5	5.1	-4.1 -16.5	5.7
(3)	0.12	1.0	151	250	4.0 ^a	-0.8 -13.6	4.0	-1.5 -14.4	4.4
(4)	0.2	1.0	163	262	7.0 ^b	-6.8 -18.0	6.8	-7.7 -18.6	7.3
(5)	0.23	1.0	118	258	3.9 ^b	-10.4 -21.2	9.6	-13.4 -23.4	10.2
(6)	0.30	1.7	150	300	12.7 ^c	-15.7 -22.2	10.5	-16.9 -22.8	11.1
(7)	0.30	1.0	100	300	12.7 ^d	-19.4 -25.1	12.3	-20.9 -25.9	13.0
(8)	0.33	1.3	150	250	3.8 7.9 11.6 ^e	-14.0 -25.7	3.9 7.1 11.0	-15.9 -27.4	4.2 7.3 11.6
(9)	0.36	1.0	160	150	14.0 ^f	-25.3	7.2	-39.8	11.1
(10)	0.36	1.0	240	200	8.0 ^f	-3.5 -26.8	8.4	-4.0 -27.6	8.8
(11)	0.30	1.0	60	100	16.9 ^g	-49.4	13.7	-52.7	14.6
(12)	0.30	1.0	60	200	17.4 ^g	14.9	-17.4 -36.2	-19.0 -37.5	15.7

Tabla 3.6: Diferentes muestras experimentales, junto con los resultados teóricos. Las características de las muestras se dan en las unidades acostumbradas. Normalmente los resultados experimentales $N_s(\text{exp})$ son densidades totales medidas por efecto Hall, así que sólo se dan los cálculos de las poblaciones totales. Para la muestra (7) se dan también las poblaciones parciales, medidas por efecto Shubnikov-de Haas. En este caso se dan también las poblaciones parciales calculadas. Referencias experimentales: (a): Störmer *et al.* [22]; (b): Shah *et al.* [42]; (c): Inoue *et al.* [43]; (d): Inoue *et al.* [44]; (e): Harris *et al.* [40]; (f): Gomes *et al.* [35]; (g): Sasa *et al.* [27].

los valores calculados y medidos de N_S es muy satisfactorio, teniendo en cuenta que algunos de los parámetros experimentales están sujetos frecuentemente a una cierta falta de precisión.

Una comparación de los casos (1), (2) y (3) permite estudiar el papel de la capa espaciadora tanto teórica como experimentalmente. Como era de esperar, si se mantienen fijos los demás parámetros, al aumentar L_S la población del pozo decrece. Aunque las tres muestras tienen dos subbandas ocupadas, la disminución de $E_F - E_j$ al aumentar L_S indica claramente que para una capa espaciadora mayor desaparecería la segunda subbanda ocupada, que en la muestra (3) tiene su fondo muy próximo al nivel de Fermi. El acuerdo con el experimento es muy bueno; en los casos (1) y (2) se observa una mejora sustancial del resultado al incluir los efectos de canje y correlación en el cálculo.

Los casos (4) y (5) corresponden a un valor intermedio de x . Respecto de los demás parámetros, (3) y (4) son sistemas muy similares. La diferencia tan grande que se observa entre sus respectivas poblaciones se debe exclusivamente al cambio en la altura de la barrera al pasar de $x = 0.1$ a 0.2 . El resultado experimental para la densidad areal de (5) no corresponde en absoluto a la tendencia observada en los demás casos. Los parámetros estructurales del pozo (5) son muy semejantes a los de (4), y al ser V_b algo mayor y L_S menor que en el caso (4), sería de esperar una densidad areal parecida y algo superior a la de éste. Es posible que o bien haya un error en la medida Hall de N_S de (5), o que alguno de los parámetros estructurales no haya sido determinado correctamente, quizá la densidad de impurezas, que podría ser en realidad mucho menor de lo indicado en la referencia [35].

El resto de las muestras de la tabla 3.6 tienen valores altos de x , aunque todas en el régimen de discontinuidad de banda directa. Los casos (6) y (7) son muy similares; aun cuando la densidad de impurezas en (6) es mayor, su capa espaciadora es también más ancha, con lo que su densidad electrónica areal es algo menor. Esto no se aprecia en el resultado experimental, sino en los cálculos teóricos.

Es interesante comparar los resultados de (6), (7), (11) y (12). Estos dos últimos son pozos más estrechos que los dos primeros, pero su capa espaciadora es mucho menor, con lo que en estos pozos más estrechos la densidad electrónica areal tanto calculada como medida experimentalmente es mucho mayor. El papel de la capa espaciadora es de crucial

importancia: en el rango de 0 a 100 Å, la población depende muy fuertemente de L_S . A partir de 100 Å, N_S sigue disminuyendo al aumentar L_S , aunque no tan rápidamente.

Los casos (9) y (10) tienen la fracción de Al más alta estudiada. Los resultados teóricos y experimentales para estos dos casos vuelven a poner de manifiesto la importancia de la capa espaciadora para estos sistemas: el pozo más estrecho es el que tiene una mayor densidad electrónica, porque su capa espaciadora es menor.

En las muestras experimentales estudiadas el acuerdo entre los cálculos y los resultados experimentales es muy bueno, teniendo en cuenta las imprecisiones que puede haber en la determinación de los parámetros experimentales: por ejemplo, el caso (6) ha sido tomado de [43], donde aparece citada como muestra R-74. Esta misma muestra aparece citada en otro trabajo de estos autores [45], pero descrita ahora con parámetros ligeramente diferentes; $N_D = 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y $L_S = 100 \text{ Å}$, que coinciden con los del caso (7). La diferencia entre los resultados teóricos es apreciable.

Respecto de la comparación entre datos experimentales y resultados teóricos, la inclusión del efecto de la interacción de canje y correlación mejora en la mayoría de los casos estudiados los resultados obtenidos respecto del cálculo puramente Hartree. La diferencia entre ambos valores es lo suficientemente grande como para que tenga sentido plantearse la inclusión del efecto del canje y la correlación con vistas a las aplicaciones prácticas de estos sistemas o a la explicación de los resultados experimentales.

Aunque desde el punto de vista teórico este efecto es más importante en sistemas con N_S menor, dentro del rango de valores de interés en estas estructuras, experimentalmente la diferencia se detecta mejor en sistemas más poblados, ya que la comparación con el experimento no da la importancia relativa de la interacción de canje y correlación, sino la diferencia absoluta entre el resultado teórico y el experimental, que es mayor en los sistemas más poblados.

Capítulo 4

Pozos δ : confinamiento del gas electrónico por dopado

El dopado selectivo puede utilizarse no sólo como un método para poblar los sistemas cuasibidimensionales de semiconductores, como hemos visto en el capítulo anterior, sino también como una técnica de modulación del potencial. Los primeros sistemas de este tipo que se concibieron fueron las superredes *n-i-p-i*, descritas en la introducción de esta memoria. En ellas, el potencial electrostático producido por las impurezas ionizadas altera el perfil de las bandas, y para capas dopadas lo suficientemente estrechas (del orden de cientos de Å) los niveles de energía de los portadores se cuantizan y se forman minibandas. Con los avances en las técnicas de crecimiento epitaxial, el ancho de las capas dopadas se ha logrado reducir hasta tal punto que se habla de dopado δ , aludiendo al intento de lograr una distribución espacial de impurezas que sea como una δ de Dirac, es decir, a dopar únicamente en una monocapa del semiconductor. Las impurezas de la lámina dopada producen un potencial que confina a los portadores provenientes de éstas, de ahí que estos sistemas se conozcan como pozos δ . Aunque las primeras estructuras con dopado δ se fabricaron en 1979 [46, 47], ha sido a partir de mediados de los años ochenta [48, 49] cuando han comenzado a ser ampliamente estudiados, no sólo por sus posibles aplicaciones tecnológicas, sino también por su interés básico: se han utilizado diferentes técnicas experimentales para el estudio de los pozos δ , como espectroscopía Raman [50], absorción infrarroja [51, 52], medidas de magnetotransporte [53] y fotoluminiscencia [50].

Desde el punto de vista teórico, han aparecido en la literatura cálculos autoconsistentes de la estructura electrónica de pozos delta aislados: Zrenner *et al.* [53] utilizan la aproximación Hartree (no incluyen efectos de canje y correlación), aunque consideran el efecto de la no parabolicidad de las subbandas; Degani [54] incluye efectos de canje y correlación y estudia fundamentalmente el efecto de la segregación de las impurezas de la lámina δ . Los resultados que se presentan en este capítulo complementan los citados anteriormente.

En la fabricación y diseño de heteroestructuras cuánticas, hay que tener en cuenta las constantes de red de los materiales constituyentes: si son muy diferentes, se producen tensiones que imposibilitan el crecimiento de capas anchas; por consiguiente, si se pretende construir un pozo cuántico con una anchura de 100 Å o superior, es necesario que las constantes de red de los materiales de pozo y barrera sean muy parecidas. En las homoestructuras cuánticas este problema no existe, puesto que las densidades que se consideran grandes para dopado suponen una distorsión muy pequeña de la red del material volúmico: por ejemplo, en el *GaAs*, la densidad areal de átomos en la superficie (100) es de $1.25 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, lo que supone una densidad de átomos de *Ga* igual a $6.25 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Los átomos de *Si* se sitúan preferentemente en las posiciones del *Ga*, de ahí que se comporte como donador. Como las densidades areales de *Si* que suelen emplear en estos sistemas son menores que 10^{13} cm^{-2} , el *Si* sólo ocupa una pequeña fracción de las posiciones del *Ga* en una monocapa, y produce una alteración menor en la red del *GaAs*. Estas homoestructuras no tienen los problemas derivados de la presencia de intercaras entre materiales distintos, puesto que las impurezas se consideran como una pequeña perturbación del material volúmico; sin embargo, las densidades de portadores que pueden obtenerse son muy altas; en el caso del *GaAs* dopado con *Si*, las densidades electrónicas areales que se consiguen superan las obtenidas en las heteroestructuras de *GaAs* y sus aleaciones con *Al* dopadas con *Si*. Esto hace que las estructuras δ dopadas se hayan utilizado para diseñar transistores de alta potencia; además, aunque la movilidad de los portadores en un pozo δ sea menor que en una heteroestructura análoga con modulación de dopado en las barreras debido a que impurezas y portadores no están espacialmente separados, la transconductancia g_m ¹ de un transistor δ es muy alta [46, 48, 49], debido

¹La transconductancia es un parámetro muy importante de los transistores: $g_m = \frac{\partial I}{\partial V_g}$, donde I es la corriente entre la fuente y el sumidero, y V_g es el voltaje de la puerta; en una primera aproximación, g_m

tanto al notable aumento de la densidad de portadores como a la reducción de la distancia entre el canal de portadores y la puerta que es posible en este tipo de sistemas.

4.1 El gas electrónico atrapado en el potencial producido por las impurezas

Si la densidad areal de impurezas N_D es lo suficientemente grande (en el *GaAs* dopado con impurezas esto supone $N_D \geq 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), los portadores no están ligados a las impurezas de las que provienen, sino que están deslocalizados en torno al plano de impurezas ionizadas, que puede tratarse como una distribución uniforme de carga en el plano de crecimiento xy . Dentro del modelo de masa efectiva, que emplearemos en la descripción de estos sistemas, puede relacionarse la densidad mínima a la que puede hacerse la aproximación de lámina uniformemente cargada con el radio de Bohr efectivo de los portadores en el semiconductor, a_B^* : los portadores se deslocalizarán cuando sus órbitas en torno a las impurezas solapen; aproximadamente, cuando lo hagan los círculos de radio igual a a_B^* . Esto corresponde a una densidad areal del orden de $1/a_B^{*2}$.

Si N_D es la densidad areal de impurezas y se supone una localización perfecta de éstas en la dirección de crecimiento z , la correspondiente densidad volúmica es

$$n_{imp}(z) = N_D \delta(z - z_0) \quad (4.1)$$

donde z_0 es la posición de la lámina de impurezas. La distribución de carga debida solamente a las impurezas ionizadas desnudas produce un potencial en forma de V en la dirección de crecimiento z . Si no hay compensación total, los portadores provenientes de las impurezas se ven confinados en dicho potencial, que a su vez apantallan, de modo que la distribución de portadores y el potencial electrostático producido por portadores e impurezas ionizadas han de ser calculados de manera autoconsistente.

En principio el dopado puede ser de tipo p o n y en cualquier tipo de semiconductor. Nosotros nos centraremos en el estudio del *GaAs* dopado δ con *Si* sin compensar. En

es proporcional a la movilidad y a la densidad areal de los portadores e inversamente proporcional a la distancia entre el canal de conducción y la puerta.

este material, la condición $N_D \geq 1/a_B^2$ se cumple para densidades del orden de $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Puesto que el *Si* se incorpora en una capa atómica ocupando las posiciones del *Ga* y por tanto es una impureza donadora en el *GaAs*, los portadores son electrones; la capa de impurezas de *Si* ionizadas se trata como una hoja de carga positiva, que produce un potencial atractivo para los electrones y repulsivo para los huecos. Debido a la magnitud de la banda prohibida del *GaAs*, es una buena aproximación para el estudio de los electrones considerar sólo la banda de conducción, análogamente a lo hecho para el estudio de los pozos cuánticos de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* con modulación de dopado de *Si* (capítulo 3).

Aunque en estos sistemas se pretende localizar las impurezas en una monocapa del semiconductor, en la práctica el *Si* se difunde en el *GaAs*, y su distribución espacial tiene una anchura finita. Santos *et al.* [55, 56] aclararon que la temperatura del sustrato durante el crecimiento de la muestra está relacionada con la difusión del *Si*: a temperaturas del sustrato T_S menores que 530°C la difusión del *Si* es prácticamente despreciable, mientras que temperaturas T_S más altas favorecen la segregación y dan lugar a distribuciones de impurezas de más de 100 \AA de anchura: a 640°C el ancho de la distribución de impurezas es del orden de 180 \AA . Como a altas temperaturas las estructuras crecen mejor, con menos defectos, las primeras muestras que se crecieron presentaban unos perfiles de difusión del *Si* muy alejados de la distribución δ ideal; una vez aclarado el efecto de la temperatura del sustrato, se ha conseguido reducir el ancho de la zona dopada prácticamente al límite de la localización de las impurezas en una monocapa: Liu *et al.* [71] consiguieron observar directamente las láminas dopadas δ por medio de microscopía electrónica de alta resolución; en sus muestras los átomos de *Si* se hallan confinados a lo sumo en 5 monocapas de *GaAs*. Nosotros consideraremos la posible difusión del *Si* y su efecto en la estructura electrónica de estos sistemas, suponiendo que las impurezas se distribuyen en una lámina de longitud l_d con una densidad uniforme $\rho_{imp} = eN_D/l_d$, esto es, como una función escalón, y comparamos con el caso ideal de dopado δ perfecto, es decir, $l_d = 0$.

Supondremos que no existe compensación, es decir, que la densidad de impurezas aceptóras n_A es 0, y que la densidad electrónica areal total N_S es igual a N_D : todas las impurezas donadoras están ionizadas. Esto ocurre para densidades areales de impurezas

menores que $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Si se dopa con una densidad mayor, se observa una saturación de la densidad electrónica [49, 53, 55, 56, 58]: aunque se aumente el dopado, las medidas de magnetotransporte indican que la densidad de electrones no supera la cota de $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. No se ha aclarado el por qué de este fenómeno; algunos autores [49] lo relacionan con el llenado de los mínimos L de la banda de conducción de *GaAs*; la diferencia en energías entre el mínimo del punto Γ y el del punto L es de 310 meV, y para un pozo delta ideal con $N_D = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, E_F supera este valor. También los niveles DX [55, 56], que en el *GaAs* tienen una energía resonante en la banda de conducción, podrían atrapar electrones en tal caso, pues $E_{DX} - E_C = 180 \text{ meV}$. Sin embargo, esto no explica por qué se produce la saturación de la densidad electrónica en pozos con una distribución de impurezas de anchura espacial finita, más realista: si la segregación del *Si* es considerable (del orden de 50 Å o más [55, 56, 58]), la energía de Fermi no es tan grande, pues el potencial resultante se ensancha y se hace menos profundo (véase la figura 4.1); sin embargo se observa igualmente la saturación de N_S . También se ha propuesto como otra posible explicación [55, 56, 58] que a partir de $N_D > 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, el *Si* deja de ser eléctricamente activo: a densidades menores, el *Si* se sitúa preferentemente en las posiciones del *Ga*, comportándose como donador; si la densidad de impurezas aumenta por encima de dicho valor, el *Si* comienza a ocupar las posiciones del *As* y deja de contribuir a la densidad electrónica areal; este fenómeno se conoce como autocompensación. Nos limitaremos a densidades N_D comprendidas entre 1 y $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, de manera que pueda suponerse que todas las impurezas están ionizadas y que producen una densidad de carga uniforme en el plano xy .

El potencial producido por las impurezas se obtiene integrando la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2}{dz^2} V_{imp}(z) = \frac{e}{\epsilon} \rho_{imp}(z). \quad (4.2)$$

$V_{imp}(z)$ ha de ser par respecto del eje $z = z_0$, y tomaremos como origen de energías $V(z_0) = 0$. Estas dos condiciones determinan completamente el potencial.

Si se considera una distribución de tipo δ en la dirección z , el potencial producido por las impurezas ionizadas desnudas tiene forma de V ; si se supone una distribución uniforme de impurezas con un ancho finito, este potencial es parabólico en la zona dopada, y lineal en la zona sin dopar. Los electrones atrapados en el pozo producen a su vez un

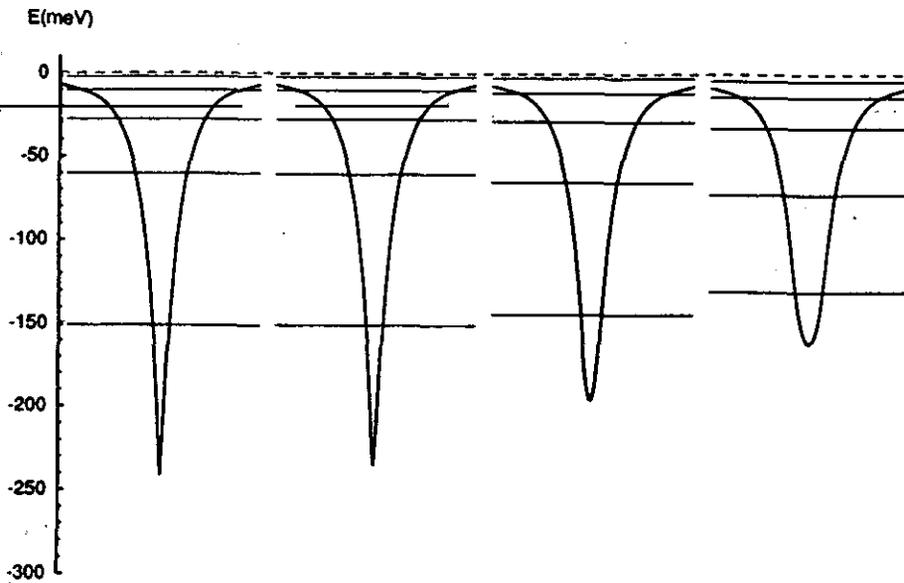


Figura 4.1 : Perfiles de potencial, fondos de las subbandas ocupadas (líneas continuas) y nivel de Fermi (línea de trazos) para pozos con $N_D = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y $l_d = 0, 10, 50$ y 100 \AA de izquierda a derecha. Todas las energías se miden desde el nivel de Fermi. Los potenciales se dibujan en un intervalo de 600 \AA centrado en la capa dopada.

potencial electrostático que modifica sustancialmente el perfil de potencial producido por las impurezas; en particular, como suponemos que no hay aceptores en el sistema, el potencial resultante final ha de tender asintóticamente a un valor constante, puesto que la carga neta total que se percibe desde una posición suficientemente alejada de la hoja de impurezas es 0.

4.2 Distribución de la población electrónica en subbandas

Como hemos anticipado, para la descripción de los estados electrónicos utilizaremos la aproximación de masa efectiva a una banda.

A las densidades de impurezas que consideraremos, $N_D \geq 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, el potencial atractivo en la dirección z confina a los electrones; su vector de onda en dicha dirección se cuantiza, mientras que su movimiento en el plano xy es libre. Consideraremos que los electrones tienen una masa efectiva constante e igual a la del $GaAs$ volúmico, y que su relación de dispersión es parabólica; dentro de esta aproximación, la ecuación (1.22) es válida para todo el sistema, lo que implica que la función envolvente en la dirección z no depende de κ , así que basta resolver el problema unidimensional

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) F_j(z) = E_j F_j(z) \quad (4.3)$$

para obtener las autoenergías y funciones envolventes del problema completo.

Las E_j son las energías asociadas al movimiento en la dirección z , los fondos de las subbandas electrónicas; las energías electrónicas totales $E_j(\kappa)$ se obtienen añadiendo a E_j la energía cinética en el plano xy , en el que los electrones se mueven libremente:

$$E_j(\kappa) = E_j + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}. \quad (4.4)$$

En este sistema, la densidad electrónica areal es conocida de antemano, e igual a la densidad areal de impurezas ionizadas. Se desconoce sin embargo la distribución de la población en subbandas y la posición del nivel de Fermi, que han de determinarse autoconsistentemente. Suponemos que todos los fondos de subbanda son estados discretos

del pozo cuántico en la dirección z ; sus correspondientes funciones envolventes son por tanto de cuadrado integrable, y se anulan para $z \rightarrow \pm\infty$, así como sus derivadas:

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} F_j(z) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} F'_j(z) = 0. \quad (4.5)$$

Estas condiciones de contorno y la normalización

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |F_j(z)|^2 dz = 1 \quad (4.6)$$

determinan completamente las funciones envolventes (salvo una fase trivial).

La expresión (3.8) para la densidad electrónica $\rho_e(z)$ en los pozos con modulación de dopado es también válida para los pozos δ , y por consiguiente su límite a temperatura $0K$, viene dado por (3.12). La diferencia entre estos dos tipos de sistemas reside en que en los pozos con modulación de dopado se conoce de antemano la posición del nivel de Fermi, fijado por los semiconductores dopados que constituyen las barreras, y se desconoce la densidad electrónica areal total del sistema N_S , mientras que en los pozos δ la densidad electrónica total areal es conocida, pero se desconoce la posición del nivel de Fermi. E_F se determina utilizando la condición de neutralidad de carga en el sistema, que en el caso que nos ocupa ($n_A = 0$) resulta ser

$$N_S = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_e(z) dz = N_D. \quad (4.7)$$

Sustituyendo en esta ecuación la densidad electrónica dada por (3.8) y utilizando la condición de normalización (4.6), se tiene

$$N_D = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} kT \sum_j \ln(1 + \exp(\frac{E_F - E_j}{kT})), \quad (4.8)$$

expresión que puede utilizarse para determinar E_F numéricamente. Nosotros nos limitaremos al caso $T = 0K$, para el que la ecuación anterior se reduce a

$$N_D = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_j (E_F - E_j) \theta(E_F - E_j). \quad (4.9)$$

De esta expresión se puede despejar E_F :

$$E_F = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p E_j + \frac{\pi \hbar^2}{pm^*} N_D \quad (4.10)$$

donde p es el número de subbandas ocupadas del pozo, que al igual que E_F , se desconoce; ambos se determinan iterativamente:

1. Se calcula E_F suponiendo que sólo hay una subbanda ocupada, es decir, que $p = 1$.

A esta cantidad la llamamos $E_F(1)$:

$$E_F(1) = E_1 + \frac{\pi \hbar^2}{m^*} N_D. \quad (4.11)$$

Evidentemente, $E_F(1) > E_1$; siempre habrá al menos una subbanda ocupada, pues hemos supuesto que no hay compensación. Para ver si hay población en la segunda subbanda, se compara $E_F(1)$ con E_2 :

Si $E_F(1) < E_2$, entonces sólo hay una subbanda ocupada, y se tiene que $E_F = E_F(1)$.

Si por el contrario $E_F(1) > E_2$, al menos hay dos subbandas ocupadas, y por consiguiente hay que calcular $E_F(2)$:

2. Supóngase que hay 2 subbandas ocupadas; en tal caso el nivel de Fermi sería

$$E_F(2) = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2} \frac{\pi \hbar^2}{m^*} N_D. \quad (4.12)$$

Se compara esta cantidad con E_3 :

Si $E_F(2) < E_3$, entonces $E_F = E_F(2)$, y efectivamente, sólo hay población en las dos subbandas más bajas.

Si $E_F(2) > E_3$, hay que calcular $E_F(3)$.

3. Se repite el razonamiento anterior hasta que se cumpla la condición

$$E_p < E_F(p) < E_{p+1} \quad (4.13)$$

En tal caso, $E_F = E_F(p)$, y hay p subbandas electrónicas pobladas.

Conocidos E_F y el número de subbandas ocupadas, puede calcularse la densidad de carga electrónica $\rho_e(z)$, que se evalúa de igual manera que para el pozo con modulación de dopado (ecs. (3.8) a (3.12)), y tiene la misma expresión final. $\rho_e(z)$ es parte del término no homogéneo de la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon} (\rho_e(z) + \rho_{imp}(z)). \quad (4.14)$$

Tanto si se toma $\rho_{imp}(z)$ como proporcional a una δ de Dirac como si se toma constante en una capa de longitud l_d y nula en el resto del sistema, el potencial producido por la distribución de impurezas puede calcularse analíticamente. El potencial electrostático producido por los electrones verifica la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2 V_e(z)}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon} \rho_e(z). \quad (4.15)$$

Para simplificar la notación, tomamos $z = 0$ como plano de simetría del sistema, que coincide con el centro de la capa dopada. Al ser el problema simétrico respecto de $z = 0$, $V_e(z)$ es par respecto de reflexiones en él, y por tanto $V_e'(0) = 0$. $V_e(z)$ es la integral doble de la densidad de carga electrónica; como vimos en el apartado 1.5, esta expresión puede simplificarse aún más; aquí lo haremos de manera ligeramente distinta a la mostrada en el apartado 1.5, que nos permite obtener una expresión muy sencilla para el potencial electrostático total cuando la distribución espacial de impurezas se modela con una δ de Dirac:

$$V_e(z) = \frac{e}{\epsilon} \int_0^z d\xi \int_0^\xi d\xi' \rho_e(\xi') = \frac{e}{\epsilon} \left(\int_0^z d\xi \int_0^\infty d\xi' \rho_e(\xi') - \int_0^z d\xi \int_\xi^\infty d\xi' \rho_e(\xi') \right). \quad (4.16)$$

Por la condición de neutralidad de carga,

$$\int_0^\infty \rho_e(z) dz = -\frac{eN_D}{2}, \quad (4.17)$$

así que

$$V_e(z) = -\frac{e^2 N_D}{2\epsilon} z - \frac{e}{\epsilon} \int_0^z d\xi \int_\xi^\infty d\xi' \rho_e(\xi') \quad (z \geq 0). \quad (4.18)$$

Esta última integral puede evaluarse por partes: definiendo

$$U(\xi) \equiv \int_\xi^\infty d\xi' \rho_e(\xi'); \quad dU(\xi) = -\rho_e(\xi) d\xi, \quad (4.19)$$

se tiene

$$I \equiv \int_0^z d\xi U(\xi) = [\xi U(\xi)]_0^z - \int_0^z \xi (-\rho_e(\xi)) d\xi = zU(z) + \int_0^z \xi \rho_e(\xi) d\xi = \int_0^z (z + \xi) \rho_e(\xi) d\xi, \quad (4.20)$$

con lo que el potencial electrostático se reduce a

$$V_e(z) = -\frac{e^2 N_D}{2\epsilon} z - \frac{e}{\epsilon} \int_0^z (z + \xi) \rho_e(\xi) d\xi \quad (z \geq 0). \quad (4.21)$$

En el caso de que la distribución de impurezas sea de tipo δ , la expresión del potencial Hartree también se simplifica; integrando la ecuación (4.2), se tiene que el potencial producido por las impurezas es

$$\frac{e^2 N_D}{\epsilon} \int_0^z d\xi \int_0^\xi \delta(\xi') d\xi' \quad (z \geq 0), \quad (4.22)$$

salvo constante fijada por el origen de energías. Utilizando la propiedad de la función de la δ de Dirac

$$\int_0^a \delta(z) dz = \frac{1}{2} \theta(0), \quad (4.23)$$

queda

$$V_{imp}(z) = \frac{e^2 N_D}{2\epsilon} z \quad (z \geq 0), \quad (4.24)$$

este potencial cancela el término lineal que aparece en (4.21), de modo que el potencial Hartree resultante de un pozo con una distribución δ de impurezas es

$$V_H(z) = -\frac{e}{\epsilon} \int_0^z (z + \xi) \rho_e(\xi) d\xi \quad (z \geq 0). \quad (4.25)$$

Si la distribución de impurezas es uniforme en una lámina de ancho finito l_d , el potencial que produce tiene la forma

$$V_{imp}(z) = \begin{cases} \frac{e^2 N_D}{2\epsilon l_d} z^2 & \text{si } z \leq \frac{l_d}{2} \\ \frac{e^2 N_D}{2\epsilon} (z - \frac{l_d}{4}) & \text{si } z \geq \frac{l_d}{2}, \end{cases} \quad (z \geq 0) \quad (4.26)$$

y añadiéndole el potencial electrostático producido por los electrones (ecuación (4.21)), se tiene el potencial Hartree total.

Como se comentaba en el apartado 1.5.1, los efectos de canje y correlación se tienen en cuenta dentro de la aproximación de funcional local; así, el potencial que aparece en la ecuación de Schrödinger (4.3) es suma del potencial Hartree y del funcional de Hedin-Lundqvist (ecuación (1.38)). Evidentemente, el criterio de autoconsistencia utilizado en el caso de los pozos con modulación de dopado (igualdad de las densidades electrónicas areales obtenidas en dos ciclos consecutivos del cálculo) no es válido aquí; en este caso consideraremos que se ha obtenido la solución autoconsistente del problema cuando los potenciales $V_H + V_{xc}$ de dos ciclos consecutivos sean suficientemente similares; en concreto,

cuando su desviación cuadrática media σ_M sea pequeña. Para estos sistemas usamos el criterio $\sigma_M \leq 0.1$ meV.

4.3 Resultados. Comparación con sistemas experimentales

Como en estos sistemas la densidad areal total N_S es conocida de antemano, los resultados de interés son las poblaciones de las subbandas, que tienen la misma expresión que en el caso del pozo con modulación de dopado (ecuación (3.14)). Por supuesto, además de éstas, se obtienen las correspondientes funciones envolventes, energías de los fondos de las subbandas y los perfiles de potencial; pero las poblaciones N_{S_j} pueden compararse directamente con los resultados de las medidas Shubnikov-de Haas y dan una idea de la bondad de los cálculos.

Zrenner *et al.* [53] presentan resultados de medidas Shubnikov-de Haas de la población de las subbandas de un pozo δ con un dopado nominal de $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y una densidad electrónica areal total de $N_S = 6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y calculan autoconsistentemente las poblaciones de las subbandas ocupadas en función del ancho de la capa dopada, teniendo en cuenta la no parabolicidad de las subbandas; sin embargo, no incluyen efectos de canje y correlación. Concluyen que el espesor de la zona dopada es $l_d = 78 \text{ \AA}$, y que este método puede utilizarse para determinar la segregación de impurezas con una gran precisión, pues las N_{S_j} dependen sensiblemente de l_d . Nosotros hemos estudiado el efecto del canje y la correlación en cuanto a la determinación de l_d , y comparamos con los resultados de Zrenner *et al.*; los resultados se muestran en las tablas 4.1 y 4.2.

Hemos realizado los cálculos suponiendo una densidad electrónica areal N_S igual a 7.0 y $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; aunque las medidas Shubnikov-de Haas dan como resultado este último valor, cabe la posibilidad de que no se haya detectado la población de subbandas más altas, y que los valores de las poblaciones de las subbandas inferiores ajusten mejor al caso $N_S = N_D$. Nuestros resultados indican que no ocurre tal cosa; el mejor ajuste que obtenemos entre nuestros cálculos incluyendo los efectos del canje y correlación y los resultados experimentales se da para $N_S = 6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $l_d = 50 \text{ \AA}$ (tabla 4.1).

$l_d(\text{Å})$	$E_F(\text{sin xc})$	$E_j(\text{sin xc})$	$N_S(\text{sin xc})$	$E_F(\text{xc})$	$E_j(\text{xc})$	$N_S(\text{xc})$
0(δ)		230.2	0.11		236.8	0.05
			223.2		229.8	0.27
	233.9	207.0	0.75	238.7	212.2	0.74
		176.7	1.59		181.0	1.60
		91.5	3.96		93.3	4.04
10		218.6	0.11		225.1	0.05
			211.7		217.2	0.27
	222.5	195.5	0.75	227.0	200.5	0.74
		164.9	1.60		161.1	1.61
		80.4	3.95		81.9	4.03
50		181.0	0.12		186.8	0.06
			173.5		217.2	0.30
	185.3	157.6	0.77	189.0	161.7	0.76
		123.7	1.71		126.8	1.73
		49.4	3.78		50.4	3.85
100		147.7	0.15		152.1	0.10
			139.4		142.6	0.36
	153.2	122.4	0.85	155.6	125.0	0.85
		85.4	1.88		86.8	1.91
		29.9	3.42		30.3	3.48

Tabla 4.1 : Energías de los fondos de las subbandas ocupadas E_j y sus respectivas densidades electrónicas areales N_{Sj} calculadas para pozos δ con una densidad de impurezas $N_D = 6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ de ancho l_d variable. Los cálculos se han realizado incluyendo y sin incluir el efecto del canje y la correlación; se indican en la tabla como "xc" y "sin xc" respectivamente. Las energías se dan en meV y están medidas desde el mínimo del potencial; las densidades areales están dadas en unidades de 10^{12} cm^{-2} .

$l_d(\text{Å})$	$E_F(\sin xc)$	$E_j(\sin xc)$	$N_S(\sin xc)$	$E_F(xc)$	$E_j(xc)$	$N_S(xc)$
0(δ)		238.1	0.12		244.8	0.06
		230.9	0.32		236.7	0.29
	242.4	213.0	0.79	247.1	219.2	0.78
		182.4	1.67		186.7	1.68
		94.4	4.11		96.1	4.20
10		225.9	0.12		232.6	0.06
		218.7	0.32		224.5	0.29
	230.2	201.4	0.79	234.9	207.0	0.78
		169.9	1.67		174.3	1.68
		82.6	4.10		84.3	4.19
50		186.8	0.13		192.6	0.07
		179.0	0.35		183.7	0.32
	191.5	162.3	0.81	195.3	166.5	0.80
		127.1	1.79		130.2	1.81
		50.1	3.92		51.6	3.99
100		152.1	0.17		156.6	0.11
		143.5	0.41		146.7	0.39
	158.2	125.6	0.90	160.6	128.2	0.90
		87.2	1.97		88.6	2.00
		30.5	3.55		30.9	3.60

Tabla 4.2 : Igual que en la tabla anterior, pero con $N_D = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

En el caso de los pozos con modulación de dopado, incluir el efecto del canje y la correlación resulta en un aumento de la población de las subbandas y de la densidad electrónica areal total: en dichos pozos, el nivel de Fermi está fijado respecto del fondo de la banda de conducción del material que forma la barrera en la zona de potencial constante, y el efecto de añadir al potencial del pozo el funcional de canje y correlación, que es definido negativo, es aumentar su profundidad respecto del nivel de Fermi, y por tanto hacerlo más atractivo, aumentar su población total. Sin embargo, en los pozos δ , la población electrónica total es fija, y la inclusión del canje y la correlación supone una redistribución de la población en las diferentes subbandas: las N_{Sj} varían, pero $\sum_j N_{Sj} = N_S$ es constante. En todos los casos estudiados, la población de las subbandas inferiores aumenta si se incluye el efecto del canje y correlación respecto del cálculo puramente Hartree; sin embargo, la población de las subbandas superiores disminuye. Aunque los cálculos muestran que el mayor cambio relativo de población se produce en la subbanda más alta, experimentalmente no suele detectarse siquiera su ocupación; es más fácil detectar la variación absoluta de la subbanda fundamental, que es la más poblada. Para los dos casos estudiados con y sin canje y correlación ($N_D = 6.7$ y $7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), la población de las 2 subbandas inferiores aumenta si se incluye el efecto del canje y correlación respecto del caso Hartree; la tercera subbanda mantiene su población constante o aumenta ligeramente: es la que sufre una menor variación de la población, y disminuye la ocupación de las dos subbandas superiores. En cualquier caso, el efecto del canje y la correlación en estos sistemas con varias subbandas ocupadas es menos importante que en los pozos con modulación de dopado, aunque conviene resaltar que cuanto menor es el ancho de la distribución de impurezas, más notable es la diferencia entre el cálculo Hartree y el que incluye canje y correlación, como se infiere de los resultados que se muestran en las tablas 4.1 y 4.2. Este resultado era de esperar, puesto que la interacción de canje y correlación depende de la dimensión del sistema, siendo mayor cuanto menor sea ésta; cuanto más estrecha es la distribución de impurezas, más confinado está el gas electrónico cuasibidimensional, y por consiguiente, más importantes son los efectos del canje y la correlación.

Respecto de la influencia de la segregación de las impurezas, en las tablas 4.1 a 4.4 se ve que las poblaciones y los fondos de las subbandas cambian apreciablemente al variar

$l_d(\text{\AA})$	$E_F(\text{xc})$	$E_j(\text{xc})$	$N_S(\text{xc})$
0(δ)		184.1	0.15
	189.5	170.8	0.52
		146.9	1.18
		76.3	3.15
10		175.3	0.15
	180.8	162.0	0.52
		138.0	1.19
		67.8	3.14
50		145.7	0.18
	152.0	162.0	0.54
		138.0	1.27
		43.3	3.02
100		118.0	0.23
	126.1	104.7	0.60
		75.1	1.41
		26.7	2.76

Tabla 4.3: Como en las tablas anteriores, pero con $N_D = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; en este caso se muestran sólo los resultados considerando el efecto del canje y la correlación.

$l_d(\text{\AA})$	$E_F(\text{xc})$	$E_j(\text{xc})$	$N_S(\text{xc})$
0(δ)		126.8	0.001
	126.7	116.9	0.28
		102.0	0.69
		53.8	2.03
10		121.5	0.001
	121.6	111.6	0.28
		96.7	0.69
		48.6	2.03
50		103.3	0.01
	103.8	96.6	0.28
		77.4	0.73
		33.0	1.97
100		85.8	0.04
	87.3	76.3	0.31
		57.6	0.82
		21.4	1.83

Tabla 4.4 : Como en la tabla anterior, con $N_D = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

l_d de 50 a 100 Å, de ahí que Zrenner *et al.* [53] consideren la medida de la ocupación de las subbandas como un buen método para determinar la segregación de las impurezas. Sin embargo, si se varía el ancho de la distribución de impurezas de 0 a 50 Å, el cambio en las ocupaciones de las subbandas es mucho menos importante: de hecho, la diferencia en los resultados es menor que la que supone para un ancho fijo incluir o no el efecto del canje y la correlación. Como en la actualidad es posible reducir la segregación de las impurezas [71] por debajo de los 50 Å, este método no es muy útil cuantitativamente para los sistemas fabricados hoy en día.

En la figura 4.1 se muestra gráficamente el efecto de la segregación del Si discutido más arriba para un pozo con una densidad areal de impurezas $N_D = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Los resultados representados corresponden a los cálculos que incluyen efectos de canje y correlación mostrados en la tabla 4.2, pero tomando E_F como origen de energía, de manera que resulta más patente el hecho de que un cambio en l_d del orden de 10 Å no afecta apreciablemente las posiciones relativas de los fondos de las subbandas y de éstas respecto del nivel de Fermi, y por consiguiente, de las poblaciones de las subbandas. La figura 4.1 pone de manifiesto claramente que la subbanda más sensible a los cambios en valor absoluto es la fundamental: al aumentar l_d , disminuye $E_F - E_1$ y por consiguiente N_{S1} . Las tablas 4.3 y 4.4 muestran los resultados de los cálculos autoconsistentes incluyendo efectos de canje y correlación en pozos con $N_D = 3$ y $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para ver el efecto de la variación de la densidad de dopado N_D en estos sistemas. En todos los casos ($N_D = 3, 5$ y $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; tablas 4.2 a 4.4) al aumentar la segregación del Si la población de la subbanda fundamental disminuye, y aumenta la población del resto de las subbandas. De hecho, aparte del perfil de potencial, que no es directamente comparable con ninguna magnitud física medible, la posición relativa de las dos subbandas más bajas es la magnitud física que más cambia al variar l_d . Por tanto, la medida experimental de la segregación del Si a través de la medida de las poblaciones de las subbandas ha de basarse principalmente en la determinación de la ocupación de la subbanda fundamental, o mejor aún, en la variación de la ocupación relativa de las dos subbandas más bajas.

Al disminuir la densidad de impurezas, no sólo varía la ocupación de todas las subbandas, sino que puede disminuir el número de subbandas ocupadas del sistema; esto

es lo que ocurre al variar N_D de 7 a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (tablas 4.2 y 4.3); se pasa de 5 a 4 subbandas pobladas. Al variar N_D de 5 a $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (tablas 4.3 y 4.4) el número de subbandas ocupadas no cambia teóricamente, pero a efectos prácticos la ocupación de la subbanda más alta para $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ es tan baja que sería indetectable con las técnicas actuales de magnetotransporte.

Nosotros no hemos considerado la no parabolicidad de las subbandas en estos cálculos; sin embargo, Zrenner *et al.* [53] muestran gráficamente (figura 3 de su artículo) la densidad electrónica areal de las subbandas calculadas tanto en la aproximación parabólica como con un modelo que da cuenta de la no parabolicidad; de la figura citada se infiere que la no parabolicidad es despreciable en los pozos con N_D pequeña (inferior a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), y la diferencia entre los dos modelos aumenta con el valor de N_D . Santos *et al.* [55] se refieren a este resultado de Zrenner *et al.* y afirman que la no parabolicidad en estos sistemas es más importante que el efecto de la interacción de canje y correlación. Sin embargo, nuestros resultados (tablas 4.1 y 4.2) muestran que para densidades como las del sistema experimental que Zrenner *et al.* estudian ($N_D \simeq 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), las correcciones introducidas al considerar el efecto de canje y correlación son del orden de las que obtienen Zrenner *et al.* empleando un modelo no parabólico; en rigor no debería despreciarse una frente a otra. Por otro lado, de acuerdo con Santos *et al.* [55], concluimos que la segregación de las impurezas tiene un efecto detectable si el ancho de la zona dopada es mayor que 50 \AA ; por debajo de este valor, suponer una distribución δ ideal de las impurezas no introduce errores mayores que los que conlleva despreciar el efecto del canje y la correlación y/o la no parabolicidad de las subbandas.

Capítulo 5

Superredes δ

Como se comentaba en el capítulo anterior, la mejora de las técnicas de crecimiento epitaxial permite un mayor control de la distribución de los dopantes en semiconductores, por lo que se han comenzado a estudiar estructuras cuya característica novedosa es el tipo de dopado, llamado δ por la intención última de lograr una localización perfecta de las impurezas [46, 48].

En las superredes δ se produce la modulación del potencial localizando las impurezas en regiones muy delgadas, distribuidas con una cierta periodicidad espacial. Si se van alternando en una superred capas de impurezas donadoras y aceptoras de modo que el sistema esté totalmente compensado, el perfil de potencial resultante tiene forma aserrada [52]. Si no existe compensación total, los portadores libres producen un potencial electrostático que modifica el de las impurezas, y que debe determinarse autoconsistentemente para lograr una descripción realista de la estructura electrónica de estos sistemas.

El interés por las superredes δ es creciente: recientemente han aparecido algunos cálculos autoconsistentes de la estructura electrónica de estos sistemas [59, 60, 61], así como espectros de fotoluminiscencia [59, 62] que proporcionan información sobre los niveles energéticos de los portadores.

En este capítulo se presenta un estudio exhaustivo de la estructura electrónica de los sistemas con dopado delta múltiple. Destacamos ciertos aspectos no señalados en la literatura existente, es decir, qué parámetros son realmente relevantes en cuanto a la estructura electrónica se refiere; en particular, cómo afectan a las anchuras de las

minibandas y a las distancias entre éstas, que son las magnitudes que tienen relevancia desde el punto de vista experimental. Finalmente, comparamos nuestros resultados con los espectros de fotoluminiscencia anteriormente citados. Los resultados de este capítulo se recogen en la referencia [63].

5.1 Planteamiento del problema

Estudiaremos superredes dopadas con impurezas donadoras, en concreto *Si* en *GaAs*, sin compensar. Supondremos que todas las impurezas están ionizadas, y que debido a la proximidad de los átomos de *Si*, la densidad de carga es uniforme en el plano *xy* de crecimiento de la estructura; como vimos en el capítulo anterior, esta suposición es válida si la densidad areal de impurezas N_D es mayor que un cierto valor crítico, que para el *GaAs* es aproximadamente $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Consideraremos diferentes distribuciones de impurezas en la dirección de crecimiento z , desde la que da nombre a estos sistemas, de tipo δ , a distribuciones gaussianas con distintas anchuras a mitad del máximo. Si suponemos que las impurezas están perfectamente localizadas, su densidad volúmica $n_D(z)$ es

$$n_D(z) = N_D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(z - nd) \quad (5.1)$$

donde d es el periodo de la superred; si se supone una distribución más realista de tipo gaussiano, entonces

$$n_D(z) = \frac{N_D}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(z-nd)^2}{2\sigma^2}}; \quad \sigma = \frac{\Delta z}{2\sqrt{2 \ln 2}} \quad (5.2)$$

La dispersión de las impurezas se mide por el ancho de la gaussiana a mitad del máximo, Δz . Esto permite estudiar cómo afecta la segregación del *Si* al potencial y al espectro de la superred. Las anchuras a mitad de máximo escogidas, de 20 y 40 Å, son del orden de las que se producen en los dispositivos experimentales últimamente [56, 58]: como comentamos en el capítulo anterior, una vez aclarado el efecto de la temperatura del sustrato T_S en la segregación del *Si*, el ancho de la distribución de impurezas se controla bastante bien. Como se explicó en el apartado 4.1, se ha comprobado [56] que para

temperaturas inferiores a 530°C la difusión del *Si* disminuye considerablemente, de tal manera que las anchuras de las zonas dopadas son del orden de las estudiadas en este caso.

El rango de densidades de impurezas considerado va de 1 a $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Como se comentó en el capítulo 4, a densidades inferiores a $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ la lámina de impurezas no puede modelarse como una hoja con una distribución de carga uniforme; por otro lado, a densidades areales mayores que $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se observa una saturación de la densidad electrónica [49, 53, 58]: aunque se aumente el dopado nominal, las medidas de efecto Hall indican que no se superan densidades de electrones de $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Para el rango de valores de N_D indicado podemos suponer que todos los donadores están ionizados, de modo que producen una distribución de carga periódica en la dirección de crecimiento de la superred z y uniforme en el plano perpendicular a ésta, xy . Los valores del periodo de la superred d oscilan entre 100 y 500 Å, lo que permite estudiar el comportamiento de este tipo de estructuras desde el régimen propiamente de superred al de pozo cuántico, que se produce para grandes periodos.

Al igual que en los pozos δ de *Si* en *GaAs*, utilizaremos el modelo de funciones envolventes a una sola banda [9]; como en todas las estructuras cuánticas que hemos estudiado, basadas en *GaAs* y las aleaciones $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, las propiedades electrónicas se describen satisfactoriamente con dicho modelo. Supondremos que la masa efectiva es constante en todo el sistema, e igual a la del *GaAs*; la interacción de canje y correlación se tiene en cuenta dentro de la Aproximación de Funcional de Densidad Local; de este modo, el problema se reduce a una ecuación de Schrödinger para una partícula con un potencial suma del potencial Hartree y de un potencial de canje y correlación. Hemos escogido el funcional de Hedin y Lundqvist [19], aunque las diferentes parametrizaciones del funcional de canje y correlación dan resultados similares para la densidad de estados.

Como se comentaba en el capítulo 1, debido a que el sistema es invariante bajo traslaciones en el plano xy , el vector de onda en dicho plano, κ , es un buen número cuántico, y lo mismo ocurre con el vector de onda en la dirección z , q , debido a la periodicidad en dicha dirección. Las funciones envolventes se escogen de modo que verifiquen la propiedad de Bloch en la dirección z , y normalizadas a un periodo de la superred, tal como se explicó en el apartado 1.4.2. El espectro de energía asociado al movimiento

en la dirección z consiste en intervalos de energías permitidas (minibandas) separados por intervalos de energías prohibidas, análogos a las bandas permitidas y prohibidas del espectro de un cristal. En cuanto al movimiento en el plano xy , consideramos que los electrones se mueven libremente; como se toma la masa efectiva constante, la relación de dispersión en dicho plano es parabólica. Así, en el caso que nos ocupa en este capítulo, la ecuación de Schrödinger que describe el problema unidimensional es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E_j(q) \right) F_{jq}(z) = 0 \quad (5.3)$$

que nos da la energía asociada al movimiento unidimensional, las minibandas $E_j(q)$. Teniendo en cuenta el movimiento libre en el plano xy , el espectro de la superred viene dado por

$$E_j(\kappa, q) = E_j(q) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}, \quad (5.4)$$

esto es, cada energía permitida $E_j(q)$ es el fondo de una subbanda parabólica.

La ecuación de Schrödinger se ha resuelto utilizando la técnica de Matrices de Transferencia explicada en el capítulo 2. Este tratamiento nos permite calcular el espectro de una superred sin hacer distinciones entre las minibandas anchas, típicas de superredes de periodos cortos, y las que son tan estrechas que pueden asimilarse a estados de pozo cuántico, como hacen Ke *et al.* [59]. Tampoco cambia la magnitud del cálculo para diferentes casos: en un desarrollo en ondas planas, que es muy adecuado para superredes de periodo pequeño, hay que aumentar enormemente el número de componentes si se estudian superredes de periodo muy grande [60] para describir adecuadamente las funciones envolventes.

Conocido el espectro y las autofunciones del hamiltoniano, puede calcularse el nivel de Fermi del sistema, E_F . La densidad de carga electrónica en la superred es

$$\rho(z) = -2e \sum_j \sum_{\kappa} \sum_q f(E_{jq}(\kappa)) |F_{jq}(z)|^2, \quad (5.5)$$

donde $f(E)$ es la función de distribución de Fermi. En un sistema infinito, las sumas discretas pueden aproximarse por integrales:

$$\sum_{\kappa} \rightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int d\kappa, \quad (5.6)$$

$$\sum_q \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{zB} dq, \quad L = Nd, \quad (5.7)$$

de modo que la densidad de carga es

$$\rho(z) = - \sum_j e \int_{ZB} dq \left(\frac{d}{2\pi} \right) \frac{m^*}{\pi \hbar^2} k_B T \ln(1 + e^{(E_F - E_j(q))/k_B T}) |F_{jq}(z)|^2. \quad (5.8)$$

ZB indica que la integración en q se realiza en toda la zona de Brillouin. A $T = 0K$,

$$\rho(z) = - \frac{em^*}{\pi \hbar^2} \sum_j \frac{d}{2\pi} \int_{ZB} dq (E_F - E_j(q)) \theta(E_F - E_j(q)) |F_{jq}(z)|^2. \quad (5.9)$$

Ahora la densidad areal de electrones N_S se calcula en un periodo de la superred; como el sistema es eléctricamente neutro, ha de ser igual a la densidad areal de impurezas N_D :

$$N_D = N_S = - \frac{1}{e} \int_0^d dz \rho(z) = \frac{d}{2\pi} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} 2 \sum_j \int_{SZB} dq (E_F - E_j(q)) \theta(E_F - E_j(q)). \quad (5.10)$$

SZB indica que la integral está evaluada en la mitad de la zona de Brillouin, entre $q = 0$ y $q = \frac{\pi}{d}$; debido a que la relación de dispersión es par en q , se tiene $\int_{ZB} dq = 2 \int_{SZB} dq$. La expresión (5.10) nos permite calcular el nivel de Fermi de la superred, conocidos los demás datos, N_D , d , $E_j(q)$. El algoritmo para el cálculo de E_F es análogo al seguido en el caso de los pozos δ (apartado 4.2). Una vez determinado E_F y por tanto el número de minibandas ocupadas del sistema, puede calcularse la densidad electrónica del sistema $\rho_e(z)$, que se empleará en la resolución de la ecuación de Poisson:

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} = - \frac{e}{\epsilon} (\rho_e(z) + \rho_{imp}(z)). \quad (5.11)$$

donde $\rho_{imp}(z) = eN_D(z)$. La solución de la ecuación de Poisson $V_P(z)$, a la que se añade el potencial de canje y correlación, $V_{xc}(z)$, se toma como nuevo potencial $V_S(z)$ para la ecuación de Schrödinger. Se logra la solución autoconsistente del problema cuando V_S , $V_T = V_P + V_{xc}$ son similares, esto es, cuando la desviación cuadrática media de estos potenciales, σ_M , es pequeña. Consideramos que nuestro resultado es autoconsistente cuando $\sigma_M \leq 0.1$ meV.

5.2 Comportamiento tridimensional frente a cuasi-bidimensional

Hemos realizado cálculos autoconsistentes para superredes de periodos d de 100, 300 y 500 Å, con densidades de impurezas N_D de 1, 3, 5 y 7×10^{12} cm⁻², además de algunos

otros casos para los que existen resultados experimentales. Los espesores de la capa dopada estudiados son de 0 (δ), 20 y 40 Å. Para la masa efectiva del electrón en el *GaAs* y la constante dieléctrica de este material se toman los mismos datos que en los capítulos previos.

En la figura 5.1 se muestran los resultados para una superred con $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $d = 300 \text{ Å}$ y $\Delta z = 20 \text{ Å}$. Las zonas sombreadas son las energías permitidas para $\kappa = 0$ cuando q varía dentro de la zona de Brillouin unidimensional, esto es, las minibandas de la superred. La línea de trazos indica el nivel de Fermi del sistema, y V_0 es la altura máxima del potencial.

Hemos calculado las funciones envolventes $F_{jq}(z)$, el potencial autoconsistente $V(z)$, las energías de las minibandas y la posición del nivel de Fermi de diferentes sistemas para estudiar el efecto de la variación de N_D y d . La minibanda fundamental de este sistema es tan estrecha que puede considerarse un estado de pozo cuántico; las minibandas superiores tienen anchuras mayores, tanto más cuanto mayor es su energía: a energías altas el efecto confinador del potencial es menor.

El aspecto de los potenciales y de las densidades electrónicas no cambia cualitativamente al variar los parámetros N_D , d [61]; es de mayor interés ver la variación de los bordes de banda, ocupación y nivel de Fermi al modificar aquéllos. En la figura 5.2 se muestra la variación de los bordes de las minibandas de la superred frente a la longitud del periodo para diferentes N_D , así como la posición del máximo del potencial y el nivel de Fermi E_F , referido todo ello al mínimo del potencial. La información de interés en estos gráficos es el valor relativo de unas energías respecto de otras, esto es, la diferencia entre los bordes de banda, o entre el nivel de Fermi y el máximo del potencial. Evidentemente, al aumentar la densidad N_D el potencial de la superred es más atractivo, y la diferencia entre el mínimo y el máximo del potencial, ΔV , es mayor. Igualmente, para una N_D dada, al variar el periodo de la superred de 100 a 500 Å se observa que ΔV aumenta hasta hacerse prácticamente constante; cuando los pozos δ están muy separados, el sistema se comporta como un conjunto de pozos aislados e independientes; por esta razón al aumentar d más allá de un cierto valor, V_0 , E_F y las energías de los bordes de las minibandas apenas cambian, y son los valores que se obtendrían para un pozo cuántico. Al disminuir d , el acoplamiento entre los pozos aumenta y el sistema muestra

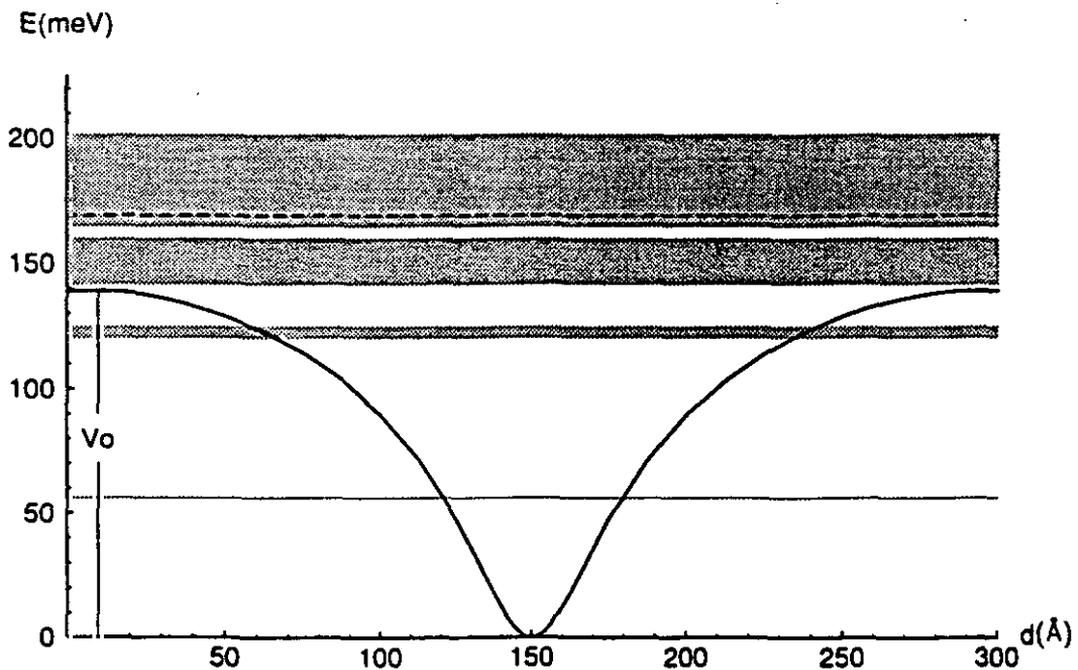


Figura 5.1 : Perfil de potencial autoconsistente para un sistema con dopado δ periódico con una dispersión de las impurezas $\Delta z = 20 \text{ \AA}$, densidad de impurezas $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y periodo $d = 300 \text{ \AA}$. Las zonas sombreadas son las energías de las minibandas, esto es, los valores permitidos de la energía a $\kappa = 0$. La línea de trazos es el nivel de Fermi, y V_0 denota la máxima altura del pozo, que ocurre a una distancia $d/2$ de la hoja de impurezas; por claridad se ha desplazado la indicación en la figura. Todas las energías se miden respecto del fondo del pozo cuántico.

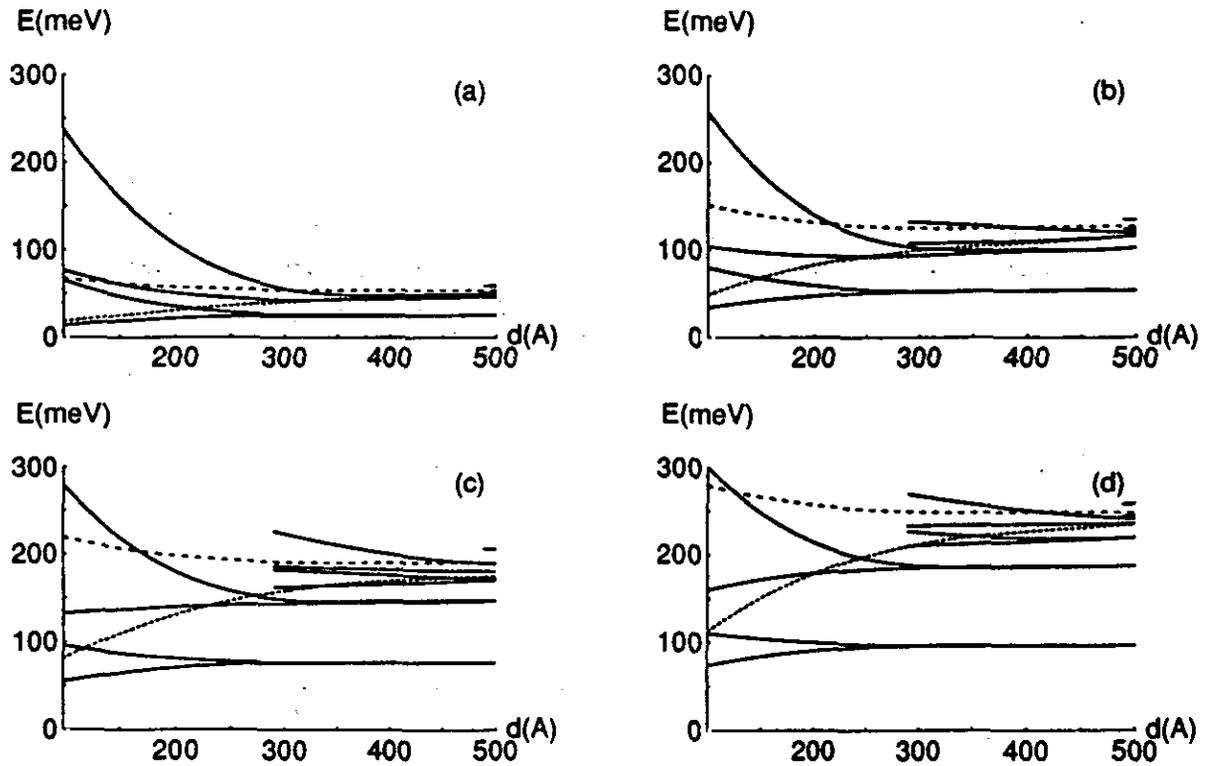


Figura 5.2 : Líneas continuas: bordes de las minibandas ($\kappa = 0$). Líneas de puntos: valores de la profundidad del pozo V_0 (véase la figura 5.1). Líneas de trazos: E_F . Todas las energías están referidas al mínimo del potencial. Los valores de N_D son (a) 1; (b) 3; (c) 5; (d) 7, todos ellos en unidades de 10^{12} cm^{-2} .

un comportamiento de superred, más notable a energías altas.

En general, nuestros resultados pueden describirse de la siguiente manera:

- (i) Para todas las densidades N_D estudiadas, el sistema con periodo $d = 100 \text{ \AA}$ se comporta como una superred: la densidad de carga electrónica no se hace despreciable en ningún punto, lo cual indica que existe un acoplamiento entre los pozos. Todas las minibandas tienen anchos considerables: incluso para densidades de impurezas muy altas, la anchura de la minibanda más baja es del orden de 30 meV . En todos los casos el número de minibandas ocupadas no pasa de dos.
- (ii) Para $d = 500 \text{ \AA}$, más que de superredes, se trata de sistemas de pozos cuánticos múltiples prácticamente desacoplados: la densidad electrónica a $d/2$ de la hoja de impurezas es casi nula. Las anchuras de las minibandas ocupadas son despreciables, asemejándose más a estados discretos de pozo cuántico. El nivel de Fermi en este caso está más próximo al máximo del potencial que en las superredes de periodo menor, como ocurría en los pozos cuánticos aislados (capítulo 4). Hay de 3 a 5 minibandas ocupadas; cuanto mayor es la densidad areal de impurezas, mayor es el número de minibandas con población.
- (iii) Para valores intermedios de d ($d \sim 250 \text{ \AA}$), la minibanda más baja es muy estrecha, más bien un estado fundamental de pozo cuántico; para este rango de energías los pozos pueden considerarse independientes. Sin embargo, las minibandas más altas tienen un ancho apreciable ($\geq 10 \text{ meV}$); como comentamos anteriormente, a energías más altas el efecto confinador del potencial es menor, y esto hace que las minibandas se ensanchen: los electrones atraviesan por efecto túnel con más facilidad el potencial si tienen energías mayores; los pozos pueden considerarse acoplados en este rango de energías.

El efecto de la segregación de la impurezas es un cambio considerable en los perfiles de potencial $V(z)$ y de la densidad electrónica $\rho_e(z)$, así como la posición de las minibandas y del nivel de Fermi respecto del mínimo de potencial, como puede verse en la figura 5.3, donde se aprecia cómo un cambio de 0 a 40 \AA en la anchura de la distribución de impurezas reduce a la mitad la altura máxima del potencial V_0 . Estos resultados coinciden

con los de Degani [61]. Sin embargo, los anchos de las minibandas, así como su posición relativa, no cambian de manera apreciable, como puede inferirse de dicha figura, y éste es el tipo de información que se extrae con más fiabilidad de los espectros. Degani [61] hace un estudio sistemático de sistemas con dopado delta múltiple. Como afirma Degani, la densidad electrónica del sistema y el perfil de potencial cambian considerablemente al suponer una distribución distinta para los donadores, e insiste fundamentalmente en este resultado. Sin embargo, esto no permite deducir que propiedades electrónicas como las posiciones relativas de las minibandas y de éstas respecto del nivel de Fermi (y por consiguiente la población de las minibandas; véase la ecuación (5.10)) cambien mucho a su vez. Como queda patente a la vista de nuestros resultados (figura 5.3; los bordes de las minibandas medidos respecto del nivel de Fermi en los 3 casos apenas cambian) e incluso de los del propio Degani (que calcula las poblaciones de las minibandas en sistemas en los que únicamente varía la distribución de impurezas), las densidades areales de las minibandas cambian muy poco con la segregación de las impurezas [61] en el rango de valores de Δz de interés experimental.

5.3 Información experimental

Hemos comparado los resultados de nuestros cálculos con los espectros de fotoluminiscencia de varias superredes. Esta técnica experimental es difícil de realizar en un pozo delta aislado, debido a que el potencial atractivo para los electrones es repulsivo para los huecos fotocreados. La recombinación radiativa de los electrones confinados en un pozo δ aislado y los huecos fotocreados es espacialmente indirecta, con lo que la integral de solapamiento de las funciones envolventes de electrones y huecos es pequeña y por consiguiente, la probabilidad de recombinación radiativa es baja. Sin embargo, confinando los huecos cerca del plano δ , aumenta considerablemente la probabilidad de recombinación, y es posible utilizar esta técnica para analizar estructuras dopadas δ . El confinamiento de los huecos puede realizarse creciendo una intercara cercana al plano δ , donde los huecos quedan confinados, como hacen Wagner *et al.* [50] que obtuvieron el espectro de fotoluminiscencia de una sola capa δ de Si en GaAs, creciendo una capa de $Al_xGa_{1-x}As$ sobre el GaAs. De esta manera, los huecos quedan atrapados en el potencial

de la heterounión, próximo al de la capa δ donde se hallan confinados los electrones, y la probabilidad de recombinación entre ambos aumenta. Se consigue el mismo efecto si se crece el pozo δ de Si dentro de un pozo cuántico $GaAsAl_xGa_{1-x}As$: los huecos fotocreados se quedan atrapados en el pozo de $GaAs$, de modo que la probabilidad de transición óptica aumenta drásticamente [64, 65]. En las superredes δ la propia modulación del potencial evita que los huecos se alejen indefinidamente del lugar donde se crearon y la probabilidad de recombinación es mayor que en pozos aislados [62, 65, 66].

Los espectros de fotoluminiscencia no son de fácil interpretación teórica. Es posible extraer de ellos información cualitativa sobre la estructura electrónica del sistema, pero no es trivial una descripción detallada de todas sus características. Lyo *et al.* [67] presentan un modelo microscópico que explica la forma de línea del espectro de fotoluminiscencia en pozos cuánticos con modulación de dopado de discontinuidad de banda directa, considerando el efecto de las impurezas. Este modelo tiene en cuenta que la recombinación de electrones y huecos ocurre tanto a través de procesos directos como indirectos, asistidos por dispersión con las impurezas ionizadas. La dispersión de las impurezas produce, por un lado, un ensanchamiento de los niveles de electrones y huecos, y por otro lado, se relaja la regla de conservación del momento, por la posibilidad de que ocurran procesos indirectos, asistidos por impurezas. Estos procesos contribuyen al ensanchamiento de los picos y al corrimiento de todo el espectro. En los sistemas que Lyo *et al.* estudian, pozos cuánticos de $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ con modulación de dopado p y n , la anchura de los picos es del orden de 10 meV, y los corrimientos de unos 5 a 10 meV. No tenemos noticia de que se hayan realizado cálculos similares en pozos o superredes δ ; evidentemente, en estos sistemas el efecto de la dispersión por las impurezas tiene que ser más importante que en los pozos con modulación de dopado, en los que el gas electrónico se halla espacialmente separado de las impurezas. Además, debido a la relajación de la regla de conservación del momento, las anchuras de las líneas en el caso de las superredes ha de ser mucho mayor, tanto más cuanto mayores sean los anchos de las minibandas ocupadas, aunque éstas no puedan inferirse directamente de los anchos de los picos del espectro de fotoluminiscencia. Sin embargo, cuando en un espectro de fotoluminiscencia aparecen varios máximos, dado que el desplazamiento entre los picos de un mismo espectro debido a la presencia de impurezas es el mismo [67], las distancias

d (Å)	N_D (10^{12}cm^{-2})	E_F^{3D} (meV)	E_F (meV)	W_{PL} (meV)
100	1.4	68	69	43
200	1.2	39	57	25
500	1.0	18	33	7

Tabla 5.1 : Energía de Fermi tridimensional calculada a partir de la densidad uniforme de portadores E_F^{3D} y anchos de los picos más intensos W_{PL} obtenidos de los espectros de fotoluminiscencia de Maciel *et al.*, junto con la energía de Fermi cuasibidimensional E_F según nuestros cálculos para superredes de periodo d y densidad de impurezas N_D .

entre ellos pueden dar una idea aproximada de la separación entre minibandas.

Maciel *et al.* [62] muestran los espectros de fotoluminiscencia de 3 superredes cuyas características se dan en la tabla 5.1. Como Maciel *et al.* hacen notar, la energía de Fermi tridimensional calculada a partir de la densidad equivalente de portadores, E_F^{3D} , difiere considerablemente de la anchura W_{PL} del pico más intenso del espectro de luminiscencia. Estos datos se recogen en la tabla 5.1, junto con la energía de Fermi cuasibidimensional, E_F , resultado de nuestros cálculos. Maciel *et al.* consideran que esta diferencia se debe al carácter cuasibidimensional del gas electrónico que puebla la superred. Sin embargo, tampoco se observa acuerdo entre nuestro valor de E_F autoconsistente con W_{PL} ; esta discrepancia se debe probablemente a que es necesario considerar el efecto de las impurezas para explicar el espectro de fotoluminiscencia.

Respecto del espectro de la superred de $d \approx 500$ Å [62] (tabla 5.1), la anchura del pico más intenso es $W_{PL} = 7$ meV, pero hay dos picos más que cabe asociar con otras tantas minibandas ocupadas de la superred. Por los motivos antes apuntados y la propia resolución del espectro, no podemos hablar de las anchuras de los picos menos intensos, pero sí de las distancias entre todos ellos, que son, en orden creciente de energías, de 20 y 15 meV, razonablemente parecidas a las distancias que hemos calculado entre las

minibandas correspondientes, de 20 y 8 meV respectivamente.

Ke et al. [59] presentan también un espectro de fotoluminiscencia de una superred con $d = 350 \text{ \AA}$ y $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, que puede compararse con nuestros resultados (figura 5.3). Aparte de los picos claramente visibles identificados por Ke *et al.*, que en nuestro cálculo corresponden a las dos minibandas más altas del sistema, hay dos pequeñas estructuras a 1.43 eV y 1.495 eV que nosotros asignaríamos a otras dos minibandas más profundas. Así, las distancias entre los máximos de los picos del espectro son, en orden creciente de energías, 65, 15 y 15 meV, que comparadas con las distancias entre los centros de las minibandas ocupadas que hemos calculado, de 70, 25 y 10 meV, muestran un acuerdo muy satisfactorio.

Volviendo a las superredes estudiadas por Maciel *et al.*, si comparamos la energía de Fermi tridimensional E_F^{3D} con la energía de Fermi cuasibidimensional E_F , resultado de nuestros cálculos (tabla 5.1), vemos que la discrepancia entre estos valores aumenta con el periodo de la superred, esto es, cuando el confinamiento del gas electrónico se hace mayor y por consiguiente es inadecuado tratarlo como un gas tridimensional, salvo en la superred de periodo menor (100 Å). En este caso, el parecido entre E_F^{3D} y E_F indica que en las superredes con $d = 100 \text{ \AA}$ el confinamiento del gas electrónico es muy pequeño. Este resultado se corrobora a la vista de la gráfica que muestra los bordes de las minibandas para $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; efectivamente, la única minibanda ocupada está casi toda por encima del máximo del potencial si $d = 100 \text{ \AA}$, y por consiguiente la población de la superred está muy deslocalizada.

El acuerdo entre nuestros cálculos y los datos experimentales es semicuantitativo, por las razones explicadas. El cálculo teórico del espectro de fotoluminiscencia de estos sistemas es una cuestión abierta, cuyo interés en relación a su estructura electrónica apuntamos aquí.

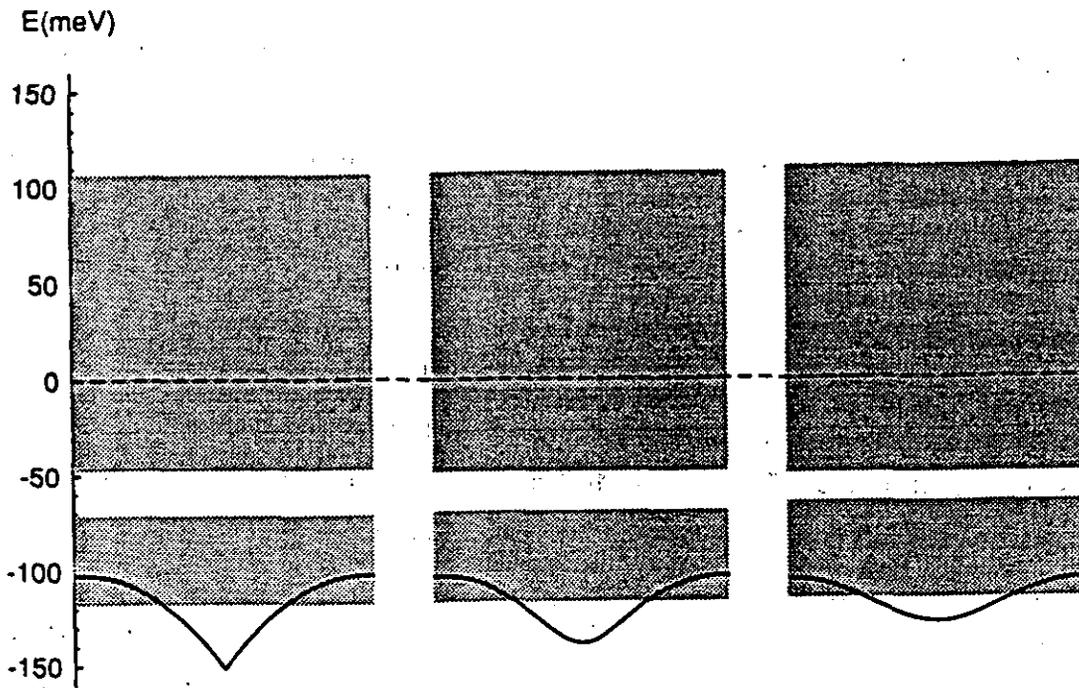


Figura 5.3 : Perfiles de potencial, energías de las minibandas ($\kappa = 0$, zonas sombreadas) y nivel de Fermi (línea de trazos) para superredes con $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $d = 100 \text{ \AA}$ y $\Delta z = 0, 20$ y 40 \AA , de izquierda a derecha. Todas las energías están referidas al nivel de Fermi.

Capítulo 6

Pozos estructurales con dopado δ externo

6.1 Motivación experimental

La técnica de modulación de dopado se ha utilizado ampliamente en la fabricación de dispositivos electrónicos de alta movilidad. Las heteroestructuras con modulación de dopado con *Si* son el ejemplo más conocido de aplicación del dopado selectivo, que permite, por una parte, reducir la dispersión por impurezas, y por otra, confinar en el canal de *GaAs* un gas electrónico cuasibidimensional de alta densidad. Sin embargo, debido a limitaciones estructurales [33] (límite de solubilidad 3D del Si en el $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, niveles de impureza del *Si*), la densidad electrónica areal N_S toma valores inferiores a $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ en heterouniones simples y algo superiores (sin exceder $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) en pozos cuánticos. Tal limitación en la densidad areal ha sido superada utilizando la técnica del dopado δ en las barreras de estas heteroestructuras. Las medidas efectuadas en este nuevo tipo de sistemas [68, 69] indican que su densidad electrónica areal es prácticamente el doble de las observadas en heteroestructuras similares con modulación de dopado. Como las movilidades en estos sistemas siguen siendo elevadas, ya que la zona dopada está separada del canal electrónico, se consigue con esta técnica fabricar transistores con transconductancias muy altas.

La literatura sobre estos sistemas es experimental. Cunningham *et al.* [68] informan

del crecimiento de heterouniones simples de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con dopado δ de Si en la barrera. Obtienen en dichos sistemas densidades electrónicas areales que superan $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y movilidades a temperatura ambiente superiores a $8000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Kuo *et al.* [69] estudian pozos cuánticos de los mismos materiales con dopado δ en las barreras, en los que logran densidades areales N_S de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, mucho mayores que las que se obtienen en pozos cuánticos de las mismas características estructurales, pero con modulación de dopado.

Para optimizar estas estructuras interesa que la mayor parte de los portadores se hallen en el canal de $GaAs$, formando principalmente un solo gas electrónico cuasibidimensional que tenga la máxima densidad areal posible allí donde la dispersión por las impurezas es menor. Por tanto, la situación más favorable es aquella en la que todos los electrones se transfieren de la lámina de impurezas de la barrera al pozo de $GaAs$. Ahora bien, no es posible *a priori* saber cuántos portadores habrá en los canales delta, y si éstos se formarán o no. Lógicamente, cuanto mayor sea la densidad de impurezas y más separadas estén las láminas con dopado delta del pozo de $GaAs$, mayor población habrá en los pozos delta. El objeto de este capítulo es aclarar por qué en estos sistemas se superan las barreras en N_S observadas experimentalmente en las estructuras con modulación de dopado, y precisar en qué situaciones se obtiene una mayor densidad electrónica en el canal de $GaAs$. Parte del contenido de este capítulo se recoge en la referencia [70].

La configuración estudiada es la siguiente: consideramos un pozo de $GaAs$ de anchura L_W con barreras de $Al_xGa_{1-x}As$, en las que se dopa delta simétricamente con Si a ambos lados del pozo a una distancia L_S de las intercaras entre el material de pozo y de barrera. La figura 6.1 es un esquema de esta estructura. Se estudiarán casos en los que la densidad areal de impurezas N_D es lo suficientemente grande como para poder suponer que los iones de Si forman una distribución uniforme de carga positiva en el plano de crecimiento xy ; como se discutió en el capítulo 4, en la práctica esto significa densidades $N_D \geq 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En este caso consideraremos el ancho finito de la distribución de impurezas; al igual que en el capítulo 5, modelaremos la distribución de impurezas en la dirección de crecimiento de la estructura z por una gaussiana, cuya anchura a mitad de máximo tomaremos fija e igual a 20 \AA . L_S es entonces la distancia entre una intercara y el máximo de la distribución de impurezas más cercana a ésta.

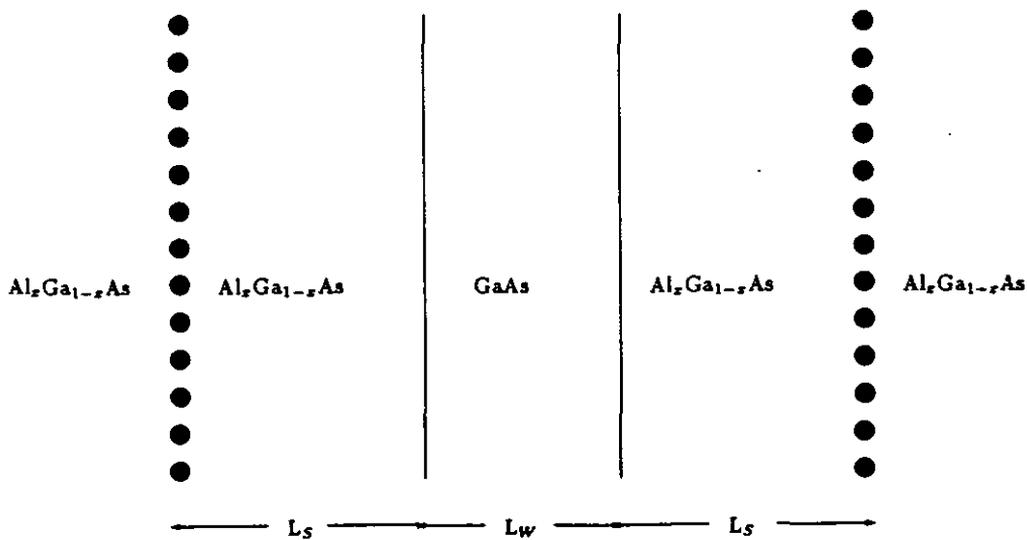


Figura 6.1 : Esquema de un pozo cuántico de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ δ dopado en las barreras. L_W es el ancho del pozo; L_S es la capa espaciadora.

Aunque en los primeros dopados delta que se realizaron la anchura de la zona dopada variaba considerablemente de muestra a muestra y resultaba ser un parámetro de difícil control, las distribuciones de impurezas que se vienen logrando últimamente son bastante estrechas; como se explica en el apartado 4.1, se ha comprobado que la segregación del Si se produce cuando la temperatura del sustrato T_S durante el crecimiento es alta ($T_S > 530^\circ C$) [58, 56], de modo que reduciendo T_S se logran distribuciones de impurezas más estrechas. Actualmente la anchura de la distribución de Si se controla bien [71], y es del orden de la escogida para los sistemas estudiados en este capítulo. En cualquier caso, a la vista de los resultados obtenidos tanto en el caso de los pozos δ aislados, en los que se empleaba una distribución de tipo escalón para las impurezas, como para la superredes δ [63], en las que se modeló la segregación de las impurezas con una gaussiana, este parámetro no altera apreciablemente la forma del espectro cuando varía de 0 a 50 Å, que cubre el rango de valores de interés experimental actual.

Como nuestro objetivo consiste en lograr la máxima concentración posible de elec-

trones en el canal de $GaAs$, interesa que la barrera sea lo más alta posible sin pasar al régimen de discontinuidad de banda indirecta en el $Al_xGa_{1-x}As$, para el cual habría que tener en cuenta los puntos Γ y X de la zona de Brillouin. Por tanto, haremos fijo el valor de la fracción de Al en el ternario, $x = 0.3$. De esta manera, podemos usar la aproximación de funciones envolventes, como en los sistemas con modulación de dopado estudiados en el capítulo 3. Como en las demás estructuras estudiadas en esta memoria, nos centraremos en el estudio de los portadores mayoritarios, cuya presencia en la estructura altera considerablemente el potencial, los autoestados y los autovalores del sistema, lo cual hace necesaria la solución autoconsistente del problema en el esquema Schrödinger-Poisson descrito en el capítulo 2.

Dada la similitud entre el problema que nos ocupa y el de los pozos con modulación de dopado estudiado en el capítulo 3, usaremos el modelo para el estudio de la estructura electrónica y población explicado en dicho capítulo; esto es, un modelo de masa efectiva a una banda asociado con el mínimo de la banda de conducción en el punto Γ para ambos materiales. Como se comentó en el caso de los pozos con modulación de dopado, la banda prohibida del $GaAs$ es lo suficientemente grande como para despreciar el acoplamiento entre electrones y huecos en el estudio de los primeros. Asimismo, hemos tenido en cuenta la diferencia de masas efectivas al resolver la ecuación de tipo Schrödinger que obedecen las funciones envolventes, que es igual a la que aparece en el caso de los pozos con modulación de dopado (ecuación (3.1)); como en dicho caso, la relación de dispersión empleada es parabólica, y el método empleado para la obtención de los autovalores E_j y las funciones envolventes es el explicado en el apartado 3.1. Igualmente, se consideran los efectos de canje y correlación dentro de la Aproximación de Funcional Local de Densidad, con la parametrización de Hedin y Lundqvist [19] que se detalla en el capítulo 1.

Para la mayor parte de los pozos estudiados hemos tomado $L_W = 80 \text{ \AA}$. Para ver la dependencia de la densidad electrónica areal con la longitud del pozo, hemos estudiado algunos pozos más anchos, sin exceder 120 \AA . Como se vio en el capítulo 3, en pozos con $x = 0.3$ y una anchura mayor que 200 \AA tienden a formarse dos gases cuasibidimensionales cerca de las intercaras [40, 72, 23]. Nos interesa que se forme un solo gas cuasibidimensional situado en el centro del pozo, donde la dispersión por la rugosidad de las intercaras y por las impurezas donadoras sea mínima. Hemos estudiado otros valores de L_W con

objeto de mejorar las características de la estructura, aunque el comportamiento general puede inferirse del caso $L_W = 80 \text{ \AA}$.

Variaremos tanto la densidad de impurezas N_D como la longitud de la capa espaciadora L_S y veremos el efecto de dicha variación en las distribuciones electrónicas de estas estructuras.

Para poder comparar directamente con los resultados obtenidos en los pozos con modulación de dopado, hemos tomado para realizar los cálculos los mismos valores de los parámetros estructurales que se usaron en el capítulo 3: la banda prohibida $E_g = (1155x + 370x^2)\text{meV}$ [24], la altura de la barrera $V_b = 0.6\Delta E_g$ [25], y para las masas efectivas utilizamos la fórmula $m^* = (0.0665 + 0.0835x)m_0$ [26], donde m_0 es la masa del electrón libre.

Consideramos que la solución es autoconsistente cuando la desviación cuadrática media del potencial en dos ciclos consecutivos del cálculo es menor que 0.1 meV.

6.2 Planteamiento estadístico: Factores que determinan el nivel de Fermi

En estos sistemas no se conoce *a priori* la posición del nivel de Fermi; sin embargo, la población total de la estructura es conocida e igual al dopado introducido; a partir de este dato, imponiendo neutralidad de carga

$$N_S = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho_e(z) = 2N_D, \quad (6.1)$$

donde, a $T = 0K$,

$$\rho_e(z) = -\frac{em^*}{\pi\hbar^2} \sum_j |F_j(z)|^2 (E_F - E_j) \theta(E_F - E_j) \quad (6.2)$$

es la densidad local de carga electrónica, E_F se determina autoconsistentemente. Ésta es la diferencia fundamental entre los pozos con dopado delta en las barreras ($\delta\text{-GaAs-}\delta$) y los pozos con modulación de dopado estudiados en el capítulo 3: en estos últimos, E_F en la zona de volumen (suficientemente lejos del pozo cuántico y de la zona donde la curvatura de la banda de conducción es apreciable) se halla siempre a la misma distancia

del borde de la banda de conducción, que a temperatura $0K$ es a la mitad de la energía de ionización de las impurezas, como se discutió con detalle en el apartado 3.1. Por tanto, en los pozos con modulación de dopado, E_F es fijo, y la densidad electrónica areal se determina autoconsistentemente, dependiendo de los parámetros estructurales del pozo. Por el contrario, cuando se dopa delta en las barreras, como hemos comentado más arriba, la situación es la opuesta: se conoce la población areal total del sistema $N_S = 2N_D$, y a partir de ella se calcula E_F y se determina el número de subbandas ocupadas. En este aspecto, los sistemas (δ -GaAs- δ) son más parecidos a los pozos y superredes delta estudiados en los capítulos anteriores. Nótese que la densidad areal conocida es la total; es necesario un cálculo autoconsistente para determinar la densidad areal en el canal de GaAs, y si habrá o no población en las zonas dopadas delta, esto es, para determinar el nivel de Fermi del sistema y la distribución de la carga.

6.3 Resultados y comentarios

En las figuras 6.2 a 6.5 se muestran los resultados para 4 pozos con $L_W = 80 \text{ \AA}$, $x=0.3$ y diferentes valores de N_D y L_S . En las figuras 6.2 y 6.3 la densidad de impurezas es $(1 + 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, esto es, cada lámina delta tiene una densidad $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, con lo que la densidad electrónica total del sistema es $N_S = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Las capas espaciadoras son respectivamente de 50 y 70 \AA . Los perfiles de potencial son muy similares; la diferencia entre estos dos casos está en la posición del nivel de Fermi E_F : para $L_S = 50 \text{ \AA}$ se halla a 38.7 meV del borde de la banda de conducción en la zona de volumen, mientras que en caso de $L_S = 70 \text{ \AA}$ se encuentra a tan sólo 9.7 meV. Aquí radica la diferencia con los pozos con modulación de dopado, en los que E_F está fijado de antemano por las impurezas, y se halla siempre a la misma distancia del borde de la banda de conducción en la zona de volumen. Por lo tanto, aun cuando los resultados mostrados en las figuras 6.2 y 6.3 sean aparentemente similares a los obtenidos en sistemas con modulación de dopado, el tratamiento estadístico es diferente, análogo en todo caso al seguido en las estructuras con dopado δ estudiadas en los capítulos 4 y 5 [63]. Esta diferencia fundamental se refleja en el hecho de que en estos sistemas puedan obtenerse densidades electrónicas superiores a las logradas en los pozos con modulación

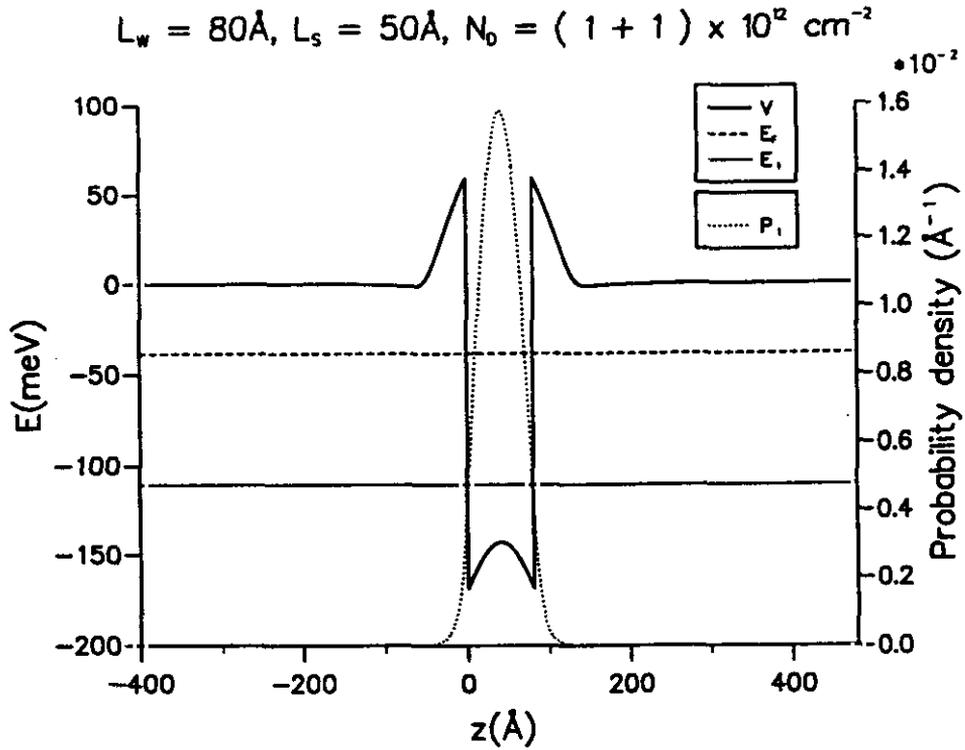


Figura 6.2 : Potencial autoconsistente (V), densidad de probabilidad (P_1) y energía de la subbanda ocupada a $\kappa=0$ (E_1) para un pozo cuántico con dopado δ en las barreras. En ésta y en las siguientes figuras $x = 0.3$.

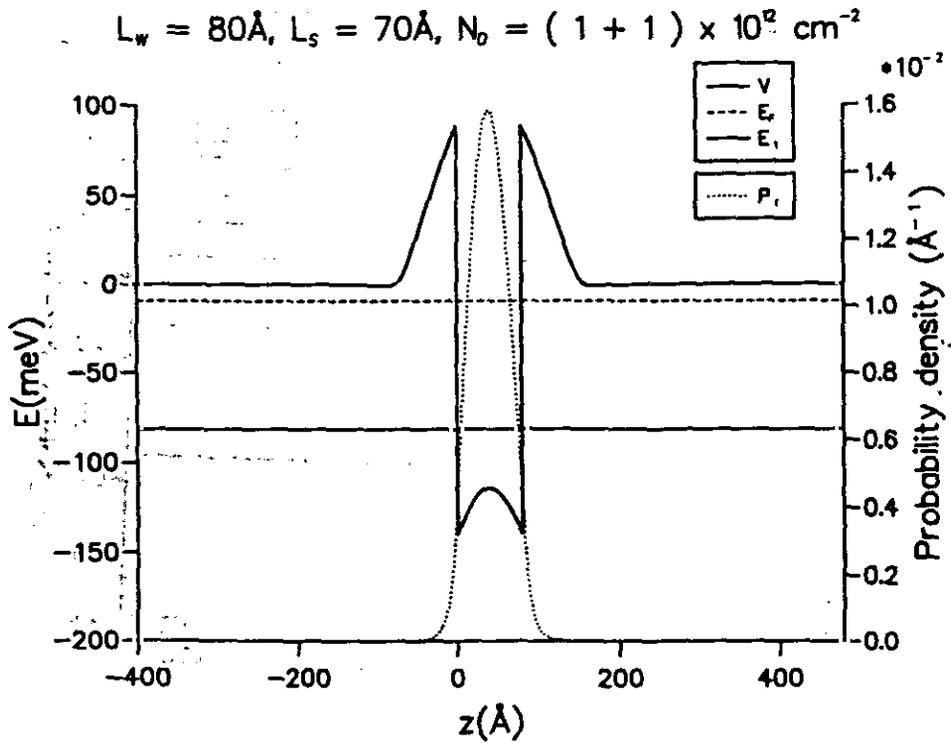


Figura 6.3 : Igual que en la figura 6.2, con L_s diferente.

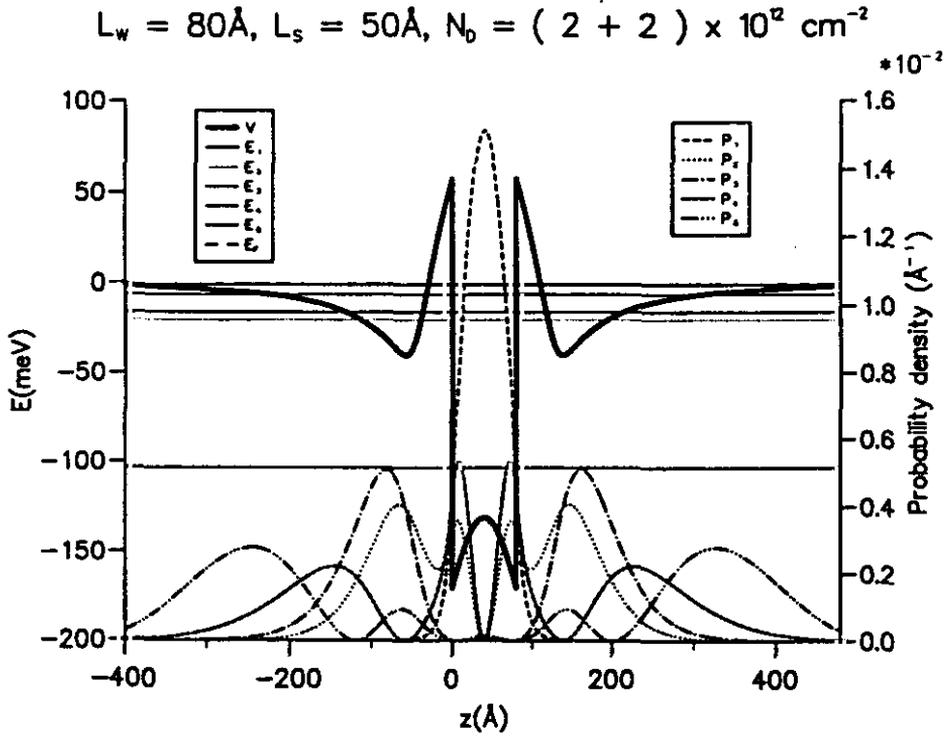


Figura 6.4 : Potencial autoconsistente (V), densidades de probabilidad de cada subbanda (P_i) y energías de las subbandas a $\kappa=0$ (E_i) para los valores de los parámetros indicados en la figura.

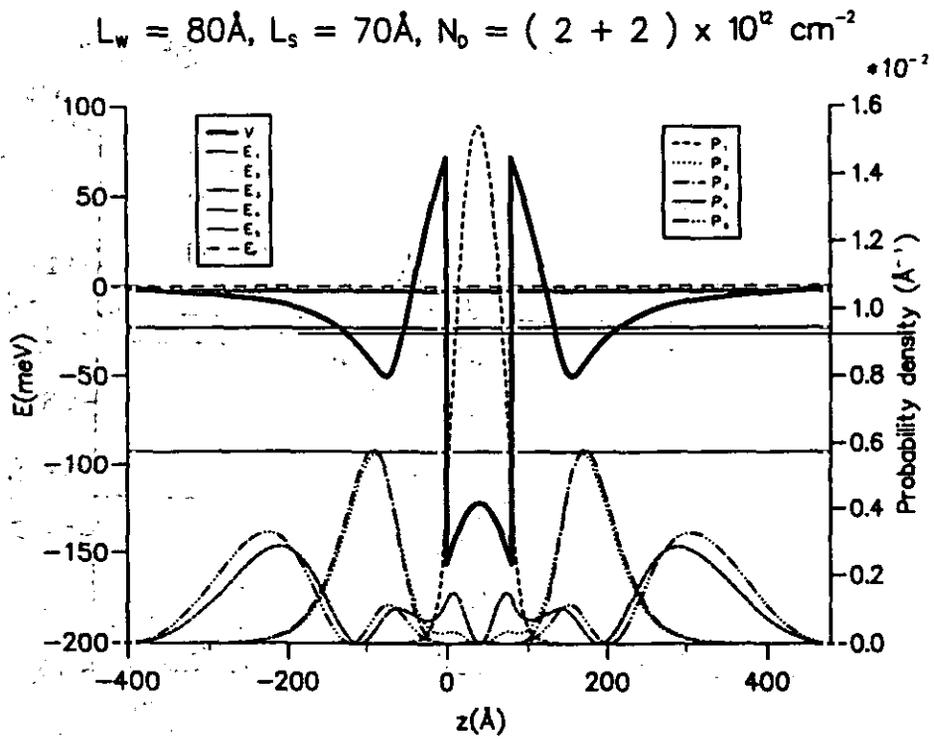


Figura 6.5: Igual que en la figura 6.4, con una capa espaciadora distinta.

de dopado.

Como los sistemas dibujados en las figuras 6.2 y 6.3 tienen la misma densidad electrónica areal y una sola subbanda ocupada, sus funciones envolventes son prácticamente iguales, y la distancia entre el fondo de la subbanda E_1 y el nivel de Fermi es la misma. En este caso las capas delta están agotadas: todos los electrones de las impurezas de Si han pasado al canal de conducción de GaAs y el nivel de Fermi en las barreras está siempre por debajo del borde de la banda de conducción; por este motivo no se observa un pozo delta en la zona del dopado.

Las figuras 6.4 y 6.5 muestran dos sistemas con densidades de impurezas que duplican las de los casos anteriores: $(2 + 2) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. En ambos casos hay 5 subbandas ocupadas, y las zonas con dopado delta de las barreras dan lugar a pozos de tipo delta con una población apreciable: ahora el nivel de Fermi en la zona dopada está por encima de la banda de conducción. La subbanda fundamental es característica del pozo estructural (de GaAs): su densidad de probabilidad está altamente localizada en el canal de GaAs. Los fondos de las 4 subbandas superiores están muy próximos en energías dos a dos, y corresponden a estados simétrico/antisimétrico de los pozos delta, que se acoplan mediante el pozo de GaAs. De hecho, la distancia entre los niveles 2 y 3 por un lado y 3 y 4 por otro es muy parecida; esto indica que proceden de un mismo nivel de pozo delta aislado que se desdobra al acoplarse los pozos. Esta imagen es corroborada por la diferencia entre el caso con $L_S=50 \text{ \AA}$ y $L_S=70 \text{ \AA}$: si la capa espaciadora es mayor, el acoplamiento entre los pozos disminuye y la diferencia en energías entre los niveles simétrico y antisimétrico es mucho menor; además, las densidades de probabilidad fuera del pozo de las subbandas 2 y 3 por un lado y 3 y 4 por otro son muy similares. Dentro del pozo han de ser forzosamente distintas en cualquier caso, pues han de tener diferente simetría.

En los dos sistemas las densidades de probabilidad de las subbandas 2 a 5 son mucho mayores en los pozos delta que en el canal de GaAs. Cuanto mayor es la energía del fondo de subbanda, más alejado del canal de GaAs se halla el correspondiente máximo de la densidad de probabilidad, esto es, menos confinados se hallan los electrones.

El paralelismo hecho entre el espectro de dos pozos delta acoplados (δ - δ) y el del sistema δ -GaAs- δ es de gran ayuda a la hora de explicar la forma de las densidades de

probabilidad y las diferencias en energía entre los fondos de subbanda. Sin embargo, no debemos olvidar que estos estados son de un sistema compuesto tanto por los pozos delta como por el pozo de *GaAs*: las subbandas superiores tienen una probabilidad por lo general apreciable en el canal de *GaAs*, que favorece el acoplo entre los pozos delta; la subbanda fundamental, cuya densidad electrónica está concentrada prácticamente en el pozo de *GaAs*, no tiene paralelismo en el sistema formado por dos pozos delta acoplados. Los estados E_2 y E_3 de los sistemas mostrados en las figuras 6.4 y 6.5 se corresponderían con los dos primeros estados del pozo delta doble. En este último caso el estado inferior (superior) del par es simétrico (antisimétrico), mientras que en los sistemas δ -*GaAs*- δ que nos ocupan, el estado inferior E_2 es el primer estado por encima del fundamental E_1 en el espectro completo de la estructura, y por tanto es antisimétrico, mientras que el siguiente, E_3 , es simétrico.

En la tabla 6.1 se dan los niveles de Fermi, poblaciones y energías de las subbandas a $\kappa = 0$ de varios sistemas, entre los que se hallan los mostrados en las figuras 6.2 a 6.5. En el último caso, los fondos de las subbandas 2 y 3 por un lado y 4 y 5 por otro están tan próximas dos a dos que aparecen como dos líneas adosadas. En la tabla 6.1 puede verse que la separación entre ellas es sólo 1 meV. Una reducción de L_S de 70 a 50 Å basta para aumentar la separación entre estos niveles, de modo que en la figura 6.4 se distinguen claramente; en este sistema ($L_S = 50$ Å) la separación entre los fondos de las subbandas $E_3 - E_2$ y $E_5 - E_4$ es aproximadamente 5 meV. Los resultados para un caso intermedio, $L_S = 60$ Å, que aparecen en la tabla 6.1, confirman que esta variación es gradual. Respecto de las ocupaciones de las subbandas, los resultados presentados en la tabla 6.1 muestran que al disminuir la capa espaciadora, la población de la subbanda fundamental aumenta, y disminuye la de las subbandas restantes. Por consiguiente, como se muestra en la tabla 6.1, el sistema que tiene una densidad areal mayor en el canal de *GaAs* es el que tiene una capa espaciadora menor, ya que la población en el canal de *GaAs* se debe principalmente a la subbanda fundamental.

En cuanto a las estructuras con $N_S = (1 + 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ de las figuras 6.2 y 6.3, no hay diferencia en $E_F - E_1$ entre los casos $L_S = 50$ Å y $L_S = 70$ Å, y por lo tanto, la población de esta única subbanda ocupada es la misma. En la tabla 6.1 se muestran los resultados para un sistema similar con una capa espaciadora menor, $L_S = 40$ Å: la

$L_W/L_S/(N_D + N_D)$	E_F	E_j	N_{Sj}	N_{GaAs}	% N_S
80/40/(1.0 + 1.0)	-52.8	-124.8	2.00	1.86	93
80/50/(1.0 + 1.0)	-38.7	-110.7	2.00	1.85	92
80/70/(1.0 + 1.0)	-9.7	-81.7	2.00	1.85	92
80/70/(1.5 + 1.5)		-11.0	0.30		
	-0.6	-11.4	0.32	2.20	73
80/50/(2.0 + 2.0)		-85.8	2.38		
		-1.0	0.003		
		-6.3	0.16		
	-0.6	-16.1	0.43	2.74	69
80/60/(2.0 + 2.0)		-20.6	0.56		
		-103.2	2.85		
		-1.2	0.03		
		-4.4	0.12		
80/70/(2.0 + 2.0)	-0.06	-19.6	0.54	2.54	64
		-21.5	0.59		
		-97.7	2.71		
80/70/(2.0 + 2.0)		-2.0	0.06		
		-3.2	0.09		
	-0.03	-22.8	0.63	2.38	60
		-23.6	0.65		
		-93.5	2.57		

Tabla 6.1 : Nivel de Fermi E_F , energías de las subbandas ocupadas a $\kappa = 0$ E_j , densidades electrónicas areales de las correspondientes subbandas N_{Sj} , densidad areal en el canal de $GaAs$ N_{GaAs} , y tanto por ciento de la población total que hay en dicho canal % N_S , para los sistemas descritos con la notación $L_W/L_S/(N_D + N_D)$. Todas las energías están en meV, las longitudes en Å y las densidades areales en 10^{12} cm^{-2} .

diferencia con los dos casos anteriores es insignificante. La densidad electrónica areal en el canal de *GaAs* para estos sistemas es de más del 90 % de la densidad total; a la vista de los potenciales mostrados en las figuras 6.2 y 6.3, es evidente que la densidad electrónica no nula en las barreras se debe a la penetración de las funciones de onda en éstas, y no a la posible población del pozo delta. Si hubiera que elegir entre estas dos estructuras para fabricar un dispositivo electrónico habría que decidirse por la que tiene la capa espaciadora mayor ($L_S = 70 \text{ \AA}$), pues a igual densidad electrónica en el canal de *GaAs*, la dispersión por impurezas es menor, ya que la zona dopada se halla más lejos del gas electrónico cuasibidimensional.

Desde el punto de vista práctico, no es conveniente la población de los pozos delta. Los casos más interesantes para el diseño de dispositivos de alta movilidad son aquéllos en los que no se produce tal efecto cuántico en las barreras (ocupación de los pozos delta), es decir, las situaciones en que el perfil de potencial bien pudiera recordar el obtenido en los pozos con modulación de dopado.

Respecto de las estructuras con $L_W = 80 \text{ \AA}$ y densidad de impurezas $(2 + 2) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, la densidad electrónica en las barreras es aproximadamente un tercio de la total (30 % si $L_S = 70 \text{ \AA}$; y 40 % si $L_S = 50 \text{ \AA}$). Esto se debe a que se forman pozos con una población apreciable en las zonas delta dopadas, como ya hemos visto en la descripción del espectro para estos casos. La densidad electrónica en el canal de *GaAs* es de casi $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ en el caso de L_S menor, y para decidir teóricamente qué estructura pueda ser más favorable para la construcción de un dispositivo habría que calcular la movilidad del gas cuasibidimensional en estos sistemas, ya que los pozos con una densidad mayor en el canal de *GaAs* son los que tienen las zonas dopadas más cerca de dicho canal, con lo que la dispersión por las impurezas será mayor, y no es posible ver cuál de los dos efectos (aumento de la densidad areal y de la dispersión por impurezas) tendrá más importancia en cuanto a movilidad se refiere.

De los resultados para los sistemas $80/L_S/(2+2)$ (tabla 6.1) se tiene que la densidad electrónica areal dentro del canal de *GaAs* varía relativamente poco cuando las capas delta no están completamente agotadas; por tanto, para optimizar esta estructura uno debería acercarse a este valor de N_{GaAs} sin que se pueblen los pozos δ . Reduciendo la densidad de impurezas de cada lámina delta a $N_D = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se tienen aún

3 subbandas ocupadas (tabla 6.1; 80/70/(1.5+1.5)); guiándonos por el valor de N_{GaAs} obtenido en este sistema, redujimos la densidad areal de impurezas a $N_D = 1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, manteniendo igual el resto de las características de la estructura. En este caso $N_{GaAs} = 2.03 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y hay una sola subbanda ocupada, con $E_F - E_1 = 79.2 \text{ meV}$. Aumentar N_D más allá de este valor lleva a situaciones análogas a las del caso 80/70/(1.5+1.5), con más subbandas ocupadas y una población apreciable en los pozos delta, sin que el aumento en N_{GaAs} sea importante.

Para poder hacer una comparación cuantitativa entre los sistemas δ -GaAs- δ y los pozos con modulación de dopado, hemos calculado la densidad electrónica areal en el canal de GaAs de un pozo con modulación de dopado de $L_W = 80 \text{ \AA}$, $L_S = 70 \text{ \AA}$ y una densidad de impurezas de Si volúmica de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, que resulta ser $N_{GaAs} = 1.36 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. El pozo con dopado delta en las barreras con los mismos valores de L_W y L_S y con una densidad de impurezas de $(1.1 + 1.1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ comentado más arriba tiene una densidad electrónica en el pozo de GaAs sensiblemente mayor, $N_{GaAs} = 2.03 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y ambos tienen una sola subbanda ocupada. Ya hemos visto que un aumento en N_D más allá de $1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ supondría un incremento en N_{GaAs} , pero con una población de los pozos delta de las barreras y un aumento del número de subbandas ocupadas.

En la tabla 6.2 se dan los resultados para sistemas con el canal de GaAs más ancho. En todos ellos hay 6 subbandas ocupadas. Dos de ellas son características del pozo de GaAs; en los casos con $L_W = 90$ y 100 \AA , se trata de las subbandas primera y cuarta, y en los otros dos sistemas con $L_W = 120 \text{ \AA}$, son la primera y la segunda subbanda. Esto se deduce de las separaciones entre los fondos de las subbandas; las restantes aparecen próximas en energía dos a dos, lo cual indica que provienen de estados de los pozos δ acoplados. Además, al aumentar el ancho del pozo, la separación entre los estados característicos del pozo de GaAs disminuye: para $L_W = 90 \text{ \AA}$, la diferencia $E_3 - E_1$ es de unos 80 meV; si $L_W = 100 \text{ \AA}$, se reduce a 70 meV, y en los casos con $L_W = 120 \text{ \AA}$, se tiene que $E_2 - E_1$ es del orden de 50 meV. Sin embargo, la diferencia entre los pares de estados de pozos delta acoplados es de unos 20 meV en todos los casos y no varía tanto con L_W , lo que indica que su origen es distinto.

Es interesante notar que el aumento de L_W de 90 a 120 \AA no supone un incremento de la población de la subbanda fundamental; aunque N_{GaAs} sí aumenta, lo hace debido

$L_W/L_S/(N_D + N_D)$	E_F	E_j	N_{Sj}	N_{GaAs}	% N_S
90/70/(2.0 + 2.0)		-1.6	0.02		
		-2.9	0.06		
	-0.8	-7.7	0.19	2.44	61
		-22.7	0.61		
		-23.8	0.64		
		-90.3	2.48		
100/70/(2.0 + 2.0)		-2.1	0.04		
		-2.6	0.05		
	-0.8	-13.7	0.36	2.51	63
		-21.6	0.58		
		-23.3	0.63		
		-85.4	2.35		
120/60/(2.0 + 2.0)		-1.8	0.02		
		-2.0	0.02		
	-1.2	-16.1	0.41	2.81	70
		-17.2	0.45		
		-32.9	0.88		
		-81.1	2.22		
120/70/(2.0 + 2.0)		-2.7	0.04		
		-2.9	0.04		
	-1.4	-19.7	0.51	2.61	65
		-20.9	0.54		
		-28.6	0.76		
		-77.6	2.12		

Tabla 6.2 : Igual que en la Tabla 6.1, para otros sistemas con el canal de *GaAs* más ancho.

al incremento de la población de las subbandas superiores. El caso con N_{GaAs} más alto es el que tiene una capa espaciadora menor, $120/60/(2+2)$, y para los rangos de L_W y L_S estudiados, N_{GaAs} es más sensible a los cambios en la capa espaciadora que a los cambios en la anchura del canal de $GaAs$.

Contrariamente a lo que opinan Cunningham et al. [68] y Kuo et al. [69], no creemos que el aumento en las densidades de portadores en estos sistemas estén relacionadas con el efecto cuántico de tamaño en la capa δ . Como se desprende del análisis de nuestros resultados, se debe a que en estos sistemas el nivel de Fermi no está fijo con respecto al fondo de la banda de conducción del ternario en la zona de potencial constante, como en el caso de los pozos con modulación de dopado. Basándonos en el simple hecho de que en los pozos con dopado delta en las barreras el nivel de Fermi se determina de una manera diferente, nuestros resultados indican que para determinados valores de los parámetros estructurales, los sistemas $\delta-GaAs-\delta$ tienen densidades areales en el canal de $GaAs$ mayores que los pozos análogos con modulación de dopado, lo cual proporciona una interpretación sencilla de los datos experimentales.

Capítulo 7

Superredes estructurales con dopado δ

En los capítulos anteriores se han mostrado diferentes estructuras en las que la modulación del potencial, la población de portadores o ambas cosas a la vez se producían mediante la técnica del dopado δ . En particular, hemos estudiado el caso de un pozo cuántico estructural de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con dopado δ de Si en las barreras, lo que permite poblar el sistema con una gran densidad areal de portadores sin que la dispersión por impurezas sea muy grande. Si la capa δ se introduce dentro del pozo, se tiene un sistema en el que la población en el pozo puede ser muy alta, aunque con la desventaja de que no se separan espacialmente impurezas y portadores, con lo que la movilidad del gas electrónico confinado es menor [73]. De hecho, la movilidad en pozos con dopado δ en el centro es menor que en pozos dopados uniformemente con la misma densidad de impurezas, debido a que el solapamiento entre los estados electrónicos y las impurezas ionizadas es mayor en el primer caso [73, 74].

Sin embargo, aunque con respecto a la movilidad del gas de portadores no resulta conveniente dopar en el centro de un pozo de $GaAs$, sí puede ser de interés para el estudio de las propiedades ópticas: como comentábamos en el capítulo 5, para realizar un experimento de fotoluminiscencia de una capa δ , hay que evitar que los huecos fotocreados se alejen indefinidamente de la capa de impurezas, como ocurre en los pozos δ aislados, en los que por este motivo la fotoluminiscencia no es una buena técnica de caracterización

de las subbandas. Si se introduce la capa δ en un pozo de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ se evita que los huecos se dispersen y se obtiene así una buena señal de fotoluminiscencia. Estos experimentos han sido realizados por Stepiniewski *et al.* [75] y por Ke *et al.* [65], que también han calculado autoconsistentemente la estructura electrónica de este sistema [76], por lo que no nos ocuparemos de dicha configuración en esta memoria, aunque los resultados para superredes de periodo grande, en los que las anchuras de las minibandas es despreciable, coincidirán con los correspondientes resultados para pozos cuánticos, como ya vimos en el caso de las superredes δ .

Otras configuraciones posibles son las superredes estructurales con dopado delta. Nuestro interés por estos sistemas proviene de dos trabajos teóricos en los que se estudian superredes con dopado δ en la barrera [77] y en el pozo [78]. En ambos casos describen el potencial de la superred como un potencial Kronig-Penney, y modelan el potencial producido por la hoja de impurezas como una δ de Dirac. Esto les permite calcular las energías de las minibandas analíticamente. En ambos casos observan que variando la intensidad del potencial de las impurezas pueden cambiar la posición y la anchura de las minibandas, esto es, modular la estructura electrónica del sistema. La simplicidad del modelo radica tanto en la forma elegida para el potencial producido por las impurezas como en que no se tiene en cuenta la población electrónica que éstas introducen, que, como es bien sabido, puede alterar considerablemente el perfil de potencial de la estructura. Nuestro modelo considera ambos aspectos del problema de una manera más realista y permite hacer algunas precisiones sobre los resultados mostrados en los trabajos previos que hemos citado, y que motivaron el estudio de este sistema.

7.1 Estructura electrónica y potencial de las superredes $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con dopado δ de Si

Estudiaremos dos tipos de estructuras distintos: superredes de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con dopado δ de Si en el centro del canal de $GaAs$ y en el centro de la barrera de $Al_xGa_{1-x}As$. Como en el resto de los sistemas con dopado δ descritos en esta memoria, supondremos que todas las impurezas están ionizadas, y que su densidad areal N_D es lo suficientemente

alta (mayor que $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) como para que puedan describirse como una distribución de carga uniforme en el plano de crecimiento. Suponemos que la distribución de impurezas en la dirección de crecimiento z es de tipo gaussiano; esto da cuenta de la segregación de las impurezas en la dirección de crecimiento [56, 58].

En todos los casos estudiados se ha tomado como valor de la fracción de Al $x = 0.3$. En el caso del dopado en el centro del pozo, hemos estudiado dos valores de la anchura L_W del canal de $GaAs$, 100 y 200 Å, y una anchura de la barrera, $L_b = 40$ Å, aunque hemos considerado un caso de barrera más delgada ($L_b = 20$ Å) para ver su efecto en la estructura electrónica. Hemos considerado dos valores de la densidad, 1 y $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y dos anchuras a mitad de máximo de la gaussiana de impurezas, 20 y 40 Å, que como se explicó en el capítulo 5, son del orden de las anchuras obtenidas experimentalmente en la actualidad.

Respecto del dopado en el centro de la barrera, hemos calculado dos casos significativos que dan una indicación del comportamiento de estos sistemas: $L_W = 100$ Å, $L_b = 40$ Å y densidades de impurezas de 1 y $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Como en el resto de los sistemas estudiados en esta memoria, empleamos el modelo de funciones envolventes a una banda para describir los estados electrónicos, y hemos incluido los efectos de canje y correlación en la aproximación de Funcional Local de Densidad, en la parametrización de Hedin y Lundqvist [19]. En los casos de dopado en el centro del canal de $GaAs$ hemos realizado también el cálculo Hartree para ver la importancia de la interacción de canje y correlación en estos sistemas.

Como se comentó en la introducción y en el capítulo 5, dedicado a las superredes δ , debido a la invariancia bajo traslaciones en el plano de crecimiento, el vector de onda en dicho plano, κ , es un buen número cuántico. Además, las funciones envolventes pueden escogerse de manera que verifiquen la propiedad de Bloch en la dirección z , normalizadas a un periodo de la superred. El espectro asociado al movimiento en la dirección z consiste en una sucesión de intervalos de energías permitidas y prohibidas. Como en el caso de los pozos cuánticos con modulación de dopado, estudiados en el capítulo 3, consideraremos la diferencia entre las masas efectivas de los materiales de pozo y barrera al resolver la ecuación de Schrödinger para $\kappa = 0$, pero despreciaremos la no parabolicidad en la dependencia en κ producida por tal diferencia.

La ecuación de Schrödinger se ha resuelto utilizando la técnica de Matriz de Transferencia. Como se explicaba en el capítulo 2, las energías de las minibandas se hallan evaluando la matriz de transferencia a través de un periodo de la superred, y viendo los intervalos de energía en los que se verifica la ecuación (2.80). En este caso se procede de la misma manera, pero teniendo en cuenta que, debido a la discontinuidad de la masa efectiva, la matriz de transferencia a través de un periodo no es simplemente el producto de la matriz de transferencia a través de los materiales de barrera y pozo: hay que reproducir el salto de la derivada en las intercaras, lo cual supone multiplicar por una matriz de salto en las superficies entre ambos medios. Supongamos que queremos construir la matriz de transferencia a través de un periodo de una superred formada por capas alternas de los materiales A y B, de longitudes L_A y L_B respectivamente, en los que las masas efectivas del electrón son distintas m_A^* y m_B^* . Para el modelo que empleamos, tomando como origen la intercara entre los materiales B y A, se tiene la siguiente relación:

$$M_S(0, L_A + L_B) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m_A^*}{m_B^*} \end{pmatrix} M_B(L_A + L_B, L_A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m_B^*}{m_A^*} \end{pmatrix} M_A(L_A, 0), \quad (7.1)$$

que se deduce de la propia definición de matriz de transferencia (2.70) y de las condiciones de empalme de la función envolvente y su derivada a través de una intercara, dadas por la ecuación (1.20).

Definiendo

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m_B^*}{m_A^*} \end{pmatrix}, \quad (7.2)$$

la ecuación anterior puede escribirse

$$M_S(0, L_A + L_B) = S^{-1} M_B(L_A + L_B, L_A) S M_A(L_A, 0), \quad (7.3)$$

que es una relación válida para modelos más generales en los que los coeficientes del respectivo sistema de ecuaciones diferenciales tengan discontinuidades en las intercaras. La forma concreta de S depende del modelo en cuestión.

Con las funciones envolventes y el espectro del sistema se puede calcular el nivel de Fermi. Como en los demás sistemas con dopado δ estudiados en esta memoria, conocemos la densidad electrónica areal por periodo del sistema, que en la aproximación empleada

es igual a la densidad areal de impurezas introducida en un periodo de la estructura. Por consiguiente, imponiendo neutralidad de carga, es posible calcular el nivel de Fermi, y con éste, la densidad de carga $\rho_e(z)$, empleada en la ecuación de Poisson. El esquema es análogo al seguido en el apartado 5.1, por lo que no lo repetiremos aquí. Consideramos que se ha obtenido la solución autoconsistente del problema cuando la desviación cuadrática media de los potenciales obtenidos en 2 ciclos consecutivos del cálculo, σ_M , es menor que 0.1 meV.

7.2 Discusión de los resultados

En la tabla 7.1 se muestran las energías de las minibandas para $\kappa = 0$ y el nivel de Fermi medidos desde el borde de la banda de conducción del *GaAs* en la intercara, para una serie de superredes en las que se dopa en el centro del canal de *GaAs*.

En todas ellas la anchura de la barrera es 40 Å. Identificaremos los sistemas como en la tabla, indicando los parámetros que se varían de un caso a otro: $L_W/N_D/\Delta z$. Comparando los resultados para $\Delta z = 20$ y 40 Å, a igualdad del resto de los parámetros, se observa que el potencial es más atractivo cuanto menor es la segregación de las impurezas: las minibandas son más estrechas cuando $\Delta z = 20$ Å, y la energía de Fermi es menor. Esta diferencia es más notable cuanto mayor es la densidad de impurezas; en los casos calculados, cuando $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. La figura 7.1 muestra el potencial, la única minibanda ocupada a $\kappa = 0$ y nivel de Fermi para el primer caso de la tabla 7.1 (100/1/20), calculado considerando el efecto del canje y la correlación. No mostramos el potencial para 100/1/40, pues la única diferencia con el caso anterior radica en que es menos profundo; el mínimo está en -11.1 meV, frente a -15.5 meV en el potencial dibujado.

Al aumentar la densidad areal de impurezas, aumenta la ocupación de las minibandas, y pueden llegarse a poblar minibandas superiores. En los casos calculados, los pozos con $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ tienen una subbanda ocupada más que sus análogos con dopado menor ($N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Si no se alteran el resto de los parámetros del sistema, un incremento de la densidad de portadores supone un aumento del nivel de Fermi, que cuando $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, rebasa con creces la segunda minibanda en los casos con

$L_W/N_D/\Delta z$	$E_j(\kappa = 0)$ (sin xc)	E_F (sin xc)	$E_j(\kappa = 0)$ (con xc)	E_F (con xc)
100/1/20	[23.5,26.8]	61.1	[19.1,22.2]	56.6
100/1/40	[25.3,28.7]	62.9	[20.9,24.1]	58.4
100/7/20	[-13.3,-11.5] [95.6,110.0]	170.9	[-19.7,-18.0] [91.8,105.5]	165.7
100/7/40	[-1.5,0.8] [97.0,112.3]	177.9	[-7.2,-5.1] [93.6,107.9]	173.1
200/1/20	[1.1,1.5] [35.8,38.4]	37.0	[-4.7,-4.3] [31.9,34.2]	31.5
200/1/40	[2.1,2.6] [35.8,38.4]	37.6	[-3.6,-3.2] [31.7,34.1]	32.4
200/7/20	[-69.7,-69.7] [10.3,11.5] [56.3,61.2]	83.9	[-78.0,-78.0] [4.6,5.7] [51.8,56.4]	77.7
200/7/40	[-60.8,-60.8] [9.8,11.0] [58.2,63.3]	87.4	[-68.7,-68.7] [3.9,5.0] [53.6,58.3]	81.2

Tabla 7.1 : Energías de las minibandas a $\kappa = 0$ ($E_j(\kappa = 0)$, se da el intervalo de energía permitida entre corchetes) y nivel de Fermi (E_F) para diferentes superredes con dopado en el centro de los pozos y anchura de la barrera $L_b = 40$ Å. Los parámetros de cada sistema se indican en la tabla con la notación $L_W/N_D/\Delta z$, donde las longitudes están en Å y la densidad areal en unidades de 10^{12} cm $^{-2}$. Se muestran los resultados de los cálculos Hartree (indicados como "(sin xc)") e incluyendo el efecto del canje y la correlación (indicados como "(con xc)").

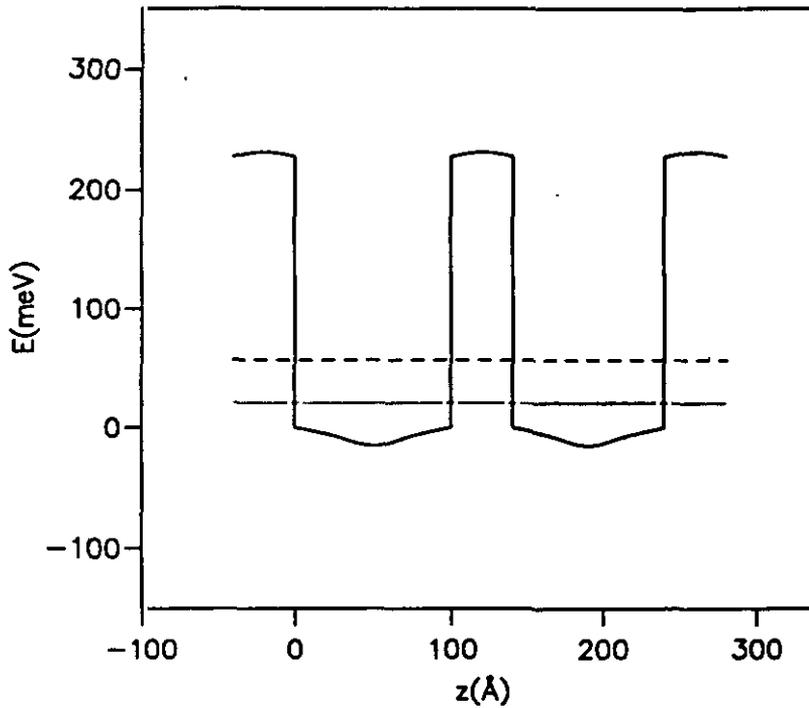


Figura 7.1 : Perfil de potencial, energía de la minibanda ocupada a $\kappa = 0$ (área sombreada) y nivel de Fermi (línea de trazos) para una superred con $L_W = 100 \text{ \AA}$, $L_b = 40 \text{ \AA}$, $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\Delta z = 20 \text{ \AA}$, en la que el dopado se halla en el centro de los pozos. El cálculo se ha realizado incluyendo el efecto del canje y la correlación; corresponde al caso 100/1/20 de la tabla 7.1.

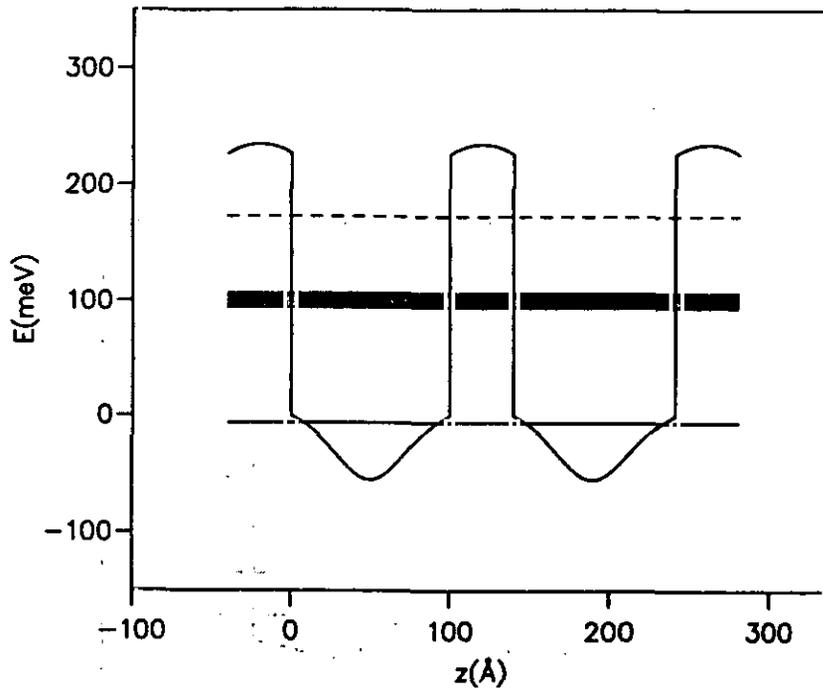


Figura 7.2 : Lo mismo que en la figura anterior, pero con $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\Delta z = 40 \text{ \AA}$. En este caso hay dos minibandas ocupadas; es el sistema 100/7/40 de la tabla 7.1.

$L_W = 100 \text{ \AA}$, y la tercera en aquéllos en los que $L_W = 200 \text{ \AA}$. Además, el aumento de la densidad de dopado en el centro del pozo hace los potenciales más atractivos, como puede verse en la figura 7.2, y en el hecho de que las minibandas fundamentales de los pozos con $L_W = 100 \text{ \AA}$ son más estrechas en los casos de mayor dopado. Cuando $L_W = 200 \text{ \AA}$, pueden compararse las segundas minibandas con idéntico resultado: su anchura se reduce a más de la mitad al pasar de 1 a $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (véase la tabla 7.1). La minibanda fundamental en este último caso ($200/7/\Delta z$) tiene una anchura despreciable (figura 7.3), debido precisamente a la mayor fuerza atractiva del pozo producida por las impurezas ionizadas, lo cual indica que para este rango de energías los potenciales están desacoplados y pueden considerarse como pozos cuánticos aislados. Evidentemente, a energías más altas, el acoplamiento es mayor, como se desprende del aumento de las anchuras de las minibandas superiores respecto de las inferiores.

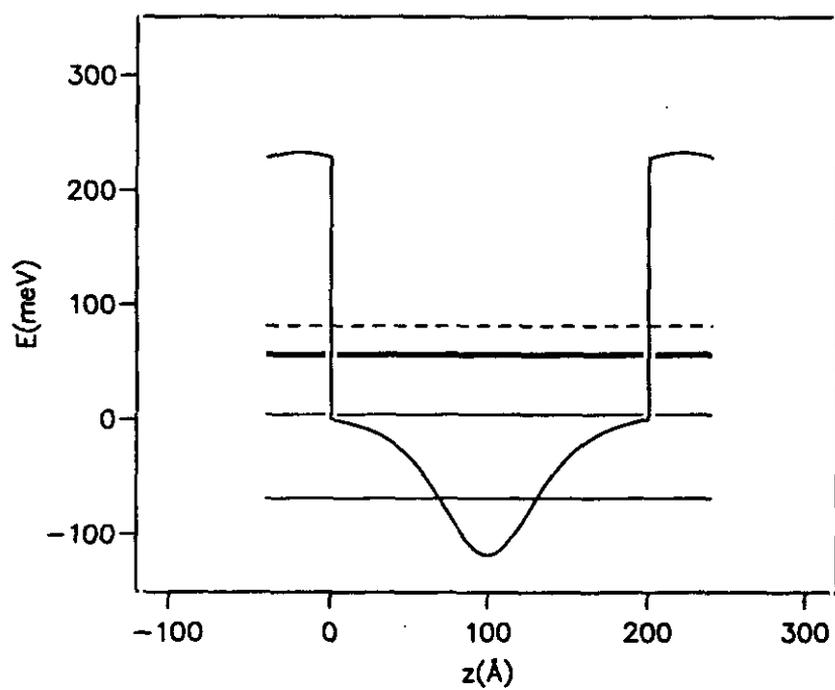


Figura 7.3 : Igual que en la figura 7.2, para una superred con $L_W = 200$ Å; es el caso 200/7/40 de la tabla 7.1.

El aumento de la anchura del pozo supone hacerlo más atractivo: en los casos con $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se pasa de 1 a 2 minibandas ocupadas al aumentar L_W de 100 a 200 Å; cuando $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, por el mismo aumento de L_W , se pasa de 2 a 3 minibandas ocupadas. Las anchuras de las minibandas son menores en los casos con L_W mayor, debido precisamente a la mayor fuerza atractiva del potencial, que supone por tanto un acoplamiento menor del sistema. De hecho, el caso mostrado en la figura 7.3 (200/7/40) se puede considerar prácticamente un pozo desacoplado: el ancho de la minibanda superior es de únicamente 5 meV.

En la tabla 7.1 se muestran los resultados de los cálculos Hartree e incluyendo el efecto del canje y correlación. Como se ha escogido el origen de energía en el borde inferior de la banda de conducción del *GaAs* en las intercaras, se observa una cierta diferencia en los resultados, ya que el funcional de canje y correlación es definido negativo y hace más atractivo el potencial de la estructura. Sin embargo, en lo que respecta a diferencias de energías, como anchuras de las minibandas y distancias entre éstas y el nivel de Fermi, las diferencias son muy pequeñas, del 1 % a lo sumo. Por consiguiente, en cuanto a las propiedades que involucren sólo la banda de conducción (como la ocupación de las minibandas), dicho efecto no es importante.

En la tabla 7.2 se dan las energías de las minibandas y niveles de Fermi de dos superredes con dopado δ en el centro de las barreras; estos valores y los correspondientes potenciales se muestran en las figuras 7.4 y 7.5.

Los potenciales son muy distintos a los mostrados en los casos anteriores, similares en todo caso a los pozos con dopado δ en las barreras. En el centro del pozo hay ahora un máximo local del potencial, debido al potencial repulsivo de los electrones, y no un mínimo, como ocurría en los sistemas con dopado en el pozo, debido al potencial atractivo producido por las impurezas ionizadas. Resulta interesante comparar los dos primeros casos de las tablas 7.1 y 7.2 (figuras 7.1 y 7.4), que sólo difieren en las posiciones de la capa de impurezas. En ambos casos hay sólo una minibanda ocupada, pero es un un poco más ancha en la superred dopada en la barrera, debido tanto a que el potencial del pozo es menos atractivo como a que las barreras son más bajas, favoreciendo el acoplamiento entre pozos; esto significa que tiene más carácter de superred, de ahí que las minibandas sean más anchas.

$L_W/L_b/N_D/\Delta z$	$E_j(\kappa = 0)$	E_F
100/40/1/20 barrera	[38.2,42.4]	76.2
100/40/7/20 barrera	[86.9,99.0] [130.9,167.6] [237.0,323.1]	245.9
100/20/1/20 pozo	[14.6,27.3]	56.3
100/40/1/60 pozo	[22.1,25.4]	59.6

Tabla 7.2 : Como en la tabla anterior, energías de las minibandas a $\kappa = 0$ y nivel de Fermi calculadas incluyendo el efecto del canje y la correlación para sistemas cuyas características denotamos de la forma $L_W/L_b/N_D/\Delta z$ (longitudes en Å, densidad areal en unidades de 10^{12} cm^{-2}). La posición de la capa dopada se indica en la tabla para cada caso.

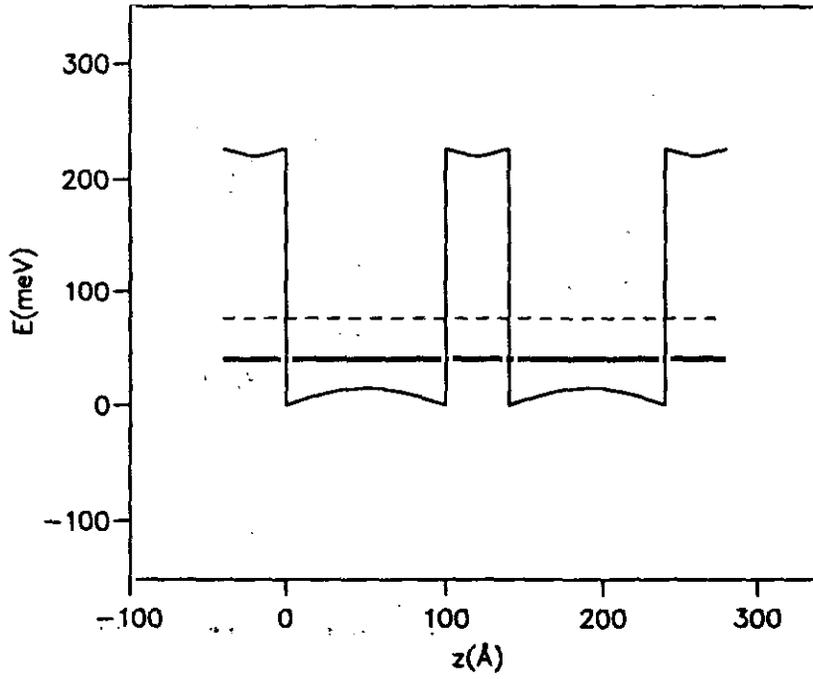


Figura 7.4 : Lo mismo que en las figuras anteriores, para una superred dopada en la barrera con $L_w = 100 \text{ \AA}$, $L_b = 40 \text{ \AA}$, $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\Delta z = 20 \text{ \AA}$; son los mismos parámetros que los del sistema dibujado en la figura 7.1. Corresponde al caso 100/40/1/20 de la tabla 7.2.

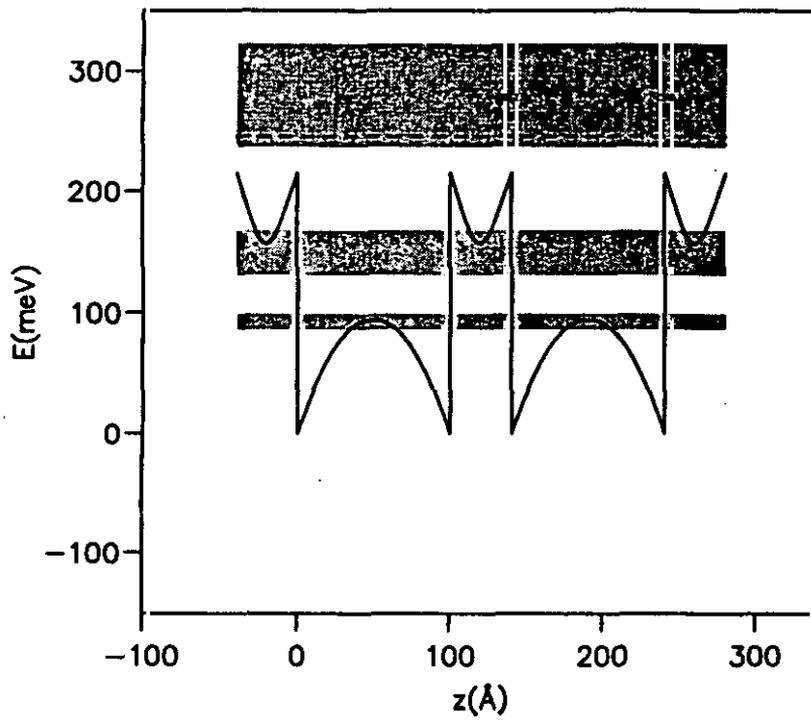


Figura 7.5 : Igual que en la figura 7.4, con $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; es el caso 100/40/7/20 de la tabla 7.2.

La diferencia es mucho mayor al aumentar la densidad de las impurezas: comparemos el caso 100/40/7/20 de la tabla 7.2, dibujado en la figura 7.5, con 100/7/20 de la tabla 7.1; como antes, estos dos sistemas difieren en la situación de la hoja de impurezas. La superred dopada en la barrera tiene 2 minibandas completamente llenas y la tercera parcialmente ocupada; la superred con dopado en el centro del pozo tiene 2 minibandas llenas, mucho más estrechas que las dos primeras minibandas de la anterior. La figura 7.4 muestra el porqué de este cambio: en la superred dopada en la barrera el potencial repulsivo producido por los electrones en el centro de los canales de *GaAs* desplaza las minibandas a energías más altas, donde el acoplamiento a través de las barreras es mayor, por lo que éstas se ensanchan. No se muestra el potencial del sistema 100/7/20 de la tabla 7.1, pero sí uno muy parecido, el del caso 100/7/40 (figura 7.2), que como explicábamos más arriba, es ligeramente menos atractivo que el del caso que nos ocupa; la comparación con la figura 7.5 ilustra adecuadamente nuestro comentario, y permite apreciar la diferencia entre los dos tipos de potencial. El dopado en las barreras favorece el acoplamiento y acentúa el carácter de superred del sistema, puesto que la profundidad de los pozos de *GaAs* y la altura de las barreras es menor que en los sistemas con dopado en el centro de los pozos.

Finalmente, en la tabla 7.2 mostramos los resultados para 2 superredes con dopado en el centro de los pozos. Una de ellas (100/20/1/20; figura 7.6) es análoga al primer caso de la tabla 7.1 (figura 7.1), pero con una barrera más estrecha, de 20 Å, lo que nos permite ver la importancia de este parámetro. Al reducir la anchura de la barrera se favorece el acoplamiento entre los canales de *GaAs* de la superred, con lo que aumenta la anchura de la minibandas, en particular de la ocupada, que pasa de 3.1 meV ($L_b = 40$ Å) a 12.7 meV ($L_w = 20$ Å). Este cambio se observa perfectamente comparando las figuras 7.1 y 7.6. Vemos por tanto que la anchura de las minibandas es muy sensible al espesor de las barreras cuando éstas son estrechas (del orden de las calculadas aquí); evidentemente, cuando las barreras son tan gruesas que no hay acoplamiento entre los pozos, el espectro no varía apenas con L_b .

El último caso mostrado en la tabla 7.2 (100/40/1/60) sirve para ilustrar el efecto de la segregación de las impurezas. Hay muy poca diferencia entre este caso y el de $\Delta z = 40$ Å (100/1/40 de la tabla 7.1); las anchuras de las minibandas son prácticamente iguales,

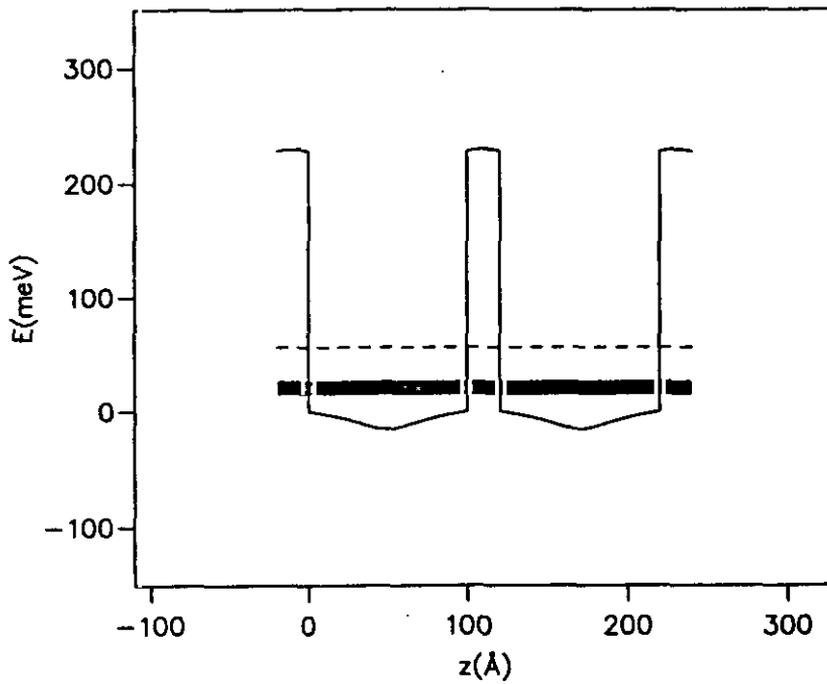


Figura 7.6 : Los mismos parámetros que en la figura 7.1 (también con dopado en el centro del pozo), salvo la anchura de la barrera, que es $L_b = 20$ Å. Obsérvese cómo aumenta la anchura de la minibanda respecto del caso dibujado en la figura 7.1; el acoplamiento entre los pozos es mucho mayor al reducirse el grosor de las barreras. Es el caso 100/20/1/20 de la tabla 7.2.

así como la energía de Fermi ($E_F - E_1(0)$). De todos modos, el potencial del sistema 100/40/1/60 es menos profundo que el de la superred 100/1/40, siguiendo la tendencia que ya habíamos advertido. Es de destacar que el mínimo del potencial para el sistema con $\Delta z = 60 \text{ \AA}$ está a sólo -3 meV del borde de la banda de conducción del *GaAs* en la intercara: dicho potencial es prácticamente plano, muy parecido al de un pozo cuadrado. Esto se debe a que la distribución de carga electrónica es prácticamente una gaussiana centrada en el pozo de *GaAs*, con una anchura similar a la de la distribución de impurezas, con lo cual los potenciales electrostáticos que producen se cancelan; el gas electrónico en estos sistemas está apantallado. De esta manera, es posible diseñar un sistema con una densidad electrónica areal elevada, pero con un espectro similar al de un potencial rectangular, lo cual no ocurre en los sistemas con modulación de dopado o dopado δ en las barreras.

Nuestros resultados permiten realizar ciertas puntualizaciones respecto del trabajo de Ihm *et al.* [78]. Si el modelo que emplean pretende describir una superred estructural de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* con dopado de *Si*, tal como afirman en [78], se está despreciando el efecto de la población electrónica de las estructuras, que como hemos visto, es considerable. Además, hay que destacar que una de las conclusiones de su trabajo depende exclusivamente de la suposición que hacen sobre la forma del potencial de las impurezas, que modelan como una δ de Dirac: advierten que al aumentar la fuerza atractiva de la δ , sólo se altera la posición de la primera minibanda, mientras que la segunda permanece invariable. Esto se debe a que las funciones envolventes de la segunda minibanda tienen un nodo en el único lugar en el que la perturbación (que es una δ) es no nula, con lo cual no se ven afectadas por ésta. Nótese que, incluso si se modela la distribución *espacial* de impurezas (su densidad) por una δ de Dirac, el potencial electrostático que producen no es de ningún modo análogo a una δ de Dirac, como discutimos en el capítulo 4.

De hecho, nuestros cálculos muestran que la posición de la segunda minibanda se altera al aumentar la densidad areal de impurezas, equivalente a la fuerza atractiva de las deltas de Ihm *et al.*: basta con comparar los casos con diferentes densidades areales en la tabla 7.1, cuando $L_W = 200 \text{ \AA}$. Para $L_W = 100 \text{ \AA}$ y $N_D = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, las energías de la segunda minibanda (en meV) son [105.8, 122.5] ($\Delta z = 20 \text{ \AA}$, con xc) y [105.8, 122.5] ($\Delta z = 40 \text{ \AA}$, con xc), que se pueden comparar con idéntico resultado con

las correspondientes energías de los casos 100/7/20 y 100/7/40. Estas energías no se dan en la tabla 7.1 porque corresponden a estados desocupados.

Como Ihm *et al.* hacen notar, cuando aumenta la fuerza atractiva de la δ aumenta el número de minibandas por debajo del valor máximo del potencial de la superred; ellos se refieren a que “baja un estado del continuo”. Nosotros preferimos no hacer tal distinción entre espectro continuo y discreto, porque hay minibandas con anchuras apreciables a energías menores que el valor máximo del potencial de la superred. En los casos estudiados por Ihm *et al.* las barreras son tan gruesas ($L_W = 80 \text{ \AA}$) que las anchuras de las minibandas son despreciables, de ahí la nomenclatura que emplean. Nosotros hemos elegido barreras más estrechas para poner de manifiesto el comportamiento de superred de estas estructuras, además de estudiar el efecto del dopado δ .

Otro efecto que Ihm *et al.* observan al aumentar la atracción del potencial δ es que “desaparece la minibanda del estado fundamental”. Creemos que esta afirmación no es correcta incluso dentro del modelo que emplean. La minibanda fundamental se halla en un rango de energías inferior al fondo de los pozos de la superred, como estados acoplados de los potenciales δ , pero no puede desaparecer. En nuestro modelo esto se corresponde con los casos en los que el dopado es $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, en los que hay minibandas con energías negativas, por debajo del borde de la banda de conducción del *GaAs* en la barrera; dos de estos casos se muestran en las figuras 7.2 y 7.3. No desaparece ningún estado; simplemente tienen energías menores que el mínimo del potencial de la superred sin dopar.

Nuestras puntualizaciones en cuanto a la población electrónica del sistema y el modelo empleado para describir el potencial de las impurezas se pueden aplicar al trabajo de Beltram y Capasso [77], que inspiró el de Ihm *et al.* [78]. En los sistemas que hemos estudiado no se produce el acoplamiento entre niveles de impureza (en nuestro caso, estados del pozo δ) y minibandas de la superred estructural que describen Beltram y Capasso, pero nos parece razonable que esto ocurra si se logra diseñar un sistema en el que se acoplen los pozos δ y los de *GaAs*, en el lenguaje de nuestro modelo. Beltram y Capasso contemplan la posibilidad de que un estado de la superred se halle por debajo del mínimo del potencial Kronig-Penney que utilizan para describir este sistema, lo cual se halla en línea con nuestra visión del problema.

Capítulo 8

Conclusiones

Los resultados obtenidos en esta memoria indican que para la descripción de la estructura electrónica de los sistemas dopados es necesario un cálculo autoconsistente. El potencial electrostático producido por las impurezas y los electrones altera, en general notablemente, el perfil de la banda de conducción, y por consiguiente, las energías y autofunciones del problema.

En los sistemas basados en *GaAs* y su aleación $Al_xGa_{1-x}As$ y dopados con *Si* es suficiente con un modelo a una banda para una primera descripción de los estados electrónicos de la banda de conducción. Los efectos de las bandas de valencia pueden ignorarse en lo que respecta a las magnitudes físicas anteriormente mencionadas: el intervalo de energías entre éstas y la banda de conducción es lo suficientemente grande como para poder considerarlas desacopladas.

El modelo que hemos empleado nos ha permitido estudiar la influencia de los distintos parámetros estructurales en la población y espectro de distintos tipos de pozos cuánticos y superredes de $GaAsAl_xGa_{1-x}As$ dopados con *Si*. Esto permite optimizar dichos sistemas desde el punto de vista de su aplicación práctica.

A igualdad de densidades areales de portadores, la perturbación del perfil de potencial producida por los electrones y las impurezas es mucho más dramática en los sistemas en que éstos se hallan espacialmente separados, como en los pozos estructurales con modulación de dopado y los pozos y superredes estructurales con dopado δ en las barreras. Sin embargo, a valores de la densidad areal comparables con las obtenidas en los sistemas

con modulación de dopado en las barreras, en los que se ha visto el gran cambio inducido en el potencial por la presencia de las cargas, los sistemas dopados δ en el canal de GaAs presentan un potencial no muy diferente del que tendría la estructura sin dopar; es para valores más altos de la densidad, no alcanzables con la modulación de dopado convencional, cuando la diferencia con el espectro del sistema despoblado es notable; hemos visto que puede diseñarse una superred (o pozo cuántico) con una densidad areal alta comparada con estructuras similares con dopado en las barreras cuyo potencial es prácticamente del tipo Kronig-Penney, sin más que utilizar un dopado cuya segregación espacial sea similar a la extensión espacial de la densidad electrónica que induce.

La comparación de nuestros cálculos con los resultados experimentales disponibles — en particular, con las densidades areales totales, medidas por efecto Hall, y de cada subbanda, medidas por efecto Shubnikov-de Haas, en los pozos con modulación de dopado— es muy satisfactoria; por un lado, esto nos permite confirmar la bondad de las aproximaciones hechas, y por otro lado, a la vista de la diferencia entre nuestros resultados y los de cálculos no autoconsistentes, hace patente la necesidad de tener en cuenta el efecto de las cargas electrostáticas presentes en las estructuras dopadas dentro de un esquema Schrödinger-Poisson.

Se ha estudiado el efecto del canje y correlación, que resulta ser de mayor importancia en los sistemas con modulación de dopado, debido a que en ellos contribuye a un aumento de la densidad areal del sistema respecto del cálculo Hartree. El acuerdo con los resultados experimentales es mejor si se tiene en cuenta este efecto. En el resto de los sistemas estudiados, todos con dopado δ y por tanto con una densidad areal total conocida de antemano, supone un cambio en la población y posición relativa de las subbandas o minibandas. Aunque la diferencia relativa entre los resultados Hartree y con canje y correlación es menor que en los pozos con modulación de dopado, es significativa respecto de las variaciones de la densidad que pueden medirse experimentalmente, y al contrario de lo que afirman Zrenner *et al.*, al menos en los pozos δ este efecto produce un cambio en los resultados comparable al de la inclusión de la no parabolicidad de las subbandas, con lo que en rigor tendrían que incluirse ambos efectos.

Respecto de la comparación de nuestros cálculos con los espectros de fotoluminiscencia en superredes δ , las distancias entre los picos del espectro se ha asociado a la separación

entre minibandas ocupadas con un acuerdo razonable. Para ir más allá de la comparación semicuantitativa, habría que realizar el cálculo teórico del espectro de fotoluminiscencia, cuyo interés en relación a la caracterización de estos sistemas es grande.

Asimismo, en esta memoria se presenta una explicación, basada en un modelo sencillo, de los altos valores de la densidad areal obtenidos experimentalmente en los pozos con dopado δ en la barrera, y se indican los parámetros que afectan a la distribución de la carga electrónica, con vistas a conseguir que ésta sea máxima en el canal de *GaAs*, lo cual es de gran interés para el diseño de dispositivos electrónicos.

Nuestra descripción de las superredes estructurales dopadas δ mejora los modelos que han aparecido hasta el momento en la literatura, con lo que hemos podido hacer ciertas precisiones sobre la modulación de su estructura electrónica en función de los parámetros de diseño del sistema, distinguiendo los aspectos que dependen del modelo empleado de los que consideramos propios de dicha estructura.

La continuación natural de este trabajo es utilizar los resultados obtenidos para el cálculo de otras propiedades físicas, como propiedades ópticas que involucren sólo la banda de conducción en los distintos sistemas estudiados, como transiciones intersubbanda o interminibanda, para las que es necesaria una buena descripción de los estados electrónicos de la banda de conducción, pero para las que no es necesario considerar las bandas de valencia, o fenómenos de transporte, ya que para el cálculo de movilidades en estos sistemas es necesario el conocimiento del espectro y los autoestados del sistema.

Otra posible extensión de este trabajo sería considerar los efectos de no parabolicidad, que tienen cierta importancia en sistemas muy poblados. Esto puede hacerse dentro del modelo a una banda, aunque sería más conveniente el paso a un modelo multibanda, con el que puede realizarse el estudio de otras propiedades ópticas que involucren las bandas de valencia, considerar sistemas con dopado p y estudiar otros tipos de materiales de discontinuidad de banda menor, para los que no puede utilizarse un modelo a una banda.

Bibliografía

- [1] L. Esaki y R. Tsu, IBM J. Dev. **14**, 61 (1970).
- [2] A. Y. Cho y J. R. Arthur, Prog. Solid State Chem. **10**, 157 (1975).
- [3] W. Shockley, US Patent **2**, 347 (1951).
- [4] H. Kroemer, RCA Rev. **18**, 332 (1957).
- [5] H. Kroemer, Proc. IEEE **51**, 1782 (1963).
- [6] L. Esaki y L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974).
- [7] R. Dingle, W. Wiegmann y C. H. Henry, Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974).
- [8] B. Vinter y C. Weisbuch, *Quantum Semiconductor Structures*, Ac. Press, San Diego, 1991.
- [9] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Edition de Physique, Les Ulis, France, 1988.
- [10] G. H. Döhler, Phys. Stat. Solidi (b) **52**, 79 (1972).
- [11] E. O. Kane, en *Semiconductor and Semimetals, vol. I*, R. K. Willardson y A. C. Beer, eds., p 75 (1966).
- [12] G. Bastard y J. A. Brum, IEEE J. Quantum Electron. **QE-22**, 1625 (1986).
- [13] F. García-Moliner y F. Flores, *Introduction to the Theory of Solid Surfaces*, Cambridge U. Press, Cambridge, 1979.

- [14] F. García-Moliner y V. R. Velasco, *Theory of Single and Multiple Interfaces*, World Scientific, Singapur 1992.
- [15] D. J. Ben Daniel y C. B. Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- [16] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [17] P. Hohenberg y W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864.
- [18] W. Kohn y L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965).
- [19] L. Hedin y B. I. Lundqvist, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4**, 2064 (1971).
- [20] M. E. Mora, R. Pérez y Ch. B. Sommers, *J. Physique* **46**, 1021 (1985).
- [21] J. Stoer y R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer Verlag, New York, 1980.
- [22] H. L. Störmer, A. Pinczuk, A. C. Gossard y W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* **38**, 691 (1981).
- [23] L. Chico, W. Jaskólski y F. García-Moliner, *Phys. Scripta* **47**, 284 (1993).
- [24] H. J. Lee, J. Juravel, J. C. Woolley y A. J. SpringThorpe, *Phys. Rev. B* **21**, 659 (1980).
- [25] R. C. Miller, A. C. Gossard y D. A. Kleinman, *Phys. Rev. B* **32**, 5443 (1985).
- [26] Z. Y. Xu, V. G. Kreismanis y C. L. Tan, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 415 (1983).
- [27] S. Sasa, J. Saito, K. Nanbu, T. Ishikawa y S. Hiyamizu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **23**, L573 (1984).
- [28] D. V. Lang, R. A. Logan y M. Jaros, *Phys. Rev. B* **19**, 1015 (1979).
- [29] D. V. Lang, *J. Appl. Phys.* **45**, 3023 (1974).
- [30] P. M. Mooney, *J. Appl. Phys.* **67**, R1 (1990).
- [31] M. O. Watanabe y H. Maeda, *Jpn. J. Appl. Phys.* **23**, L734 (1984).

- [32] H. Hihara y C. Hamaguchi, *Solid State Commun.* **54**, 485 (1985).
- [33] K. Hirakawa, H. Sakaki y J. Yoshino, *Appl. Phys. Lett.* **45**, 253 (1984).
- [34] N. Chand, T. Henderson, J. Clem, W. Ted Masselink, R. Fischer, Y. C. Chang y H. Morko, *Phys. Rev. B* **30**, 4481 (1984).
- [35] V. M. S. Gomes, A. S. Chaves, J. R. Leite y J. M. Worlock, *Phys. Rev. B* **35**, 3984 (1987).
- [36] V. R. Velasco, F. García-Moliner, H. Rodríguez-Coppola y R. Pérez-Alvarez, *Phys. Scr.* **41**, 375 (1990).
- [37] F. García-Moliner y V. R. Velasco, *Physics Reports* **200**, 83 (1991).
- [38] F. Stern y S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **20**, 840 (1984).
- [39] T. Ando, A. B. Fowler y F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [40] J. J. Harris, J. M. Lagemaat, S. J. Battersby, C. M. Hellon, C. T. Foxon y D. E. Lacklison, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 773 (1988).
- [41] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, 1990.
- [42] J. Shah, A. Pinczuk, A. C. Gossard y W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2045 (1985).
- [43] K. Inoue, H. Sakaki, J. Yoshino y Y. Yoshikoa, *Appl. Phys. Lett.* **46**, 973 (1985).
- [44] K. Inoue y H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **23**, L61 (1984).
- [45] K. Inoue, H. Sakaki, J. Yoshino y T. Hotta, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 4277 (1985).
- [46] C. E. C. Wood, S. Judaprawira, L. F. Eastman, *IEMD Tech. Dig.*, p. 388 (1979).
- [47] K. Board, A. Chandra, C. E. C. Wood, S. Judaprawira y L. F. Eastman, *IEEE Trans. on Electron. Dev.* **ED-28**, 505 (1981).
- [48] E. F. Schubert y K. Ploog, *Jpn. J. Appl. Phys.* **24**, L608 (1985).

- [49] E. F. Schubert, A. Fischer y K. Ploog, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **ED-33**, 625 (1986).
- [50] J. Wagner, A. Fischer y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **42**, 7280 (1990).
- [51] G. Tempel, F. Müller, N. Schwarz, F. Koch, G. Weimann, H. P. Zeindl e I. Eisele, *Surf. Sci.* **228**, 247 (1990).
- [52] E. F. Schubert, *Surf. Sci.* **228**, 240 (1990).
- [53] A. Zrenner, F. Koch, K. Ploog, *Surf. Sci.* **196**, 671 (1988).
- [54] M. H. Degani, *Phys. Rev. B* **44**, 5580 (1991).
- [55] M. Santos, T. Sajoto, A. Zrenner, M. Shayegan, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 2504 (1988).
- [56] M. Santos, T. Sajoto, A.-M. Lanzillotto, A. Zrenner, M. Shayegan, *Surf. Sci.* **228**, 255 (1990).
- [57] D. G. Liu, J. C. Fan, C. P. Lee, C. M. Tsai, K. H. Chang, D. C. Liou, T. L. Lee y L. J. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2628 (1992).
- [58] H. C. Nutt, R. S. Smith, M. Towers, P. K. Rees y D. J. James, *J. Appl. Phys.* **70**, 821 (1991).
- [59] M.-L. Ke, J. S. Rimmer, B. Hamilton, M. Missous, B. Khamsehpour, J. H. Evans, K. E. Singer y P. Zalm, *Surf. Sci.* **267**, 65 (1992).
- [60] F. A. Reboredo y C. R. Proetto, *Sol. St. Comm.* **81**, 163 (1992).
- [61] M. H. Degani, *J. Appl. Phys.* **70**, 4362 (1991).
- [62] A. C. Maciel, M. Tatham, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. E. Nahory, J. P. Harbison y L. T. Florez, *Surf. Sci.* **228**, 251 (1990).
- [63] L. Chico, F. García-Moliner y V. R. Velasco, *Phys. Rev. B* **48**, 11427 (1993).
- [64] J. Wagner, A. Ruiz y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **43**, 12134 (1991).

- [65] M.-L. Ke, J. S. Rimmer, B. Hamilton, J. H. Evans, M. Missous, K. E. Singer y P. Zalm, *Phys. Rev. B* **45**, 14114 (1992).
- [66] S. M. Shibli, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, C. A. C. Mendonça, F. Plentz y E. A. Meneses, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2895 (1992).
- [67] S. K. Lyo y E. D. Jones, *Phys. Rev. B* **38**, 4113 (1988).
- [68] J. E. Cunningham, W. T. Tsang, G. Timp, E. F. Schubert, A. M. Chang y K. Owusu-Sekyere, *Phys. Rev. B* **37**, 4317 (1988).
- [69] T. Y. Kuo, J. E. Cunningham, E. F. Schubert, W. T. Tsang, T. H. Chiu, F. Ren y C. G. Fonstad, *J. Appl. Phys.* **64**, 3324 (1988).
- [70] L. Chico, W. Jaskólski, R. Pérez-Álvarez y F. García-Moliner, *J. Phys.: Cond. Matter*, **49**, en prensa (1993).
- [71] D. G. Liu, J. C. Fan, C. P. Lee, C. M. Tsai, K. H. Chang, D. C. Liou, T. L. Lee y L. J. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2628 (1992).
- [72] J. M. Lagemaat, G. E. W. Bauer, J. J. Harris y C. T. Foxon, *Phys. Rev. B* **38**, 13439 (1988).
- [73] W. Ted Masselink, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 694 (1991).
- [74] W. Ted Masselink, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1513 (1991).
- [75] R. Stepiniewski, S. Huant, G. Martinez y B. Etienne, *Phys. Rev. B* **40**, 9772 (1989).
- [76] M.-L. Ke y B. Hamilton, *Phys. Rev. B* **47**, 4790 (1993).
- [77] F. Beltram y F. Capasso, *Phys. Rev. B* **38**, 3580 (1988).
- [78] G. Ihm, S. K. Noh, J. I. Lee, J.-S. Hwang y T. W. Kim, *Phys. Rev. B* **44**, 6266 (1991).