

ESTADOS DE SUPERFICIE EN TERNARIOS II-VI.

A. Reyes y A. Camacho B.

Dpto. de Física, U. de Los Andes A.A. 4976, Santafé de Bogotá.

Resumen

Presentamos un cálculo de la estructura de bandas de compuestos semiconductores ternarios de los grupos II-VI, obtenidos a partir de CdTe y ZnTe, para todo el rango de concentraciones. Ya que nuestro interés se centra principalmente en el estudio de las bandas electrónicas, que son las responsables directas de las propiedades ópticas de sus heteroestructuras, nos concentramos en la parte alta de la banda de valencia, para la cual una aproximación de cristal virtual es suficientemente buena. Para describir las superficies [001], representamos el material en bloque por medio de capas alternadas de aniones y cationes. Encontramos un estado de superficie dentro del gap y un segundo estado de superficie resonante, presente únicamente en las superficies terminadas en anión. Por último, analizamos la composición orbital de estos estados.

Abstract

We present a band structure calculation of ternary alloys of II-VI semiconductors obtained from CdTe and ZnTe, in the whole range of concentrations. Because we are mainly interested in studying the electronic bands, which are directly responsible for the optical properties of their heterostructures, we concentrate in top of valence band and then a virtual crystal approximation is good enough. With the purpose of describing the surfaces [001], we represent the bulk material as alternating anionic and cationic layers. We find a surface state in the gap and a second resonant surface state in the valence band, which is present only in anion terminated surfaces. Finally, we analyse the orbital composition of these states.

Método

Como primer paso, construimos el hamiltoniano para el cristal en bloque, haciendo uso del método Tight Binding. Hemos incluido 3 orbitales p , un orbital s y un orbital virtual s^* [1] que introducimos para describir correctamente la parte baja de la banda de conducción. Adicionalmente, tenemos en cuenta la interacción spin-órbita, con lo cual obtenemos una base de 10 funciones de Bloch[2] de la forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = N^{-1/2} \sum_j \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}_j) \varphi(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (1)$$

Por lo tanto, los elementos matriciales están dados por:

$$\langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = \sum_j \exp(i \vec{k} \cdot \vec{\rho}_j) \int \psi_n(\vec{r}) H \psi_m(\vec{r} - \vec{\rho}_j) d^3r \quad (2)$$

La relación de dispersión $E(k)$ se obtiene diagonalizando la matriz (2). Para describir la superficie, escribimos matrices del mismo tipo para las diferentes capas atómicas que

componen el cristal. Si se tienen en cuenta interacciones a primeros vecinos, entonces la matriz correspondiente a la interacción entre dos láminas principales está compuesta por cuatro sub-matrices de 10×10 (cada lámina principal está compuesta por una capa de aniones y una de cationes). Debido a la periodicidad del cristal, la matriz resultante es de 40×40 . Si denotamos cada lámina principal con un índice n , entonces el proyector, para esa lámina, es (la superficie la identificamos con $n=0$):

$$I = |n-1\rangle \langle n-1| + |n\rangle \langle n| + |n+1\rangle \langle n+1| \quad (3)$$

Para obtener la función de Green, partimos de:

$$\langle m | (\omega - H) G | n \rangle = \delta_{mn} \quad (4)$$

La expresión para la función de Green de la superficie, en términos de la matriz de transferencia T , es[3]:

$$(\omega - H_{00} - H_{01} T) G_{00} = I \quad (5)$$

$$T = G_{00} H_{00}^+$$

Para la n -ésima lámina principal:

$$G_{nn} = G_{00} + T G_{n-1, n-1} S \quad (6)$$

$$S = H_{01} G_{00}$$

Una vez obtenidas las funciones de Green G_{nn} , calculamos la densidad de estados, usando la relación:

$$N(E, k) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G(E, k) \quad (7)$$

El hamiltoniano para la superficie ternaria se construyó haciendo uso de la aproximación de cristal virtual; ya que, experimentalmente, se ha observado que la variación del gap de energía como función de la concentración, para el ternario $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, es aproximadamente lineal[4].

Resultados

El método empleado permite analizar la composición orbital de los estados de superficie. Para localizarlos, graficamos la diferencia en densidad de estados entre el bloque y la superficie, discriminando por orbitales. El resultado para todas las concentraciones de Cd en el compuesto ternario, es similar; por lo tanto, en las figuras 1 y 2 mostramos la diferencia en densidad de estados para ZnTe puro, como ilustración. La figura 1 corresponde a la superficie terminada en anión. Aquí se observa que aparece un estado de superficie dentro del gap, formado a partir de contribuciones de los orbitales p_x y p_y . Para averiguar el origen de este estado, integramos la diferencia en densidad de estados para todas las energías negativas (valencia) obteniendo como resultado -2, lo que confirma que este es un estado que viene de valencia. En la figura 2, vemos las mismas gráficas, correspondientes a la superficie terminada en catión. En este caso, el estado de superficie dentro del gap proviene principalmente de contribuciones del orbital s . Igualmente, hemos verificado que este estado proviene de la banda de conducción.

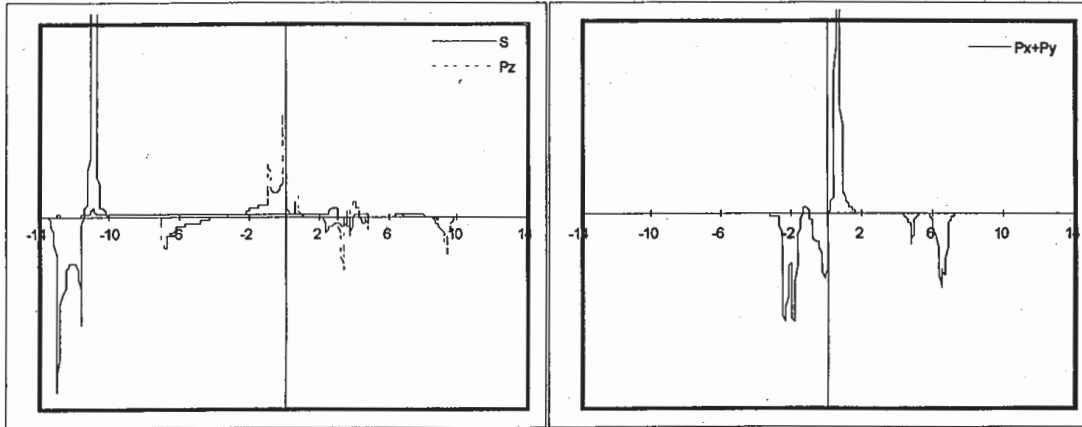


Fig. 1 Diferencia en densidad de estados, discriminada por orbitales (Superficie de Te)

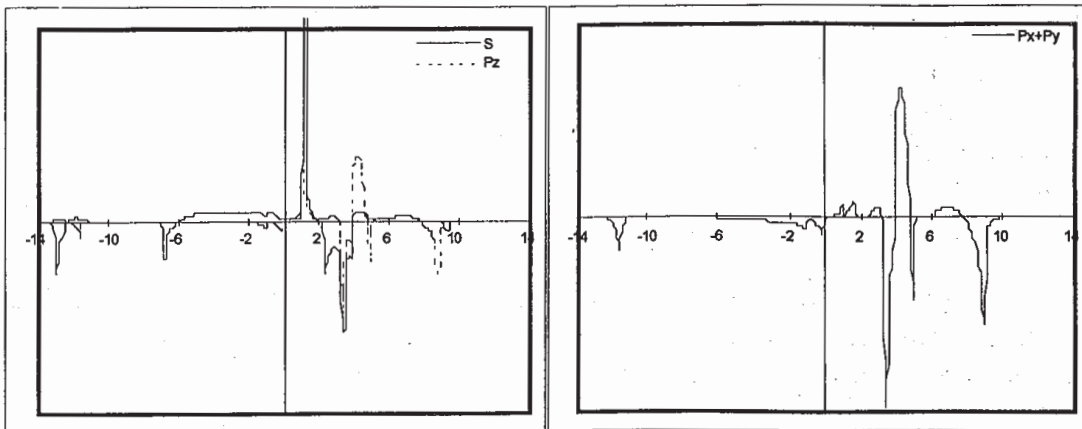


Fig. 2 Igual a Fig. 1, pero con superficie de Zn.

En la figura 3 se presenta la estructura de bandas proyectada, para la superficie de ZnTe terminada en catión. Esta gráfica se obtiene a proyectando la densidad de estados en varios puntos dentro de la zona de Brillouin bidimensional. Aquí se observa claramente el que estado de superficie dentro del gap presenta muy poca dispersión. También se observa un estado en valencia, ubicado dentro de los "lentes", que entra al continuo como resonancia y dos estados mas en la parte alta de la banda de conducción. Para las superficies terminadas en anión, no se encuentra el estado resonante de valencia que se ve en el caso anterior, pero se encuentra un nuevo estado muy profundo en valencia.

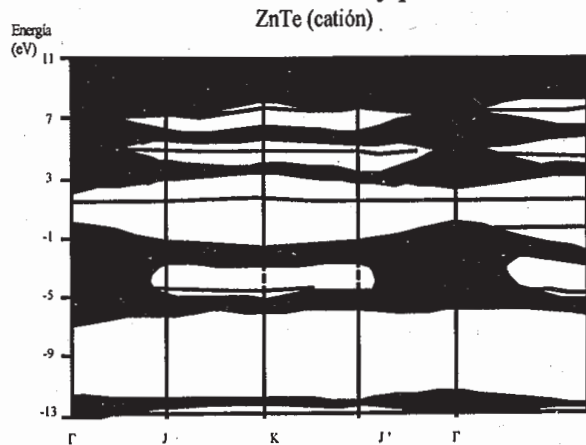


Fig. 3

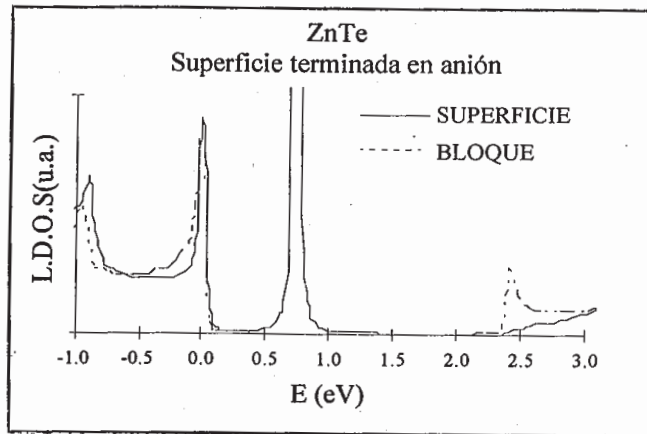


Fig. 4

En la figura 4, presentamos la densidad de estados calculada en el centro de la zona de Brillouin, para ZnTe. Aquí se observa claramente el estado de superficie y se observa también que el valor obtenido para el ancho del gap, concuerda muy bien con el valor reportado en la literatura (1.39 eV). Igual sucede con la superficie de CdTe (1.6 eV).

Por último presentamos los resultados obtenidos con las dos superficies ternarias de $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, terminadas en anión y en catión, para todo el rango de concentraciones. En la figura 5 se muestra la variación de la posición, en energía, de ntro del gap, del pico que representa al estado de superficie. Es interesante anotar que mientras la variación para la superficie terminada en anión es aproximadamente lineal, la variación para la superficie terminada en catión, presenta cierta curvatura. Para una discusión detallada de los resultados, ver referencia [4].

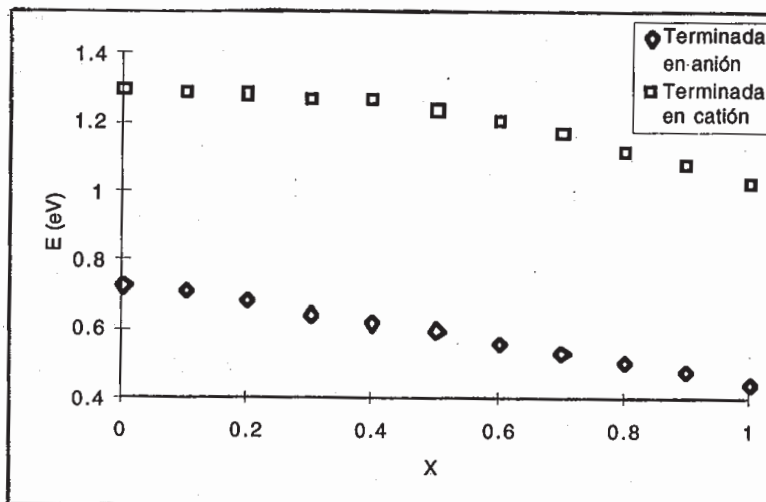


Fig. 5

Referencias

- [1] P. VOGL, H.P.HJALMARSOV, and J. DOW, J. Phys. Chem. Solids 44, 365 (1983)
- [2] J. C. SLATER and G. F. KOSTER, Phy. Rev. 94, 1498 (1954)
- [3] M.P. LOPEZ-SANCHO, J.M. LOPEZ-SANCHO, and J.RUBIO. J.Phys. F 15, 851 (1985)
- [4] A. REYES, Tesis de pregrado (*Estructura electrónica de superficies ternarias*). Universidad de los Andes, Stafé. de Bogotá (1997); y referencias incluidas.