



Universidad Autónoma del Estado de Morelos

 Facultad
de Ciencias

PRIMER TALLER DE FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO EN LA UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

FIRST WORKSHOP ON SOLID STATE PHYSICS
STATE UNIVERSITY OF MORELOS

L. M. GAGGERO-SAGER, M. E. MORA-RAMOS, R. PÉREZ-ÁLVAREZ (Eds.)

CUERNAVACA, MORELOS, MÉXICO

28 DE ENERO AL 1° DE FEBRERO DE 2008

ISBN: 978-968-878-285-9



Índice

Introducción	3
Comité Organizador. Patrocinadores	5
Minicurso	7
Notes on symmetrically localized sets and their associated manifolds, C.M. Zicovich-Wilson	9
Conferencias invitadas	23
Dynamics and Thermodynamics of Nanoclusters, Karo Michaelian and Iván Santamaría-Holek	25
Transmittance of a layer of metamaterial, H. Ruiz-Luna, Xóchitl Saldaña, A. Enciso, and D.A. Contreras-Solorio	35
Optical frequencies of metallo-dielectric photonic crystal, A.A. Krokhin, J. Arriaga, and L. Gumen	41
Carbon nanotubes, Leonor Chico Gómez	44
Green's Function Tight-Binding Formalism for Line-shape Description of Virtual Electronic States, Stoyan Vlaev	45
Pozos delta dopados, Isaac Rodríguez Vargas	49
Otros trabajos	77
Propagación de la luz en heteroestructuras dieléctricas de Rudin-Shapiro, M.E. Mora-Ramos, B. Alvarado Tenorio, V. Agarwal.....	79
Variación del gap de energía bajo tensión uniaxial a lo largo de (111) y (211) para los materiales InAs, GaSb y GaAs, J. Martín Mozo, B. Salazar-Hernández, J. Arriaga, J. Olvera Cervantes, B. S. Soto-Cruz y S. Alcántara	84
Oscilaciones de la red de nitruros cúbicos, D.G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez, R. Pérez-Álvarez y M. E. Mora-Ramos.....	91
n-type delta-doped quantum well in GaAs under laser radiation and in-plane magnetic field, M.T. Pérez-Maldonado, C. Rodríguez-Castellanos, and L.M. Gaggero-Sager	95

Complete transmittance for symmetric heterostructures, R. Pérez-Álvarez, G. Tichadini, and Y. Mutomba	98
Fuerzas de oscilador y propiedades ópticas de heteroestructuras cuasirregulares de Fibonacci y Rudin-Shapiro, R. Pérez- Álvarez, C. Trallero-Giner y F. García-Moliner	102
Analytical calculation of the eigen-energies for a quantum lens with finite barriers, Arezky H. Rodríguez	108

Introducción

Este es el modesto comienzo de lo que esperamos llegue a convertirse en un fructífero espacio de intercambio y colaboración entre colegas mexicanos y extranjeros que trabajamos en distintas áreas de la Física del Estado Sólido. Hay que destacar que el énfasis ha estado en la interacción y no en los aspectos formales, los cuales de seguro serán cada vez de mayor importancia en la medida que, como esperamos, esta clase de encuentros crezca en todos los sentidos en futuras celebraciones.

Queremos manifestar nuestro reconocimiento a todos los que decidieron acompañarnos en esta primera edición.

No podemos dejar de agradecer a la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos y a su dirección por el apoyo brindado en la organización del Taller.

Asimismo, expresamos nuestro agradecido reconocimiento a la Casa de la Ciencia de la Ciudad de Cuernavaca por brindarnos el espacio para la realización de las actividades del Taller.

Finalmente, queremos enviar nuestro más sincero agradecimiento a la European Physical Society-IGPD por el apoyo financiero brindado

L.M.Gaggero-Sager
M. E. Mora-Ramos
R. Pérez-Álvarez

Comité Organizador. Patrocinadores

Comité Organizador

- Dr. Luis Manuel Gaggero Sager
- Dr. Rolando Pérez Álvarez
- Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos
- Maestro Bonifacio Alvarado
- Lic. David Ariza Flores

Patrocinadores

- Grupo Interdivisional de Física para el Desarrollo (IGPD) de la Sociedad Europea de Física (EPS)
- Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México



Minicurso

Notes on symmetrically localized sets and their associated manifolds

Claudio M. Zicovich-Wilson

Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino, Via P. Giuria 7, 10125 Torino, Italy*

I. INTRODUCTION

Substitution operators are useful theoretical tools in quantum mechanics, in terms of which every many-body operator can be written in a neat and compact form whenever a suitable one-body basis set is given. In the context of the electronic structure calculations, the Born-Oppenheimer electronic Hamiltonian can be written in terms of such operators according to

$$\hat{H} = \sum_{ia} \mu_{ia} \hat{E}_i^a + \sum_{ijkl} \beta_{ijkl} \hat{E}_i^a \hat{E}_j^b, \quad (1)$$

where operator \hat{E}_i^a substitutes an occupied orbital i by a virtual one a , and the matrix elements μ_{ia} and β_{ijkl} correspond to the mono- and bi-electronic integrals, respectively. The choice of the one-electron basis set in this case is often guided by the criterion of reducing as possible the number of numerically relevant terms in Eq. (1) (in principle ∞),¹ allowing approximate methods to display both, good computational performances and accurate enough numerical results.

To this respect it has been shown that such conditions are well fulfilled in the so-called Local Correlation approaches, where the one-electron basis sets used to build the approximate Hamiltonian is chosen so as to bring about a Slater determinant that satisfy the Hartree-Fock conditions, exhibiting at time good spatial localization properties [1–5]. Such characteristics permit to successfully truncate the series of one- and two-electron terms in Eq. (1), giving rise to remarkable improvement in computational performance with negligible loss in accuracy. These techniques have been shown to be suitable for large systems and they have been recently adapted to perform calculations of the electronic structure in crystalline systems.[3]

As concerns the latter, the concept that numerically relevant particle-hole substitutions in electron correlation effects mainly involve states that are localized in close spatial regions, is not enough to convert the infinite periodic problem into a finite one. Such a goal is only reached when the symmetry properties of the system, that gives rise to equivalences between the terms in eq. (1), are additionally exploited. In the most simple case, when just translational equivalences in the one-electron basis

set are considered, the resulting symmetry-adapted localized wave-functions are the so-called Localized Wannier Functions (LWF).[6–9]. A much more efficient performance can be attained if the full symmetry of the system (including both, translational and point operators) is exploited, taking advantage of that most crystals are highly symmetric objects. [10–13] In such a case a basis set of symmetry-adapted LWFs (SALWF) is employed, and the corresponding substitution operators are the so-called symmetry-adapted local substitution operators (SALSO).

Another context where the use of SALSOs can provide practical computational benefits is in the implementation of variational methods for periodic systems. In these kind of problems one is interested in computing a set of orthonormal LWF that optimizes a given functional. In the procedures considered to compute spatially localized wave-functions starting from a set that span the occupied manifold, for instance, the functional to be optimized returns a conventional measure of the spatial spread of a set of orthonormal functions. On the other hand, taking advantage of the variational theorem of the total energy in quantum mechanics, stationary states can be approached by minimizing suitable energy functionals as for HF, KS (also perturbed by external electric fields), MC SCF methods, among others. In all cases, the optimization processes can be interpreted as evolving over manifolds constituted by unitary transformations applied on some given starting basis sets of orthonormal wave functions.

These notes are intended to provide a theoretical framework for the implementation of variational procedures within orthonormal basis sets of wave-functions that display both, symmetry and spatial localization properties. This general development, of course, includes the very important case of the obtention of SALWFs in crystalline systems, whose computation *a priori* is to be one of the aims of the present work.

The main idea is to keep symmetry constraints along the functional optimization processes, by using SALSOs to build the unitary transformations that perform the motions along the variational manifold. The transformations obtained in this manner keep symmetry relationships together with the localization properties featured by the components of the original basis set.

The symmetry adaption scheme must be compatible with localization and, as shown in the works of Smirnov, Evarestov, *et al.*, [11, 14] this goal is feasible when considering a basis sets of the representations induced from the irreducible representations (IRREP) of a subgroup G_p of the symmetry group G . The basis sets symmetry-adapted according to this scheme, feature symmetry

*E-Mail: claudio@servm.fc.usm.mx; On sabbatical leave from Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México

¹ Which means to also reduce the number of degrees of freedom of the many-electron Schrödinger Equation

equivalences (under the action of the coset representatives) between subsets and are also basis of the IRREPs of G_p .

Briefly: given a manifold invariant under a symmetry group, a coset decomposition should be found that imposes symmetry constraints maximally compatible with the required localization properties and, according to it, one tries to symmetry-adapt both a starting basis set, and the corresponding SALSOs that generates the unitary transformations between all possible symmetry-adapted basis sets with the same structure of coset decompositions and IRREPs. The optimization procedure can then be performed within the symmetry-adapted sub-manifold spanned by the SALSOs and the resulting basis set is therefore ensured to feature the required symmetry and localization properties at a given stationary point.

This is particularly interesting for the aim to compute a basis set in terms of which the matrix elements of one- and two-electron operators could be restricted to a reduced set of numerically relevant components, thanks to the localization, that at time form an even more compact set of asymmetric components thanks to symmetry equivalences. The success of such a strategy is based on the possibility of performing efficient symmetry-adapted optimizations of a suitable spatial spread functional (in these notes the Foster-Boys one have been chosen).

Last but not least, it appears that any Hermitian totally symmetric operator can be spanned in terms of the same *substitution operators* as adopted for the generation of the symmetry-adapted unitary transformations. Given the Hermitian totally symmetric operator in this form, it is easily shown that its matrix elements in terms of the symmetry-adapted basis set feature several interesting connections between them, including very surprising kind of selection rules. This suggests that there may be not evident relationships or vanishing of matrix elements that would allow to improve the efficiency of the computation of the two-electron operators, for instance in the case of local correlation methods for solids. The study of these equivalences requires considering two-electron substitution operators in addition to the one-electron ones considered in the present notes and will be the subject of further works.

Owing to the connection between the algebra of the substitution operators and the formalism of most of methods based on the configuration interaction scheme, employed to correct the electronic structure by electron correlation effects, the symmetry-adaptation strategy presented here could be useful to compute excited states in solids with well defined space and spin/permutational symmetry in the framework of the Local Correlation approach. In this strategy, one takes at the same time advantage of the sparsity and localized character of the matrix form of the Hamiltonian together with symmetry correspondences. This makes the total energy to depend on a quite restricted number of integrals for a given numerical accuracy.

In the following sections the general issues concerning the symmetry adapted localized sets and manifolds are shown in a rather straightforward way, while the most hard mathematical proofs are developed in the Appendices.

II. GENERAL SYMMETRY-ADAPTED BASIS SETS AND MANIFOLDS

Let G be a group and $\{G_p\}$ a set of subgroups that allow to make the following left-coset decompositions:

$$G = \sum_g S_g^{(p)} G_p, \quad (2)$$

where $S_g^{(p)}$ are the corresponding coset representatives.

Let us now assume that there is an orthonormal basis set of subspace \mathcal{S} , namely $\{|\mu p i, g a\rangle\}$, adapted to the symmetry in such a way that

$$\begin{aligned} \hat{S}|\mu p i, 1a\rangle &= \hat{S}_g^{(p)} \hat{R}_S^{(p)} |\mu p i, 1a\rangle \\ &= \hat{S}_g^{(p)} \sum_{a'} D_{a'a}^{(\mu p)}(\hat{R}_S^{(p)}) |\mu p i, 1a'\rangle \\ &= \sum_{a'} D_{a'a}^{(\mu p)}(\hat{R}_S^{(p)}) |\mu p i, g'a'\rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

where $\hat{R}_S^{(p)} = [S_g^{(p)}]^{-1} S \in G_p$ and $D_{a'a}^{(\mu p)}(\hat{R}_S^{(p)})$ is a given matrix form for the μ -th IRREP of G_p . Multiplying eq. (2) at the right hand by $[S_g^{(p)}]^{-1}$ it arises that any $S' \in G$, $S' = S[S_g^{(p)}]^{-1}$ has thus a unique decomposition $S' = S_g^{(p)} \hat{R}_S^{(p)} [S_g^{(p)}]^{-1}$ which gives rise to the following transformation rule for any vector $|\mu p i, g'a\rangle$:

$$\hat{S}'|\mu p i, g'a\rangle = \hat{S}' \hat{S}_g^{(p)} |\mu p i, 1a\rangle = \sum_{a'} D_{a'a}^{(\mu p)}(\hat{R}_S^{(p)}) |\mu p i, g'a'\rangle. \quad (4)$$

On the other hand, vector $|\mu p i, 11\rangle$ belongs to the first row of the μ -IRREP of subgroup G_p (the i -th time the μ -IRREP appears in the set) and

$$|\mu p i, g a\rangle = \hat{S}_g^{(p)} |\mu p i, 1a\rangle = \hat{S}_g^{(p)} \hat{F}_{a1}^{(\mu p)} |\mu p i, 11\rangle, \quad (5)$$

where $\hat{F}_{ab}^{(\mu p)} = \frac{a_m}{g_p} \sum_{R \in G_p} D_{ab}^{(\mu p)}(R) \hat{R}$ is a shift operator in the μ -th IRREP of G_p .² The set of all vectors $|\mu p i, 11\rangle$ in the basis set, will be hereafter called the *asymmetric set*, as it does not feature by itself any symmetry property, but contains all the necessary information to build the full symmetry adapted basis set. A basis set of this kind can be obtained from the usual symmetry

² A necessary condition is that the matrix forms of the IRREPs to be the same for any time it appears in the basis set

adapted vectors,³ adopting projection techniques under the theory of induced representations.[14] Given a subgroup $G_p \subset G$ the full set $\{\mu p i, g a\}$, $\forall g a$ is a basis of the representation of G induced by the μ -th IRREP of G_p , what is denoted as $\Gamma^{\mu G_p | G}$. The induced representations will be hereafter denoted by the acronym INDREP.

In what concerns the symmetry properties of the direct product of these symmetry adapted vectors and their linear combinations, they are analyzed separately in Appendix A.

In those cases where the symmetry adapted basis sets are employed to build sets of objects that do not form a vector space and, consequently, do not obey equivalence rules similar to Eq. (5), it is useful to choose the coset representatives and the basis for the IRREPs in such a way that the correspondence between rows of the μ -th IRREP of G_p is given by single elements of G and not linear combinations of them like in Eq. (5). Although it is not guaranteed that such additional equivalences can be found in all cases, in particular when the objects are constructed in terms of pairs of symmetry adapted vectors, we show in Appendix D that there is a systematic way to, at least, maximize the equivalences within the set of pairs of vectors by choosing suitable coset representatives in Eq. (2), and basis vectors for the IRREPs of the subgroups involved.

For the sake of illustration of the symmetry adaption procedure here proposed, let us consider the example of the Wannier Functions (WF), already mentioned in the Introduction. If the translational group was the symmetry group of the system, WFs are obtained by means of a coset decomposition in terms of the C_1 group (maximum order point subgroup), giving rise to a fully equivalent set of wave-functions, connected to each other by translational operations. In the general case, the coset decomposition in terms of any point subgroup of a given spatial group brings about symmetry-adapted functions that are at the same time WFs and equivalent/invariant under the point operators.

For the present purposes, each asymmetric set computed adopting a given symmetry-adaption scheme, may be also considered a point in the manifold of all orthonormal symmetry-adapted basis sets that span subspace \mathcal{S} , that are basis of the INDREPs obtained by means of the same coset decomposition as in Eq. (2) and the same matrix forms of the IRREPs as adopted in Eqs. (3) and (4). This is what in the following we refer to as the *symmetry-adapted sub-manifold*.

The present symmetry-adaption scheme of a basis set is a generalization of the usual symmetry-adaption to bases of the IRREPs of G , as the latter corresponds to the

³ For instance in case one wants to obtain symmetry-adapted Wannier Functions from a set of symmetry-adapted Bloch Functions spanning the occupied manifold

special case of $G_p = G$. Obviously, this scheme requires in general a choice for the the coset partitions, although the number of choices is finite for space groups under some reasonable restrictions.⁴

III. SYMMETRY ADAPTED FUNCTIONAL OPTIMIZATIONS

The problem of the obtention of a basis set that simultaneously satisfy good spatial localization properties and symmetry correspondences is part of the general problem of the optimization of any continuous and derivable functional, namely Ω , over a symmetry adapted sub-manifold.⁵

Given a scheme for symmetry-adaption and the functional Ω , a couple of questions arise:

1. is there a symmetry-adapted basis set that also satisfy the optimum conditions for Ω ?
2. if the answer to question 1 is NO, then: what is the best choice of the symmetry adaption scheme (Sec. II) that allows the functional to take a value as close as possible to the optimum?⁶

The construction of the generators that allow to move around the sub-manifold associated to a given symmetry-adapted basis set is developed in Appendix B. It arises that any symmetry-adapted substitution operator, namely \tilde{E}_d , is a linear combination of the basic substitution operators $\tilde{E}_{\nu q_1, \nu q_2}^{\mu p i, g a} = b_{\nu q_1, \nu q_2}^{\mu p i, g a}$, written making use of the second quantization formalism, that span the full manifold,

$$\tilde{E}_d = \sum_{\alpha} A_{\alpha, d} \tilde{E}_{\alpha}, \quad (6)$$

where, for the sake of clarity, the label α is used as a shortcut notation of the set of 10 indices that define a given basic substitution operator in the symmetry adapted basis set.

A unitary transformation generated by an anti-hermitian linear combination of substitution operators⁷ that span the sub-manifold, $\sum_d D_d \tilde{E}_d = \sum_d D_d [\sum_{\alpha} A_{\alpha, d} \tilde{E}_{\alpha}]$, can be written as $\tilde{U} = \exp [\sum_d D_d \tilde{E}_d]$, according to the theory briefly exposed in App. C. Obviously, similar equations appear if considering the basic substitution operators \tilde{E}_{α} , as

⁴ For instance, we are interested in the coset partitions in terms of point subgroups of the space group.

⁵ A localized basis set will be that set of orthonormal functions that optimize a given Ω , taken as a spatial localization measure.

⁶ Obviously this optimization is to be performed over a suitable symmetry-adapted sub-manifold.

⁷ The unitary algebra is composed by Hermitian operators but the argument of the exponential functional is actually anti-hermitian, due to the factor i present in the definition, Eq. (C2).

generators, $\sum_{\alpha} \hat{D}_{\alpha} \hat{E}_{\alpha}$, of the whole manifold in this case. The vectors D_d or \hat{D}_{α} , have correspondences to the unitary transformations and can be considered as displacements along paths that connect points into the manifold.

The optima of Ω in the full and restricted manifolds must fulfill the stationary conditions $\frac{\partial \Omega}{\partial D_d} = 0$ and $\frac{\partial \Omega}{\partial \hat{D}_{\alpha}} = 0$, respectively.⁸ The number of conditions in each case are not in general the same, satisfying $N_r \leq N_f$ for the restricted (r) and the full (f) manifolds, respectively. If $N_f = N_r$ then question 1 has a positive answer, at least for stationary points, and it is possible to find a symmetry-adapted stationary point. Otherwise, a useful criterion to obtain a symmetry-adaption scheme that allows good approximate values for the restricted stationary point will be to choose the scheme that yields the lowest $N_f - N_r$. Obviously, this does not ensure that the restricted and full solutions will coincide but provides a criterion, just based on symmetry considerations, so as to decide which should be the best symmetry-adaption scheme for a given system and functional.

Whenever one considers the problem of what of the possible symmetry-adapted basis sets spanning \mathcal{S} is the best one for symmetry-adapted optimization purposes, the criterion of the lowest difference between the number of independent conditions required by the full and restricted optimizations seems to be suitable. This provides a clear criterion to *a priori* define the symmetry character of the basis set and to perform the optimization (localization) restricted into the resulting sub-manifold.

At this stage, it is worth to provide a general consideration about the present criterion for the symmetry-adaption of the critical points of a given functional. In a similar way as the symmetry-adaption scheme given in sec. II, is a generalization of the usual adaption to irreducible basis sets, the criterion of minimizing the difference $N_f - N_r$ so as to obtain a suitable symmetry-adaption scheme provides a general form of the so-called Wigner theorem, that states all eigenvectors of a given totally symmetric Hermitian operator must belong to irreducible basis sets of the symmetry group. As a matter of fact, the diagonalization of a given Hermitian operator \hat{L} , can be regarded in terms of the variation theory as an optimization of the functional $\Omega_{\text{diag}} = \langle \phi | \hat{L} | \phi \rangle$, under the normalization constraint $\langle \phi | \phi \rangle = 1$. Wigner theorem, becomes a corollary of our weakest symmetry condition: $N_f - N_r = 0$, by considering the minimization of Ω_{diag} .

Given a general subspace into which a suitable SABS is to be constructed, it usually happens that the number of choices that fulfill the condition of minimizing $N_f - N_r$ is large and, therefore, there is in general the problem to find an *a priori* criterion to choose one and only one

symmetry adaption scheme. A suitable way to define the best symmetry-adaption scheme from those that fulfill the previous condition, at least for computational-methodological purposes, arises when considering the concept of maximal equivalence between the basis components. Maximal equivalence means that the asymmetric set $\{|\mu\pi i, 11\rangle\}$, as defined in Sec. II, from which the whole set is generated through Eq. (5), should be as small as possible between all possible choices. In other words, the information of the basis set is, therefore, contained in the lowest number of components. One of the practical consequences of the adoption of maximally equivalent basis sets is that the number of integrals $\beta_{j,ab}$ and μ_{ia} in Eq. (1) to be computed and stored in memory will be very small if the maximal equivalence is combined with maximal localization. Examples of this computational efficiency obtained by the exploitation of equivalences together with spatial localization of the basis functions are the strategies of the CRYSTAL[15-18] and CRYSCOR[3, 10] codes.

IV. THE EXAMPLE OF THE FOSTER-BOYS (FB) FUNCTIONAL

The FB functional has a short form given in terms of the matrix elements of the dipole moment, in the symmetry-adapted basis set this reads

$$\Omega = \sum \langle \mu\pi i, ga | r | \mu\pi i, ga \rangle \cdot \langle \mu\pi i, ga | r | \mu\pi i, ga \rangle, \quad (7)$$

where the sum is performed over all indices.

A unitary transformation generated by a hermitian linear combination of substitution operators $\sum_d D_d (\sum_{\alpha} A_{\alpha d} \hat{E}_{\alpha})$, where d is a general index and $A_{\alpha d}$ is an expansion coefficient, can be written as $\hat{U} = \exp i (\sum_d D_d (\sum_{\alpha} A_{\alpha d} \hat{E}_{\alpha}))$. Considering the exponential form given in Sec. III, the vector D_d , defines the transformation and can be considered as a displacement over the manifold. Accordingly, the gradient component along each direction can be written as

$$\frac{\partial \Omega}{\partial D_d} = 2 \sum \langle \mu\pi i, ga | [(\sum_{\alpha} A_{\alpha d} \hat{E}_{\alpha}), r] | \mu\pi i, ga \rangle \cdot \langle \mu\pi i, ga | r | \mu\pi i, ga \rangle = 0, \quad (8)$$

which must vanish at any stationary point (including optima).

In case the set of non symmetry-adapted substitution operators $\{e_{\nu\mu\eta, \hat{h}\hat{b}}^{\mu\nu, \eta\sigma}\}_{\pm}$ is considered as a basis of the generators algebra, and assuming reality for vectors $\{|\mu\pi i, ga\rangle\}$ and IRREPs, Eq. (8) reduces to

* They are necessary but not sufficient conditions. As a matter of fact they only can ensure that the point is a critical (stationary)

point, but not an optimum.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial [D_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_-} &= 2 \sum \langle \mu' \nu' i', g' a' | [\hat{\mathcal{E}}_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_- \cdot \mathbf{r} | \mu' \nu' i', g' a' \rangle \cdot \langle \mu' \nu' i', g' a' | \mathbf{r} | \mu' \nu' i', g' a' \rangle \\ &= 2 \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle \cdot (\langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \mu \nu i, ga \rangle - \langle \nu qj, hb | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

In order to characterize an optimum, Eqs. (9) must be complemented by another set of conditions that depends on the second derivatives of the functional, for the Foster-Boys scheme these conditions are given by

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial [D_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_-^2} &= \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle^2 - \\ &\quad - \frac{1}{4} (\langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \mu \nu i, ga \rangle - \langle \nu qj, hb | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle)^2 \\ &< 0. \end{aligned} \quad (10)$$

The derivatives with respect to the symmetry-adapted substitution operators $\frac{\partial \Omega}{\partial [D_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_{(\sigma \kappa \lambda)}}$ are given as a linear combination of those in Eq. (9) according to Eqs. (B11) and (B13). As discussed in sec. III, if optimizing over the

whole manifold, the conditions $\frac{\partial \Omega}{\partial [D_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_-} = 0$ must be fulfilled at the optimum, while if the symmetry-adapted sub-manifold is considered, the restricted optimum requires the (generally weaker) conditions $\frac{\partial \Omega}{\partial [D_{\nu qj, hb}^{\mu i, ga}]_{(\sigma \kappa \lambda)}} = 0$.

Let us consider the symmetry relations between the stationary conditions in terms of the symmetry-adapted basis set in the full manifold, given in eq. (9). Let

$$S = S_g^{(\mu)} R_S^{[\nu' g']} [S_g^{(\nu)}]^{-1} = S_h^{(q)} R_S^{[q' h']} [S_h^{(q)}]^{-1},$$

being $R_S^{[\nu' g']}$ and $R_S^{[q' h']}$ univocally defined, the transformed general matrix element of the dipole moment matrix reads

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle &= \langle \mu \nu i, ga | \hat{S}^{-1} \cdot \mathbf{r} \cdot \hat{S} | \nu qj, hb \rangle \\ &= \langle \mu \nu i, ga | \hat{S}_g^{(\mu)} [\hat{R}_S^{[\nu' g']}]^{-1} [\hat{S}_g^{(\nu)}]^{-1} \cdot \mathbf{r} \cdot \hat{S}_h^{(q)} \hat{R}_S^{[q' h']} [\hat{S}_h^{(q)}]^{-1} | \nu qj, hb \rangle \\ &= \sum_{a' b'} D_{a' a}^{(\mu \nu)} (R_S^{[\nu' g']})^* D_{b' b}^{(q)} (R_S^{[q' h']}) \langle \mu \nu i, g' a' | \mathbf{r} | \nu qj, h' b' \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

where \mathbf{S} is the matrix form of $S \in G$ in the cartesian

coordinate space. By taking into account that

$$\begin{aligned} \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle \cdot (\langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \mu \nu i, ga \rangle - \langle \nu qj, hb | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle) &= \\ = [\mathbf{S} \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle] \cdot [\mathbf{S} (\langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \mu \nu i, ga \rangle - \langle \nu qj, hb | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle)] &= \\ = [\mathbf{S} \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle] \cdot (\mathbf{S} \langle \mu \nu i, ga | \mathbf{r} | \mu \nu i, ga \rangle - \mathbf{S} \langle \nu qj, hb | \mathbf{r} | \nu qj, hb \rangle), \end{aligned} \quad (12)$$

and then considering eq. (11), it arises that, except for those particular cases where the matrix forms of the IRREPs $D_{a' a}^{(\mu \nu)} (R_S^{[\nu' g']})$ and $D_{b' b}^{(q)} (R_S^{[q' h']})$ have only one non-null element in columns a' and b' , respectively,

there are no symmetry equivalences between the stationary conditions. Let us split the problem in two different cases: the simplest one correspond to the situations where the representations $\Gamma^{(\mu \nu)}$ and $\Gamma^{(q)}$ are one-

dimensional, then we shall consider the general case.

A. One dimensional $\Gamma^{(\mu p)}$ and $\Gamma^{(\nu q)}$ IRREPs

A given Boys gradient component transforms according to

$$\begin{aligned} & (\mu p i, g 1 | r | \nu q j, h 1) \cdot ((\mu p i, g 1 | r | \mu p i, g 1) - (\nu q j, h 1 | r | \nu q j, h 1)) = \\ & = [\mathbf{S}(\mu p i, g 1 | r | \nu q j, h 1)] \cdot [\mathbf{S}((\mu p i, g 1 | r | \mu p i, g 1) - (\nu q j, h 1 | r | \nu q j, h 1))] \\ & = \rho(\mu p i, g' 1 | r | \nu q j, h' 1) \cdot [((\mu p i, g' 1 | r | \mu p i, g' 1) - (\nu q j, h' 1 | r | \nu q j, h' 1))], \end{aligned} \quad (13)$$

where $\varphi = \chi^{(\mu p)}(R_S^{[g' q]}) \cdot \chi^{(\nu q)}(R_S^{[h' 1]})$ and Eqs. (11) and (12) have been considered. It turns out that the asymmetric conditions have a one-to-one correspondence with the symmetry adapted orthogonal generators, which means that there are stationary solutions with the same symmetry features as the basis set. Nonetheless the number of independent conditions is not in general equal to the number of degrees of freedom because it might occur the Dipole Moment matrix element $(\mu p i, g 1 | r | \nu q j, h 1)$ to vanish due to symmetry if the corresponding direct product representation does not contain the totally symmetric IRREP. In such a case a so-called *infinite degeneracy* holds, which means that there are infinite solutions corresponding to the same value of the functional that are connected to each other by the unconstrained orthogonal transformations.

As all choices of symmetry adaption of this kind give rise to stationary solutions of the functional optimization, the criterion we shall make use to decide which of them is the best localized will be based on the stability conditions given by Eq. (10).

Let us consider two possible choices for symmetry adapted basis sets: a general one that belong to INDREP $\Gamma^{(\nu G, 1|G)}$ and a set of trivial symmetry adapted vectors that are basis of the IRREPs (restricted to the particular case where they are also one-dimensional) that fill the same subspace as the original INDREP, namely $\{(\mu p i, g 1) = |g\rangle\}_g$ and $\{(\alpha G, 1|1) = |\alpha\rangle\}_\alpha$, respectively. For the sake of simplicity, the second notation will be used in what follows.

In accordance with Smitrov and Ewarestov (Ref. 14: eq. (2.3.57) p. 26) the following relation holds

$$\langle g | \alpha \rangle = \chi^{(\alpha)}(S_g)^* \langle 1 | \alpha \rangle. \quad (14)$$

This gives the full matrix form of the unitary transformation connecting both orthonormal basis set. The column $\langle 1 | \alpha \rangle$ has an explicit form in terms of the IRREPs of G and G_p , but it is irrelevant for the present scopes. The vectors $|g\rangle$ can therefore be written in terms of the basis

of the IRREPs,

$$|g\rangle = \sum_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(S_g) \langle 1 | \alpha \rangle |\alpha\rangle. \quad (15)$$

Making use of Eq. (15) one can write the matrix elements of the Dipole Moment, in terms of the INDREP basis set

$$\begin{aligned} \langle g | r | g' \rangle & = \sum_{\alpha \alpha'} \langle g | \alpha \rangle \langle g' | \alpha' \rangle^* \langle \alpha | r | \alpha' \rangle \\ & = \sum_{\alpha \alpha'} \chi^{(\alpha)}(S_g)^* \chi^{(\alpha')} (S_{g'}) \langle 1 | \alpha \rangle \langle 1 | \alpha' \rangle^* \langle \alpha | r | \alpha' \rangle \end{aligned}$$

B. General case

In Appendix D we shall study how, given a symmetry-adapted basis set, one can obtain a maximum number of equivalences by suitably choosing the matrix forms of the representations.

On the other hand, some gradient components must vanish due to their symmetry properties if in the 3 integrals involved in eq. (9) there are no IRREPs of $G_{pq,gh}$ in common.

V. CONCLUSIONS

In these notes a general symmetry-adaption scheme that can be applied to any set and allows equivalences between their components together with spatial localization properties is presented. When applying this scheme to basis sets of vectors spaces, it is shown that a manifold of unitary transformations that keeps the symmetry properties of the set can be constructed which can be used to optimize any functional depending on one-electron states. This is particularly useful in the solid state context, as the optimization scheme in terms of localized-equivalent basis sets allow to convert the infinitely sized variational

problem of the Schrödinger equation of a crystal into a, not only finite, but also rather small computational problem.

Support from mexican CONACYT (project 46983) and a Lagrange Senior Fellowship at the University of Turin from Institute for Science Interchange-CRT Foundation are gratefully acknowledged.

Acknowledgments

The author is indebted to Cesare Pisani and Silvia Casassa for useful suggestions and fruitful discussions.

[1] P. Pula, *Chem. Phys. Lett.* **100**, 151 (1983).
 [2] M. Schütz, G. Herzer, and H.-J. Werner, *J. Chem. Phys.* **111**, 5691 (1999).
 [3] C. Pisani, M. Basso, G. Capocchi, S. Casassa, R. Dovesi, L. Maschio, C. M. Zicovich-Wilson, and M. Schütz, *J. Chem. Phys.* **122**, 094113 (2005).
 [4] W. Kutzelnigg, in *Localization and Delocalization in Chemistry*, edited by O. Chalvet, R. Daudel, S. Diner, and J. P. Malrieu (Reidel, Dordrecht, 1975) vol. 1 of *Atoms and molecules in the ground state*, pp. 143–153.
 [5] S. Diner, J. P. Malrieu, P. Clavare, and F. Jordan, *Chem. Phys. Lett.* **2**, 319 (1968).
 [6] C. M. Zicovich-Wilson, R. Dovesi, and V. R. Saunders, *J. Chem. Phys.* **115**, 9708 (2001).
 [7] N. Marzari and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**(20), 12847 (1997).
 [8] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 191 (1937).
 [9] W. Kohn, *Phys. Rev.* **115**, 809 (1959).
 [10] S. Casassa, C. M. Zicovich-Wilson, and C. Pisani, *Theor. Chem. Acc.* **116**, 726 (2006), on line ed.: <http://dx.doi.org/10.1007/s00214-006-0119-z>.
 [11] V. P. Smirnov, R. A. Evarestov, and D. E. Usvyat, *Int. J. Quantum Chem.* **88**, 642 (2002).
 [12] J. D. Cloizeaux, *Phys. Rev. A* **135**, 685 (1964).
 [13] J. D. Cloizeaux, *Phys. Rev. A* **135**, 698 (1964).
 [14] R. A. Evarestov and V. P. Smirnov, *Site symmetry in crystals: theory and applications*, Solid-state sciences (Springer, Berlin, 1997), second enlarged ed.
 [15] R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalieri, K. Doll, N. M. Harrison, I. J. Bush, et al., *CRYSTAL06 User's Manual* (Università di Torino, 2006), URL <http://www.crystal.unito.it>.
 [16] R. Dovesi, R. Orlando, B. Civalieri, C. Roetti, V. R. Saunders, and C. M. Zicovich-Wilson, *Z. Kristallogr.* **220**, 571 (2005).
 [17] C. Pisani, ed. *Quantum-Mechanical ab initio calculation of the properties of crystalline materials*, vol. 67 of *Lecture notes in chemistry* (Springer, Berlin Heidelberg, 1996).
 [18] C. Pisani, R. Dovesi, and C. Roetti, *Hartree-Fock Ab Initio Treatment of Crystalline Solids*, vol. 48 of *Lecture Notes in Chemistry Series* (Springer-Verlag, Berlin, 1988).

APPENDICES

Appendix A: SYMMETRY EQUIVALENCES BETWEEN DIRECT PRODUCTS OF VECTORS

Given any pair of vectors that belong to classes g and h of left-coset decompositions of G , according to Eq. (2) in terms of subgroups G_p and G_q , respectively, one would like to know whether there is a $S \in G$ that converts the starting pair of vectors to another one that belong to classes g' and h' of the same coset decompositions, respectively

In accordance with eq. (4), a necessary condition for this to occur is that

$$S = S_h^{(g)} R_1 [S_h^{(g)}]^{-1} = S_{g'}^{(p)} R_2 [S_{g'}^{(p)}]^{-1}; \quad R_1 \in G_q, R_2 \in G_p. \quad (A1)$$

It is worth to be noted that, given h and g , the set of cosets representatives under subgroups G_q and G_p , and $S \in G$, h' , g' , R_1 and R_2 become univocally determined by eq. (A1).

In order to obtain the indices g' and h' that fulfill Eq. (A1) for a given S , let us rewrite eq. (2) as

$$G = \sum_{h'} S_{h'}^{(g)} G_q [S_{h'}^{(g)}]^{-1} = \sum_{g'} S_{g'}^{(p)} G_p [S_{g'}^{(p)}]^{-1} \\ = \sum_{h'} S_{h'}^{(g)} [S_{h'}^{(g)}]^{-1} G_{gh} = \sum_{g'} S_{g'}^{(p)} [S_{g'}^{(p)}]^{-1} G_{pg} \quad (A2)$$

where $G_{pg} \equiv S_g^{(p)} G_p [S_g^{(p)}]^{-1}$ and $G_{gh} \equiv S_h^{(g)} G_q [S_h^{(g)}]^{-1}$, are subgroups of G isomorphic with G_p and G_q , respectively. On the other hand, the second row in eq. (A2) indicates that, given (g', h') and S that fulfill Eq. (A1), the set $\{S' = SX, \forall X \in G_{pg,gh}\}$, where $G_{pg,gh}$ is the maximum common subgroup of G_{gh} and G_{pg} , satisfy the same condition with the same indices (g', h') .

It is worth to carry out another left-coset partition of G under subgroup $G_{pg,gh}$, $G = \sum_m S_m^{(pg,gh)} G_{pg,gh}$, and define functions $h' = \hat{h}(m)$ and $g' = \hat{g}(m)$ where (g', h') satisfy condition eq. (A1) for $S \in S_m^{(pg,gh)} G_{pg,gh}$. Considering eq. (A1), we define

$$S_m^{(pg,gh)} = S_{h'}^{(g)} R_{q,m}^{[h'g']} [S_{h'}^{(g)}]^{-1} = S_{g'}^{(p)} R_{p,m}^{[gg']} [S_{g'}^{(p)}]^{-1}, \quad (A3)$$

where $R_{q,m}^{[h'g']}$ and $R_{p,m}^{[gg']}$ are the explicit notations for R_1 and R_2 , respectively, in the present case. According to

Eq. (A3) all pairs that can be generated from (g, h) form an equivalence class (including (g, h) itself) whose cardinal is $|G|/|G_{\mu\nu,gh}|$, the number of cosets upon partition by subgroup $G_{\mu\nu,gh}$.

In case the pairs of vectors are associated to the substitution operators as provided in App. B, it is useful to compute the number of symmetry adapted generators that can be generated from a given one, namely $\hat{b}_{\mu\nu,gh}^\dagger \hat{b}_{\nu\eta,gh}$, upon the symmetrization performed in eq. (B3). As it is stated in footnote 10, the symmetry adapted generator belong to the totally symmetric IRREP and, therefore, the number of degrees of freedom associated to a given substitution operator is the number of times the totally symmetric IRREP appears in the direct product of the representations of each vector $\Gamma^{(\mu\nu,gh)} \otimes \Gamma^{(\nu\eta,gh)}$.

A particular situation arises when both vectors belong to the same IRREP. In such a case there is an additional symmetry operation that involve the permutation of the vectors that in eq. (B3) implies the exchange between the labels of the annihilation and creation operators. The resulting symmetry adapted generators should be either symmetric or antisymmetric, under such a permutation. As it is discussed at the end of App. B, eq. (B13) and footnote 11, the generators are further antihermitized so as to generate an orthogonal transformation and its special unitary partner, which is useful when dealing with real basis sets. This antihermitization involves in fact the (anti)symmetrization with respect to the exchange of the indices of the annihilation/creation parts of the generator. This means that, by decomposing the direct square of the representation to which both vectors belong into symmetric and antisymmetric parts, by looking at the characters according to $\chi^{(\Gamma^{(\mu\nu,gh)} \otimes \Gamma^{(\nu\eta,gh)})_{\pm}}(S) = \frac{1}{2}(\chi^{(\Gamma^{(\mu\nu,gh)} \otimes \Gamma^{(\nu\eta,gh)})}(S)^2 \pm \chi^{(\Gamma^{(\mu\nu,gh)} \otimes \Gamma^{(\nu\eta,gh)})}(S^2))$, and seeking how many times the totally symmetric IRREP is contained in each of these parts, it is possible to know which number of symmetry adapted orthogonal or special unitary generators holds.

Appendix B: SYMMETRY ADAPTED SUBSTITUTION OPERATORS

Each basis vector defined in sec. II has a pair of mutually conjugated creation-annihilation operators associated, namely $(\hat{b}_{\mu\nu,gh}^\dagger, \hat{b}_{\nu\eta,gh})$. The substitution operators, which also are the generators of the unitary transformations into the full manifold (see below), are written in terms of creation-annihilation operators according to $\hat{E}_{\nu\eta,gh}^{\mu\nu,gh} = \hat{b}_{\nu\eta,gh}^\dagger \hat{b}_{\mu\nu,gh}$. The action of these mathematical objects on a given Slater determinant $|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_M\rangle$, where M is the number of electrons and α_i is a shortcut notation for the indices used to label the basis vectors, is provided according to

$$\hat{E}_{\nu\eta,gh}^{\mu\nu,gh} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \dots \alpha_M\rangle = \delta_{\alpha_i} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \dots \alpha_M\rangle. \quad (\text{B1})$$

It is worthwhile noting that the second quantization form of the substitution operator, $\hat{E}_{\alpha_i}^{\nu\eta}$, is independent of the number of electrons M . The mono-substitution operators form a complete basis of the space of one-electron Hermitian operators, therefore any of the latter can be expressed as a linear combination of the former according to

$$\hat{B} = \sum_{\alpha_i, \alpha_j} B_{\alpha_i, \alpha_j} \hat{E}_{\alpha_i}^{\alpha_j}. \quad (\text{B2})$$

where $B_{\alpha_i, \alpha_j} = \langle \alpha_i | \hat{B} | \alpha_j \rangle$ are the one-electron matrix elements of operator \hat{B} .⁹ The powerfulness of the second quantization formalism is that the operators have the same notation irrespective of the number of electrons. This is a very appealing feature, for instance when seeking to represent operators that act on to a Hilbert space of wave-functions of infinite electrons, as it often occurs in the solid state context.

In accordance with the discussion provided in Appendix C and the fact that the substitution operators span the subspace of one-electron Hermitian operators, they (or more exactly their Hermitian components: $(\hat{L}^\dagger + \hat{L})/2$ and $i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2$) provide a basis for the generators of all one-particle Unitary transformations, according to Eq. (C2).

From the geometrical point of view, those operators provide directions in the manifold, in terms of which the gradient vectors of any functional can be expressed (see sec. III and app. C). Adopting the symmetry-adapted sub-manifold as a restriction to the full manifold so as to perform functional optimizations, a set of symmetry-adapted generators can be constructed in the form

$$\hat{E}_{\nu\eta,gh}^{\mu\nu,gh} = \frac{1}{|G|} \sum_{S \in G} \hat{S} \hat{b}_{\mu\nu,gh}^\dagger \hat{b}_{\nu\eta,gh} \hat{S}^{-1}, \quad (\text{B3})$$

whose components are by construction totally symmetric as they commute with all $S \in G$.¹⁰ Any linear combination of symmetrized substitution operators commutes with $S \in G$ and, as shown in App. C [Eq. (C3)], the associated Unitary Transformation also does.

These Unitary Transformations keep invariant all symmetry properties of the symmetry-adapted basis set. This means that, provided

$$\hat{U} = \exp \left[\sum_{\nu\eta,gh} \hat{E}_{\nu\eta,gh}^{\mu\nu,gh} \right]$$

⁹ Equation (B2) allows to obtain the matrix elements of \hat{B} in any basis of Slater determinants, by automatically satisfying the Slater rules by virtue of the well known anti-commutation rules of creation-annihilation operators.

¹⁰ The symmetrized operators are actually projected onto the totally symmetric subspace of one-electron Hermitian operators and $1/|G| \sum_{S \in G} \hat{S} [\dots] \hat{S}^{-1}$ can be regarded as the superoperator form of the projection.

and if $\hat{S}|\mu\pi, ga\rangle = |\mu'p'i', g'a'\rangle$, then $\hat{S}\hat{U}|\mu\pi, ga\rangle = \hat{U}|\mu'p'i', g'a'\rangle$, for all $|\mu\pi, ga\rangle$, which is a consequence of the commutation with the symmetry group operators. According to the discussion given in App. C, the set of these symmetry-adapted unitary transformations allows to carry out any motion over the symmetry-adapted submanifold, as each of them keeps invariant the symmetry relationships that define the symmetry-adapted basis sets (see discussion in sec. II).

On the other hand, following Eq. (B2), the one-electron operator $\hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga}$ can be expressed in terms of the substitution operators using its matrix elements in the one-electron representation as coefficients of the expansion,

$$\hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga} = \sum_{\langle \mu'p'i', g'a' | \hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga} | \mu'q'j', h'b' \rangle} \hat{b}_{\mu'p'i', g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu'q'j', h'b'} \quad (\text{B4})$$

where in the second equality the primed sum is intended to run over all primed indices.

Looking at the matrix elements of $\hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga}$ in Eq. (B4) together with the strict definition of the operator given by Eq. (B3), it immediately arises that, if the three first (primed) indices of the vectors do not match those of the

annihilation operator, the integral does vanish. The same condition must be simultaneously fulfilled by the adjoint vectors and the creation operators, giving rise to

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga} &= \\ &= \frac{1}{|G|} \sum_{S \in G} \hat{b}_{\mu'p'i', g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu'q'j', h'b'} \langle \mu'p'i', g'a' | \hat{S} \hat{b}_{\mu\pi, ga}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, hb} \hat{S}^{-1} | \mu'q'j', h'b' \rangle \\ &= \frac{1}{|G|} \sum_{g'a', h'b'} \hat{b}_{\mu\pi, g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, h'b'} \\ &\quad \sum_{S \in G} \langle \mu\pi, g'a' | \hat{S} \hat{b}_{\mu\pi, ga}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, hb} \hat{S}^{-1} | \nu qj, h'b' \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

In what concerns the terms within the sum in Eq. (B5), they must vanish if $\hat{S}^{-1}|\nu qj, h'b'\rangle$ does not have any component in the direction of $|\nu qj, hb\rangle$, as it would involve the annihilation of an absent state, and similarly in what concerns their adjoints.

According to the previous statement, and adopting the notation defined in Eq. (A3) with $S = S_m^{\nu qj, hb}$, $X \in G_{\nu qj, hb}$, Eq. (B5) is rewritten as

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga} &= \sum_m \sum_{g'h'} \delta_{h'\bar{h}(m)} \delta_{g'\bar{g}(m)} \sum_{a''h''} \sum_{X \in G_{\nu qj, hb}} \hat{b}_{\mu\pi, g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, h'b'} \langle \mu\pi, g'a' | S_m^{\nu qj, hb} \hat{X} \hat{b}_{\mu\pi, ga}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, hb} \hat{X}^{-1} | \nu qj, h'b' \rangle \\ &= \sum_m \sum_{g'h'} \delta_{h'\bar{h}(m)} \delta_{g'\bar{g}(m)} \sum_{a''h''} \hat{b}_{\mu\pi, g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, h'b'} \sum_{X \in G_{\nu qj, hb}} \sum_{a''b''} D_{a''a'}^{(\mu\pi)}(R_{\nu, m}^{g'g'}) \langle \mu\pi, g'a'' | \hat{X} \hat{b}_{\mu\pi, ga}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, hb} \hat{X}^{-1} | \nu qj, h'b'' \rangle D_{b''b'}^{(\nu qj)}(R_{\nu, m}^{h'h'})^* \\ &= \sum_m \sum_{g'h'} \delta_{h'\bar{h}(m)} \delta_{g'\bar{g}(m)} \sum_{a''h''} \hat{b}_{\mu\pi, g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, h'b'} \sum_{X \in G_{\nu qj, hb}} \sum_{a''b''} D_{a''a'}^{(\mu\pi)}(R_{\nu, m}^{g'g'}) D_{a''a'}^{(\mu\pi g)}(X) D_{b''b'}^{(\nu qj)}(R_{\nu, m}^{h'h'})^* D_{b''b'}^{(\nu qj h)}(X)^* \\ &= \sum_m \sum_{g'h'} \sum_{a''b''} \delta_{h'\bar{h}(m)} \delta_{g'\bar{g}(m)} \hat{b}_{\mu\pi, g'a'}^\dagger \hat{b}_{\nu qj, h'b'} \\ &\quad \sum_{a''a'''} D_{a''a'''}^{(\mu\pi)}(R_{\nu, m}^{g'g'}) D_{b''b'''}^{(\nu qj)}(R_{\nu, m}^{h'h'})^* \sum_{X \in G_{\nu qj, hb}} D_{a''a'''}^{(\mu\pi g)}(X) D_{b''b'''}^{(\nu qj h)}(X)^* \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

where $D_{a''a'''}^{(\mu\pi g)}(X) = \langle \mu\pi, ga | \hat{X} | \mu\pi, g'a'' \rangle = \langle \mu\pi, 1a | [\hat{S}_g^{(p)}]^{-1} \hat{X} [\hat{S}_g^{(p)}] | \mu\pi, 1a'' \rangle$, $\forall i$, the third equality derives from Eq. (5) and the last one, from the fact that $\hat{b}_{\nu qj, hb} | \nu qj, h, b' \rangle = \delta_{b'b} | 0 \rangle$.

Equation (B6) provides a more compact form of Eq. (B3). However, in principle other symmetry-adapted substitution operators can be obtained for the same partitions i, j of the μ - and ν -IRREPs of subgroups G_p and G_q , respectively, that depend on what indices g, h, a, b

have been considered for the generating substitution operator. The resulting operators do not form in general a linearly independent set.

For instance, other equations related to (B6) could be found by making a one-to-one correspondence with other partitions of G under subgroups isomorphic with $G_{\nu qj, hb}$, studied in Appendix A. Using these results one is able to write a given symmetry-adapted substitution operator, $\hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga}$, in terms of the set $\{\hat{F}_{\nu qj, hb}^{\mu\pi, ga}\}_{ab}$.

$$\begin{aligned}
\tilde{F}_{\nu qj, h_1 b}^{\mu p i, g_1 a} &= \sum_m \sum_{g' h'} \sum_{a' b'} \delta_{h' h(m)} \delta_{g' g(m)} \hat{b}_{\mu p i, g' a'}^{\dagger} \hat{b}_{\nu q j, h' b'} \sum_{a'' b''} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']})^* \sum_{X' \in G_{p q, q h_1}} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(X') D_{b'' b'}^{(\nu q)}(X')^* \\
&= \sum_m \sum_{g' h'} \sum_{a' b'} \delta_{h' h(m)} \delta_{g' g(m)} \hat{b}_{\mu p i, g' a'}^{\dagger} \hat{b}_{\nu q j, h' b'} \sum_{a'' b''} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}) R_{p, m}^{[g_1 g']} D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']}) R_{q, m}^{[h_1 h']}^* \\
&\quad \sum_{X \in G_{p q, q h_1}} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}^{-1} [S^{(p)}]^{-1} X S_{p, m}^{[g_1 g']} R_{p, m}^{[g_1 g']}) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']}^{-1} [S^{(q)}]^{-1} X S_{q, m}^{[h_1 h']} R_{q, m}^{[h_1 h']})^* \\
&= \sum_m \sum_{g' h'} \sum_{a' b'} \delta_{h' h(m)} \delta_{g' g(m)} \hat{b}_{\mu p i, g' a'}^{\dagger} \hat{b}_{\nu q j, h' b'} \sum_{a'' b''} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']})^* \\
&\quad \sum_{X \in G_{p q, q h_1}} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(X) D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(X) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']})^* \\
&= \sum_{a'' b''} \tilde{F}_{\nu q j, h_1 b}^{\mu p i, g_1 a} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g_1 g']}) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h_1 h']})^*, \tag{B7}
\end{aligned}$$

where eq. (B6) have been considered. Equation (B7) tells us that it is enough to have any set $\{\tilde{F}_{\nu q j, h_1 b}^{\mu p i, g_1 a}\}_{ab}$ so as to generate a family of linearly dependent symmetry-adapted substitution operators whose indices (g_1, h_1) belong to the equivalence class generated by (g_0, h_0) .

Another way to reduce the linear dependencies of the set of symmetry-adapted substitution operators between subspaces $[\mu p i g]$ and $[\nu q j h]$, is by adapting the generators to the IRREPs of $G_{p q, q h}$. This is accomplished by considering an auxiliary basis set for each subspace, $\{|\mu p i, g(\sigma k u)\rangle\}$ and $\{|\nu q j, h(\sigma l v)\rangle\}$, that consists of vectors that are, at time, bases of the IRREPs of $G_{p q, q h}$ with the additional conditions:

$$\langle \mu p i, g(\sigma k u) | \hat{X} | \mu p i, g(\sigma k' v) \rangle = \delta_{kk'} D_{uv}^{(\sigma)}(X)$$

$$\langle \nu q j, h(\sigma l v) | \hat{X} | \nu q j, h(\sigma l' v) \rangle = \delta_{ll'} D_{uv}^{(\sigma)}(X), \tag{B8}$$

$\forall X \in G_{p q, q h}$; where triplets of the form $(\sigma k u)$ denotes the raw u of the k -th appearance of the σ -IRREP of $G_{p q, q h}$.

Let the transformation between both basis sets of subspace $[\mu p i g]$ be given by $\langle \mu p i, g a | = \sum_{\sigma k u} T_{\sigma, \sigma k u}^{[\mu p i g]} \langle \mu p i, g(\sigma k u) |$; the last sum in Eq. (B6) can be rewritten as

$$\begin{aligned}
\sum_{X \in G_{p q, q h}} D_{a'' a'}^{(\mu p)}(X) D_{b'' b'}^{(\nu q)}(X)^* &:: \sum_{\sigma k u} \sum_{\tau l v} T_{\sigma, \sigma k u}^{[\mu p i g]} T_{\tau, \sigma k u}^{[\mu p i g]}^* T_{b'' b'}^{[\nu q j h]} T_{b, \tau l v}^{[\nu q j h]} \sum_{X \in G_{p q, q h}} D_{a'' a'}^{(\sigma)}(X) D_{b'' b'}^{(\tau)}(X)^* \\
&= \sum_{\sigma k u} \sum_{\tau l v} T_{\sigma, \sigma k u}^{[\mu p i g]} T_{\tau, \sigma k u}^{[\mu p i g]}^* T_{b'' b'}^{[\nu q j h]} T_{b, \tau l v}^{[\nu q j h]} \frac{|G_{p q, q h}|}{n_{\sigma}} \delta_{\sigma \tau} \delta_{a'' a'} \delta_{b'' b'} \\
&= \sum_{\sigma k l u v} \frac{|G_{p q, q h}|}{n_{\sigma}} T_{\sigma, \sigma k u}^{[\mu p i g]} T_{\tau, \sigma k u}^{[\mu p i g]}^* T_{b'' b'}^{[\nu q j h]} T_{b, \sigma l v}^{[\nu q j h]}^*, \tag{B9}
\end{aligned}$$

where the orthogonality theorem of the IRREPs of $G_{p q, q h}$ has been used in the second equality.

A linearly independent set of generators is obtained by

applying the previous result to the last sum of Eq. (B5) and carrying out the transformation on indices a and b ,

$$\sum_{S \in G} \langle \mu p i, g' a' | \hat{S} \left(\sum_{ab} T_{a, \tau l' v}^{[\mu p i g]} \hat{b}_{\mu p i, g_1 a}^{\dagger} \hat{b}_{\nu q j, h_1 b} T_{a, \tau l' v}^{[\nu q j h]} \right) \hat{S}^{-1} | \nu q j, h' b' \rangle =$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{ab} \left[\sum_{a''b''} \sum_m \delta_{g',\bar{g}(m)} \delta_{h',\bar{h}(m)} D_{a''a''}^{(\mu p)}(R_{p,m}^{[gg']}) D_{b''b''}^{(\nu q)}(R_{q,m}^{[hh']})^* \times \right. \\
 &\quad \left. \times \sum_{\sigma k l u u''} \frac{|G_{p q,gh}|}{n_\sigma} T_{a'',\sigma k u''}^{[\mu p q]} T_{b'',\sigma l u''}^{[\nu q h]} T_{a'',\tau k' u''}^{[\mu p q]} T_{b'',\tau l' u''}^{[\nu q h]} \right] T_{a'',\tau k' u''}^{[\mu p q]} T_{b'',\tau l' u''}^{[\nu q h]}^* \\
 &= \sum_{a''b''} \sum_m \delta_{g',\bar{g}(m)} \delta_{h',\bar{h}(m)} D_{a''a''}^{(\mu p)}(R_{p,m}^{[gg']}) D_{b''b''}^{(\nu q)}(R_{q,m}^{[hh']})^* \times \sum_{\sigma k l u u''} \frac{|G_{p q,gh}|}{n_\sigma} T_{a'',\sigma k u''}^{[\mu p q]} T_{b'',\sigma l u''}^{[\nu q h]}^* \delta_{\sigma\tau} \delta_{\sigma\tau} \delta_{k k'} \delta_{l l'} \delta_{u u''} \delta_{u u''} \\
 &= \sum_{a''b''} \sum_m \delta_{g',\bar{g}(m)} \delta_{h',\bar{h}(m)} D_{a''a''}^{(\mu p)}(R_{p,m}^{[gg']}) D_{b''b''}^{(\nu q)}(R_{q,m}^{[hh']})^* \times \delta_{u''\tau} \delta_{\tau\tau'} \frac{|G_{p q,gh}|}{n_\tau} \sum_{u''} T_{a''\tau, \tau k' u''}^{[\mu p q]} T_{b''\tau, \tau l' u''}^{[\nu q h]}^* . \quad (B10)
 \end{aligned}$$

where the unitary properties of transformations T have been exploited.

Making use of Eqs. (B3), (B5) and (B10), the symmetry adapted generators read

$$\begin{aligned}
 [\hat{E}_{\nu q j h}^{\mu p q}]^{(\tau k l)} &= \frac{|G_{p q,gh}|}{n_\tau |G|} \sum_{g' a', h' b'} \hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'} \sum_{a'' b''} \sum_{u''} T_{a'', \tau k u''}^{[\mu p q]} T_{b'', \tau l u''}^{[\nu q h]}^* \times \sum_m \delta_{g', \bar{g}(m)} \delta_{h', \bar{h}(m)} D_{a'' a''}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g g']}) D_{b'' b''}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h h']})^* \\
 &= \sum_{g' a', h' b'} [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} \hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'} . \quad (B11)
 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
 [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} &= \frac{|G_{p q,gh}|}{n_\tau |G|} \sum_{a'' b''} \sum_{u''} T_{a'', \tau k u''}^{[\mu p q]} T_{b'', \tau l u''}^{[\nu q h]}^* \times \\
 &\quad \times \sum_m \delta_{g', \bar{g}(m)} \delta_{h', \bar{h}(m)} D_{a'' a''}^{(\mu p)}(R_{p, m}^{[g g']}) D_{b'' b''}^{(\nu q)}(R_{q, m}^{[h h']})^* . \quad (B12)
 \end{aligned}$$

$R_{p, m}^{[hh']}$ = $[S_h^{(q)-1} S_m^{(p q, gh)} S_h^{(q)}]$, $R_{p, m}^{[gg']}$ = $[S_g^{(p)-1} S_m^{(p q, gh)} S_g^{(p)}]$ and $\hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'}$ = $b_{\mu p q, h' b'}^{\mu p q, g' a'}$ are the usual non symmetry adapted generators of the unitary group of transformations over the full manifold, that in principle includes all operations, even those that destroy the symmetry properties of the basis set. On the other hand, operators given by Eq. (B11) generate all transformations of the symmetry adapted sub-manifold that, as discussed previously, is a restriction of the full manifold, in the sense that transformations are effectively applied just on the representatives of the symmetry adapted basis set by keeping unchanged all their symmetry properties as provided by Eqs. (2) and (5).

In order to employ the substitution operators as generators of the set of one-electron unitary transformations,

a further anti-hermitization¹¹ is required giving rise to

$$\begin{aligned}
 [\hat{E}_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{\pm}^{(\tau k l)} &= \sum_{g' a', h' b'} \Re [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} [\hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'}]_{\pm} \\
 &\quad - \sum_{g' a', h' b'} \Im [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} [\hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'}]_{\mp} \\
 [\hat{E}_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{\pm}^{(\tau k l)} &= \sum_{g' a', h' b'} \Re [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} [\hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'}]_{\pm} \\
 &\quad + \sum_{g' a', h' b'} \Im [A_{\nu q j h}^{\mu p q}]_{g' a', h' b'}^{(\tau k l)} [\hat{E}_{\nu q j, h' b'}^{\mu p q, g' a'}]_{\mp} . \quad (B13)
 \end{aligned}$$

where $[\hat{E}_{\nu q j, h b}^{\mu p q, a a}]_{\pm} = \frac{i}{2}(\hat{E}_{\nu q j, h b}^{\mu p q, a a} + \hat{E}_{\mu p q, g a}^{\nu q j, h b})$, $[\hat{E}_{\nu q j, h b}^{\mu p q, g a}]_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{E}_{\nu q j, h b}^{\mu p q, g a} - \hat{E}_{\mu p q, g a}^{\nu q j, h b})$.

¹¹ Exploiting the fact that operator $i\hat{Z}$ is anti-hermitian provided \hat{Z} is hermitian, and vice-versa, the formulation of the Unitary Transformations as exponential functionals of anti-hermitian operators is equivalent to that given in app. C. However, the formulation in terms of anti-hermitian operators is useful for restricting the sub-manifold to real (orthogonal) transformations

Appendix C: HERMITIAN OPERATOR ALGEBRA AND THE GROUP OF THE UNITARY TRANSFORMATIONS

The vector space of one-particle Hermitian operators together with the usual commutation operation, which plays the role of the antisymmetric internal product, give rise to a Lie algebra (the Unitary Algebra) that is associated to the group of all Unitary transformations into the Hilbert space of many-particle wave-functions (the Unitary Group). The connection between the algebra operators and the group of transformations is provided through the definition of the exponential of an operator,

$$\exp \hat{L} = \sum_n \frac{1}{n!} [\hat{L}]^n. \quad (C1)$$

Hence, the operator form of the unitary transformation associated to a Hermitian operator, namely \hat{Z} , is given by

$$\hat{U}_Z = \exp[i\hat{Z}], \quad (C2)$$

where the Hermiticity of \hat{Z} ensures that $\hat{U}_Z^\dagger = \hat{U}_{(-Z)} = \hat{U}_Z^{-1}$ according to the definition of the exponential of operators [Eq. (C1)]. Let \hat{T} to be a given operator that commutes with \hat{Z} , it appears that it will also commute with the associated Unitary transformation, as

$$\begin{aligned} [\hat{Z}, \hat{T}] &= 0 \\ \hat{Z}\hat{T} &= \hat{T}\hat{Z} \\ \hat{T}^{-1}\hat{Z}\hat{T} &= \hat{Z} \\ \exp i [\hat{T}^{-1}\hat{Z}\hat{T}] &= \exp i\hat{Z} \\ \hat{T}^{-1} [\exp i\hat{Z}] \hat{T} &= \exp i\hat{Z} \\ \hat{T}^{-1}\hat{U}_Z\hat{T} &= \hat{U}_Z \rightarrow [\hat{U}_Z, \hat{T}] = 0, \end{aligned} \quad (C3)$$

where Eq. (C1) has been considered in the formulation of the fifth equality.

The set of Unitary Transformations, forming a Lie Group, is also a manifold for which generalized derivatives are always well defined. In accordance with Eq. (C2), a path along the manifold may be given by $\hat{U}_{\epsilon\hat{T}} = \exp i\epsilon\hat{T}$ where ϵ is a scalar parameter, and \hat{T} a Hermitian operator. Let a given operator \hat{Z} to transform along the path as

$$\begin{aligned} \hat{Z}(\epsilon) &= \hat{U}_{\epsilon\hat{T}}^{-1} \hat{Z} \hat{U}_{\epsilon\hat{T}} \\ &= \exp[-i\epsilon\hat{T}] \hat{Z} \exp[i\epsilon\hat{T}] \\ &= \hat{Z} + i\epsilon[\hat{Z}, \hat{T}] + \mathcal{O}(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (C4)$$

where $\hat{Z} = \hat{Z}(0)$ and in the last equality Eq. (C1) is used. It arises from Eq. (C4), that the first directional derivative along the path is given by $\partial\hat{Z}(\epsilon)/\partial\epsilon|_{\epsilon=0} =$

$i[\hat{Z}, \hat{T}]$.¹²

Appendix D: MAXIMIZING EQUIVALENCES BETWEEN THE SET OF PAIRS OF SYMMETRY-ADAPTED VECTORS

In the symmetry adaption scheme discussed in Sec. II the coset representatives adopted in the partition of G by a subgroup G_p , perform equivalences between basis vectors that belong to the same row of an IRREP μ of G_p , while the connection between vectors that belong to different rows is performed by shift operators that are constructed as linear combinations of symmetry operators. This kind of equivalence have a general formal expression in Eq. (5), and is here referred to as *coset equivalence*. The coset equivalence can be straightforwardly extended to objects that form vector spaces spanned by direct products of the symmetry adapted basis set as it is shown in App. A.

Nevertheless, the scheme is not applicable to sets of general objects like, for instance, functionals of vectors. In the latter, the action of a symmetry operator on any functional $F\{|\omega_i\rangle\}$ that depends simultaneously on the set $\{|\omega_i\rangle\}$ of vectors gives rise to another functional according to

$$\hat{S}F\{|\omega_i\rangle\} = F\{\hat{S}|\omega_i\rangle\} \quad (D1)$$

A general set of objects of these kind may not be closed under the full set of symmetry operations $S \in G$, a fact that makes the coset equivalence scheme not to be enough so as to establish symmetry correspondences within the set. For instance, if one constructs a set of objects defined by expressions that involve pairs of symmetry adapted vectors, as in the case of the stationary conditions of the Boys Functional (see Sec. IV) it arises that that the symmetry correspondences of the basis set provided by Eq. (5) do not fully give rise to symmetry equivalences between the conditions.

In several cases it is however possible to extend the symmetry adaption scheme, in such a way that also basis vectors belonging to different rows of an IRREP of the subgroup to display symmetry equivalences, i.e. to be connected to each other through symmetry operations. These are the so-called *row equivalences* which make possible to establish correspondences between non-linear objects, as it is shown in what follows.

Accordingly, a particular choice of the coset representatives and rows of the IRREPs of G_p , that is in principle

¹² This allows to connect the algebra of the operators that generates the Unitary Group, and the algebra of observables under the Poisson brackets that generates the canonical transformations, in the Dirac and Hamilton formalisms of Classical and Quantum Mechanics, respectively, providing a useful and elegant mathematical tool to derive the correspondence principle of Quantum Mechanics.

irrelevant for the coset equivalence, will make a maximum number of vector components of the INDREP basis set to be equivalent to each other by at least one symmetry operation. More explicitly, given two vectors of different row indices (the last one in our notation) $|\mu\pi i, 1a\rangle$ and $|\mu\pi i, 1a_1\rangle$ there should be at least one $R \in G_p$ for which the following condition is to be satisfied,

$$\hat{R}|\mu\pi i, 1a\rangle = D_{a_1 a}^{(\mu\pi)}(R)|\mu\pi i, 1a_1\rangle = \varepsilon|\mu\pi i, 1a_1\rangle, \quad (\text{D2})$$

what means that the matrix form of \hat{R} in the μ -IRREP of G_p displays zeros in column a , except for the a_1 -th row where it takes a non-null value, ε (always a root of the unity). Obviously, the product of such an operation with the coset representatives $S_p R S_p^{-1}$, allows to obtain vector $|\mu\pi i, a_1'\rangle$ from $|\mu\pi i, ga\rangle$.

In order to extend the previous scheme to pairs of vectors (which is actually what is needed when seeking for equivalences between complex objects like the Foster-Boys conditions) one should take care that the choices of the coset representatives and IRREP rows to be performed so as the same symmetry operation gives rise to correspondences in all INDREPs or, at least, in the most as possible of them.

This kind of pair equivalence is trivially fulfilled when the μ -th and ν -th IRREPs of subgroups G_p and G_q , respectively, of a given pair of symmetry adapted vectors are one-dimensional. Symmetry equivalences in eq. (12) are thus completely dominated by coset partition correspondences.

Otherwise, we can in principle impose a stronger condition to the basis set of a given INDREP, which is based on additional coset decompositions of subgroup G_p in terms of its subgroups $G_{p_2} \subset G_{p_1} \subset G_p$, where the representation subduced by the μ -th IRREP of G_p onto G_{p_2} , $\beta = \Gamma^{(\mu G_p | G_{p_2})}$, must be a one-dimensional IRREP of the latter and the partition $G_{p_1} = \sum_c R_c^{(\nu_2)} G_{p_2}$ must display a number of cosets less than the dimension of IRREP μ . Under such conditions, a vector $|\mu\pi i, g1\rangle$ belonging to the μ -th IRREP of G_{p_2} envisages equivalences in the manner of eq. (D2) for all operations $R \in G_{p_1}$, provided that

$$\begin{aligned} \hat{R}|\mu\pi i, g1\rangle &= \sum_b D_{b1}^{(\mu\pi)}(R)|\mu\pi i, gb\rangle \\ &= \sum_b D_{b1}^{(\mu\pi)}(R_c^{(\nu_2)} X)|\mu\pi i, gb\rangle, \quad (X \in G_{p_2}) \\ &= \sum_{b'c'} D_{b'c'}^{(\mu\pi)}(R_c^{(\nu_2)}) D_{b'1}^{(\mu\pi)}(X)|\mu\pi i, gb\rangle \\ &= \chi^{(\beta\nu_2)}(X)|\mu\pi i, gc\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D3})$$

where $D_{b'1}^{(\mu\pi)}(X) = \delta_{b'1} \chi^{(\beta\nu_2)}(X)$ and $D_{b1}^{(\mu\pi)}(R_c^{(\nu_2)}) = \delta_{cb}$.

Keeping the previous considerations in mind and given a pair of symmetry adapted vectors, namely $|\mu\pi i, 11\rangle$ and $|\nu q j, 11\rangle$, that belong to different INDREPs and have been chosen so as to belong to IRREPs β and γ of subgroups G_{p_2} and G_{q_2} , respectively, they transform under an arbitrary operation $S \in G$ according to

$$\hat{S}|\mu\pi i, 11\rangle = \hat{S}_y^{(\mu)} \hat{R}_S^{(\mu)} |\mu\pi i, 11\rangle, \quad (R_S^{(\mu)} \in G_p)$$

$$\begin{aligned} &= \hat{R}_S^{(\mu)} |\mu\pi i, g1\rangle \\ &= |\hat{R}_S^{(\mu)}|_m^{(\mu)} \hat{R}_S^{(\mu)} |\mu\pi i, g1\rangle, \\ &(G_p = \sum_m \{R_S^{(\mu)}\}_m^{(\mu)} G_{p_1}, R_S^{(\mu)} \in G_{p_1}) \\ &= |\hat{R}_S^{(\mu)}|_m^{(\mu)} \chi^{(\mu G_p | G_{p_2})}(X_S^{(\mu)}) |\mu\pi i, gc\rangle, \\ &(R_S^{(\mu)} = \{R_S^{(\mu)}\}_c^{(\mu)} X_S^{(\mu)}) \\ &= \hat{S}_y^{(\nu)} \hat{R}_S^{(\nu)} |_m^{(\nu)} \chi^{(\nu G_q | G_{q_2})}(X_S^{(\nu)}) |\nu q j, 1c\rangle \end{aligned} \quad (\text{D4})$$

$$\hat{S}|\nu q j, 11\rangle = \hat{S}_h^{(\nu)} \hat{R}_S^{(\nu)} |_m^{(\nu)} \chi^{(\nu G_q | G_{q_2})}(X_S^{(\nu)}) |\nu q j, 1d\rangle, \quad (\text{D5})$$

where for the sake of clarity we use a shorthand notation as c depends on the choice of S , and Eq. (D5) results from a develop equivalent to that shown for Eq. (D4). Making use of the relative freedom in the choice of the coset representatives, one can reset $S_y^{(\mu)} \rightarrow S_y [R_S^{(\mu)}]$ and $S_h^{(\nu)} \rightarrow S_h [R_S^{(\nu)}]$ leading to the following expressions for the pair equivalence

$$\begin{aligned} \hat{S}|\mu\pi i, 11\rangle &= \chi^{(\mu G_p | G_{p_2})}(X_S^{(\mu)}) |\mu\pi i, gc\rangle \\ \hat{S}|\nu q j, 11\rangle &= \chi^{(\nu G_q | G_{q_2})}(X_S^{(\nu)}) |\nu q j, hd\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D6})$$

Though for a given pair there are several choices of the coset representatives that give rise to Eq. (D6), this is not in general so if considering all possible pairs of vectors of a given symmetry adapted basis set, as a given choice of the representative suitable to make equivalence between two pairs may not be appropriate when including a third one. This is because it is not in general possible to make a one-to-one correspondence between the cosets of different INDREPs as the number of partitions depends on the choice of the subgroup in each case. In most cases a suitable way to build a symmetry adapted basis set with a maximum number of row equivalences would be to adopt a tree scheme in which the coset representatives of a given INDREP are chosen so as to correspond to the choice performed in the INDREPs generated by subgroups of higher dimension. Accordingly, one can start from the INDREP with the subgroup of highest dimension (being the number of coset equal to $|G|/|G_p|$) setting arbitrarily the coset representatives, the remaining basis of the INDREPs can be constructed in the order of decreasing the subgroup dimension so as to be consistent with the choices of the previous INDREPs.

It is not in general guaranteed that one can find equivalences between all basis set members. Nevertheless the possibilities are quite limited when dealing with space groups and constraining the subgroup choice into the set of point subgroups. In that case, the dimension of the IRREPs of those subgroups must be less or equal than three.

Let us now analyze what kind of equivalences could be obtained within the INDREP basis set when the IRREP of subgroup G_p is two dimensional. According to Eq. (D2), it is enough to find the operators of G_p that

perform transformations between the components of the IRREP basis set. The symmetry elements of the operators able to perform this substitution can be easily obtained by considering a model of the euclidean two-dimension space, accordingly they are: a plane perpendicular to that containing the two basis set vectors that bisects the angle between them, a C_2 axis on the plane containing the vectors and in the same position as the previously described plane and a C_4 (and also S_4) axis perpendicular to the plane containing the vectors. The other possible operations either provides a mixture of basis vectors upon operation over a given component, or leave invariant a given set of vectors.

In three-dimensional IRREPs the set of possible symmetry operations that work as in Eq. (D2) contains all the ones described for the two-dimensional case, with the addition of those related to three-fold axes along the largest diagonals of a cube whose edges are parallel to the three basis set components, and one of its angles coincides with the origin.

Conferencias invitadas

Dynamics and Thermodynamics of Nanoclusters

Karo Michaelian⁽¹⁾ and Iván Santamaría-Holek⁽²⁾

(1) Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Post. 20-364, México D.F., 01000 México. Email: karo@fisica.unam.mx

(2) Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., 04510 México.

The dynamics and thermodynamic properties of nanoclusters are studied in two different environments; the canonical and microcanonical ensembles. Comparison is made to thermodynamic properties of the bulk. It is shown that consistent and reproducible results on nanoclusters can only be obtained in the canonical ensemble. Nanoclusters in the microcanonical ensemble are trapped systems and inconsistencies will be found in the formalism if thermodynamics is applied. An analytical model is given for the energy dependence of the phase space volume of nanoclusters which allows the prediction of dynamical and thermodynamical properties.

Los propiedades dinámicas y termodinámicas de nanocumulos están estudiados en dos ambientes diferentes; en el ensamble canónico y el microcanónico. Se hacen comparación con las propiedades termodinámicas del bulto. Es mostrado que resultados consistentes y reproducibles en nanocumulos solo puedan ser obtenidos en el ensamble canónico. Nanocumulos en el ensamble microcanónico son sistemas atrapados y si el formalismo de termodinámica de equilibrio está aplicado, inconsistencias resultaran. Un modelo analítico está presentado para la dependencia en energía del volumen en espacio fase de los nanocumulos que permite predecir propiedades dinámicas y termodinámicas.

PACS numbers: 36.40.Ei, 36.40.Mr, 36.40.-c

I. Introduction

Nanoclusters are small finite systems consisting of from several atoms to several thousands of atoms. These systems are interesting because their physical characteristics are strongly size dependent. Often changing the size by only one atom can alter significantly the physical properties of the system. Many new periodic tables can thus be envisioned in which different sized clusters become the new elements. Potential applications are enormous, ranging from devices in nano-electronics and nano-optics (Andres et al., 1996) to applications in medicine and materials. A revolution in technology based on nanoclusters is at the point of fruition, predicted to be on a scale as large, or larger, than the industrial or digital revolutions. However, before the engineering designs can be contemplated, complete physical characterization of nanoclusters is needed. Of particular importance is the understanding of the dynamic and thermodynamic behavior of these systems in different environments.

The present article studies the dynamics and thermodynamics of nanoclusters in two different environments, the microcanonical and canonical ensembles. It will become clear that the choice of the environment, or ensemble, in which the thermodynamic properties of the nanocluster are to be determined is crucial since they generally lead to different results. This is because in the microcanonical ensemble, nanoclusters inevitably

become trapped at low energy in only a sub-region of the energetically available phase space and so the system never arrives at a true thermodynamic equilibrium. Consistent *thermodynamic* results cannot be expected and any results so obtained will depend on initial conditions or subsequent perturbation. However, under some circumstances, and under the premise that the initial conditions can be ascertained, *dynamical* information obtained in the microcanonical ensemble may be useful in describing the behavior of nanoclusters in a given practical application.

The canonical ensemble is more suited to obtaining reproducible thermodynamic information which is independent of initial condition or subsequent perturbation. This is because in the canonical ensemble, the nanoclusters environment is a thermal reservoir which allows exchange of energy, permitting the cluster to pass energy barriers and thereby visit all of available phase space. However, even in the canonical ensemble caution must be exercised before assuming thermodynamic equilibrium. Energy barriers between different isomeric forms (between solid–solid, or between solid and mixed solid–liquid) of the nanocluster can be very high but must be frequently surmounted if the system is to reach true thermodynamic equilibrium. Equilibration times may be impractically large for many experimental or simulation situations.

Applying equilibrium thermodynamic formalism to a system trapped out of equilibrium will lead to inconsistencies and paradoxes in the formalism (Callen, 1985). This has been the history of nanocluster research since its beginnings. Principle among these inconsistencies in the formalism has been the reporting of so called "negative heat capacity" and the presumption of the thermodynamic validity of the results obtained in the microcanonical ensemble. This has led some to the surprising implicit conclusion that there are two thermodynamics for small systems (Lynden-Bell and Lynden-Bell, 1977; Wales and Berry, 1994). However, we have emphasized before that nanoclusters in the microcanonical ensemble are not in equilibrium and therefore it is incorrect to apply the equilibrium thermodynamic formalism to such systems (Michaelian and Santamaria-Holek, 2007). An important conclusion of this work is that since all macroscopic results obtained on systems trapped out of equilibrium will depend on the initial conditions (which for nanoclusters still cannot be adequately controlled in the laboratory) or on subsequent perturbation, *all published results on nanoclusters should be carefully re-examined.*

The focus for our study of the thermodynamic properties of nanoclusters will be the caloric curve, and thus we first describe the anatomy of this curve in detail in section II. In section III we emphasize the differences to be expected in this curve between that obtained on material in the bulk and that obtained on nanoclusters. In section IV we mention the frequent errors and caveats normally entertained by the unwary analyst of the thermodynamics of nanoclusters. In section V we present a simple model for obtaining the energy dependence of the density of states of a nanocluster in thermodynamic equilibrium. This density of states can only be obtained in the canonical (or macrocanonical) ensemble since trapping is inevitable (if energy barriers between isomeric forms are non-zero) in the microcanonical ensemble. In the same section we consider a modification of our model that allows us to include energy barriers and thus simulate what would be expected in the microcanonical ensemble for particular initial conditions. This allows initial condition dependent dynamical information to be obtained. Comparison is then made of our results with caloric curves and heat capacities obtained using molecular dynamics at constant energy (the microcanonical ensemble). Section VI presents our conclusions.

II. The Anatomy of a Caloric Curve

The caloric curve is the graph of the temperature of a system as a function of its internal energy. The temperature is defined as the inverse of the partial derivative of the entropy with respect to energy at

constant particle number and constant volume; $T = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}^{-1}$. It is thus an inverse

measure of how fast the entropy is increasing with respect to the energy; if the entropy increases slowly with energy, the temperature is high, and vice versa. At the melting energy, the caloric curve demonstrates an inflection which is due to the sudden increase in the number of modes for storing energy in the cluster as the cluster becomes liquid (atoms in the liquid can carry translational kinetic energy related to their diffusion within the volume). Figure 1 shows a typical caloric curve for a nanocluster demonstrating a phase transition at an energy of 7.5 eV.

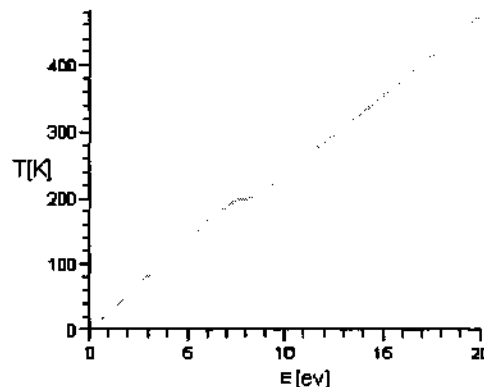


Figure 1. Example of a caloric curve, for a nanocluster.

The heat capacity is the inverse slope of the caloric curve, $C_{V,N} = \left(\frac{\partial T}{\partial E} \right)_{V,N}^{-1}$, and is thus an inverse

measure of how fast the temperature is changing with energy; if the temperature increases slowly with energy, the heat capacity is high, and vice versa. The slope of the caloric curve before the transition, when the cluster is solid, is given by the Dulong-Petit law. For a cluster of N atoms which is neither rotating nor translating (angular and linear momentum fixed at zero), there are only $3N - 6$ normal vibrational degrees of freedom. Each vibrational degree of freedom contributes two modes for storing energy; one in the kinetic energy associated with vibration, and one in the potential energy (these are the two quadratic terms that enter the Hamiltonian for the solid). Each of these contributes $1/2 k_B$ to the heat capacity (assuming that the energy is high enough to excite all vibrational modes). The heat capacity of the solid is

thus $(3N - 6)k_B$, the Dulong-Petit law, and the slope before the transition (where the system is solid) is therefore $1/(3N - 6)k_B$. This slope before the transition is the practically the same for both the nanocluster and for the bulk. Note that the slope of the caloric curve before the transition is also the same for whatever symmetry the cluster or bulk may be in. This is simply because there are always only $3N - 6$ vibrational degrees of freedom. The energy intercept of the caloric curve can be different however, depending on the binding energy of the particular symmetry.

Approaching in energy from below the solid-to-liquid transition, the slope of the caloric curve for a nanocluster decreases (the heat capacity increases) because new modes for storing energy come into play. These modes are related to the fact that the surface atoms are now relatively free to move over the surface of the underlying solid structure and thus can carry energy in their translation modes on the 2-dimensional surface of the structure. The $3N - 6$ vibrational degrees of freedom remain even though they take on a lower frequency and become anharmonic. Each of these new translational modes contributes a further $1/2k_B$ to the heat capacity and thus the heat capacity increases as $(3N - 6 + i)k_B$ where i is the number of atoms in the liquid (the cluster may be mixed solid and liquid).

The heat capacity can also be written in terms of the entropy as the second partial derivative of the entropy with respect to energy divided by the rate of change of entropy with energy (at constant volume and particle number),

$$C_{V,N}(E) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right)_{V,N} / \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}. \quad (1)$$

It is also possible to write the heat capacity in terms of the phase space volume (or density of states) $\Gamma(E)$ using Eq. (1) and the Boltzmann equation, $S(E) = k_B \ln \Gamma(E)$. This gives,

$$C_{V,N}(E) = \left[1 - \frac{\Gamma(E)\Gamma'(E)}{\Gamma'(E)^2} \right]^{-1}. \quad (2)$$

The heat capacity thus depends not only on the phase space volume Γ , but also on its first and second derivatives with respect to energy, $\Gamma' \equiv \partial \Gamma / \partial E$ and $\Gamma'' \equiv \partial^2 \Gamma / \partial E^2$ (at constant V and N).

From equation (2), we note that for the heat capacity to go negative, it is required that $\Gamma \Gamma'' / \Gamma'^2 > 1$. Such a change in the phase space volume will be

referred to as “abrupt” in the following. Borrowing from the language of cosmology, one could say that the heat capacity goes negative when the phase space *inflation*, defined as $\Gamma \Gamma'' / \Gamma'^2$, becomes greater than unity. It can be ascertained that this will happen only if the phase space volume Γ increases faster than exponentially with energy (Michaelian and Santamaría-Holek, 2007).

III. Bulk versus Nanocluster Thermodynamics

The microstates contributing to the thermodynamics of bulk material (containing over 10^{23} atoms) are overwhelmingly determined by the atoms of the volume. Except for particular processes, such as, for example, the initiation of melting, surface atoms play very little part in the thermodynamics, simply because there are too few surface atoms as compared to the vast amount of atoms of the bulk. Although a given bulk material may have a number of possible symmetries (eg. fcc, bcc, hcp, etc.) these symmetries are separated from one another in state space by very large energy barriers that can only be surmounted at the melting temperature (the phase transition). At the energy of melting for the bulk, in the microcanonical ensemble, all symmetries become simultaneously accessible and the phase space increases instantaneously leading to a singularity in the caloric curve which takes the form of a delta function. This leads to a discrete increase in the entropy and is the description of a first order phase transition.

Below the transition energy, all bulk materials cannot be in true thermodynamic equilibrium because there exists other symmetries corresponding to phase space regions that are never sampled. However, for all practical purposes, before the transition, the bulk can be considered as having obtained thermodynamic equilibrium while existing in only one particular symmetry. This is because other symmetries, under normal circumstances, can almost never be accessed because of the large energy barriers between symmetries, and thus the corresponding microstates can be effectively neglected within the thermodynamic formalism. After the melting singularity, all these bulk symmetries and many more, come into play simultaneously. Different symmetries of the same material are named differently (eg. graphite and diamond) and the caloric curve and other thermodynamic results for a given symmetry are always reproducible because the initial condition is easily determined.

The thermodynamics of nanoclusters is different from that of the bulk precisely because the number of surface atoms is greater than, or of the order of, the number of volume atoms. The surface atoms have lower coordination (fewer nearest neighbors) and are thus less bound to the rest of the cluster by the potential. This fact, coupled with the finite size of the system, often implies that the different symmetries available to the cluster are separated from each other by barriers that can be below the melting energy. Solid to solid transitions are thus allowed before the melting transition.

The finite size of the system also means that new, additional, symmetries (for example, the icosahedra and decahedral) are allowed for the nanocluster while they are strictly forbidden for the bulk. Also, because nanoclusters are very small systems, thermodynamic averages (macroscopic results) imply that measurement must be made on an ensemble of identical systems. It is currently impossible experimentally to be able to control the initial conditions and so the distributions of the clusters among their many different allowed symmetries will depend very much on the non-equilibrium process used to form them.

Since it is not possible to control initial conditions, and furthermore since each member of the ensemble can change symmetry even before the transition energy, the only way to obtain useful (reproducible) information concerning the behavior of nanoclusters is to assure that one has a truly thermodynamic equilibrium distribution over all symmetries at all energies. This, because of trapping by barriers, can only be obtained by employing a canonical ensemble in which energy can be utilized from the thermal reservoir to surmount the barriers.

Thus, for a nanocluster, the different symmetries come into play at energies below the transition, and this is due to the surface atoms being less tightly bound. The phase space volume of a cluster thus increases more gradually near the transition than does that of the bulk and there exists no singularity but rather an extended region in energy over which the heat capacity gradually increases as the system gains new modes for storing energy. These modes for storing energy are related to the fact that the atoms in the liquid are no longer constrained to particular symmetries but are relatively free to pass over barriers and so can carry kinetic energy of diffusion over the 2-dimensional surface of the underlying solid part of the cluster.

However, it is not always true that the energy barriers between different symmetries are below the solid to liquid transition energy. In figure 2 we show that the energy barriers (blue or dashed lines) between the icosahedral (red or dark grey) and

decahedral (green or light grey) isomers for the nanocluster Na_{147} are large and in fact reach up to the energy (≈ 7.8 eV) of the transition region. Note, however, that in a truly equilibrium distribution, the microstates corresponding to the decahedral isomers should be accounted for at an energy of ≈ 0.8 eV, which is well below the transition energy of ≈ 7.8 eV.

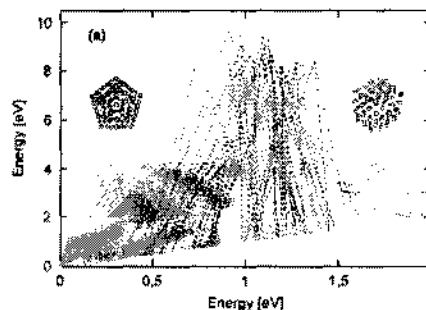


Figure 2: Plot showing the heights of the energy barriers (blue or dashed lines) between various isomers of the icosahedral (red or dark grey) and decahedral (green or light grey) isomers of Na_{147} . The red (dark grey) lines mark the energy barriers between different isomers of icosahedral symmetry while the green (light grey) lines mark the energy barriers between different isomers of decahedral symmetry. Data were obtained using a genetic algorithm to search the Gupta potential energy surface. Details are given in reference (Michaelian, 2003).

IV. Frequent Caveats encountered in the Analysis of the Thermodynamics of Nanoclusters

As mentioned above, the fact that clusters can become easily trapped in different symmetries, that this trapping is a function of energy, and that initial conditions cannot be adequately controlled, has led to the publication of many unfortunate and false conclusions concerning the thermodynamic properties of nanoclusters. The errors related to these frequently encountered caveats will be discussed here because their clarification leads to a better understanding of the thermodynamics and because it is important correct historical errors which have become folklore within the nanocluster community.

The energy barriers between different isomers of the same symmetry are usually small while those between isomers of different symmetry are large and often reach into the transition region (see Fig. 2). For sufficiently low energy in the microcanonical ensemble each cluster of the ensemble, just as in the case for the bulk, is trapped in one particular symmetry, which depends, of course, on its initial condition. However, unlike in the case of the bulk, the cluster may leave the particular symmetry before

reaching the transition energy. As a specific example, figure 3 demonstrates this untrapping of isomers before the transition for LJ₇. The figure shows the “caloric curves” obtained in the microcanonical ensemble (at constant energy) by starting from the four different isomers of LJ₇, whose geometry is shown in the inset of the figure. From the figure it can be ascertained that below an energy of 1.5 in units of ϵ (ϵ is the depth of the potential well for binary interaction) the cluster is trapped in the particular isomer defined by its initial condition and there are 4 distinct caloric curves, each corresponding to a different initial condition or isomer. Untrapping occurs at 1.5ϵ which is considerably lower than the transition energy of 3.5ϵ .

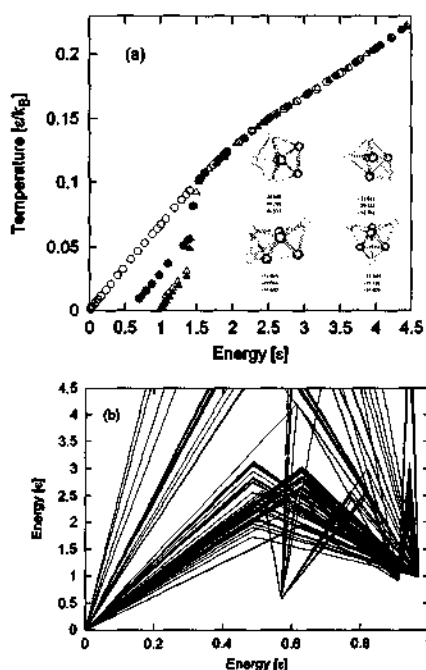


Figure 3: (a) Four different caloric curves are obtained for LJ₇ by starting constant energy molecular dynamics simulations in the different isomers shown in the inset. This dependence on initial condition highlights the unavoidable trapping in the microcanonical ensemble. (b) Energy barriers between the different isomers obtained through a genetic algorithm search on the potential energy landscape, described in (Michaelian et al., 2003). The barriers found in (b), the lowest at 1.5ϵ , are in agreement with the results obtained in (a).

For larger sized clusters, the energy barriers between the different symmetries become higher and move closer in energy to the transition region. For larger systems, there is also the possibility of new microstates corresponding to part of the cluster in the solid phase and part of the same cluster in the liquid phase (referred to as *phase separation* in the

literature). These states may include one, two, three, etc. up to all N atoms in the liquid.

It has often been assumed that these mixed solid-liquid states do not contribute to the thermodynamics below the transition energy, as it was argued that an energy cost of a presumed interface between the solid and liquid had to be paid (Wales, 1995). The nature of the interface, however, was never explained nor even questioned. Apparent support for this hypothesis was claimed in the fact that only rarely were mixed solid liquid states found in Monte Carlo and Molecular Dynamics simulations of clusters. The true reason for not finding these states, however, is related to their high energy barriers and not to a supposedly high energy for these states due to the existence of a hypothetical interface. The unimportance of these mixed states to the thermodynamics gradually became academic folklore without ever being seriously challenged or tested.

The heights of the energy barriers separating these mixed solid-liquid states from the solid states depend not only on how many atoms are in the liquid but also on the nature of the symmetry of the underlying solid structure. For a large enough nanocluster in the microcanonical ensemble, these mixed solid-liquid states will be hidden from the simulation or experiment until surmounting their particular energy barriers. For the case of the magic number clusters (corresponding to closed geometry shells of a given symmetry) the barriers separating the mixed states from the solid states may be higher than the barrier between the all solid and all liquid states (even though the mixed states are *available* but not *accessible* at a significantly lower energy than the all liquid states). Therefore, in the microcanonical ensemble increasing the energy of the cluster may lead to a direct jump from the all solid (or nearly all solid) to the all liquid (or nearly all liquid) states. In this case the measured phase space inflation may become so large that the apparent heat capacity, as determined by equation (2), may become negative. We emphasize, however, that what is being measured is not a true heat capacity since the system is not in thermodynamic equilibrium in the microcanonical ensemble because of trapping. The mixed solid-liquid states are hidden by the large energy barriers but must be accounted for in an equilibrium calculation. Exactly how all this comes about and leads to the determination of “negative heat capacity” will be made clear in section V with the help of our model for the energy dependence of the phase space volume of a cluster.

A further inconsistency resulting from ignoring the mixed solid-liquid states, and thus incorrectly assuming thermodynamic equilibrium, is the difference in results obtained in the microcanonical

and canonical ensembles. Although the ensemble defines the different environment, it should not affect the sought after thermodynamic properties of the system under consideration. There is only one thermodynamic equilibrium state and this state must be determined identically and independently of the ensemble used. Unfortunately, this basic fact was overlooked and the inconsistencies obtained, such as negative heat capacity, are often considered as exotic thermodynamic attributes of these novel systems (Schmidt et al., 2001, Helmer, 2001).

V. Model for the Phase Space Volume of a Nanocluster

We seek an analytical model that can accurately describe the true thermodynamics of nanoclusters. Preferably, such a model should allow for the introduction of energy barriers between different microstates of the system in such a way that we may also use the model to describe the spectrum of dynamical behavior that would be observed for a trapped nanocluster in the microcanonical ensemble. Furthermore, we would like our model to be valid over a useful range of energies, including the phase transition from solid to liquid.

We begin by considering the possible microstates available to a nanocluster assuming only two phases, the solid and liquid. We seek the energy dependence of the phase space volume $\Gamma(E)$ for an ensemble of clusters in thermodynamic equilibrium. In practice, this could be obtained from the energy probability density $\rho(E, T_0)$ of a canonical ensemble of clusters in true thermodynamic equilibrium at temperature T_0 ; $\Gamma(E) = \rho(E, T_0) Z \exp(E/k_B T_0)$, (3) with Z the partition function. At any temperature T_0 , for each member of the ensemble, there may be one, two, three, etc, up to N (N = number of atoms in the cluster) atoms in the liquid. Each of these possibilities contributes to $\rho(E, T_0)$ and thus to $\Gamma(E)$. Every one of these possibilities is a microstate that must be counted, weighted (in the canonical ensemble the microstates have different probability (Callen, 1985), and averaged over in the determination of the thermodynamics.

An alternative but equivalent and more straightforward procedure is to assume no energy barriers and develop the phase space volume in the microcanonical ensemble. We have presented this procedure in detail in another publication (Michaelian and Santamaría-Holek, 2007) so here we only give a summary of the procedure. We

construct a model for the phase space volume of a nanocluster, including the change at the solid to liquid transition, by considering the contribution to the total phase space of each partial volume Γ_i constituted by i particles in the liquid phase in interaction with $N-i$ particles in the solid phase: $\Gamma_i(E) = (N!/(N-i)!i!) \Gamma_i^l(E) \Gamma_{N-i}^s(E)$, (4)

where $\Gamma_i^l(E)$ and $\Gamma_{N-i}^s(E)$ are the liquid and solid phase space volumes. The combinatory factor gives the number of ways to distribute i particles from N identical particles between the liquid and solid phases. The total phase space volume is then obtained by summing over all possible partial volumes constituting all distributions of particles among the solid and liquid: $\Gamma(E) = \sum_{i=0}^N \Gamma_i(E)$. Note that, the microcanonical ensemble imposes no restrictions on how the energy E is distributed over the system.

The phase space volume for a classical system increases as a power law in the energy, where the power exponent is equal to one half the number of quadratic terms which enter the Hamiltonian for the system.

Thus, a simple model of the energy dependence of the phase space volume, which includes the change in the number of degrees of freedom upon melting, for a cluster of N atoms (with total momentum and total angular momentum fixed at zero) is,

$$\Gamma(E) = c \sum_{i=0}^N \frac{N!}{(N-i)!i!} \left(\frac{E}{E^*}\right)^{6(N-i)/2-6} \left(\frac{E}{E^*}\right)^{(6+i)/2} \quad (5)$$

where c is a constant and E^* is the characteristic energy of the solid to liquid transition. In the harmonic approximation, E^* can be taken as the geometric mean of the normal mode vibrational frequencies ν_i of the

solid, $E^* \approx \left(\prod_{i=1}^{3N-6} \nu_i\right)^{1/(3N-6)}$. The first energy factor in Eq. (5) corresponds to contributions to the phase space volume due to the solid part of the cluster while the second corresponds to contributions due to the liquid part, with the extra λ modes for storing energy per atom. As mentioned above, for a cluster there are nominally $\lambda = 2$ new modes related to the translational energy of the atoms moving over a 2-dimensional surface. The different values of i correspond to the different grades of melting; for $i = 0$ the cluster is all solid, for $i = N$ the cluster is all liquid, for $i = N/2$ half the atoms are in the solid part and half are in the liquid part of the cluster.

Since the thermodynamics is independent of an arbitrary constant multiplying the phase space volume (only changes in entropy are important), equation (5) may be rewritten in the more condensed form,

$$\Gamma(E) = d \sum_{i=0}^N \frac{1}{(N-i)!i!} \left(\frac{E}{E^*}\right)^{3N+i-6} \quad (6)$$

Given this density of states, it is then straightforward to calculate the thermodynamics of the system using the Boltzmann equation,

$S(E) = k_B \ln \Gamma(E)$. The temperature is then given by,

$$T(E) = \left(\frac{\partial S(E)}{\partial E} \right)_{V,N}^{-1}$$

and the *specific heat* (heat capacity per atom) by

$$C_{V,N}(E) = \frac{1}{N} \left[1 - \frac{\Gamma(E)\Gamma''(E)}{\Gamma'(E)^2} \right]^{-1}.$$

The caloric curve and the specific heat for the cluster Na_{147} obtained using the density of states as determined by equation (6) are given by the solid line in figures 4(a) and 4(b) respectively. These curves represent the results that would be obtained for a cluster in thermodynamic equilibrium. In this case all mixed microstates (different terms in equation (6) corresponding to a different number of atoms in the liquid) are included. The specific heat shows a smooth increase from its value of $(3N-6)/N$ in units of k_B to its value of $(4N-6)/N$. The transition is not the abrupt first order transition of the bulk, but of order N .

We may now ask what would happen if our measurements were performed in the microcanonical ensemble where they are affected by the energy barriers. This would correspond to the dynamics of a trapped system. If we assume the extreme case in which all mixed solid-liquid states have high barriers reaching into the transition region, then our system would go directly from the all solid into the all liquid states. To model the energy dependence of this phase space volume it is necessary to remove all intermediate terms in equation (6) corresponding to the mixed solid-liquid states. This leaves us with just two terms, that of the all liquid and that of the all solid states,

$$\Gamma(E) = d \left[\left(\frac{E}{E^*}\right)^{3N-6} + \left(\frac{E}{E^*}\right)^{4N-6} \right]. \quad (7)$$

The corresponding ‘‘caloric curve’’ and ‘‘specific heat’’ curves are given by the dashed lines in figures 4(a) and 4(b) respectively. In this case, the transition is not smooth, but abrupt and the measured specific heat becomes negative. This, as mentioned above, is

not a thermodynamic result since the measured phase space volume given by Eq. (7) does not correspond to a system in equilibrium, but instead to a trapped system.

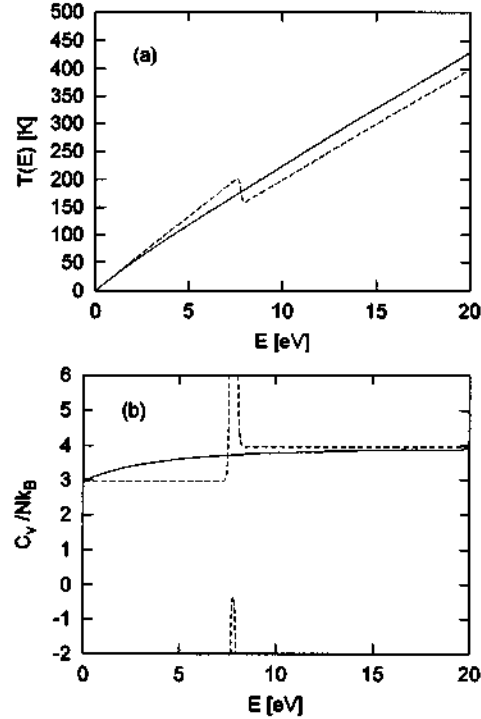


Figure 4: (a) Caloric curves for Na_{147} obtained with the full phase space volume, Eq. (6), (solid line) and sampled non-ergodically for the extreme case of all the atoms going to the liquid simultaneously in energy, Eq. (7), (dashed line). (b) The corresponding specific heats. Apparent negative specific heat is found for the non-ergodic case. Taken from (Michaelian and Santamaría-Holek, 2007).

In reality, different mixed solid-liquid states could have energy barriers of different height. A more correct description of the energy dependence of the measured phase space volume for such a trapped system is therefore not the extreme case as given by equation (7) but one in which we have a different E^* for each mixed solid-liquid state. Our equation (6) then becomes

$$\Gamma(E) = d \sum_{i=0}^N \frac{1}{(N-i)!i!} \left(\frac{E}{E_i^*}\right)^{3N+i-6} \quad (8)$$

What E_i^* 's to use depend on the energetics of liquid over solid structures. Obtaining the E_i^* from the potential model or experiment directly is not as difficult a task as would seem at first sight. Given the experimental or simulation specific heat curves we can fit the specific heat curve obtained by theory, using equation (8) in equation (2), by varying the E_i^* . Figure 5 shows the result of fitting the theoretical specific heat to the specific heat determined through molecular dynamic results at constant energy (Reyes-Nava, 2003) minimizing the χ^2 of the fit by varying the E_i^* 's. The corresponding best fit barrier heights E_i^* for the different mixed solid-liquid states with i atoms in the liquid are given in figure 6.

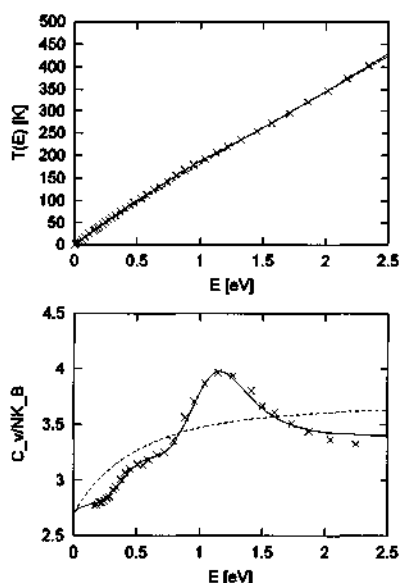


Figure 5: (a) Caloric curve for Na_{20} obtained from molecular dynamics runs at constant energy (Reyes-Nava et al., 2003) (crosses) and using the model phase space volume Eq. (6) (dashed curve). The solid curve is a fit using Eq. (8) with the E_i^* as given in figure 6. (b) Corresponding specific heat curves.

Note that as suggested above, the all solid to all liquid barrier (E_{20}^* , $i = 20$) is lower than the E_i^* for many mixed solid-liquid states. It is this fact which leads to the false determination of negative heat capacity for larger sized clusters (eg. Na_{147}).

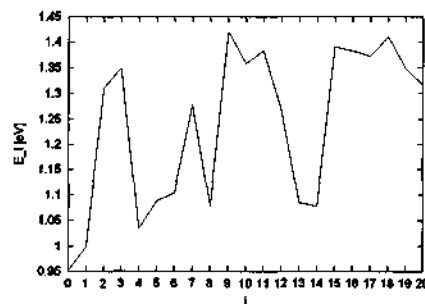


Figure 6: The energy barriers E_i^* for the mixed solid-liquid states with i atoms in the liquid for Na_{20} . Obtained by fitting the model specific heat capacity, using the phase space volume of Eq. (8), to molecular dynamics results at constant energy (see Fig. 5).

VI. Conclusions

We have studied the dynamics and thermodynamics of nanoclusters in two different environments, the canonical and the microcanonical ensembles. We have shown that equilibrium thermodynamic properties can only be obtained from the canonical ensemble and that nanoclusters in the microcanonical ensemble are trapped systems. Negative heat capacities and differences between results obtained in the canonical and microcanonical ensembles are simply inconsistencies that result from applying equilibrium thermodynamic formalism to a cluster trapped out of equilibrium. Nanoclusters differ in their thermodynamic properties from the bulk in that many possible symmetries constitute the accessible microstates and because energy barriers between solid and mixed solid-liquid states are variable. This is due to the fact that surface atoms are important in the thermodynamics of nanoclusters and these are less tightly bound.

We have given a simple analytical model to describe the dynamics and thermodynamics of nanoclusters and have shown how this model can be used to understand the false determination of negative heat capacity and the differences obtained in the two different ensembles. We have also used our model to determine the barrier heights for the mixed solid-liquid states, which we suggest will be of great utility to the study of the dynamics of nanoclusters.

Since any system trapped out of equilibrium will demonstrate macroscopic results which depend on the initial conditions, we suggest that all previous results on nanoclusters should be carefully reviewed.

Acknowledgements

K.M. is grateful for the hospitality afforded by L. M. Gaggero of the Facultad de Ciencias, Universidad Autonoma del Estado de Morelos, Morelos, México,

and for the financial support of DGAPA-UNAM while on sabbatical leave in 2007.

-
- Andres R. P. et al., *Science* **272**, 1323 (1996) ; and *ibid*, *Science* **272**, 1690 (1996).
CALLEN H.B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, New York) 2nd edition. 1985.
Helmer M., *News@Nature.Com*, <http://news.nature.com/news/2001/010222/010222-6.html>.
Lynden-Bell D. and Lynden-Bell R. M., *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, **181**, 405 (1977).
Michaelian K., and Santamaria-Holek I., *Critical Analysis of Negative Heat Capacity*, *Europhys. Lett.*, **79**, 43001 (2007).
Michaelian K., Taméz A., and Garzón I. L., *Efficient statistical mapping of the energy surfaces of nanoclusters and molecules*, *Chem. Phys. Lett.* **370**, 654-660 (2003).
Reyes-Nava J. A., Garzón I. L., and Michaelian K., *Phys. Rev. B*, **67**, 165401 (2003).
Schmidt M. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 1191 (2001)
Wales D. J. and Berry R. S., *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 2875 (1994).
Wales D. J. and Doye J. P. K., *Coexistence and phase separation in clusters: From the small to the not-so-small regime*, *J. Chem. Phys.*, **103**, 3061-3070 (1995).

Transmittance of a layer of metamaterial

H. Ruiz-Luna¹, Xóchitl Saldaña², A. Enciso¹ and D.A. Contreras-Solorio¹

¹Escuela de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas,
Apartado Postal C-580, 98060, Zacatecas, Zac., México

²Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,
Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México.

We calculate the transmittance for normal incidence of a layer with negative refractive index in the frequency range from 4 to 6 GHz. We also calculate the dependence of the transmittance with the incident angle for both *TE* and *TM* polarizations for several selected frequencies. For 4.024 GHz the layer has high transmittance for both polarizations, mainly for *TE* waves. For 4.21 GHz the transmittance curves are identical for both polarizations for all values of incident angle. We compare these results with those obtained for a layer of positive refractive index.

Calculamos la transmitancia para incidencia normal, de una capa con índice de refracción negativo en el rango de frecuencias de 4 a 6 GHz. Para varias frecuencias seleccionadas, también calculamos la dependencia de la transmitancia con el ángulo de incidencia para ambas polarizaciones *TE* y *TM*. Para 4.024 GHz se tiene elevada transmitancia para ambas polarizaciones, principalmente para ondas *TE*. Para 4.21 GHz las curvas de transmitancia son idénticas para ambas polarizaciones, para todos los ángulos de incidencia. Comparamos estos resultados con los obtenidos para una capa con índice de refracción positivo.

PACS numbers: 42.25.Bs; 78.20.Cf; 78.20.-e

I. INTRODUCTION

The first to introduce the concept of a material with a negative refractive index was V. Veselago¹. He predicted the possibility to have such materials, for which both the magnetic permeability and the electric permittivity were simultaneously negative. He published a theoretical analysis of several extraordinary electromagnetic and optical properties that these materials would exhibit. These materials, also known as left-handed materials or metamaterials, were only a theoretical curiosity for 30 years. At the end of the decade of the 90 these materials with negative refraction were fabricated, using thin wires and split ring resonators (SRR) made of copper²⁻⁵, confirming the predictions of Veselago. Initially, these materials had negative refraction for frequencies in the range of microwaves. However, there are recent reports of materials with negative refraction for optical frequencies⁶. In this work, we calculate the transmittance of a layer of material with negative refractive index for which both the magnetic permeability and the electric permittivity are negative for the frequency range from 4 to 6 GHz, using a dispersion formula taken from the literature. We calculate the transmittance for normal incidence in the range from 4 to 6 GHz for a layer width of 1.5 cm. Likewise, we calculate the dependence of the transmittance with the incident angle for both *TE* and *TM* polarizations for several frequencies. We compare these results with those obtained for a layer of a normal material with positive refractive index. For the calculations, we use the procedure described in the book of P. Yeh⁷.

II. THEORETICAL MODEL AND METHOD OF CALCULATION

In order to calculate the transmittance, we follow the approach used by Yeh⁷ to build the transfer matrix of the structure. We consider a one plane dielectric layer. The layer is perpendicular to the *x* axis, with width *d*₁, electric permittivity ϵ_1 and magnetic permeability μ_1 . The medium of the layer is homogeneous and isotropic. The refractive index n_1 is given by

$$n_1 = \pm \sqrt{\frac{\epsilon_1 \mu_1}{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (1)$$

Where ϵ_0 and μ_0 are the permittivity and the permeability of the vacuum, respectively. In Eq. 1 the plus sign is for normal materials with positive refraction which have ϵ_1 and μ_1 simultaneously positive. The minus sign is taken for metamaterials, which is congruent with the boundary conditions for the electromagnetic fields when both ϵ_1 and μ_1 are simultaneously negative. For metamaterials, ϵ_1 negative is obtained with an array of thin metallic wires and μ_1 can be made negative using an array of Split Ring Resonators (SRR). With these arrays the dispersion for ϵ_1 and μ_1 takes the form²⁻⁵,

$$\frac{\epsilon_1}{\epsilon_0} = 1 - \frac{f_p^2}{f^2} ; \quad \frac{\mu_1}{\mu_0} = 1 - \frac{F f^2}{f^2 - f_r^2} \quad (2)$$

Where *f* is the frequency, *f_p* the plasma frequency, *f_r* a resonance frequency, and *F* a geometrical factor. For Eq. (2) we suppose a lossless material. We consider an electromagnetic plane wave propagating in the *xz* plane, coming from the left in a medium with refractive index n_0 . The plane wave

is incident on the layer with refractive index n_1 . At the right hand-side of the layer, the wave propagates in a medium with refractive index n_2 . We can write the wave function in each medium in the following form

$$\Psi_j = A_j e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} + B_j e^{i(\vec{k}'_j \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (3)$$

Where $j = 0, 1, 2$. The first and the second term on the right-hand side of Eq. 3 represent propagation to the right and to the left, respectively, i.e. the forward and the backward waves. The index $j = 0$ represents the medium with refractive index n_0 at the left-hand side of the layer. In the medium at the right-hand side of the layer we consider only propagation to the right, consequently $B_2 = 0$. \vec{k}_j and \vec{k}'_j are the forward and backward wavevectors for medium j , t is the time, ω the angular frequency, and i the imaginary unit. If the wave is incident at an angle θ_0 with the normal to the layer, the Law of Snell gives

$$n_0 \sin \theta_0 = n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (4)$$

The wave propagation from medium 0 to medium 2 through the layer is described by

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

Where the 2×2 transfer matrix is given by

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_2. \quad (6)$$

The matrix D_j is called the dynamical or transmission matrix, and arises from the continuity conditions on the electric and magnetic fields at the interface between media $j - 1$ and j . P_1 is the kinematical or propagation matrix inside the layer. Their forms are given by

$$D_j^{TE} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\cos \theta_j}{Z_j} & -\frac{\cos \theta_j}{Z_j} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$D_j^{TM} = \begin{bmatrix} \cos \theta_j & \cos \theta_j \\ \frac{1}{Z_j} & -\frac{1}{Z_j} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} e^{-ik_1 d_1 \cos \theta_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1 \cos \theta_1} \end{bmatrix} \quad (9)$$

The two different polarizations TE and TM are indicated. Z_j is the wave impedance, given by

$$Z_j = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_j}} \quad (10)$$

The transmittance T is given by the ratio of the Poynting power flow of the transmitted wave to that of the incident wave, and is given in terms of the transfer matrix, by

$$T = \frac{Z_0 \cos \theta_2}{Z_2 \cos \theta_0} \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \quad (11)$$

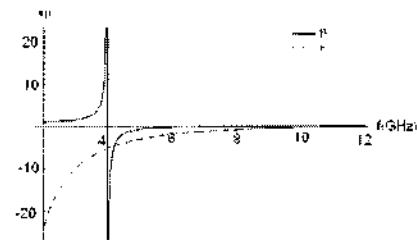


Figure 1. Frequency dependence of ϵ_1 and μ_1 .

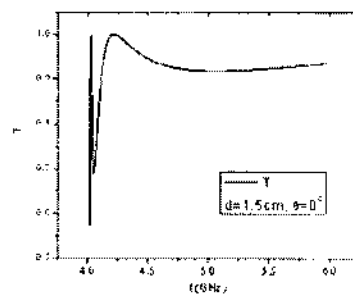
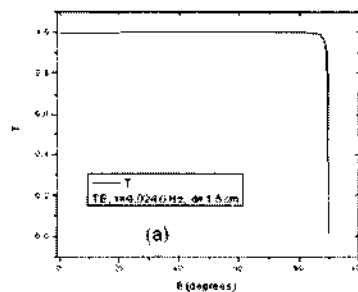


Figure 2. Frequency dependence of the transmittance T for the interval of negative refraction, $d_1 = 1.5$ cm.



III. RESULTS AND DISCUSSION

We use the dispersion model of Eq. (2). We take the values⁵ $f_D = 10$ GHz, $F = 0.56$, and $f_0 = 4$ GHz. We present in Fig. 1 the dependence of ϵ_1 and μ_1 with the frequency f . Both ϵ_1 and μ_1 are negative in the frequency range from 4 to 6 GHz. The negative refractive index is given by Eq. (1), where the minus sign must be taken from 4 to 6 GHz. We consider a structure which is a layer of metamaterial situated in vacuum. The media before and after the layer have a refractive index $n_0 = n_2 = 1.0$. We calculate the transmittance T using Eq. (11) for normal incidence, from 4 to 6 GHz, for a layer width of 1.5 cm, which is a quarter wavelength width for a frequency of 5 GHz, in the middle of the range from 4 to 6 GHz. We show in Fig. 2 the spectrum of transmittance, which presents an intricate behavior. The curve of T begins at $f = 4$ GHz from zero and increases abruptly to $T = 1$ for $f = 4.024$ GHz, then decreases to $T \sim 0.69$ for $f = 4.05$ GHz, and increases again to $T = 1$ for $f = 4.21$ GHz. After that, the curve is smooth. For the three foregoing critical points, we analyse the dependence of T with the incident angle for both TE and TM polarizations for the same width. In Figs. 3(a) and 3(b) we present the angular dependence of T for $f = 4.024$ GHz, for the TE and TM polarizations, respectively. For TE waves the transmission is practically 1 almost for all the angles, up to approximately 85° , while for TM waves is approximately 1 up to 45° . Figs. 4(a) and 4(b) show the angular dependence of T for $f = 4.05$ GHz and TM polarizations, respectively. For both polarizations T begins with a value of about 0.69 for normal incidence and for TE waves the transmission increases with the angle and reaches the value of 1 at around 62° and then decreases. On the other hand, for TM waves the transmission has a monotonic decline with the angle.

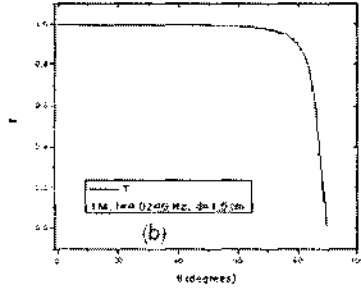


Figure 3. For $f = 4.024$ GHz angular dependence of the transmittance T . (a) TE polarization, (b) TM polarization.

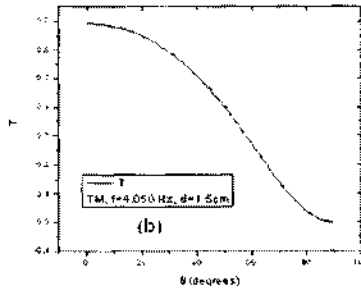
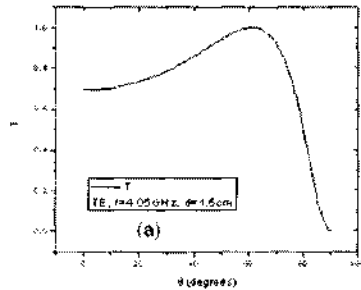
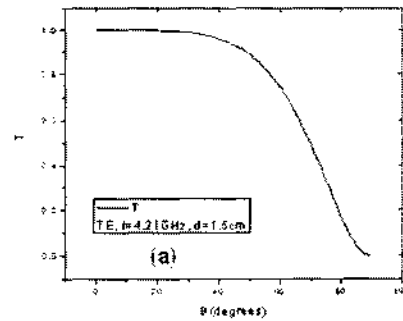


Figure 4. For $f = 4.05$ GHz angular dependence of the transmittance T . (a) TE polarization, (b) TM polarization.



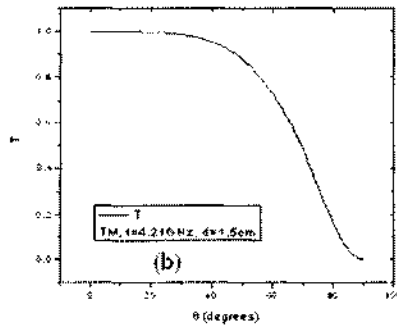


Figure 5. For $f = 4.21$ GHz angular dependence of the transmittance T . (a) TE polarization. (b) TM polarization.

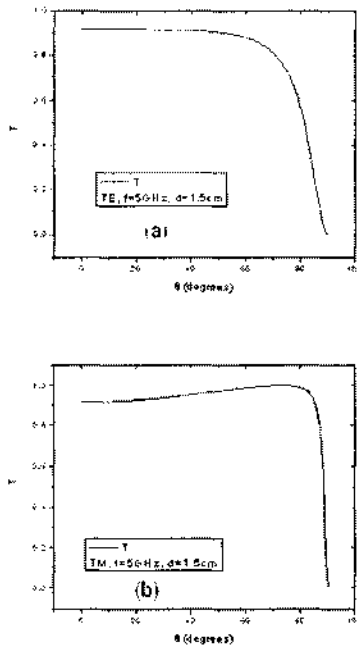


Figure 6. For $f = 5$ GHz angular dependence of the transmittance T . (a) TE polarization. (b) TM polarization.

In Figs. 5(a) and 5(b) we present for $f = 4.21$ GHz the dependence of T with the incident angle for both polarizations. We point out that at this value of frequency, the angular dependence of T is practically the same for both polarizations. In Figs. 6(a) and 6(b) we show the angular dependence of T for a value of frequency which is not a critical point; we choose $f = 5$ GHz, a value in the middle of the interval from 4 to 6 GHz. For both polarizations T starts with a value of around 0.92 for normal incidence. For TM waves the transmission increases with the angle up to the value of 1 at around 74° and then decreases. On the other hand, for TE waves the transmission has a monotonic decline when the angle increases. This behavior of the polarizations is opposite to that of the polarizations for $f = 4.05$ GHz. In order to compare, we also have calculated the transmittance for a layer of material with positive refractive index, $n_1 = 1.5$, with the same width $d_1 = 1.5$ cm and f in the same interval from 4 to 6 GHz. Fig. 7 shows T vs f for normal incidence. By comparing with Fig. 2 for negative refraction, the curve of T vs f for positive refraction is very different. For positive refraction the curve for T is smooth, with a slow monotonic decrease. In Figures 8(a) and 8(b) we show the angular dependence of T for $n_1 = 1.5$ and $f = 4.024$ GHz for both polarizations. For TE waves the curve for T has a monotonic decrease, while for TM waves the transmittance increases with the angle up to the value of 1 approximately in the interval between 42° and 66° . This behavior for oblique incidence, for positive refractive index, is similar to the behavior for $f = 5$ GHz in the case of negative refraction, Fig. 6. For positive refraction, the behavior of T for oblique incidence, for other values of f , is similar to that observed for $f = 4.024$ GHz.

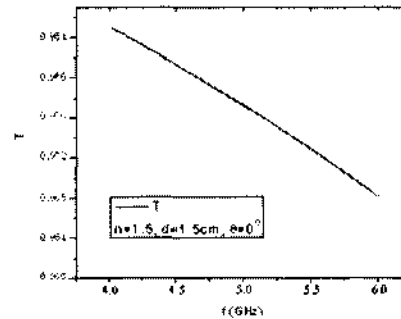


Figure 7. Frequency dependence of the transmittance T for positive refractive index, $n_1 = 1.5$, $d_1 = 1.5$ cm.

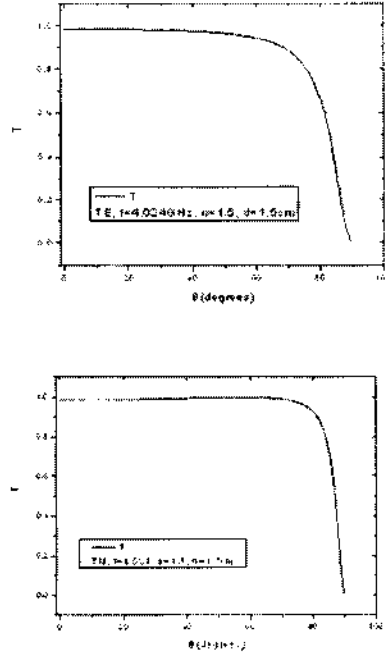


Figure 8. For $f = 4.024\text{GHz}$, angular dependence of the transmittance T for positive refractive index, $n_1 = 1.5$. (a) TE polarization, (b) TM polarization.

IV. CONCLUSIONS

We have calculated the transmittance of a layer of metamaterial, using a dispersion model which gives negative refraction index in the interval of frequencies from 4 to 6 GHz. For normal incidence, the dependence of the transmittance with the frequency is complicated, showing three critical points in the interval. We have studied the dependence of the transmittance with the incident angle for four values of frequencies, including the above mentioned critical points. For the critical point in $f = 4.024\text{GHz}$ the transmittance is practically total for all the values of the incident angle for TE polarization, while for TM polarization the transmittance is practically total up to 45° . For the critical point in $f = 4.21\text{GHz}$ both polarizations have the same transmission curve in the whole range of angles from 0° to 90° . For the critical point at $f = 4.05\text{GHz}$ and for $f = 5\text{GHz}$, the curves of transmission for TE and TM waves present opposite behavior. For the first value of frequency, the transmission of the TE waves reaches the maximum of transmittance for 62° and the transmission for TM waves is monotonically decreasing. On the other hand, for the second value of frequency, the transmission of TM waves reaches the maximum of transmittance for 74° , while the curve of transmission for TE waves is monotonically decreasing. For positive refraction and normal incidence, the dependence of the transmittance with the frequency is smooth. The dependence of the transmittance with the incident angle, is similar for all the values of the frequency, for positive refraction.

Acknowledgements

This work has been supported partially by Secretaría General de la Universidad Autónoma de Zacatecas.

¹ V. G. Veselago, *Sov. Phys. Usp.* **10** (1968) 509.

² J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, W. J. Stewart, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **47** (1999) 2075.

³ D.R. Smith, W.J. Padilla, D.C. Vier, S.C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 4184.

⁴ R.A. Shelby, D.R.Smith, S.Schultz, *Science* **292** (2001) 77.

⁵ R. Ruppin, *Phys. Lett. A* **277** (2000) 61.

⁶ C. M. Soukoulis, S. Linden, and M. Wegener, *Science* **315** (2007)47.

⁷ P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media.* (Wiley, New York, 1988).

Optical frequencies of metallo-dielectric photonic crystals

J. Arriaga

Instituto de Física Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570, Puebla, México

A. A. Krokhin

Center for Nonlinear Science, University of North Texas, P.O. Box 305370, Denton, Texas, 76203

L. Gumen

Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla, Puebla 72160, México

(Dated: January 23, 2008)

We calculate the optical frequencies of a periodic arrangement of metallic cylinders. The nonmagnetic cylinders are described by the dielectric constant $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ and their magnetic response is due to the eddy currents circulating in a narrow skin layer. The E- and H-polarizations are considered.

Calculamos las frecuencias ópticas de un arreglo periódico de cilindros metálicos. Los cilindros no magnéticos se describen por una constante dieléctrica del tipo $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ y su respuesta magnética se debe a las denominadas "eddy currents" circulando en sobre una delgada capa en la superficie de los cilindros.

I. INTRODUCTION

Let us consider a 2D photonic crystal of metallic cylinders of radius a . The cylinders are nonmagnetic and, neglecting dissipation, their dielectric constant is $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$. The cylinders are embedded in a homogeneous dielectric medium with dielectric constant ϵ_0 . The magnetic response of the cylinders is attributed to the eddy currents induced by the electromagnetic wave in a skin-layer of depth

$$\delta(\omega) = \frac{c}{\omega\epsilon(\omega)} \quad (1)$$

Magnetization of the cylinders by the H-polarized mode is characterized by the magnetic permeability[1]

$$\mu_H(\omega) = \frac{2\delta(\omega)I_1(a/\delta(\omega))}{aI_0(a/\delta(\omega))}. \quad (2)$$

Here $I_n(x)$ is the modified Bessel function. For the E-polarized mode the magnetic permeability is twice larger, $\mu_E(\omega) = 2\mu_H(\omega)$. Metallic nonmagnetic cylinders exhibit diamagnetic response, i.e. $0 < \mu(\omega) < 1$. If the cylinders radius is much less than the skin depth, the metallic cylinders are practically transparent for the electromagnetic waves. It is obvious that in this case the magnetic response is very weak. The expansion of Eq. (2) in this case is given by,

$$\mu_H(\omega) \approx 1 - (a/2\delta_0)^2, \quad a \ll \delta_0 \quad (3)$$

In the opposite case, when the interior of the cylinders is shielded from the electromagnetic field, the cylinders behave like ideal diamagnetic, i.e., $\mu = 0$. In this limit we get,

$$\delta_H(\omega) \approx 2\delta_0/a \ll 1, \quad \delta_0 \ll a \quad (4)$$

For 2D photonic crystals the equations for the E and H-polarized modes have the following form,

$$\nabla \cdot (\mu^{-1}(\mathbf{r})\nabla E) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon(\mathbf{r})E, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla H) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mu(\mathbf{r})H. \quad (6)$$

These equations are symmetric with respect to the replacements $E \leftrightarrow H$ and $\epsilon \leftrightarrow \mu$. Therefore in what follows we calculate the optical frequencies, ω_n , ($n=1, 2, \dots$ is the band index) for the H-mode only and that for the E-mode are obtained by substituting $\epsilon \leftrightarrow \mu$. To obtain the equation for the ω_n we apply the plane wave expansion. Using the Bloch theorem and the periodicity of the functions $\epsilon(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$, $1/\epsilon(\mathbf{r})$ and $1/\mu(\mathbf{r})$ we get the Fourier expansions,

$$H(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G}} h_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (7)$$

$$E(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G}} e_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (8)$$

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (9)$$

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{r}) = \eta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \eta(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (10)$$

$$\mu(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G}} \mu(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (11)$$

$$\mu^{-1}(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G}} \xi(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}). \quad (12)$$

Where \mathbf{G} are the reciprocal vectors. The Fourier components are,

$$\epsilon(\mathbf{G} \neq 0) = (\epsilon(\omega) - \epsilon_0) F(\mathbf{G}) \quad (13)$$

$$\eta(\mathbf{G} \neq 0) = \left(\frac{1}{\epsilon(\omega)} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) F(\mathbf{G}) \quad (14)$$

$$\mu(\mathbf{G} \neq 0) = (\mu(\omega) - 1) F(\mathbf{G}) \quad (15)$$

$$\xi(\mathbf{G} \neq 0) = \left(\frac{1}{\mu(\omega)} - 1 \right) F(\mathbf{G}). \quad (16)$$

Here ϵ_0 is the dielectric constant of the background material. If A_c is the area of the unit cell, the form factor $F(\mathbf{G})$ of the photonic crystal is,

$$F(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_c} \int_{cyl} \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (17)$$

and the integral is taken over the cross section of the cylinder.

The Fourier components with $\mathbf{G} = 0$ are reduced to the bulk average values,

$$\epsilon(\mathbf{G} = 0) = \bar{\epsilon} = f\epsilon(\omega) + (1-f)\epsilon_0. \quad (18)$$

$$\eta(\mathbf{G} = 0) = \bar{\eta} = \frac{f}{\epsilon(\omega)} + \frac{(1-f)}{\epsilon_0}, \quad (19)$$

$$\mu(\mathbf{G} = 0) = \bar{\mu} = f\mu(\omega) + (1-f), \quad (20)$$

$$\xi(\mathbf{G} = 0) = \bar{\xi} = \frac{f}{\mu(\omega)} + (1-f). \quad (21)$$

f is the filling fraction of the metallic component. Substituting Eqs. (7)-(12) into Eqs. (5) and (6) we get the generalized eigenvalue problem in \mathbf{G} -space,

$$\sum_{\mathbf{G}'} \xi(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') e_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \sum_{\mathbf{G}'} \epsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') e_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}') \quad (22)$$

$$\sum_{\mathbf{G}'} \eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') h_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}') = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \sum_{\mathbf{G}'} \mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}') h_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}') \quad (23)$$

The dispersion relation for the E -polarized (H -polarized) mode $\omega = \omega_n(\mathbf{k})$, ($n = 1, 2, \dots$) is obtained from the condition that the set of equations (5) and (6) has a non-trivial solution. The optical frequencies are the values of the eigenfrequencies at the center of the Brillouin zone, $\mathbf{k} = 0$. They are obtained from the following equations. For the E -mode,

$$\det \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') - \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}' \xi(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] = 0 \quad (24)$$

and for the H -mode,

$$\det \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}') - \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}' \eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] = 0. \quad (25)$$

These formulae can be simplified using the identities,

$$\mu^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \equiv \xi(\mathbf{G} - \mathbf{G}'), \quad (26)$$

$$\eta^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \epsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \quad (27)$$

Here $\xi(\mathbf{G})$ is the Fourier coefficient of the inverse permeability, $\xi(\mathbf{r}) = 1/\mu(\mathbf{r})$ and $\mu^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ is the inverse matrix. Multiplying both sides of Eq. (25) by $\det[\mu^{-1}(\mathbf{G} - \mathbf{G}')]$ and using the property $\det A \det B = \det(A\hat{B})$, we obtain,

$$\det \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} - \gamma(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] = 0. \quad (28)$$

The matrix γ is different for the E - and the H -mode. For the E -mode,

$$\gamma_E(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = \sum_{\mathbf{G}''} \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}'' \eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}'') \xi(\mathbf{G}'' - \mathbf{G}'). \quad (29)$$

For the H -mode,

$$\gamma_H(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = \sum_{\mathbf{G}''} \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}'' \xi(\mathbf{G} - \mathbf{G}'') \eta(\mathbf{G}'' - \mathbf{G}'). \quad (30)$$

The matrix $\gamma_{E,H}(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ is not hermitian. However, it can be shown that it is equivalent to a Hermitian eigenvalue problem, i.e., all the eigenvalues are real. Although Eq. (28) looks like an eigenvalue problem, it is not, because the matrix γ depends on ω through $\epsilon(\omega)$ and $\mu(\omega)$. In order to reduce Eq. (28) to a true eigenvalue problem, the dependence on ω of the matrix γ must be suppressed. This can be easily done for the H -mode. The

matrix γ_H is determined through the inverse dielectric constant $\eta(\mathbf{G})$. Since for the frequencies much below the plasma frequency ω_p , the dielectric constant of the metallic cylinders $|\epsilon(\omega)| \ll 1$, the Fourier components $\eta(\mathbf{G})$ are given by Eqs. (14) and (19) are practically independent on $\epsilon(\omega)$. The skin depth Eq. 1 in this limit also becomes frequency-independent.

$$\delta(\omega) \approx \delta_0 \cdot \frac{c}{\omega_p} \quad (31)$$

Thus, the magnetic permeability Eq. (2) and its Fourier components are frequency-independent functions. Therefore, within a wide interval of frequencies,

$$\omega \ll \omega_p \quad (32)$$

the matrix γ_H can be considered as frequency independent. This means that Eq. (28) for the matrix γ_H given by Eq. (30) is a true eigenvalue problem, which can be solved, using standard numerical methods.

Let us consider a case of copper and aluminium cylinders. For these metals the plasma frequencies and the skin depths are $\omega_p^{Cu} = 6.98 \times 10^{16} s^{-1}$, $\delta_0^{Cu} = 4.94 \times 10^{-6} cm$, and $\omega_p^{Al} = 2.3 \times 10^{16} s^{-1}$, $\delta_0^{Al} = 1.32 \times 10^{-6} cm$. Assuming that the radius of the cylinders is much larger than the skin-depth, i.e. $a \gg 10^{-6} cm$, then we can approximate formula (4) for the magnetic permeability, which becomes a small parameter. Thus, the cylinders are not only good conductors, $|\epsilon| \gg 1$, but they also behave like a superconducting cylinders since $\mu \gg 1$. Physically these properties mean that the interior of the cylinders is shielded from electromagnetic radiation. Using the inequalities $|\epsilon(\omega)| \gg 1$, and $\mu(\omega) \ll 1$, the formulae for the Fourier components can be simplified as follows,

$$\eta(\mathbf{G}) \approx -F(\mathbf{G}) \quad \text{and} \quad \bar{\eta} \approx 1 - f, \quad (33)$$

$$\xi(\mathbf{G}) \approx \frac{a}{2\delta_0} F(\mathbf{G}) \quad \text{and} \quad \bar{\xi} \approx \frac{af}{2\delta_0}. \quad (34)$$

Substituting these formulae into Eq. (30) we obtain the following approximate result for the matrix γ_H

$$\gamma_H(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \approx \frac{a}{2\delta_0} \Gamma_H(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \quad (35)$$

Here the matrix $\Gamma_H(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ is independent on the material properties of the photonic crystal and it is defined only by the geometry of its unit cell,

$$\Gamma_H(\mathbf{G} \neq \mathbf{G}') = \frac{1}{2} \left[-f \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}' + (1-f)(G')^2 \right] F(\mathbf{G} - \mathbf{G}') - \sum_{\mathbf{G}'' \neq \mathbf{G}, \mathbf{G}'} \mathbf{G}' \cdot \mathbf{G}'' F(\mathbf{G} - \mathbf{G}'') F(\mathbf{G}'' - \mathbf{G}') \quad (36)$$

$$\Gamma_H(\mathbf{G} = \mathbf{G}') = f(1-f)G^2 - \sum_{\mathbf{G}'' \neq \mathbf{G}} \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}'' F(\mathbf{G} - \mathbf{G}'') F(\mathbf{G}'' - \mathbf{G}) \quad (37)$$

Finally, the eigenvalue problem for the optical frequencies for the H -mode can be written as follows,

$$\det \left| \frac{2\delta_0}{a} \frac{\omega^2}{c^2} \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} - \Gamma(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \right| = 0 \quad (38)$$

To study chaos, let us consider the same geometry as we considered in reference [2]. We need to calculate a enough number of frequencies lying below the plasma frequency ω_p in order to calculate the level-space distribution. There is formal mathematical difficulty on the way from Eq. (25) to Eq. (28), which may lead to a serious numerical error in Eq. (36). This last equation was obtained in the limit of strong skin-effect ($a \gg \delta_0$). Under this condition the matrix $\mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ cannot be inverted because all the elements of the inverse matrix are proportional to $1/\mu(\omega) \sim a/\delta_0 \rightarrow \infty$. This means that under the conditions of strong skin-effect the matrix $\mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ becomes singular and the inverse matrix, i.e. $\xi(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ does not exist. This can be seen for Eq. (34) where all the elements are proportional to a/δ_0 . To avoid this unstable procedure of inversion of almost a singular matrix it is better to calculate the optical frequencies directly from equation (25). This equation is a generalized eigenvalue problem. The advantage of this method is that the matrices $\mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ and $\eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ are strongly simplified under the conditions of skin effect, see Eq. (33) and $\bar{\mu} \approx 1 - f$, $\mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \approx -F(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$. The matrix of the determinant in Eq. (25) can be written as follows,

$$\frac{\omega^2}{c^2} \mu(\mathbf{G} - \mathbf{G}') - \mathbf{G} \cdot \mathbf{G}' \eta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = A(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \approx \begin{cases} -(1-f)(G^2 - \omega^2/c^2), & \text{if } \mathbf{G} = \mathbf{G}' \\ F(\mathbf{G} - \mathbf{G}')(\mathbf{G} \cdot \mathbf{G}' - \omega^2/c^2), & \text{if } \mathbf{G} \neq \mathbf{G}' \end{cases} \quad (39)$$

The matrix $A(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ is independent on the parameters of the constituent photonic crystal. This means that it gives the principal approximation of optical frequencies for metallic cylinders. In this approximation the cylinders are perfect conductors and perfect diamagnets, i.e. they are superconductors. The corrections to this result appear in the next approximation over δ_0/a .

[1] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii. *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd Ed. (Pergamon, Oxford, 1984).

[2] L. N. Gumen, J. Arriaga, and A. A. Krokhin, *Physica* **13**, 459 (2002).

Spin-orbit interaction in carbon nanotubes

I. Chico^{1,1)}, M. P. López Sancho²⁾, and M. C. Muñoz^{1,2)}

¹Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias del Medio Ambiente,
Universidad de Castilla-La Mancha, Avda. Carlos III s/n, 45071 Toledo, Spain

²Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Investigaciones Científicas,
C/ Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco, E-28049 Madrid, Spain

Carbon nanotubes are a new kind of one-dimensional materials which may behave as semiconductors or metals depending on their geometry. Such unique behavior has stimulated research on their electronic and transport properties, with the aim of exploring their potential applications in nanoelectronics. Several experiments have shown that spin plays an important role in their transport properties, although some results are in apparent contradiction [1-3]. We have studied [4,5] the role of spin-orbit interaction in carbon nanotubes of different geometries, within a tight-binding model including sp^3 orbitals, considering the effect of curvature. Our results show that chiral nanotubes present spin splitting at the Fermi level, whereas achiral tubes are spin degenerated at that energy. This can be understood considering that achiral tubes possess inversion symmetry. This spatial symmetry plus time-reversal invariance implies that spin degeneracy cannot be removed. On the contrary, in chiral tubes, which lack inversion symmetry, spin-orbit interaction removes the spin degeneracy. We have therefore shown that the inclusion of crystal symmetry is crucial for spin-orbit effects. This can explain the disparity of transport experiment results in carbon nanotubes.

Los nanotubos de carbono son un nuevo tipo de materiales cuasi-unidimensionales que pueden comportarse como metales o semiconductores según su geometría. Este comportamiento singular ha estimulado la investigación de sus propiedades electrónicas y de transporte, con el objeto de explorar sus posibles aplicaciones en nanoelectrónica. Varios experimentos [1-3] muestran que el espín juega un papel importante en sus propiedades de transporte, aunque algunos resultados son aparentemente contradictorios. Hemos estudiado [4,5] el efecto de la interacción espín-órbita en nanotubos de carbono de diferentes geometrías dentro de un modelo *tight-binding* con orbitales sp^3 , teniendo en cuenta efectos de curvatura. Nuestros resultados muestran que los nanotubos quirales presentan un desdoblamiento de espín al nivel de Fermi, mientras que los tubos aquirales tienen degeneración de espín a esta energía. Esto puede entenderse teniendo en cuenta que los nanotubos aquirales tienen simetría de inversión. Esta simetría espacial, añadida a la invariancia temporal, implican que la degeneración de espín no puede eliminarse. Por el contrario, en los nanotubos quirales, que carecen de simetría de inversión, la interacción espín-órbita destruye la degeneración de espín. Comprobamos por tanto que la inclusión de la simetría total de la red cristalina resulta crucial para los efectos espín-órbita en estos sistemas, lo cual puede explicar la disparidad de los resultados experimentales de transporte en nanotubos de carbono.

PACS numbers: 71.20.Ts, 71.70.Ej, 73.22.-f

¹ S. J. Tans, *et al.*, Nature (London) **394**, 761 (1998)

² D. Cobden *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 681 (1998)

³ W. Liang, M. Bockrath, and H. Park, Phys. Rev. Lett. **88**, 126801 (2002)

⁴ I. Chico, M. P. López-Sancho, and M. C. Muñoz, Phys. Rev. Lett. **93**, 176402 (2004)

⁵ I. Chico, M. P. López-Sancho, and M. C. Muñoz, unpublished (2002)

Green's Function Tight-Binding Formalism for Line-Shape Description of Virtual Electronic States

S. J. Vlaev
 Unidad Académica de Física,
 Universidad Autónoma de Zacatecas, ZAC., México
 Email: stoyan52@yahoo.com

The possibility of line-shape description for virtual electronic states within the framework of the Green's function formalism is discussed. The consideration is carried out for a semi-empirical tight-binding model. A new scheme based on the Green's function imaginary part is proposed to calculate the full width at half maximum (*FWHM*) and the mean-life time of virtual electronic states.

Consideramos la posibilidad de determinar la forma de la línea de estados electrónicos virtuales dentro del formalismo de las funciones de Green en el contexto del modelo de enlace fuerte semi-empírico. Proponemos un nuevo esquema numérico basado en la parte imaginaria de la función de Green para calcular la anchura a media altura (*FWHM*) y el tiempo de vida media de estados electrónicos virtuales.

PACS numbers: 71.15.Dx, 71.15.Qe, 73.21.Fg

I. INTRODUCTION

The study of the electron structure of atoms, molecules, clusters, nanostructures and condensed matter objects of different dimensionality is a main purpose of the modern experimental and theoretical investigations in the atomic, molecular and solid state physics, materials science and quantum chemistry¹. All new physical phenomena discovered in the last decades in these fields and their practical applications are strongly related to the basic electronic properties of the matter²⁻⁴. The rigorous description of the electronic structure can be achieved through quantum mechanical methods and precise measurements based on quantum mechanics²⁻⁴.

The direct observation of the occupied and non-occupied electronic states is possible in the photo-emission, inverse photo-emission and scanning tunneling spectroscopy measurements^{5,6}. These experimental techniques permit to obtain detailed total density of states curves and in many cases the band structure and the local density of states in some points of the Brillouin zone for periodic structures⁷. These quantities can be calculated within the framework of different molecular or solid state physics theoretical methods based on the quantum mechanics⁸. The empirical, semi-empirical and first principles methods in discrete and continuous models give the eigenvalues and the eigenvectors of the system related directly to the energy position and the intensity of the maxima in the density of states curves⁴.

Each maximum of a given density of states curve obeys two fundamental characteristics: the energy position and the intensity. The energy position determines qualitatively the electronic structure and the chemical composition of the system and the intensity contains also quantitative information. The parameter for each energy maximum in the spectroscopy measurements which describes the line-shape is the full width at half maximum (*FWHM*)⁴.

It is well known that the electronic energy spectrum of each quantum-mechanical system may have discrete and

continuum part. The discrete part contains bound states and the states in the continuum are unbound states. Energy bands appear in a bulk crystal and their states propagate through the crystal having the behavior of Bloch extended states. In some cases, for instance crystal with defects, the so called quasi-bound (virtual) states appear in the continuum^{9,10}. These quasi-bound states possess normally very strong energy and spatial localizations and obey specific features. These states, occupying the place between the bound and the extended states, have attracted recently the attention of many researchers because of their specific characteristics. The possibility to design the energy position and the *FWHM* parameter of the quasi-bound states in quantum well structures taking into account the fundamental analogy between photon and electron optics makes the investigations in this direction very interesting and promising from the point of view of technological applications⁹.

A bound state is a δ -like state. Measurements and calculations with a given precision "see" this δ -like state as a state with a finite energy width. This energy width is an artificial fact and not an intrinsic feature of the physical system. In the measurements this width depends on the experimental technique and in the numerical calculations on the method of calculation. If the precision is sufficient to resolve the maxima, the area of each maximum conserves when the line-shape (*FWHM* parameter) changes. The only important information is the energy position of the maximum. Theoretically each bound state has a zero width and the corresponding mean-life time is infinity.

An extended state in the quasi-continuum of a crystal band has the same δ -like state behavior. We can measure or calculate a continuous density of states curve with different precisions but each maximum of this curve will be always a δ -like state and, as a result, its mean-life time will be equal to infinity.

The fundamental difference between the bound and extended states from one side and the quasi-bound (virtual)

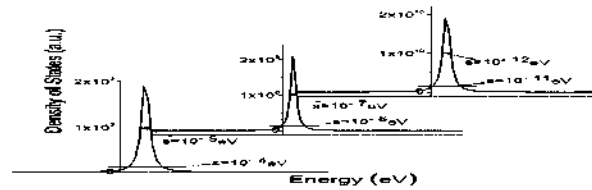


FIG 1 Line-shape of the ground electronic bound state in 50 monolayers rectangular $\text{Al}(0.3)\text{GaAs}(0.7)/\text{GaAs}$ quantum well calculated with different values of the imaginary part s . A typical δ -like behavior is observed for the energy maxima. The energy of the state measured from the bottom of the well is 10meV .

states from other is the fact, that the virtual states have intrinsically finite value of the *FWHM* parameter and, as a consequence, finite mean-life times. The physical reasons for this intrinsic feature of the virtual states can be different. For instance, the un-restricted Hartree-Fock treatment of the Anderson impurity model¹⁰ derives analytical solutions which reveal the physical mechanism for the creation of virtual states in case of bulk and surface impurities in metals. In many complicated physical systems where analytical solutions are not found, there is not a transparent quantitative explanation for the existence of virtual states.

The virtual states can be observed and studied experimentally using time-resolved spectroscopy measurements¹¹. The interpretation of the experimental data and the systematical theoretical study of the quasi-bound states in real systems need the development of stable numerical schemes to calculate the *FWHM* parameter of the virtual states.

The Green's function formalism has been widely applied in the electronic structure calculations^{12,13}. The Green function contains by definition a vanishing imaginary part added to the energy. In the numerical calculations this imaginary part is a small but finite one and it corresponds to the energy resolution of the experimental measurements. To the best of our knowledge there are very few studies within this formalism to calculate the *FWHM* parameter of quasi-bound states. The aim of the present work is to discuss how the Green's function formalism can be applied to describe the line-shape of the virtual states. We propose a numerical scheme based on the Green's function methodology in the context of the semi-empirical tight-binding model. A brief review of some results for real systems obtained by us previously¹⁴⁻¹⁷ is presented as an illustration.

II. GENERAL DESCRIPTION OF THE NUMERICAL SCHEME

The quantum-mechanical formula to calculate the density of states $\rho(E)$ in the Green's function formalism is given by:

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im}G(E + i\epsilon) \quad (1)$$

where $G(E + i\epsilon)$ is the Green function of the system and ϵ is the vanishing imaginary part added to the energy. This formula has been widely applied in the literature to obtain the electronic spectrum of different kind of physical systems. The common interpretation of the imaginary part as the precision of the calculation restricts the application of formula (1) and a full description of the line-shape for virtual states can not be done. An intrinsic feature of the virtual states is the finite energy width of their maximum Γ . The full width at half maxima (*FWHM*) parameter Γ contains additional physical information - the mean-life time τ of the virtual state.

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (2)$$

If we want to extract this information from the line-shape of the electronic state we have to calculate the intrinsic finite width Γ . So, the problem is to find the procedure which permits the determination of the *FWHM*.

The idea of the proposed numerical scheme which may determine the *FWHM* is very simple. We have to calculate the position of the maximum and its energy width for different values of the imaginary part ϵ decreasing the value of ϵ in the sequence of calculations. The step energy value in each cycle of the calculation has to be properly chosen providing correct result. Observing what kind of behavior the *FWHM* values have one can determine the type of the electronic state and in the case of virtual states we are able to find the intrinsic *FWHM* value thus describing the line-shape and finding the mean-life time of the virtual state.

To clarify better the proposed procedure we consider below typical bound, extended and virtual states.

A. Bound states

Let's consider the simple example of an isolated bound s state. Its Green function $G_s(E + i\epsilon)$ has the form:

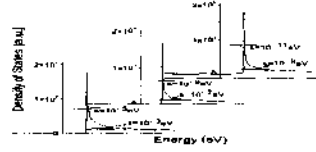


FIG. 2: Line-shape of the extended bulk state in the $GaAs$ conduction band with energy 0.48 eV measured from the band edge calculated with different values of the imaginary part s . A δ -like behavior is observed again for the energy maxima

$$G_{ii}(E + i s) = (E - E_{ii} + i s)^{-1} \quad (3)$$

where E_{ii} is the energy position of the level, s the small imaginary part and i the imaginary unit. The density of states $\rho_{ii}(E)$ is given by the well known formula.

$$\rho_{ii}(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{s \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{ii}(E + i s) \quad (4)$$

In this trivial case we obtain

$$\rho_{ii}(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{s}{(E - E_{ii})^2 + s^2} = \delta(E - E_{ii}) \quad (5)$$

The Eq.(5) describes the bound state at energy E_{ii} with $FWHM$ parameter $\Gamma = 0$ and mean life time $\tau = \infty$. If we perform a numerical calculation where s has a finite small value, we will observe this discrete level with $\Gamma = s$. The situation is analogous to a measurement with energy resolution s . For smaller s values we find smaller Γ values, conserving the area of the pick. It is impossible to obtain equal numerical values for Γ , decreasing the small imaginary part s during the calculations. For complicate real systems where the analytical form of the Green function is not known, numerically the procedure is the same. However, in the case of quasi-bound states the numerical scheme is quite different, as we demonstrate in the subsection 2.3.

Fig. 1 illustrates the above considerations for the ground bound state in $Al(1.7)Ga(1-x)As/GaAs$ quantum well with $x = 0.3$ and well width of 50 monolayers. The energy of this state is 10 meV measured from the bottom of the well. A typical δ -like behavior is observed. The numerical procedure falls down when the imaginary part takes values of the order of the machine zero.

B. Extended states

If we consider now any energy maximum of the density of states curve in a band of a bulk crystal, we obtain the same

behavior in the numerical calculation of the $FWHM$ parameter as in the previous subsection. The numerical procedure again falls down when the imaginary part takes values of the order of the machine zero. Fig. 2 presents the results for bulk $GaAs$. The maximum has energy $E_{ii} = 0.48$ eV measured from the bottom of the $GaAs$ conduction band.

C. Virtual states

Let's consider now a single quasi-bound S state. A well known case is, for instance, the virtual impurity level in metals. The un-restricted Hartree-Fock solution of the Anderson impurity model^[6] gives analytical solution for the Green function of the impurity $G_{ii}(E + i s)$:

$$G_{ii}(E + i s) = (E - E_{ii} + i \Gamma)^{-1} \quad (6)$$

where Γ is the intrinsic finite $FWHM$ parameter. The parameter Γ depends on the metal band structure and the local impurity-host interaction. The Eq. (4) now derives

$$\rho_{ii}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_{ii})^2 + \Gamma^2} \quad (7)$$

a pick of Lorentzian line-shape. What about the numerical procedure in this case? If the small imaginary part $s \gg \Gamma$, we observe a Lorentzian pick, but its $FWHM$ parameter has a value different from Γ . Only if $s \ll \Gamma$, the density of states gives us the right $FWHM$ parameter equal to Γ . The mean life time τ calculated from (2) in the case when $s \ll \Gamma$ has the correct value. Decreasing s during the calculations, we must find s value after which the $FWHM$ does not change. It is important to mention that the step of the energy has to be properly chosen.

Fig. 3 shows the line-shape description of the quasi-bound state in 500 monolayers rectangular $Al(0.3)Ga(0.7)As/GaAs$ quantum well. There are not changes in the line-shape of the pick for values of the imaginary part less than 10^{-8} eV. The Lorentzian pick has a finite energy width. The calculated value for the $FWHM$ parameter is 10^{-9} eV and the corresponding mean-life time $\tau = 1(10^{-10})$ s.

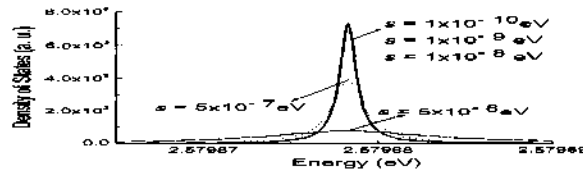


FIG. 3: Line-shape of the first virtual electronic state in 500 monolayers rectangular $Al(0.3)Ga(0.7)As/GaAs$ quantum well calculated with different values of the imaginary part s . A Lorentzian pick is observed and its $FWHM$ parameter is found when the imaginary part is less than 10^{-7} eV. The energy of this state is 0.479 eV measured from the bottom of the well. The calculated value for the $FWHM$ parameter is 10^{-6} eV and the corresponding mean-life time $\tau = 10^{-11}$ s.

In a general case we don't have analytical solution and the interpretation about the physical reasons which create quasi-bound states is not clear as in the case of the Anderson impurity model cited above.

III. APPLICATION TO VIRTUAL STATES IN SOME QUANTUM WELLS STRUCTURES

We have applied the methodology described in this work to study quasi-bound states in rectangular, parabolic and delta-doped quantum wells structures¹⁴⁻¹⁷. We have calculated the $FWHM$ parameters and the mean-life times of many virtual states varying the physical conditions. The delta-doped quantum wells create virtual states with stronger energetic and spatial localizations than the rectangular and parabolic quantum

wells and barriers. The mean-life times of the quasi-bound states in these wells are sufficiently large to be measured experimentally. It seems that the potential profile of the delta-doped wells creates quasi-bound states which can be converted in Capasso states [9] if a delta-doped well is embedded in a superlattice.

IV. CONCLUSIONS

The proposed numerical scheme can be used for a full line-shape description of virtual electronic states created by different physical reasons. A detailed analysis of the virtual states formed in different quantum wells embedded in superlattices is in progress.

- ¹ W.A. Harrison, "Elementary Electronic Structure", World Scientific, Singapore (1999).
- ² B. Vinter and C. Weisbuch, "Quantum Semiconductor Structures", Academic Press, San Diego (1991).
- ³ H. T. Graha, "Semiconductor Superlattices: Growth and Electronic Properties", World Scientific, Singapore (1995).
- ⁴ P. Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics", John Wiley, Chichester (2000).
- ⁵ J. Chen, W. F. Smith, "Introduction to Scanning Tunneling Microscopy", American Journal of Physics, **62** 6, 573-574 (1994).
- ⁶ S. Hofner, "Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications", Springer (2003).
- ⁷ S. D. Kevan, "Angle-resolved Photoemission", Elsevier (1992).
- ⁸ M.C. Desjonquères, D. Spanjaard, "Concepts in Surface Physics", Springer (1996).
- ⁹ F. Capasso, S. Datta, "Quantum electron devices", Physics Today, **43** 2, 74-82 (1990).
- ¹⁰ J. A. White, "Self-consistent Green functions for the Anderson impurity model", Phys. Rev. B, **45**:3, 1100-1106 (1992).
- ¹¹ J. Shah, "Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures", Springer (1999).
- ¹² A. Gomis, "Green functions for ordered and disordered systems", Elsevier (1992).
- ¹³ E. Garcia-Moliner, V.R. Velasco, "The Method of Surface Green Function Matching: Theory of Single and Multiple Interfaces", World Scientific (1992).
- ¹⁴ S. J. Vlaev, V. M. Gonzalez Robles, "Mean life times of quasi-bound electronic states in single rectangular quantum wells", phys stat sol (c) **2**:10, 3653-3656 (2005).
- ¹⁵ S. J. Vlaev, I. Rodriguez-Vargas, and L. M. Gaggero Sager, "Resonant states in n-type delta-doped GaAs quantum wells", phys stat sol (c) **2**:10, 3649-3652 (2005).
- ¹⁶ S. J. Vlaev, I. Rodriguez-Vargas, and L. M. Gaggero Sager, "Mean life times of quasi-bound states in delta-doped GaAs quantum wells", Microelectronics Journal **36**:xx, 347-349 (2005).
- ¹⁷ S. Jeleu Vlaev, J. Madrigal Melchor, V. M. Gonzalez Robles, D. A. Contreras Solorio, "Quasi-bound electronic states in parabolic GaAs/AlGaAs quantum wells and barriers", Microelectronics Journal, accepted (2007).

Coloquio: Pozos delta dopados

I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina Con Paseo La Bufa S/N, 9860 Zacatecas, ZAC., México

Resumen

El dopado se puede encontrar desde el deporte, la medicina hasta los semiconductores. En los últimos es una herramienta sumamente útil debido a que las propiedades físicas se pueden modificar con relativa facilidad. El increíble control experimental que se ha alcanzado en la impurificación hace del dopado un elemento indispensable en la implementación tecnológica de los semiconductores. En particular, el dopado con precisión atómica o delta-dopado es ampliamente usado para crear o reducir barreras, poblar canales de conducción o propiamente para crear los denominados pozos delta dopados. Una de las características más importantes de esta clase de dopado es la alta densidad de portadores que se puede alcanzar ($n_{2D} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), sin embargo debido a que estos se encuentran localizados muy cerca de las impurezas ionizadas las propiedades de transporte se ven sacrificadas ($\mu \sim 10^2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$). Una manera de mejorar las propiedades de transporte en pozos delta dopados es a través del acoplamiento de capas delta dopadas. Lo principal en esta propuesta es encontrar la distancia óptima entre las capas tal que las propiedades de transporte se vean favorecidas. En este artículo se revisan las propiedades y características más importantes en estos sistemas, desde su nacimiento hasta el estado actual de los mismos. Se pone especial énfasis en el análisis teórico de pozos delta dopados con dos capas de impurezas del mismo tipo, dos o tres capas con impurezas de diferente tipo en materiales tales como GaAs, Si y ZnSe. Finalmente, se presentan algunos resultados, tanto para la estructura electrónica como para las propiedades de transporte, bajo la influencia de efectos tales como la presión hidrostática. Así entonces, se trata de presentar de la manera más clara y concisa el estado del arte en sistemas delta dopados, donde el objetivo central sea la mejora de las propiedades de transporte, estas últimas de vital importancia para las posibles aplicaciones tecnológicas.

Abstract

The doping can be found from sports, medicine until semiconductors. In the latter, the doping is a very useful tool since the physical properties can be modified with relative facility. The amazing experimental control reached in the impurity seeding techniques does of the doping an indispensable element in the technological implementation of the semiconductors. Particularly, the doping with atomic precision or delta-doping is widely used to rise or shrink potential barriers, populate conduction channels or properly to make the so called delta-doped quantum wells. One of the most important features of this type of doping is the high carrier density that can be reached ($n_{2D} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), however due to that the carriers are localized close to the ionized impurities the transport properties are not the best ($\mu \sim 10^2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$). One way to improve these properties is through the coupling of delta layers. The central idea is to find the optimum distance between delta layers such that the transport properties be improved. This article reviews the most important characteristics and properties in these systems, from their seminal proposal to the present days. Special attention is paid to the theoretical analysis of delta-doped quantum wells with two impurity layers of the same type, two or three different impurity layers, in materials such as GaAs, Si and ZnSe. Finally, some results are presented, for both the electronic structure and the transport properties, under effects such as hydrostatic pressure. So, the intention is to present in a clear and concise manner the state-of-the-art in delta doped systems in which the aim is the improvement of the transport properties, the latter very important for possible technological applications.

PACS numbers: 73.63.Hg; 73.21.Fg

Contents		V. Pozos bajo presión	23
I. Introducción	1	VI. Conclusiones y preguntas abiertas	26
II. Marco teórico	2	Agradecimientos	26
A. Aproximación de masa efectiva	2	Bibliografía	26
B. Aproximaciones TF y TFD	3		
1. Aproximación TFD	3		
2. Aproximación TF	7		
C. Movilidad relativa	8	I. INTRODUCCIÓN	
III. Pozos dobles	9	El dopado con precisión atómica o delta dopado consiste en impurificar una capa de un material semiconductor (de ahí el nombre de estas estructuras). En la práctica las impurezas ocupan unas pocas capas del material y se distribuyen de manera Gaussiana. Se suele hablar de pozos delta dopados si el ancho del perfil del dopado es menor que 25 Å, o bien en	
A. Arsenuro de Galio	16		
B. Silicio	15		
C. Selenuro de Zinc	20		
IV. Pozos p-n y p-a-p	22		
A. Arsenuro de Galio	22		
B. Silicio	24		

términos de la relación entre la extensión de la función de onda al ancho del perfil de dopado, teniendo que cumplirse que la extensión de la función de onda sea mucho mayor que el ancho del perfil. Lo primero depende esencialmente de la técnica de crecimiento, los segundo de la cantidad de impurezas depositadas. Se suele entonces hablar de pozos delta dopados si la cantidad de impurezas es tal que las orbitas medias de los electrones se solapan creándose así un gas bidimensional de electrones o huecos, según sean impurezas donora oceptoras. En principio la densidad de impurezas debe ser igual a la densidad de portadores de tal forma que si se grafican representarían una línea recta. Sin embargo, esta relación no se mantiene para todas las densidades de impurezas, hay una para cual la concentración de portadores no cambia debido principalmente a efectos de compensación, estamos entonces en el límite de saturación. Evidentemente tanto el límite al que se crean los pozos delta dopados como el de saturación dependen fuertemente del material y dopante empleados. En 1980 Wood y colaboradores (1) comenzaron a estudiar lo que llamaron dopado hiperabrupto que no es más que delta dopado. La técnica básica consiste en interrumpir el crecimiento y bajar la temperatura del mismo. Ellos avizoraban que aplicando esta clase de dopado en Transistores de Efecto de Campo (FET's, por sus siglas en inglés) se mejorarían sustancialmente propiedades tales como la transconductancia extrínseca. Años más tarde Schubert y Ploog (2) demostraban el FET con dopado hiperabrupto o δ -FET. Dentro de las ventajas que reportan están alto voltaje de ruptura de compuerta, alta transconductancia extrínseca y alta densidad de portadores.

Yamaguchi y colegas (3) proponen una manera de mejorar el desempeño de los δ -FET's. La propuesta consiste en colocar una barrera, generada por dopado deltaico de aceptores, a una cierta distancia de la capa de donores. Lo que ellos denominaron Transistor de Efecto de Campo de Capa Atómica Dopada (ALD-FET, por sus siglas en inglés). El objetivo de esta barrera es eliminar, en la medida de lo posible, la corriente de merma generada entre la fuente y el sumidero (comúnmente conocida como punchthrough). Posteriormente Nakagawa et al (4) demuestran que efectivamente la corriente de merma es suprimida por la inclusión de la barrera, y además que se mantiene una alta transconductancia, indicando que el dispositivo es promisorio como FET de canal corto. Hay que mencionar que la transconductancia reportada para el ALD-FET no es mayor que la de un δ -FET convencional, sin embargo la supresión de la corriente de merma mejora sustancialmente la ejecución del ALD-FET con respecto al δ -FET.

En 1993 Zheng et al (5) hacen una propuesta similar a la de Yamaguchi y colaboradores (3). La diferencia radica en que ambas capas dopadas son de donores. Ellos reportan que la movilidad en pozos delta dopados dobles, como los llamaron, aumenta de dos a cinco veces con respecto a un solo pozo (pozo simple). Estos resultados resonaron en algunos grupos teóricos y experimentales (6-8), los cuales reportan tendencias similares a las reportadas por Zheng et al (5). En 1998 Gurtovoi et al (9) reportan estudios experimentales en

estos sistemas. Destacan en particular un detalle reportado por Zheng y colaboradores referente a el aumento en la movilidad con la temperatura, tendencia atípica en pozos delta dopados (10, 11). Ellos observan que la movilidad de los pozos dobles nunca es mayor que la de los simples, sin embargo los dobles presentan un aumento de 20 y 30% en la conductividad lo cual los hace más atractivos para las aplicaciones tecnológicas.

En los últimos años se está empleando el dopado con precisión atómica en FET's basados a heteroestructuras (HFET's, por sus siglas en inglés) (12-18). El dopado se hace de manera simétrica en las barreras del HFET, tratando de encontrar la distancia óptima entre el canal de conducción y las capas dopadas, tal que las propiedades de transporte se vean favorecidas. Esto mejora las propiedades de linealidad del dispositivo lo cual es importante para aplicaciones en dispositivos de alta potencia y alta frecuencia, en particular circuitos integrados milimétricos y componentes inalámbricas.

Un mecanismo alternativo para mejorar las propiedades de transporte en pozos delta dopados podría ser la presión hidrostática (19). Este mecanismo también podría servir para lograr alta densidad de carga (20). Los sistemas pueden ser diversos, un pozo simple, pozos dobles, etc. La idea central es encontrar los parámetros -densidad de impurezas, distancia entre capas dopadas, etc.- en función de la presión que optimicen las propiedades de transporte. Como se verá en la sección dedicada a estos sistemas en los primeros cálculos se encuentra un aumento de hasta ocho veces respecto a pozos sin presión. Estos resultados no han sido corroborados experimentalmente, sin embargo hay optimismo ya que recientemente han aparecido reportes experimentales en estos sistemas (21, 22).

Dentro de este contexto, el presente artículo tiene como objetivo hacer una revisión de sistemas delta dopados en los cuales el punto central sea la mejora de las propiedades de transporte. Se pone especial atención a sistemas propuestos en años recientes, así como a las metodologías desarrolladas para el estudio de los mismos. En particular, pozos dobles, pozos p-n y p-n-p, y pozos bajo presión. Se hace un análisis detallado de la estructura electrónica y la movilidad, obteniendo el juego de parámetros -densidad de impurezas, distancia entre capas dopadas, y presión hidrostática- que optimizan las propiedades de transporte en cada uno de los sistemas mencionados. Lo cual es atractivo, como ya se ha vertido, para aplicaciones tecnológicas basadas en FET's.

II. MARCO TEÓRICO

A. Aproximación de masa efectiva

Para la aproximación de masa efectiva usaremos un sistema particular. Si tipo n, que no es el más sencillo pero sí el más ilustrativo. La banda de conducción del Si consiste en seis valles equivalentes localizados cerca del punto X en la zona de Brillouin. Las masas son anisótropas y es posible separar ecuaciones de Schrödinger para cada valle

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_t^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_l^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) F^z(\mathbf{x}) = E_z F^z(\mathbf{x}). \quad (1)$$

Esta ecuación es válida para los valles z y \bar{z} . Para el valle x se tiene

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_t^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_l^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(z) \right) F^x(\mathbf{x}) = E_x F^x(\mathbf{x}). \quad (2)$$

Ecuaciones similares se aplican a los valles \bar{x} , y y \bar{y} . La masa longitudinal m_l^* se aplica paralelamente a la dirección de crecimiento $[001]$, es decir, para los valles z y \bar{z} , mientras la masa transversal m_t^* lo hace para los valles x , \bar{x} , y y \bar{y} . Entonces se hará referencia a los dos valles como longitudinales y transversales. Ya que las ecuaciones de Schrödinger son las mismas para valles del mismo tipo, los autovalores son también idénticos. Por tanto, los autovalores longitudinales estarán doblemente degenerados y los transversales degenerados por un factor de cuatro.

La solución de las ecuaciones (1) y (2) son ondas planas en las direcciones x y y . Por ende la densidad electrónica correspondiente es

$$n(z) = \sum_n n_n^* |F_n^z(z)|^2. \quad (3)$$

Aquí el índice j corre sobre los seis valles. Suponiendo temperatura cero, N_j^* es

$$n_n^* = \frac{m_{||j}^*}{\pi \hbar^2} [E_F - E_{n_j}] \Theta(E_F - E_{n_j}), \quad (4)$$

donde $m_{||j}^* = m_l$ si $j = z, \bar{z}$ y $m_{||j}^* = (m_t m_l)^{1/2}$ si $j = x, \bar{x}, y, \bar{y}$. E_F representa el nivel de Fermi y Θ la función escalón.

En el caso del GaAs tipo n, la aproximación de masa efectiva adopta una forma más simple debido a que no existen las múltiples degeneraciones. Además no se requiere descomponer la banda de manera longitudinal y transversal. Así sólo se tiene una ecuación y la masa simplemente es la de electrón en GaAs.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) F(z) = EF(z). \quad (5)$$

$$n_n = \frac{m_n^*}{\pi \hbar^2} [E_F - E_{n_n}] \Theta(E_F - E_{n_n}) \quad (6)$$

En el caso de los pozos tipo p en GaAs, Si y ZnSe la aproximación adopta una forma similar a la del GaAs tipo n, con la diferencia que se tienen dos o tres ecuaciones debido a la estructura de bandas particular de cada uno de estos materiales. Así entonces, se tiene una ecuación para huecos pesados, otra para huecos livianos y una más para huecos de desdoblamiento (split-off), esta última en los casos que sea necesario incluirla.

B. Aproximaciones TF y TFD

La aproximación TFD es la generalización de la TF ya que los efectos de intercambio se toman explícitamente en el funcional de la energía. En la presente sección mostraremos el desarrollo detallado de la teoría TFD para un gas de huecos bidimensional. La aproximación TF se desarrolla con menos detalle para un gas de electrones bidimensional, pero esta quedará muy clara dado el desarrollo de la teoría TFD.

1. Aproximación TFD

Asumiremos que estamos en el límite de bajas temperaturas y que las relaciones del gas ideal son válidas en cada punto del espacio, i.e., que el gas es localmente homogéneo, con lo que el número de portadores por unidad de volumen es,

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3(\mathbf{r})}{\hbar^3}. \quad (7)$$

Siguiendo la aproximación de TFD y teniendo en cuenta que las bandas de huecos pesados y livianos son consideradas como bandas independientes, la energía cinética de huecos por unidad de volumen puede ser escrita como en (23) o en (24)

para el caso a dos o tres bandas, respectivamente, de la siguiente manera

$$T = \frac{1}{2m_{hh}m_v} \int_0^{p_F} p_{hh}^2 I_v(p_{hh}) dp_{hh} = \frac{3}{2m_{hh}^2 m_v p_F} \int_0^{p_F} p_{hh}^4 dp_{hh} \quad (8)$$

haciendo la integral y sustituyendo la Ec. (7) en la Ec. (8) para p_F

$$T = \frac{3 [3\pi^2 h^3 p(\tau)]^{2/3}}{10m_{hh}m_v} \quad (9)$$

con $n_{hh} = \left[1 - \left(\frac{m_{hh}}{m_v} \right)^{1/2} \right]^{2/3} (23)$ o $m_{hh} = \left[1 - \left(\frac{m_{hh}}{m_v} \right)^{1/2} + \left(\frac{m_{hh}}{m_v} \right)^{3/2} \right]^{2/3}$ (24) para el caso a dos o tres bandas, respectivamente, donde m_{hh} , m_{hv} y m_{vh} son las masas de huecos pesados, livianos y de desdoblamiento. Por lo que el funcional de la energía cinética es

$$T = \int p(v) dv = \frac{3}{10m_{hh}m_v} \int p(z) [3\pi^2 h^3 p(z)]^{2/3} dz \quad (10)$$

El funcional de la energía referente a la interacción hueco-hueco es

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \iint \frac{p(\mathbf{r})p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad (11)$$

El llamado modelo hidrogenoideo es considerado, por lo que los huecos están en un medio homogéneo de constante dieléctrica ϵ_r .

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \iint p(z)p(z') dz dz' \iint \frac{dS dS'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (12)$$

donde dS y dS' son los diferenciales de área de las coordenadas \mathbf{r} y \mathbf{r}' , respectivamente. Tomando las integrales de área

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \iint p(z)p(z') dz dz' \iint dxdy \iint \frac{dx'dy'}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} \quad (13)$$

redefiniendo $X' = (x-x')$ and $Y' = (y-y')$

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \iint p(z)p(z') dz dz' \iint dxdy \iint \frac{dX'dY'}{\sqrt{X'^2 + Y'^2 + (z-z')^2}} \quad (14)$$

ahora llevando a coordenadas polares $X' = R' \cos \theta$ y $Y' = R' \sin \theta$,

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \iint p(z)p(z') dz dz' \iint dxdy \int_0^R \int_0^\pi \frac{2R' dR' d\theta}{\sqrt{R'^2 + (z-z')^2}} \quad (15)$$

haciendo el cambio de variable $u = R^2 - (z - z')^2$ y tomando las integrales sobre u , θ , r y y se llega a la siguiente ecuación

$$V_{hh} = \frac{e^2 \pi}{\epsilon_r} \iint p(z)p(z') (\sqrt{R^2 - (z - z')^2}) dz dz' \quad (16)$$

En el límite $R = \infty$, la primera integral en la Ee. (16) diverge, pero podemos ignorar ese término por que corresponde a la energía de autointeracción. Entonces

$$V_{hh} = -\frac{e^2 \pi}{\epsilon_r} \iint p(z)p(z') |z - z'| dz dz' \quad (17)$$

Esta última ecuación es muy interesante, ya que como la energía de autointeracción es omitida, esperamos que nuestros resultados sean más próximos a los resultados experimentales. Otra característica interesante es el signo negativo de dicha ecuación, ya que está en contradicción con la lógica común de una interacción repulsiva como lo es la interacción hueco-hueco.

La interacción entre el gas de huecos y el plano de impurezas está descrita por el siguiente funcional de la densidad:

$$V_{hn} = \int p(r)V_N(r)dr - \frac{2e^2 \pi}{\epsilon_r} p_{2D} \int p(z) |z - d| dz \quad (18)$$

Aquí, p_{2D} es la densidad de impurezas bidimensionales en el pozo. La energía de intercambio para un gas de huecos con acoplamiento de la banda de valencia es (25; 26)

$$\epsilon_i(r) = -\epsilon_i(w) \frac{3a_0^*}{2\pi} (3\pi^2 p(r))^{1/3} R_p^* \quad (19)$$

donde

$$\epsilon_i(w) = 2^{-1/3} + (1-w^2)[w^2(a_0 + b) + c(4w^4 + 3w^2 - 2w - 1)] \quad (20)$$

con $w = \frac{m_h^*}{m_{hh}}$, $a = 0.679$, $b = -0.0686$, y $c = -0.0811$. Por tanto, el funcional de la energía de intercambio es

$$E_x = \int p(r)\epsilon_i(r)p(r)dr \quad (21)$$

sustituyendo la Ec. (19) en la Ec. (21)

$$E_x = -\epsilon_i(w) \frac{3a_0^*}{2\pi} R_p^* \int p(z)(3\pi^2 p(z))^{1/3} dz \quad (22)$$

Sumando cada una de las contribuciones, el funcional total E_{TFD} está dado de la siguiente manera

$$E_{TFD} = \frac{3}{10m_h m_n} \int p(z) [3\pi^2 h^3 p(z)]^{2/3} dz - \frac{e^2 \pi}{\epsilon_r} \iint p(z)p(z') |z - z'| dz dz' + \frac{2e^2 \pi}{\epsilon_r} p_{2D} \int p(z) |z - d| dz - \frac{3a_0^* \epsilon_i(w) R_p^*}{2\pi} \int p(z)(3\pi^2 p(z))^{1/3} dz \quad (23)$$

Es bien sabido que si se aplica el principio variacional $\delta(E_{TFD} - \mu N) = 0$ y se calcula por procedimientos usuales,

podemos encontrar el multiplicador de Lagrange μ identificado como el potencial químico

$$\mu = \frac{1}{2m_h m_n} [3\pi^2 h^3 p(z)]^{2/3} - \frac{2e^2 \pi}{\epsilon_r} \int p(z) |z - z'| dz + \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} \times p_{2D} |z - d| - \epsilon_i(w) \frac{2a_0^*}{\pi} [3\pi^2 p(z)]^{1/3} R_p^* \quad (24)$$

Consideramos unidades efectivas $R_p^* = e^2 / (2\epsilon_r a_0^*)$ y $a_0^* = \epsilon_r h^2 / (e^2 m_h m_n)$, definiendo $p_{eff}(z) = (a_0^*)^3 p(z)$ es posible

reescribir el potencial químico como

$$\mu = \frac{1}{m_n} [3\pi^2 p_{00}(z)]^{2/3} - \frac{2e^2 \pi}{\epsilon_r} \int p(z') |z - z'| dz' + \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} \langle p_{2D} \rangle; \quad d] - \chi(w) \frac{2}{\pi} (3\pi^2 p_{00}(z))^{1/3} R_g^* \quad (25)$$

Por otro lado, el doblamiento espacial de la banda de valencia está descrito por la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} p(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} p_{2D} \delta(z - d) \quad (26)$$

y

$$V_H(z) = -\frac{2e^2 \pi}{\epsilon_r} \int p(z') |z - z'| dz' - \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} p_{2D} |z - d| \quad (27)$$

donde $V_H(z)$ es el potencial de Hartree. Tomando en cuenta la Ec. (27), el potencial químico, Ec. (25), es

$$\mu = \left[\frac{3\pi^2 p_{00}(z)}{m_n} \right]^{2/3} R_g^* + V_H(z) - \frac{2\chi(w)}{\pi} (3\pi^2 p_{00}(z))^{1/3} R_g^* \quad (28)$$

Resolviendo la ecuación anterior para $(p_{00}(z))^{1/3}$ y eligiendo la solución físicamente aceptable

$$p_{00}(z) = \frac{m_n^3 \chi^3(w)}{3\pi^3} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2 (\mu^* - V_H^*(z))}{\chi^2(w) m_n}} \right]^3 \quad (29)$$

donde $V_H^* = V_H/R_g^*$ y $\mu^* = \mu/R_g^*$. Reemplazando $p_{00}(z)$ en la ecuación de Poisson,

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{8m_n^3 \chi^3(w)}{3\pi^3} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2 (\mu^* - V_H^*(z))}{\chi^2(w) m_n}} \right]^3 + 8\pi p_{2D} \delta(z - d) \quad (30)$$

la solución de esta ecuación proporcionará una solución autoconsistente de Hartree-Fock. Ya que la ecuación (30) es no lineal, su solución no es trivial y tiene que ser resuelta de manera numérica; en tal caso no es más conveniente que hacer un cálculo autoconsistente. Por lo tanto, para que nuestro método sea viable y ventajoso, haremos una aproximación adicional. Los efectos de intercambio afectan la estructura de niveles de la siguiente manera: primero los efectos de muchos cuerpos a través del potencial de intercambio generan un cambio en los estados de la banda de valencia. Por lo tanto, este cambio en la estructura de subbanda modifica la densidad de carga; como consecuencia el potencial de Hartree se ve modificado. Nosotros supondremos que la presencia del intercambio modifica la estructura electrónica y la densidad de carga, pero descartaremos cambios en la forma del potencial de Hartree, todo esto dentro de una aproximación semiclásica. En tal caso la correspondiente ecuación de Poisson a resolver es

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{8m_n^3 \chi^3}{3\pi^3} (\mu^* - V_H^*(z))^{3/2} + 8\pi p_{2D} \delta(z - d) \quad (31)$$

la solución físicamente aceptable de este tipo de ecuación es de la forma $1/f f'(z)$ (27), donde $f(z)$ es una función lineal de z . En el caso de los pozos dobles la solución tomará la forma (28)

$$V_H^*(z) - \mu^* = \frac{a^2}{(a|z - d| + z_0)^2} \quad (32)$$

sustituyendo esta última ecuación en la Ec. (31), encontramos

$$a^2 = \frac{2m_n^3 \chi^3}{15\pi} \quad (33)$$

y de la condición de neutralidad de carga obtenemos

$$n_i = \left(\frac{e^2 n}{\pi p_{\text{TF}}^2} \right)^{1/3} \quad (34)$$

Sustituyendo la Ec. (32) en la Ec. (30), la densidad de carga es

$$\rho_{\text{ext}}(z) = \frac{m_e^2 c^4 (n_i)}{3\pi^3} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{\kappa^2(w) m_e (\alpha |z - d| + z_0)^2}} \right] \quad (35)$$

Para el potencial de intercambio usaremos.

$$V_x^*(z) = -\kappa(w) \frac{2}{\pi} (3\pi^2)^{1/3} (n_{\text{ext}}(z))^{1/3} \quad (36)$$

sustituyendo la Ec. (35) en la Ec. (36), obtenemos

$$V_x^*(z) = -\frac{2\kappa^2(w)m_e}{\pi^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{\kappa^2(w)m_e(\alpha|z-d|+z_0)^2}} \right] \quad (37)$$

Finalmente, el potencial total $V^*(z) = V_H^*(z) + V_x^*(z)$ es

$$V^*(z) = -\frac{\alpha^2}{(\alpha|z-d|+z_0)^2} - \frac{2\kappa^2(w)m_e}{\pi^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{\kappa^2(w)m_e(\alpha|z-d|+z_0)^2}} \right] \quad (38)$$

2. Aproximación TF

La derivación es similar a la aproximación TFD por lo que no se hace en detalle. Sin embargo, ya que la TF se aplica a un gas bidimensional de electrones se hace una deducción tratando de resaltar los aspectos más importantes de la misma.

Las relaciones de gas ideal se suponen válidas en cada punto, esto es la densidad de electrones puede ser escrita como:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3(\mathbf{r})}{\hbar^3} \quad (39)$$

donde p_F es el radio de Fermi en el espacio de momentos.

Tomando la probabilidad de encontrar a un electrón entre p y $p + dp$, el funcional de densidad concerniente a la energía cinética es

$$T = \int n(\mathbf{r}) \epsilon(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{3}{10m^*} \int n(z) [3\pi^2 \hbar^2 n(z)]^{2/3} dz \quad (40)$$

$m^* = (m_l^2 m_t)^{1/3}$ es el promedio geométrico, con m_l y m_t la masa longitudinal y transversal esto en el caso del *Si*, y simplemente la masa efectiva $m^* = m_{\text{GaAs}}$ de la banda de conducción en el caso del *GaAs*. El funcional correspondiente a la interacción entre la nube de portadores y las impurezas ionizadas en el plano es,

$$V_{\text{ext}} = \int n(z) V_i(r) dr = \frac{2\pi e^2 n_2 d}{\epsilon_r} \int n(z) |z - d| dz \quad (41)$$

donde $n_2 d$, d y ϵ_r son la densidad bidimensional de impurezas, la distancia a la cual está localizado el pozo y la constante dieléctrica relativa respectivamente. El funcional de la densidad asociado a la interacción electrón-electrón viene dado por (29)

$$V_{\text{ee}} = -\frac{\pi e^2}{\epsilon_r} \int n(z) n(z) |z - z'| dz dz' \quad (42)$$

Construyendo el funcional de la energía de Thomas-Fermi y tomando la variación por procedimientos estándar podemos llegar a la ecuación de Thomas-Fermi (29)

Los efectos de canje y correlación son tomados en cuenta dentro de los lineamientos de la aproximación de densidad local (LDA), por lo que el potencial de canje y correlación puede ser escrito como

$$n(z) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} (\mu - V_H(z))^{3/2} \quad (43)$$

$$V_{II}(z) = \left[1 + \frac{0.7734b}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_2} \right) \right] \left(\frac{2}{\pi a r_2} \right) R_c^* \quad (44)$$

donde

$$r_2 = (4\pi n_0^* h(z)/3)^{-1/3} \quad (45)$$

En esta expresión $a_0^* = \epsilon_0 h^2 / (4\pi^2 m^* e^2)$ es el radio de Bohr efectivo y $R_c^* = \epsilon^2 / (2\epsilon_0 a_0^*)$ el Rydberg efectivo, y $a = (4/(9\pi))^{1/3}$.

Sustituyendo la relación entre la densidad de portadores y el potencial de Hartree en la ecuación anterior para c_+ y c_- en la Ec. (44), el potencial de cambio y correlación puede ser escrito en términos del de Hartree

$$V_{II}^*(z) = -c \left[1 + a \frac{\ln(1 + b(\mu^* - V_{II}^*(z))^{1/3})}{(\mu^* - V_{II}^*(z))^{1/3}} \right] (\mu^* - V_{II}^*(z))^{1/2} \quad (46)$$

esta última ecuación está dada en unidades atómicas $V_{II}^* = V_{II}/R_c^*$, $V_H^* = V_H/R_c^*$ y $\mu^* = \mu/R_c^*$. $a = (0.7734/21)^{1/3}/(9\pi)^{-1/3}$, $b = 21[4/(9\pi)]^{1/3}$ y $c = 2/\pi$. El potencial autoconsistente de Hartree es (23; 27)

donde $\beta = 2/(15\pi)$ y $z_0 = (z^2/\pi n_0^* a_0^*)^{1/2}$. Finalmente sustituyendo la Ec. (47) en la Ec. (46), el potencial total $V^*(z) = V_H^*(z) + V_{II}^*(z)$ es

$$V_H^*(z) = \mu^* \frac{\beta^2}{(\beta|z - d| + z_0)^4} \quad (47)$$

$$V^*(z) = \frac{\beta^2}{(\beta|z - d| + z_0)^4} \left[\frac{\beta^2}{(\beta|z - d| + z_0)^4} + \ln \left(1 + \frac{b\beta^2}{(\beta|z - d| + z_0)^4} \right) \right] \quad (48)$$

Esta última ecuación resume el modelo propuesto para los pozos delta dopados tipo-n. En lugar de realizar numéricamente cálculos autoconsistentes tan tediosos y problemáticos, simplemente resolvemos la ecuación de Schrödinger a una o dos bandas, dependiendo si se trata de GaAs o bien Si y obtenemos la estructura de niveles.

C. Movilidad relativa

Una vez obtenidos los autovalores y autofunciones, con el presente modelo para el potencial, se calcula la movilidad. Únicamente se toma en cuenta la dispersión por las impurezas ionizadas en la capa impurificada, ya que es el mecanismo dispersivo más importante a bajas temperaturas. Se considera el potencial Coulombiano dispersivo, debido a las impurezas

ionizadas distribuidas azarosamente en la capa impurificada. Se toma la razón de las movilidades de un sistema con un parámetro variable (SV) -distancia, presión hidrostática, etc - a un sistema de referencia (SR). Como se verá más adelante la razón de movilidades de pozos dobles a un simple pozo con presión a pozos sin presión, o cualquier otro parámetro que se pueda analizar. La ecuación de partida es la siguiente.

$$\mu_{rel}^A = \frac{\mu_{SV}}{\mu_{SR}} = \frac{\int \int \rho_e^{SR}(z') \rho_{imp}^{SV}(z) |z - z'| dz dz'}{\int \int \rho_e^{SV}(z') \rho_{imp}^{SR}(z) |z - z'| dz dz'} \quad (49)$$

donde $\rho_e^{SR}(z')$ ($\rho_e^{SV}(z')$) es la densidad electrónica en el SR (SV) y $\rho_{imp}^{SR}(z')$ ($\rho_{imp}^{SV}(z')$) es la densidad de impurezas en el SR (SV). La ecuación anterior se puede llevar a la forma

$$\mu_{rel}^A = \frac{\sum_i m_i^* \sum_j \int \int |E_v^{SR}(z)|^2 (E_v^{SR} - E_{im}^{SR}) \rho_{im}^{SR}(z) |z - z'| dz dz'}{\sum_i m_i^* \sum_j \int \int |E_v^{SV}(z)|^2 (E_v^{SV} - E_{im}^{SV}) \rho_{im}^{SV}(z) |z - z'| dz dz'} \quad (50)$$

donde $F_i^{SR}(z')$, E_i^{SR} y F_i^{SH} (F_i^{SV}), E_i^{SH} y E_i^{SV} son la función envolvente, el nivel de Fermi y el i -ésimo nivel del SR (SV), respectivamente. Lo importante aquí es encontrar el parámetro o parámetros óptimos para la máxima movilidad. Las expresiones anteriores son válidas para $T \rightarrow 0$ K. En (30) se estudia la variación del nivel de Fermi y los autovalores como función de la temperatura. De acuerdo con este

estudio la estructura electrónica se modifica muy poco para el intervalo de temperaturas de 0 a 77 K. Por lo que, para temperaturas por debajo de 77 K la estructura electrónica se puede tomar como la correspondiente a 0 K y el efecto térmico puede verse como una redistribución de carga. Bajo estas suposiciones la expresión de la movilidad toma la forma

$$\mu_{tot}^i = \frac{\sum_j m_j^* \sum_i \int |F_i^S(z')|^2 \int_0^L \left[1 + e^{(E_i^S - E_F^S)/k_B T} \right] \mu_{mp}^{SR}(z) |z - z'| dz dz'}{\sum_j m_j^* \sum_i \int |F_i^{SH}(z')|^2 \int_0^L \left[1 + e^{(E_i^S - E_F^S)/k_B T} \right] \mu_{mp}^{SV}(z) |z - z'| dz dz'} \quad (51)$$

III. POZOS DOBLES

En esta sección se describen los resultados más importantes concernientes a pozos delta dopados dobles en GaAs, Si y ZnSe. En el caso de GaAs y Si se presentan los resultados tanto para pozos tipo n como p, mientras que en ZnSe únicamente los referentes a pozos tipo p. Antes de pasar a los resultados presentaremos como es que se construyen los potenciales para los pozos tipo n y p. Supondremos que la densidad de impurezas en las capas que conforman el sistema doble es la misma, además tomaremos como origen un punto

intermedio entre las dos capas de tal manera que el potencial sea simétrico. Así entonces usaremos este último hecho para restringirnos a sólo el semi-espacio $z \leq 0$. En el caso de los pozos tipo p, usaremos la teoría TFD ya que los efectos de intercambio son más relevantes y un funcional más robusto es siempre aconsejable, mientras que para los pozos tipo n usaremos la aproximación TF.

El potencial para los pozos tipo p es del tipo Ec. (37), donde se ha tomado $d = l/2$ y se ha usado la simetría del potencial, esto es,

$$V_p^*(z) = \frac{\alpha^2}{(\alpha|z + l/2| + z_{0p})^4} - \frac{2\kappa^2(w)m_c}{\pi^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{\kappa^2(w)m_c} (\alpha|z + l/2| + z_{0p})^4} \right] \quad (52)$$

De forma similar para los pozos tipo n (Ec. 47).

$$V_n^*(z) = \frac{\beta^2}{(\beta|z + l/2| + z_{0n})^4} + a \ln \left(1 + \frac{b\beta^4}{(\beta|z + l/2| + z_{0n})^2} \right) \quad (53)$$

En el caso de la movilidad la expresión toman la forma:

$$\mu_{tot}^i = \frac{\sum_j m_j^* \sum_i \int |F_i^S(z')|^2 (E_i^S - E_F^S) |z'| dz'}{\sum_j m_j^* \sum_i \int |F_i^{SH}(z')|^2 (E_i^{SH} - E_F^S) (|z' - l/2| + |z' + l/2|) dz'} \quad (54)$$

donde $F_i^S(z')$, E_i^S y E_i^H ($F_i^{SH}(z')$, E_i^{SH} y E_i^{SV}) son la función

envolvente, el nivel de Fermi y el i -ésimo nivel de los pozos

simples (pozos dobles), respectivamente. Tomando en cuenta la temperatura.

$$\mu_{r,d}^0 = \frac{\sum_j m_j^* \sum_i |F_{r,d}^j(z')|^2 \ln \left[1 + e^{(E_{r,d}^j - E_F^0)/k_B T} \right] |z'| dz'}{\sum_j m_j^* \sum_i |F_{r,d}^j(z')|^2 \ln \left[1 + e^{(E_{r,d}^j - E_F^0)/k_B T} \right] (|z' - l/2| + |z' + l/2|) dz'} \quad (55)$$

Antes de comenzar con la parte de resultados propiamente se mencionaran algunos aspectos sobre la presentación de los mismos. Se ha prescindido de la discusión de los efectos de intercambio, y la comparación con los datos experimentales, al menos en lo concerniente a la estructura de niveles en pozos simples. Lo único que mencionaremos es que los primeros han resultado ser relevantes en la determinación de las propiedades electrónicas de esta clase de sistemas, y que los datos obtenidos dentro de la metodología aquí empleada están en buen acuerdo con los datos teóricos y experimentales dispobles, al menos para pozos simples. Detalles sobre estos puntos se encuentran en la bibliografía citada en los apartados correspondientes. Las propiedades generales de los materiales estudiados -GaAs, Si, y ZnSe- son ampliamente conocidas en la literatura. La importancia de estos en aplicaciones electrónicas y optoelectrónicas es bien sabida. Pozos delta dopados en estos materiales han sido estudiados intensamente tanto desde el punto de vista fundamental como el aplicado. Para mayores detalles se pueden consultar los trabajos citados en cada sección.

Así pues nos centraremos en aspectos generales del comportamiento de la estructura de niveles y la movilidad; la conexión de la densidad de subbanda con la movilidad, y la variación de la movilidad con la temperatura en el intervalo de 0 a 77 K. Ya que el comportamiento general en los pozos dobles es muy parecido en GaAs, Si y ZnSe, tanto tipo n como p, nos centraremos en los aspectos más relevantes de cada uno de estos sistemas.

A. Arsenuro de Galio

Los siguientes parámetros: $m^* = 0.067m_0$, $m_{hh}^* = 0.52m_0$, $m_{lh}^* = 0.087m_0$, $\epsilon_s = 12.5$ y $\zeta(m) = 0.6476$ se usan típicamente para el GaAs. La densidad de impurezas se trabaja en el intervalo de 1×10^{12} a 1×10^{13} cm^{-2} . El origen de las energías se toma en el borde de la banda de valencia para los pozos tipo p, y el borde de la banda de conducción para el caso de los pozos tipo n.

En la Fig. 1 se presenta el perfil del potencial y las autofunciones para los diferentes niveles de huecos, éstas están normalizadas a 1, para (a) $l = 50$ Å y (b) $l = 100$ Å, respectivamente. En la Fig. 2 se muestra la dependencia de los niveles *versus* la distancia entre los planos de las impurezas para dos concentraciones típicas, (a) $p_{2D} = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} y (b) 1×10^{13} cm^{-2} . Las tendencias son similares para ambas concentraciones. La distancia a la cual se rompe la de-

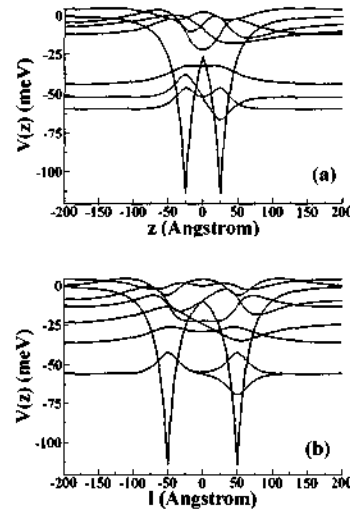


FIG. 1 Perfil del potencial y autofunciones normalizadas a 1, para los pozos dobles en GaAs tipo p para: (a) $l = 50$ Å y (b) $l = 100$ Å, con $p_{2D} = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} . $V(z)$ está en meV y z en Å.

generación disminuye conforme la densidad de impurezas aumenta, y su valor para el estado básico de huecos pesados siempre es menor en comparación con cualquier otro nivel.

Para la movilidad se presentan los resultados obtenidos en las concentraciones siguientes: 3, 5, 7 y 9 en unidades de 10^{12} cm^{-2} . La Fig. 3 (a) correspondiente a la primera de las densidades mencionadas, muestra un máximo en la movilidad relativa alrededor de 170 Å. Al aumentar la densidad, el máximo en la movilidad se corre a una distancia menor 150 Å, Fig. 3 (b). Para 7×10^{12} cm^{-2} dicho máximo se presenta a una distancia de 130 Å y para 9×10^{12} cm^{-2} el máximo se presenta a 120 Å, Fig. 4. Estos máximos en la movilidad obedecen primordialmente al reordenamiento en la densidad de carga, debido a la degeneración del nivel básico de huecos pesados y a la aparición de canales adicionales de conducción. El nivel básico de huecos pesados es el que más carga ocupa, por ende uno de los que más contribuyen a la dispersión, ya que la densidad de carga en este nivel se localiza

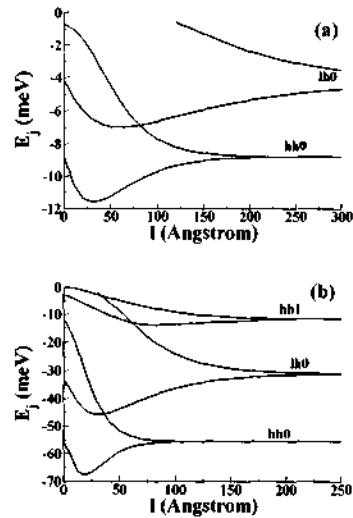


FIG. 2 Niveles de energía (en meV) de los pozos dobles tipo p en GaAs para (a) $p_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ versus la distancia entre los pozos (en Å).

muy cerca de las impurezas ionizadas. Un cambio en la densidad de carga en el nivel básico de huecos pesados trae consigo un cambio importante en la movilidad, incluso cuando dicho cambio sea pequeño. También es bien sabido que la aparición o desaparición de canales de conducción trae consigo cambios importantes en las propiedades de transporte de sistemas unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales (31).

Con tal de analizar con un poco más detalle las curvas antes mencionadas se consideraran las densidades de subbanda relativas, i.e., la densidad de subbanda de un cierto nivel dividida la densidad de impurezas en un pozo (p_{2D}^*/p_{2D}) como función de la distancia entre los pozos, Figs. 5 y 6. Para la Fig. 5 (a) que corresponde a $p_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se ve que en el intervalo de 0 a 170 Å se tienen únicamente tres subbandas ocupadas, dos correspondientes a niveles de huecos pesados y la restante a huecos ligeros. El nivel básico de huecos pesados es el que mas carga ocupa a distancias pequeñas representando el 84.6 % de carga relativa para $l = 10 \text{ Å}$, al primer nivel excitado de huecos pesados le corresponde el 8.35 % de la carga relativa, mientras que al nivel básico de huecos ligeros el restante 7.05 %. A medida que se separan los pozos $hh0$ se va desocupando al igual que $hh1$ como es visible en la Fig. 5 (a), en cambio la densidad de carga relativa de $hh1$ va aumentando hasta alcanzar el 48.15 % cuando se degenera. Al mismo tiempo que se degenera el nivel básico de huecos pesados se ocupa el primer nivel excitado de huecos ligeros ocupando el 0.25 % de la carga relativa. Este nivel va aumentando su ocupación relativa conforme aumentamos la distancia entre los pozos hasta alcanzar el 1.35 % de la carga

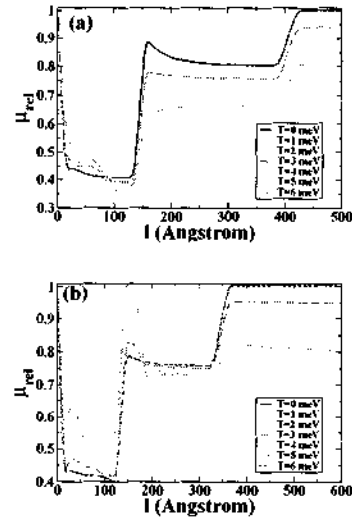


FIG. 3 Cálculos de movilidad para pozos dobles tipo p en GaAs para (a) $p_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando $k_B T$ en 1 meV de 0 a 6 meV.

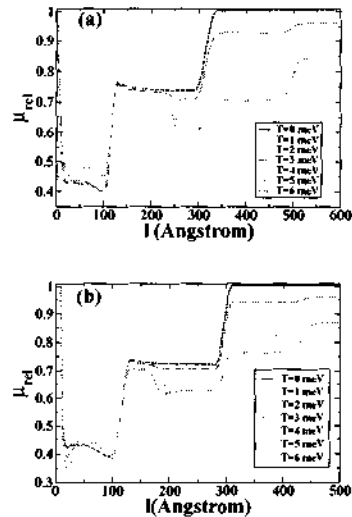


FIG. 4 Cálculos de movilidad para pozos dobles tipo p en GaAs para (a) $p_{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando $k_B T$ en 1 meV de 0 a 6 meV.

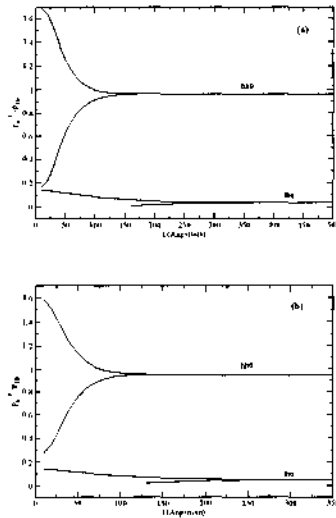


FIG. 5 Densidad de subbanda relativa p_i^0/p_{2D} de los DDD tipo p en GaAs para (a) $p_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

cuando se degenera, $l = 420 \text{ \AA}$. Hay varias cosas importantes a resaltar en lo anterior, en primer lugar la degeneración del nivel básico de huecos pesados ocupando el 96.3% de la carga relativa, en segundo lugar el grado de confinamiento tanto del nivel básico como del primer nivel excitado de huecos pesados los cuales tienen un proceso inverso, mientras en $hh0$ el grado de confinamiento va siendo menor conforme separamos los pozos en $hh1$ el grado de confinamiento va aumentando, en tercer lugar y último la ocupación de $hh1$. Considerando los puntos anteriores es de esperar que la movilidad tenga un aumento monótono conforme separamos los pozos hasta alcanzar su máximo cuando $hh0$ se degenera y aparece un canal adicional de conducción ($hh1$), que como se sabe al aparecer dicho canal se espera que la movilidad presente un decremento (31). Al seguir separando los pozos la movilidad aumentará paulatinamente debido a la desocupación de $hh0$. El mismo comportamiento se presenta para 5 y $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, Figs. 5 (b) y 6 (a).

Un comportamiento similar se presenta en la Fig. 6 (b), correspondiente a $p_{2D} = 9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, excepto que a una separación de 70 \AA aparecen $hh2$ y $hh1$ ocupados, por lo que es de esperar que la movilidad presente un máximo a esta distancia. Al separar aún más los pozos $hh0$ queda degenerado alrededor de 100 \AA y al mismo tiempo queda desocupado $hh2$ dando lugar a una posible caída en la movilidad ya que este nivel tiene nodos en los planos de las impurezas y aún que no ocupe ni el 0.4% de la carga su aparición o desaparición traerá consigo cambios importantes en la movilidad.

En vista del posible comportamiento de la movilidad en

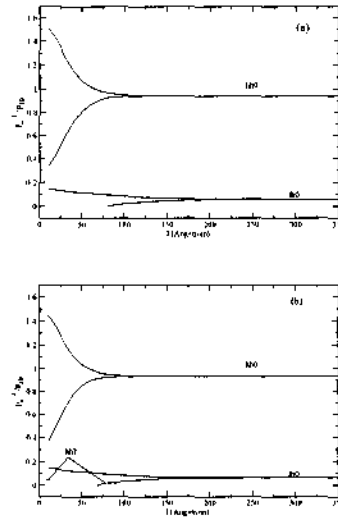


FIG. 6 Densidad de subbanda relativa p_i^0/p_{2D} de los DDD tipo n en GaAs para (a) $p_{2D} = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

base a la ocupación de carga relativa de las diferentes subbandas se puede ver que las curvas de movilidad relativa, Figs. 3 y 4, se adaptan en buena forma.

Gurtovoi et al. (9) han crecido pozos dobles en GaAs impurificados con Si y han estudiado las propiedades de transporte como función de la densidad de impurezas y la distancia entre los pozos. Observan un máximo en la movilidad a 200 \AA , la cual sobrepasa por un 20% a 77 K la conductividad de un pozo simple para la misma concentración. La movilidad del sistema simple es la más alta de todas las muestras estudiadas, pero debido a la baja densidad de portadores la ventaja de la alta movilidad μ_0 es de gran utilidad para las aplicaciones prácticas en FET's, como si lo es el aumento en la conductividad de las estructuras dobles. Usando la ecuación (55) se obtiene la movilidad, Fig. 3 (a), en el intervalo de $0 - 6 \text{ meV}$ variando $k_B T$ de forma gradual en 1 meV . Como se puede ver hay un máximo a unos 170 \AA , en buen acuerdo con los resultados experimentales. Además, los resultados de movilidad muestran que la movilidad en pozos dobles siempre es menor que en pozos simples.

En el caso de los pozos tipo n el comportamiento de la estructura de niveles guarda características muy parecidas a los pozos tipo p. Sin embargo, las grandes diferencias en la estructura de bandas, sobre todo la masa efectiva, hacen que la movilidad presente un comportamiento totalmente distinto como se ve a continuación.

En la Fig. 7 (a) se muestra la estructura de niveles versus la distancia entre los pozos. En cuanto a las distancias de degeneración, se encuentra para el estado base $l_{degen} = 260 \text{ \AA}$

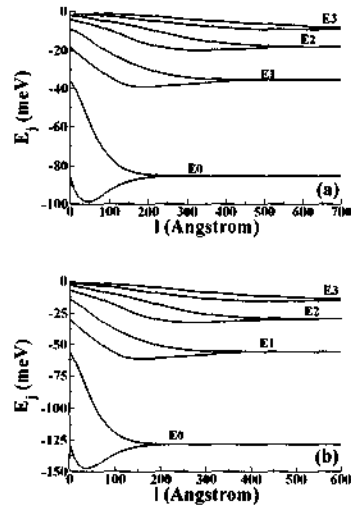


FIG. 7 Estructura electrónica (en meV) para los pozos dobles tipo n en GaAs como función de la distancia (en Å) entre los pozos para (a) $n_{2D} = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Otra característica importante es la profundidad de los pozos. Como se puede apreciar de la Fig. 8 los pozos son mucho más profundos si se comparan con los correspondientes tipo p , para la misma concentración de impurezas y considerando los mismos efectos. En dicho caso se encuentra una diferencia de 110 meV. Esta diferencia tan enorme en las profundidades es debida a la diferencia entre las masas efectivas de los huecos y los electrones. Los electrones tienen una masa muy pequeña en comparación con la de los huecos, lo que hace que el apantallamiento y localización sean menos efectivos.

La Fig. 7 (b) muestra la estructura electrónica como función de la distancia para $n_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Se encuentra una diferencia en la profundidad de los pozos de 66.7 meV al aumentar la concentración de 3 a 5 (en unidades de

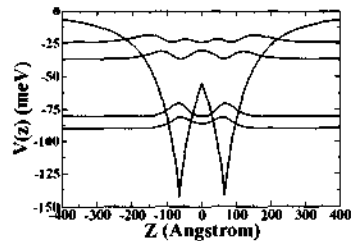


FIG. 8 Perfil del potencial y estados electrónicos de pozos dobles tipo n en GaAs para $n_{2D} = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

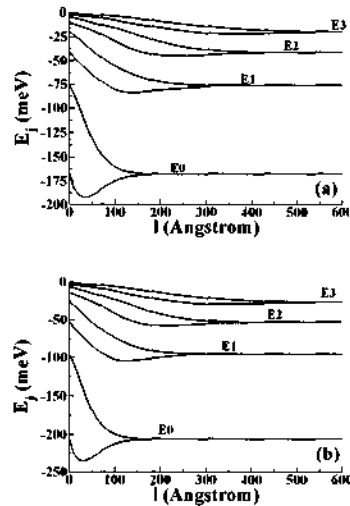


FIG. 9 Estructura electrónica (en meV) de pozos dobles tipo n en GaAs como función de la distancia (en Å) entre los pozos para (a) $n_{2D} = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 9.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

10^{12} cm^{-2}). El nivel básico ahora se degenera a una distancia de 250 Å.

Al aumentar la densidad de impurezas hasta $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ la profundidad de los pozos aumenta hasta -264.6 meV lo que equivale a un incremento de alrededor del 25 % con respecto al valor obtenido para $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. El nivel básico en este caso se degenera a una distancia 220 Å. En la Fig. 9 (b) se muestra la estructura electrónica como función de la distancia entre los pozos para $9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. En este caso la profundidad es -320 meV . Los niveles en este caso se degeneran a una distancia de 210 Å.

De lo anterior se puede resumir los siguiente:

1. Aumentando la densidad de impurezas, los pozos son más profundos. Por lo que es posible tener más estados ligados.
2. La distancia de degeneración disminuye al aumentar la densidad de impurezas.

La movilidad se presenta como función de la distancia de 0 a 600 Å para 2 y 4 en unidades de 10^{12} cm^{-2} , Fig. 10 (a) y (b). Se ha variado la temperatura de 0 a 77 K. De la Fig. 10 (a) se ve que para $T = 0 \text{ K}$ hay un aumento significativo a una distancia de 250 Å debido al acomodamiento de la carga al degenerarse el nivel básico. Al aumentar gradualmente la temperatura se ve que aparece un segundo pico alrededor de 80 Å, relacionado con la aparición de más niveles ligados. Estos niveles, aunque están por encima del nivel de Fermi, tienen una probabilidad distinta de cero de ser ocupados, por lo que hay que tomarlos en cuenta. El pico principal que aparecía

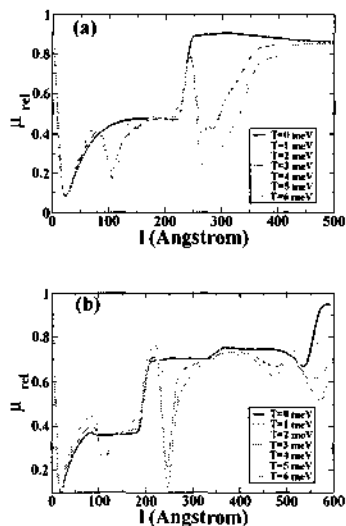


FIG. 10. Movilidad en pozos dobles en GaAs tipo *n* para (a) $n_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

alrededor de 250 Å se hace más pronunciado al ir aumentando la temperatura.

De la Fig. 10 (b) se observa que la movilidad presenta tres picos bien definidos a distancias de 80 Å, 200 Å y 500 Å. El primero de los picos es debido a que aparece otro nivel con probabilidad de ser ocupado, el segundo de ellos está relacionado con la redistribución de la carga que ocurre cuando el nivel básico se degenera, y el tercero con otra redistribución de la carga debido a otra degeneración. El segundo pico es el más pronunciado debido a que el nivel básico es el que más carga tiene y al degenerarse es el que produce un cambio más significativo. Este comportamiento es peculiar en este sistema ya que sólo tenemos una escalera de niveles. Las distancias a las que aparece el pico más pronunciado son mayores para este caso, debido a que los electrones están menos focalizados en comparación con los huecos. Un comportamiento similar se presenta para las concentraciones mostradas en la Fig. 11 a saber (a) 6 y (b) 8 en unidades de 10^{12} cm^{-2} . El pico más pronunciado para estas concentraciones se presenta alrededor de 200 Å.

Con el objetivo de dar una descripción más completa del comportamiento cualitativo de la movilidad se presentan las curvas correspondientes a la densidad de subbanda relativa. En primer lugar se presentan los resultados para $n_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, Fig. 12 (a) y (b) respectivamente. Como se ha mencionado en los demás sistemas tratados, los cambios relevantes son de esperar cuando se abran o cierren canales de conducción, en el presente caso, a saber, a 270 Å, 320 Å y 520 Å, Fig. 12 (a). Para la Fig. 12 (b) las distancias son 240 Å, 360 Å, 420 Å y 540 Å, estas

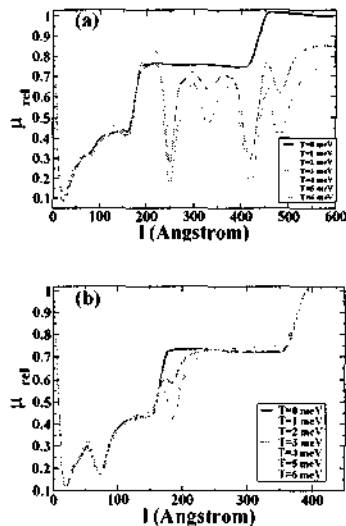


FIG. 11. Movilidad en pozos dobles en GaAs tipo *n* para una densidad de impurezas de (a) $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

distancias corresponden a la degeneración del nivel básico, la aparición de un canal adicional de conducción, la degeneración del primer nivel excitado, la degeneración del segundo estado excitado y la desaparición de un canal de conducción, como es evidente de la figura. Otra característica notable en este sistema es el comportamiento general de la ocupación de los niveles, en particular, de los niveles excitados los cuales a distancias pequeñas presentan un decremento en la densidad relativa de subbanda con un subsiguiente aumento de la misma a distancias considerables y posteriormente una caída gradual hasta que alcanzan la degeneración y se estabiliza la ocupación relativa.

Este mismo comportamiento se presenta para $n_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, salvo que la cantidad de niveles ocupados es mayor, del mismo modo las distancias a las que se presentaran los cambios importantes en la movilidad cambiarían ya que al aumentar la densidad de impurezas los pozos son más profundos lo que hace que los niveles electrónicos se degeneren a distancias menores, Fig. 13. Para la Fig. 13 (a) las distancias son 210 Å, 320 Å, 360 Å y 420 Å, además de 80 Å y 90 Å que corresponden a un nivel que se ocupa y desocupa muy rápido. En el otro caso las distancias están alrededor de 200 Å, 320 Å y 500 Å, además de 70 Å y 120 Å debido a la ocupación y desocupación momentánea de un canal de conducción, Fig. 13 (b).

Al comparar los resultados anteriores con los obtenidos para la movilidad relativa es evidente que los cambios sustanciales esperados no se producen a las distancias antes mencionadas para la mayoría de los casos. El único cambio que concuerda de mejor manera es el correspondiente a la degeneración

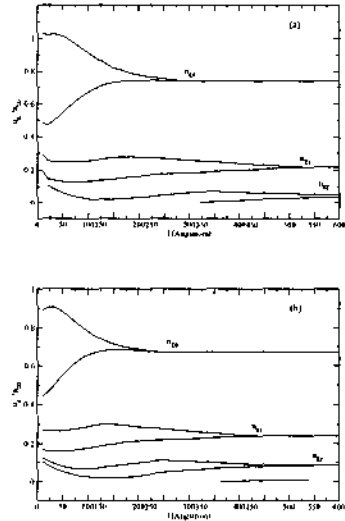


FIG. 12 Densidad de subbanda relativa n_i^s/n_{2D} de pozos dobles tipo n en GaAs para (a) $n_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

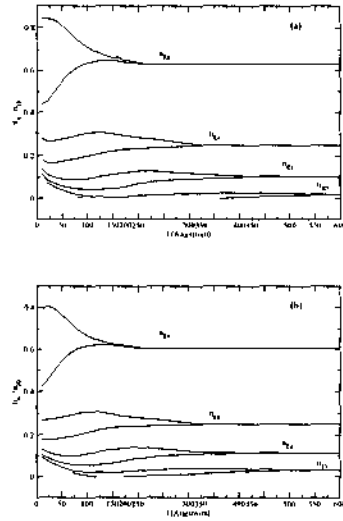


FIG. 13 Densidad de subbanda relativa n_i^s/n_{2D} de pozos dobles tipo n en GaAs para (a) $n_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

eración del nivel básico.

Mayores detalles sobre los efectos de intercambio, comparación de la estructura electrónica con los datos experimentales, y en general los sistemas delta dopados en GaAs ver (33-36).

B. Silicio

Los parámetros usados para los pozos en Si son: $m_c^* = 0.5163m_0$, $m_v^* = 0.1905m_0$, $m_{hh} = 0.52m_0$, $m_{lh} = 0.16m_0$, $m_{sv} = 0.23m_0$, $\epsilon_r = 11.7$ y la concentración de impurezas de 1×10^{13} a $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. La distancia entre los pozos se dará en la unidad usual, Angstrom, la densidad de impurezas bidimensional en unidades de 10^{12} cm^{-2} y la energía en meV.

Los pozos tipo p presentan algunas diferencias importantes con respecto a los correspondientes en GaAs, debido principalmente a la masa efectiva de huecos livianos y la presencia de estados de desdoblamiento para densidades por encima de 10^{13} cm^{-2} . Dado que el comportamiento general de la estructura electrónica, como función de la distancia entre las capas dopadas y la densidad de impurezas, es similar a la de los pozos en GaAs no se pondrá demasiado énfasis al respecto. En su lugar se tratarán de resaltar los cambios provocados por la masa efectiva de huecos livianos y la presencia de los huecos de desdoblamiento.

Para $p_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($p_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) se tienen distancias de degeneración de 170 Å (130 Å), 330 Å

(250 Å), y 450 Å (400 Å) para $hh0$, $lh0$ y $hl1$. Fig. 14. Si se pone atención, la distancia de degeneración del nivel básico de huecos livianos, presenta una diferencia de 50 y 100 Å en comparación a GaAs, aun y cuando las densidades con las que se hace la comparación son mayores, 3 y 7. Estas diferencias, a primera instancia, serán relevantes para el comportamiento de las propiedades de transporte.

Pasemos a analizar el segundo punto a destacar en los pozos tipo p en Si, i. e., la banda de desdoblamiento. Primariamente se ha considerado una densidad de impurezas de $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ que está por debajo del límite para el cual aparecen estados de desdoblamiento. Se encuentra que aparecen estados a distancias de 10 Å, 20 Å, 30 Å y 40 Å con valores de 3.7 meV, 6.2 meV, 4.8 meV y 2.0 meV, respectivamente. Esto representa una diferencia importante a lo observado en pozos simples.

En las Figs. 15 (a) y (b) se muestra la estructura de niveles para $20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Se encuentra que la consideración de la banda de desdoblamiento afecta primordialmente a los estados excitados. Los estados básicos de huecos pesados y livianos prácticamente no se ven afectados en sus distancias de degeneración. La diferencia en las distancia de degeneración ($L_{d,s}$) para los estados excitados presentes es de alrededor de 60 Å. Esto se relaciona con la profundidad de los pozos, ya que al incluir la banda de desdoblamiento los pozos son menos profundos que en el cálculo a dos bandas.

En cuanto a las transiciones entre niveles se ve que la correspondiente al estado base de huecos pesados y livianos se afecta muy poco, con diferencias de 1.0 meV para la menor

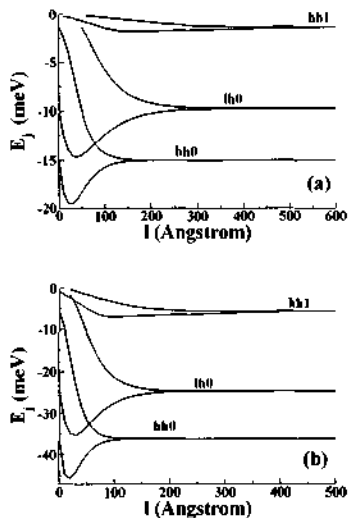


FIG. 14 Niveles de energía (en meV) de los pozos dobles tipo p en Si versus la distancia entre los planos de las impurezas (en Å), para (a) $p_{210} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{210} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

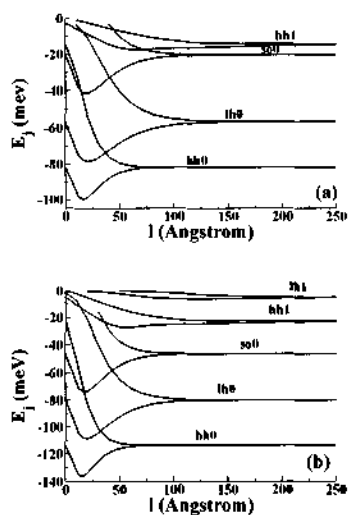


FIG. 15 Niveles de energía (en meV) de los pozos dobles tipo p en Si para (a) $p_{210} = 20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{210} = 30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, versus la distancia entre los planos de las impurezas (en Å).

de las concentraciones considerada y una diferencia de 5.0 meV para la mayor, esto comparando las transiciones con y sin la banda de desdoblamiento. La transición entre el estado básico y el primer estado excitado de huecos pesados se ve afectada por 6 meV para $20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y con 12 meV para $30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Estos cambios en las transiciones son importantes, pero lo es aún más la presencia de los estados de desdoblamiento que pueden participar en las transiciones, con diferencias desde 60.4 meV hasta 82.8 meV. Para mayores detalles ver (39).

En la Fig. 16 se muestran los resultados de movilidad obtenidos para una densidad de impurezas de (a) 2 y (b) $9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Las diferentes curvas corresponden a diferentes temperaturas, que van desde 0 hasta 77 K , en meV. Como se puede apreciar aparece un pico bastante interesante alrededor de 170 Å , para $T = 0 \text{ K}$ el pico apenas si es perceptible, pero conforme la temperatura aumenta el pico es más visible. Este pico obedece al reordenamiento de la carga en los diferentes niveles, ya que alrededor de esta distancia el estado básico de huecos pesados se degenera. La degeneración causa una pequeña reducción de la densidad de portadores en el estado básico de $hh1$ lo cual favorece primordialmente a los estados excitados. Estos estados tienen nodos en los planos de las impurezas por lo que la tasa de dispersión se verá reducida y la movilidad favorecida. Además la oclusión o apertura de canales de conducción traerá cambios significativos en la movilidad como ya se ha explicado para el caso de los DD en $GeAs$. A distancias grandes la estructura de niveles corresponde a la de un pozo SDD y la movilidad como consecuencia tiende a la unidad.

La Fig. 16 (b) que corresponde a $9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ presenta una característica importante, como se puede ver, hay un aumento alrededor de 130 Å , pero hay un pico todavía más notorio a 230 Å . El aumento presentado a 130 Å corresponde a la degeneración del estado básico de huecos pesados y el máximo en 230 Å a la degeneración del estado básico de huecos livianos. Para $T = 0 \text{ K}$, a 230 Å hay un aumento importante y pareciera que la movilidad es la unidad, sin embargo al aumentar la temperatura se ve que hay un máximo bastante acentuado.

En las Figs. 17 y 18 se muestran los resultados obtenidos para la movilidad teniendo en consideración los estados de desdoblamiento. La Fig. 17 (a) presenta un pico a unos 120 Å , este pico se acentúa más al aumentar la temperatura. Con respecto a los resultados obtenidos sin tener en cuenta la banda de desdoblamiento el pico se corrió unos 20 Å . En la Fig. 17 (b) no se ve ninguna estructura en particular interesante únicamente los aumentos de la movilidad a causa de las degeneraciones de los huecos pesados, los huecos de desdoblamiento y los livianos. El segundo de los aumentos presentes es debido a la degeneración en los huecos de desdoblamiento, ya que éstos se degeneran a menor distancia que los huecos livianos. Al ir aumentando la densidad de impurezas no se encuentran máximos bien definidos, únicamente los incrementos relacionados con las degeneraciones de las diferentes subbandas. A una densidad de $60 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se encuentra un máximo más claro a una distancia de 70 Å , Fig. 18.

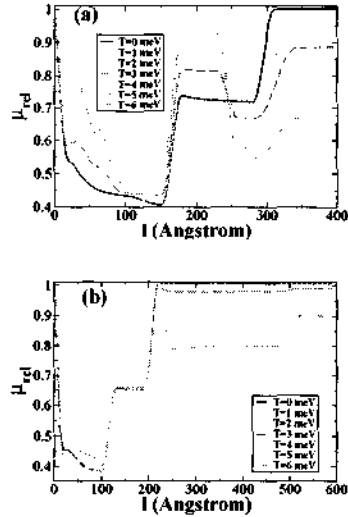


FIG. 16. Cálculos de movilidad para pozos dobles tipo p en Si para (a) $p_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando $k_B T$ en 1 meV de 0 a 6 meV.

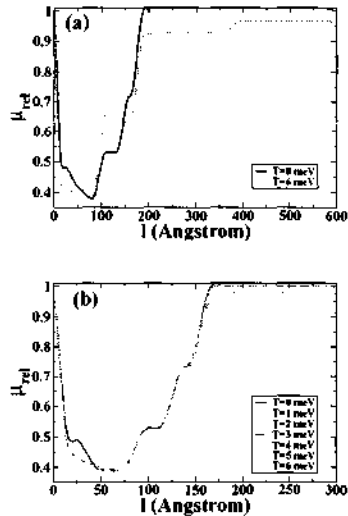


FIG. 17. Cálculos de movilidad para pozos dobles tipo p en Si para (a) $p_{2D} = 20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, teniendo en consideración la banda de desdoblamiento. $k_B T$ se varía en 1 meV de 0 a 6 meV.

Como se puede apreciar de las Figs. 19 (a) y (b) el comportamiento de estas es similar al encontrado en el caso del GaAs, por tanto, los cambios de relevancia que pueden esperarse en la movilidad estarán relacionados con la aparición o desaparición de canales de conducción. Estos ocurrirán cerca de la distancia de degeneración del nivel básico de huecos pasados, para ser precisos a unos 80 Å que es cuando aparece un canal adicional debido a la ocupación de $hh1$. También cuando se degenera $hh0$ y $hh1$ se espera algún cambio en la movilidad ya que la desaparición de un canal de conducción o dispersión conlleva la cancelación de términos intersubbanda en lo concerniente a la tasa de dispersión.

Ahora, teniendo en consideración la banda de desdoblamiento en el cálculo de las densidades de subbanda relativas las cosas serán diferentes ya que al incluir dicha banda los pozos son menos profundos y además se tienen estados de desdoblamiento ocupados. Como se puede apreciar de la Fig. 20 (a) se esperan cambios relevantes en la movilidad a 60 Å, que es cuando se abre un canal adicional de conducción debido a la ocupación de $so1$, a 90 Å debido a la degeneración de $hh0$ y a la apertura de un canal adicional de conducción de huecos pesados. De igual manera se esperan cambios cuando se degeneran tanto $hh0$ como $so0$. Es importante mencionar que a $l = 10$ Å hay cuatro canales de huecos pesados, sin embargo, el último de estos canales desaparece de inmediato, $l = 20$ Å, volviendo a ocuparse hasta los 90 Å. Un comportamiento similar ocurre para la Fig. 20 (b) correspondiente a una densidad de impurezas de $30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Por último se presenta la densidad de subbanda relativa correspondiente a una densidad de impurezas de $60 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. En este caso se tienen ocho subbandas ocupadas cuatro correspondientes a huecos pesados, dos a huecos ligeros y dos más a huecos de desdoblamiento, conforme se separan los pozos no aparecen canales adicionales por lo que los cambios fundamentales en la movilidad vendrán de la degeneración de las diferentes subbandas, a saber: 50 Å, 90 Å, 120 Å, y 130 Å.

Tomando en cuenta los resultados obtenidos con la fórmula de movilidad relativa se ve que no se reproducen todas las posibles situaciones que se pudieran presentar en un sistema como los pozos dobles en Si, sin embargo, el cambio más importante que se presenta en el sistema, que tiene que ver con la degeneración de $hh0$ y la apertura de un canal adicional

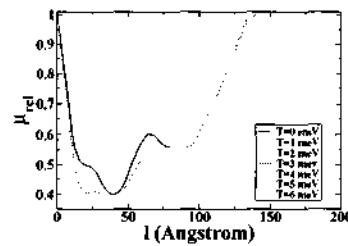


FIG. 18. Cálculos de movilidad para pozos dobles tipo p en Si para $p_{2D} = 60 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, teniendo en consideración la banda de desdoblamiento. $k_B T$ se varía en 1 meV de 0 a 6 meV.

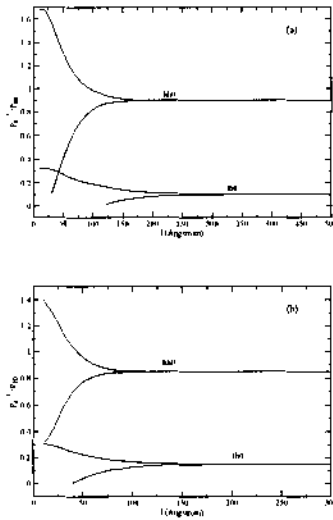


FIG 19 Densidad de subbanda relativa $p_{n,i}^{(2D)} / p_{2D}$ de pozos dobles tipo p en Si para (a) $p_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, considerando la banda de desdoblamiento.

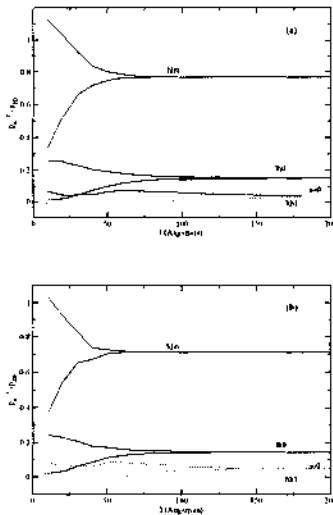


FIG 20 Densidad de subbanda relativa $p_{n,i}^{(2D)} / p_{2D}$ de pozos dobles tipo p en Si para (a) $p_{2D} = 30 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $p_{2D} = 40 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, considerando la banda de desdoblamiento.

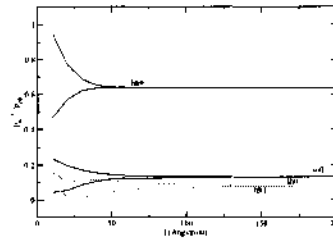


FIG 21 Densidad de subbanda relativa $p_{n,i}^{(2D)} / p_{2D}$ de pozos dobles tipo p en Si para $p_{2D} = 60 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, considerando la banda de desdoblamiento.

de conducción es bien satisfecha en todos los casos.

Este sistema como tal no ha sido estudiado desde el punto de vista teórico, y hay muy pocos trabajos experimentales (6; 32). Lo cierto es que presenta algunas ventajas para las posibles aplicaciones tecnológicas, pues como se verá, la movilidad se puede optimizar variando tanto la densidad de impurezas como la distancia entre los pozos.

En primera instancia se presenta la estructura de niveles como función de la distancia entre los pozos para 8, 13 y 65 en unidades de 10^{12} cm^{-2} . En la Fig. 23 se muestra el perfil de potencial, así como las autofunciones de los estados longitudinales y transversales para $1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y distancias entre los pozos de (a) 260 Å y (b) 180 Å, respectivamente. Como se ve tanto de las figuras de los niveles de energía (22) contra la distancia entre los pozos como del perfil y autofunciones, la cantidad de estados longitudinales es mucho mayor que la cantidad de estados transversales. Esto se debe principalmente a la diferencia en las masas efectivas, ya que, esta diferencia es sustancial al determinar las características del sistema.

El comportamiento cualitativo general de los pozos tipo n en Si es similar al de los sistemas vistos hasta el momento, esto es: los pozos son más profundos al aumentar la densidad de impurezas, como consecuencia, los niveles se degeneran a una menor distancia y eventualmente la cantidad de estados confinados aumentará.

Por último, presentamos los cálculos de movilidad relativa para las tres concentraciones que se han manejado a lo largo de esta sección dedicada a los pozos tipo n en Si, Figs. 24. Como se puede ver de las figuras aparece un pico muy pronunciado. Este pico está a unos 120 Å para la densidad más baja Fig. 24 (a), al aumentar la densidad de impurezas a $1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ el pico se localiza a 100 Å, Fig. 24 (b). Para la densidad más alta no hay un pico tan pronunciado y evidente pero se alcanza a ver una pequeña estructura a la distancia de degeneración del nivel básico de electrones longitudinales, Fig. 24 (c).

Para n ($p_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) se tienen dos subbandas ocupadas, al ir separando los pozos se ocupa una subbanda más a una distancia de 30 Å, al aumentar aun más la distancia entre los pozos aparece otra subbanda ocupada a 120 Å, misma distancia a la cual se degenera el nivel básico de es-

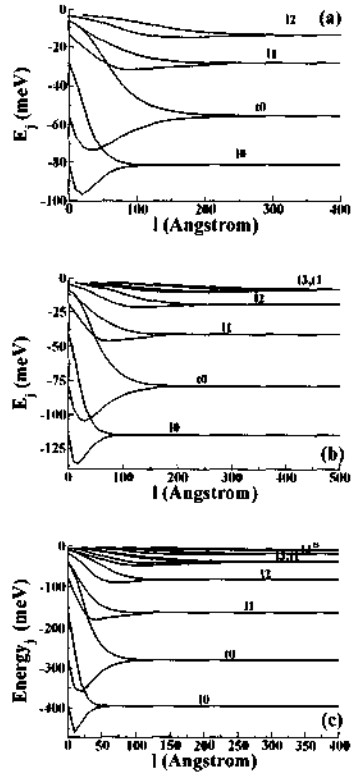


FIG. 22 Niveles de energía (en meV) de pozos dobles tipo n en Si versus la distancia (en Å) entre los pozos para (a) $8.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, (b) $1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $6.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

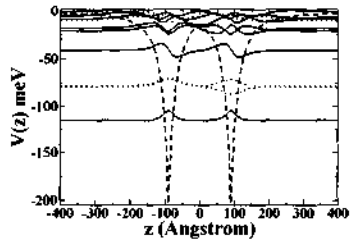


FIG. 23 Perfil del potencial y funciones de onda de los niveles longitudinales y transversales de pozos dobles tipo n en Si con $n_{2D} = 1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

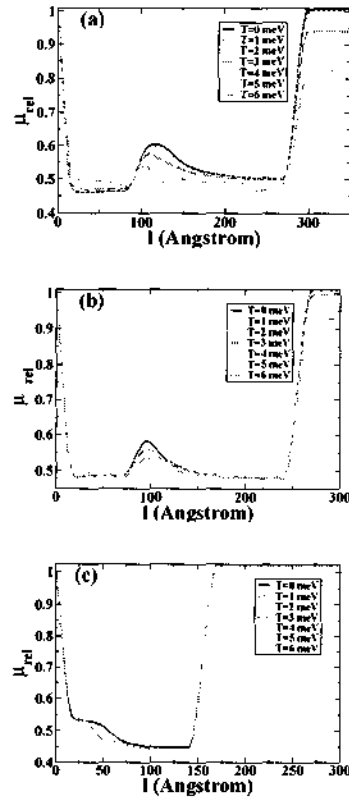


FIG. 24 Movilidad en pozos dobles en Si tipo n para una densidad de impurezas de (a) $8.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, (b) $1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $6.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

tados longitudinales, el nivel básico de estados transversales se degenera alrededor de 300 Å, Fig. 25 (a). Estas distancias son a las que se esperan cambios sustanciales en la movilidad. Un comportamiento similar se observa para $n_{2D} = 1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ sólo que las distancias se han corrido a 30 Å, 100 Å y 250 Å, respectivamente, Fig. 25 (b). Para $n_{2D} = 6.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ se tienen tres subbandas ocupadas, dos de estados longitudinales y la restante de estados transversales, al aumentar la separación entre los pozos aparece una subbanda ocupada más (t_1) muy cerca de la distancia a la que se degenera t_0 , a saber 50 Å, al ir aumentando la separación t_0 se degenera a unos 150 Å, Fig. 25 (c). Estas distancias son a las que se espera se presenten cambios relevantes en las propiedades de transporte. Los resultados de movilidad relativa presentan un cambio importante a 100 Å para $n_{2D} = 1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ lo cual concuerda de manera satisfactoria con la distancia a

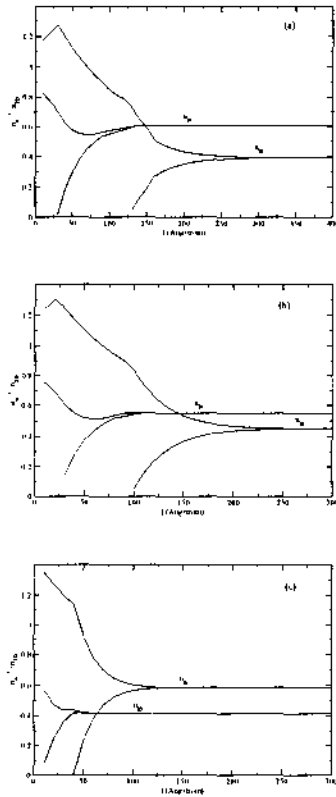


FIG. 25 Densidad de subbanda relativa n_{2D}^i/n_{2D} de pozos dobles tipo p en Si para (a) $n_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_{2D} = 13 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $n_{2D} = 17 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

la cual se degenera l_0 y aparece un canal adicional de conducción. En el caso concerniente a $n_{2D} = 6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ no se presenta ningún cambio importante.

Mayores detalles sobre los efectos de intercambio, comparación de la estructura electrónica con los datos experimentales, y en general los sistemas delta dopados en Si ver (37-39).

C. Selenuro de Zinc

Debido a que la banda de desdoblamiento está a $\pm 30 \text{ meV}$ del punto Γ en el origen de la zona de Brillouin, y ya que la profundidad de los pozos nunca excede esta distancia energética el estudio se hace a dos bandas. Los parámetros de partida para el ZnSe son: $E_g = 2.82 \text{ eV}$, $m_{hh} = 0.40m_0$,

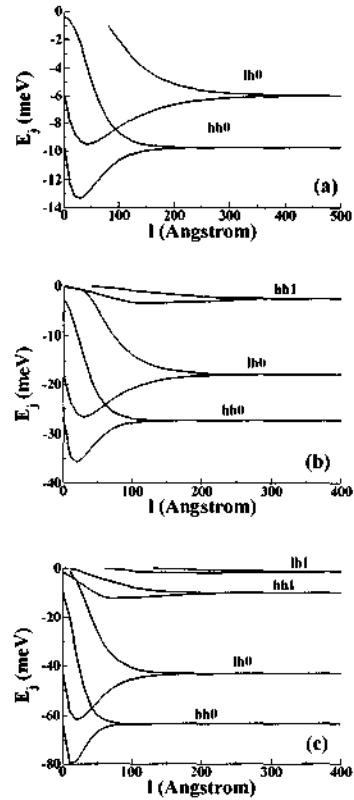


FIG. 26 Niveles de huecos (en meV) en pozos dobles tipo p ZnSe versus la distancia (en Å) entre planos de las impurezas para (a) $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, (b) $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

$m_{lh} = 0.15m_0$, $\epsilon(0) = 8.7$, y $\epsilon(\infty) = 5.8$. La Fig. 26 muestra la estructura de niveles como función de la distancia entre los pozos para (a) $1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, (b) $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente. Un parámetro a seguir en estas figuras es la distancia de degeneración. Claro está que los niveles más profundos de una escalera determinada se degenerarán más rápido. Los niveles de huecos livianos se degeneran a una distancia mayor, debido a la masa de éstos. Por ende, los huecos livianos están menos localizados y el apantallamiento es menos efectivo que en los huecos pesados.

En la Fig. 27 se presentan los cálculos de movilidad como función de la distancia entre los pozos para las tres concentraciones consideradas. La dependencia con la temperatura es analizada en el intervalo de temperaturas de 0 a 77 K. En la Fig. 27 (a), se encuentra un pico en la movilidad a 210 Å. Aumentando la concentración un poco el pico cambia a 120

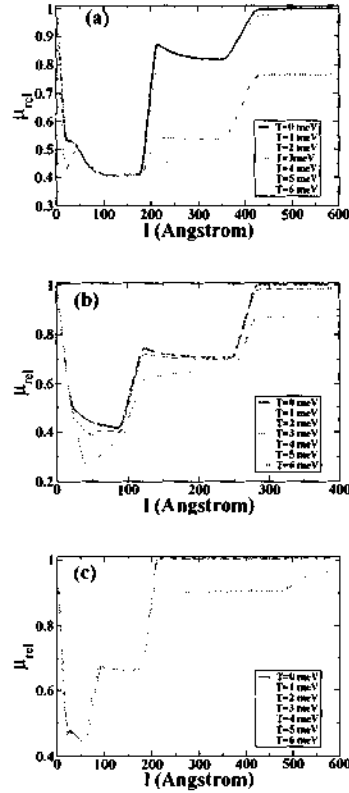


FIG. 27 Cálculos de movilidad en pozos dobles tipo η en ZnSe para (a) $p_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, (b) $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Las curvas de línea sólida, a puntos, cortada, etc., corresponden a las diferentes temperaturas en el intervalo de 0 – 77 K.

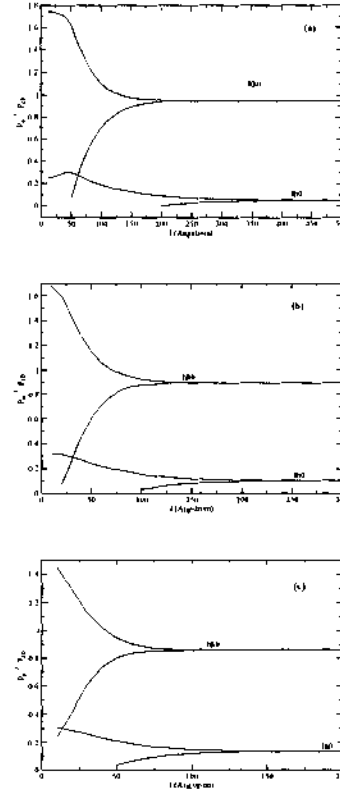


FIG. 28 Densidad de subbanda relativa p'_n/p_{2D} de pozos dobles tipo η en ZnSe para (a) $p_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, (b) $p_{2D} = 3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (c) $p_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Å, Fig. 27 (b). Para $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ el pico aparece a 90 Å y conforme la temperatura aumenta un segundo pico aparece a 220 Å, Fig. 27 (c). Finalmente, cuando la distancia entre pozos es lo suficientemente grande de tal manera que la interacción entre los pozos es nula, la razón de movilidades tiende a la unidad.

Tomando en consideración las densidades de subbanda relativas se esperan cambios relevantes en la movilidad a 50 Å, 200 Å y 400 Å, Fig. 28 (a). Estas distancias corresponderán a la apertura de un canal de conducción de huecos pesados, la degeneración de $hh0$ y la simultánea aparición de otro canal de conducción correspondiente a los huecos ligeros, y por último la degeneración de $hh0$, respectivamente. Esto concuerda muy bien con los picos observados en la curva de movilidad relativa correspondiente, Fig. 27 (a). Al aumentar

la densidad a $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, los cambios relevantes en la movilidad relativa se presentarán a 20 Å, 100 Å y 250 Å, que como en el caso anterior corresponderán a la apertura, degeneración y apertura, y degeneración de canales de conducción como es apreciable de la Fig. 28 (a). En este caso la fórmula de movilidad sólo reproduce de manera aceptable el cambio debido a la degeneración de $hh0$ y la apertura de un canal adicional de conducción de huecos ligeros, Fig. 27 (b). En el caso de $p_{2D} = 10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ los cambios relevantes se esperan a 50 Å, 100 Å y 200 Å, los cuales corresponderán a la apertura de un canal de conducción de huecos ligeros, la degeneración de $hh0$ y la de $hh1$, respectivamente, Fig. 28 (c). Para esta densidad de impurezas la fórmula de movilidad relativa reproduce de manera aceptable los cambios esperados a 100 Å y 200 Å, Fig. 27 (c).

Mayores detalles sobre los efectos de intercambio, com-

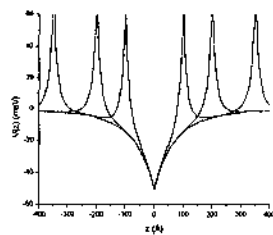


FIG. 29 Perfil del potencial de los pozos p-n-p en GaAs para diferentes distancias entre los planos de impurezas con $n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

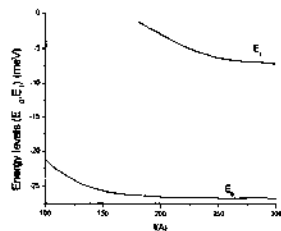


FIG. 30 Estructura electrónica de pozos p-n-p en GaAs como función de la distancia entre las capas delta dopadas con $n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

paración de la estructura electrónica con los datos experimentales, y en general los sistemas delta dopados en ZnSe ver (40)

IV. POZOS P-N Y P-N-P

Esta sección esta avocada a los pozos delta dopados tipo p-n y p-n-p, esto es, una capa de donores y una de aceptores separadas una cierta distancia d , y una capa de impurezas donoras con dos capas de impurezasceptoras dispuestas de manera simétrica, ambas a la misma distancia d . La construcción del potencial se hace de manera similar al caso de los pozos dobles. Escogiendo los potenciales para huecos y electrones de manera adecuada es posible construir el potencial para los pozos p-n y p-n-p. En el caso de los pozos tipo p-n-p se usa la simetría del potencial y se trabajara con el semiespacio $z \leq 0$. Por tanto, el potencial tanto para los pozos p-n como p-n-p es

$$V_n^{\pm}(z) = -\frac{q^2}{(d|z| + z_{0n})^2} + \frac{q^2}{(d|z + l| + z_{0p})^2} \quad (56)$$

con el entendido que para los pozos p-n se trabaja en todo el

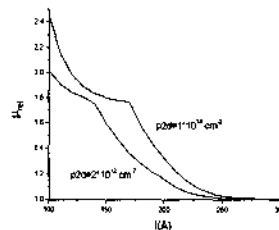


FIG. 31 Movilidad relativa en pozos p-n-p en GaAs versus la distancia entre las capas delta dopadas con $n_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para $p_{2D} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (curva superior) y $p_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (curva inferior).

espacio mientras que para los p-n-p sólo en una parte de este como ya se menciona. Para estos sistemas no se toman en cuenta los efectos de intercambio, así que la expresión anterior se obtiene directamente de TF y TFD ignorando el término de intercambio en la expresión para el potencial.

Para la movilidad se ha tomado como sistema de referencia un pozo simple con la misma densidad de donores que en los pozos p-n o p-n-p. Entonces la ecuación correspondiente adopta la forma:

$$\mu_{n,t}^{\pm} = \frac{H_{2D}^{n(t) \pm} D}{\mu \leq 1 D} = \frac{\int \int \rho_n^{\pm}(z') \rho_{imp}^{\pm}(z) |z - z'| dz' dz}{\int \int \rho_n^{p(n) \pm}(z') \rho_{imp}^{p(n) \pm}(z) |z - z'| dz' dz} \quad (57)$$

donde ρ_n^{\pm} and ρ_{imp}^{\pm} ($\rho_n^{p(n) \pm}$ and $\rho_{imp}^{p(n) \pm}$) representan la densidad de electrones e impurezas de un pozo simple (pozos p-n-p), respectivamente.

A. Arsenuro de Gallo

Se han usado los mismos parámetros que en el caso de los pozos dobles. En la figura 29 se bosqueja el perfil del potencial de los pozos p-n-p para tres distancias entre los planos de impurezas, dejando fija la densidad de impurezas en las capas delta dopadas: $n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. De la figura podemos observar que la región de confinamiento aumenta conforme la barrera de potencial se aleja de la capa delta dopada tipo n. Este hecho se refleja en el número de estados ligados y el confinamiento efectivo de estos, ver Fig. 30.

En la figura 31 se muestra la movilidad relativa como función de la distancia entre el pozo tipo n y los p. La densidad considerada es $p_{2D} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, curva superior e inferior, respectivamente. La movilidad presenta un comportamiento muy interesante y bastante diferente como función de la distancia entre los pozos en comparación con los pozos dobles. En primer lugar la movilidad tiene su máximo valor para la menor de las distancias

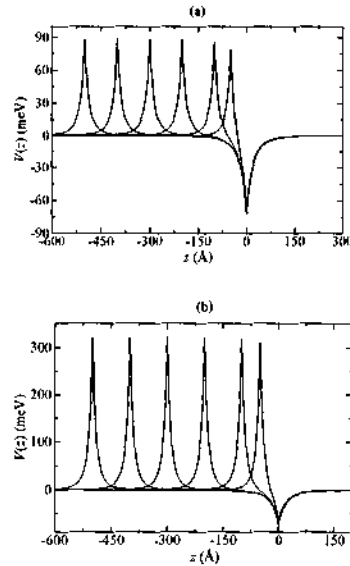


FIG. 32. Perfil del potencial en pozos p-n en Si para diferentes distancias con. (a) $n_{Dn} = 5 \times 10^{12}$ y $n_{Ap} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_{Dn} = 5 \times 10^{12}$ y $n_{Ap} = 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$

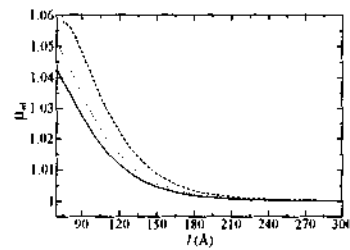


FIG. 33. Movilidad relativa versus la distancia entre el pozo tipo n y la barrera tipo p. La densidad de donores se mantiene fija en $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, mientras la densidad de aceptores toma tres valores 5, 10 y 50 en unidades de 10^{12} cm^{-2} , líneas sólida, punteada y a trozos, respectivamente

consideradas (100 Å), esto es una consecuencia directa de la interacción entre la nube de portadores y los planos de impurezas, que en este tipo de sistemas es lineal, de tal forma que la movilidad aumenta conforme la nube de portadores y los planos de impurezas están más cerca. La distancia mínima que hemos considerado son 100 Å con el objetivo de evitar posibles efectos de compensación ya que los radios de Bohr para electrones y huecos tiene un valor del orden de los 100 Å en GaAs. La movilidad, para las densidades consideradas,

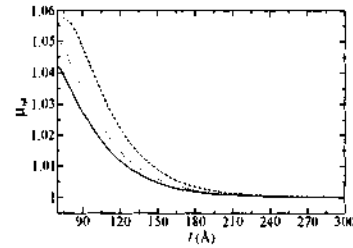


FIG. 34. Movilidad relativa versus la distancia entre el pozo tipo n y la barrera tipo p. La densidad de donores se mantiene fija en $7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, mientras la densidad de aceptores toma tres valores 5, 10 y 50 en unidades de 10^{12} cm^{-2} , líneas sólida, punteada y a trozos, respectivamente

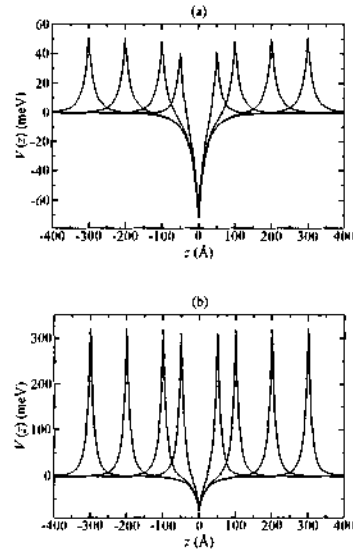


FIG. 35. Perfil de potencial de pozos p-n-p en Si para diferentes distancias entre la capa n y las p. (a) y (b) corresponden a concentraciones de aceptores de 5 y 50 en unidades de 10^{12} cm^{-2} , mientras que la densidad de donores se mantiene fija en $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$

es 2.5 (curva superior) y 2 (curva inferior) veces mayor que en el caso en que no existan barreras. Por otro lado, la movilidad disminuye conforme las barreras se alejan del pozo tipo n hasta que eventualmente alcanza la unidad. Muy lejos del pozo tipo n las barreras tipo p no modifican la estructura de niveles y la razón de movilidades por ende es 1. En el caso de que la densidad de aceptores sea baja barrera disminuye, como resultado, los electrones penetran mucho más en estas y en consecuencia la movilidad disminuye.

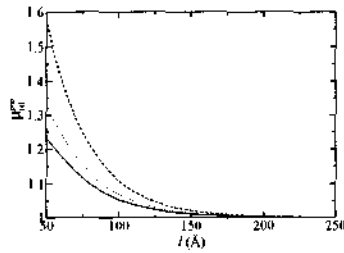


FIG. 36 Movilidad relativa versus la distancia entre la capa n y las p. La densidad de donores se mantiene fija en $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, mientras que la concentración de aceptores toma los valores 5, 10 y 50 en unidades de 10^{12} cm^{-2} , líneas sólida, punteada y a trozos, respectivamente.

Para mayores detalles ver (41: 42).

B. Silicio

Se han usado las mismas masas efectivas, constante dieléctrica e intervalo de densidades que en el caso de los pozos dobles. Los resultados se presentan tratando de resaltar los rasgos más importantes de cada sistema. Se hace una comparación entre los pozos p-n y p-n-p en Si, así como entre pozos p-n-p en Si y GaAs.

En la Fig. 32 se presenta el perfil del potencial para los pozos p-n para varias distancias entre los pozos, desde 500 a 50 Å. Podemos ver que hay un pequeño decremento en la barrera para 100 y 50 Å así como una reducción en el ancho del pozo tipo n, debido posiblemente a la recombinación. Pero a estas distancias aun persiste un buen confinamiento de los electrones y huecos. La Fig. 34 bosqueja la movilidad, para tres concentraciones de aceptores dejando fija la densidad de los donores, como función de la separación entre las capas de donores y aceptores. Se ha encontrado un aumento monótono de la movilidad conforme la distancia entre las capas dopadas disminuye. La más alta movilidad se ha encontrado a una distancia de 70 Å para densidades de donores y aceptores de 5×10^{12} and $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. El aumento en la movilidad se atribuye a un mejor confinamiento de la nube electrónica, lo cual constituye otro mecanismo para optimizar las propiedades de transporte en sistemas delta dopados.

Tomando en cuenta este mecanismo se puede vislumbrar que los pozos p-n-p presentarán propiedades de transporte su-

periores que los pozos p-n, ya que al incluir una capa adicional de manera simétrica el grado de confinamiento de la nube electrónica aumenta sustancialmente. Esto se puede apreciar claramente en los resultados obtenidos para los pozos p-n-p (Figs. 35 y 36).

En la Fig. 35 se muestra el perfil de potencial de los pozos p-n-p para varias distancias con (a) $n_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; y (b) $n_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $p_{2D} = 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Es importante mencionar que en todos los cálculos realizados únicamente los estados base de electrones longitudinales y transversales están ocupados, consecuencia de la múltiple degeneración de la banda de conducción.

En la Fig. 36 se presenta la movilidad de los pozos p-n-p como función de la distancia entre la capa n y las p. Las tendencias generales de la movilidad son similares a las encontradas en los pozos p-n, esto es: (1) aumento monótono conforme las capas son acercadas, (2) aumento al incrementar la densidad de aceptores. Se encuentran aumentos de 23 %, 32 % y 60 % a una distancia de 50 Å correspondientes a las tres concentraciones de aceptores manejadas tanto en p-n como en p-n-p. Por último, si comparamos la movilidad de los pozos p-n-p en Si con la correspondiente en GaAs se puede ver que en GaAs es mayor, aun y cuando las densidades empleadas son menores que en Si. Esto se debe primordialmente a que la profundidad de los pozos en GaAs es mayor que en Si por lo que el grado de confinamiento es mayor en GaAs que en Si, lo cual favorece la movilidad en esta clase de sistemas. Los resultados presentados han sido publicados recientemente (43, 44).

V. POZOS BAJO PRESIÓN

En esta última sección esta avocada al análisis de los efectos de presión en pozos delta dopados en GaAs. Estos efectos constituyen un mecanismo alternativo para mejorar tanto las propiedades de transporte como la densidad de portadores en pozos delta dopados (19: 20).

Los efectos de presión se toman en cuenta introduciendo una dependencia sobre la presión en los parámetros básicos del GaAs. Esto es, la posición del mínimo de la banda de conducción con respecto a lo alto de la banda de valencia, las correspondientes masas efectivas y la constante dieléctrica (45).

En lo concerniente a la movilidad tomaremos como sistema de referencia a pozos sin presión. En tal caso la ecuación correspondiente toma la forma:

$$\mu_{r,l}^p = \frac{\epsilon_r^{l^2-n} \sum_n \int |F_n^{l^2-n}(z')|^2 (E_F^{l^2-n} - E_c^{l^2-n})(|z' - l/2| + |z' - l/2|) dz'}{\epsilon_r^{l^2+n} \sum_n \int |F_n^{l^2+n}(z')|^2 (E_F^{l^2+n} - E_c^{l^2+n})(|z' - l/2| + |z' - l/2|) dz'} \quad (58)$$

donde $\epsilon_r^{l^2-n}$, $F_n^{l^2-n}(z')$, $E_F^{l^2-n}$ y $E_c^{l^2-n}$ ($\epsilon_r^{l^2+n}$, $F_n^{l^2+n}(z')$, $E_F^{l^2+n}$ y $E_c^{l^2+n}$) son la constante dieléctrica relativa, la función

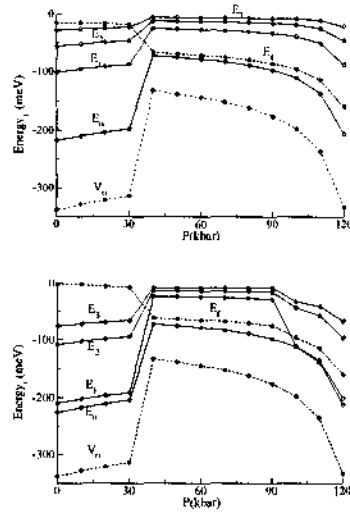


FIG. 37 Estructura electrónica versus presión hidrostática para pozos dobles tipo n en GaAs con (a) $l = 0 \text{ \AA}$ y (b) $l = 90 \text{ \AA}$. La densidad de impurezas considerada es $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.

envolvente, el nivel de Fermi y el i-ésimo nivel de pozos sin presión (con presión).

El estudio se centra en el límite de altas densidades, i.e., $n_{2D} \geq 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ siguiendo a (20). La Fig. 37 muestra la estructura electrónica de pozos dobles como función de la presión aplicada, para dos distancia entre los pozos (a) 0 Å(SDD), y (b) 90 Å. La densidad de impurezas por capa es $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. La Fig. 37 (a) corresponde a un pozo simple con la mitad de la densidad de impurezas del sistema doble. Es evidente la variación lineal de la estructura electrónica en el intervalo de presiones de 0 a 30 kbar, siendo significativo para el nivel básico y la profundidad del pozo. Cambios importantes ocurren a 40 kbar lo cual corresponde al cambio en el mínimo de la banda de conducción (Γ -X crossover). En este punto la masa efectiva toma su mayor valor, y los efectos de apantallamiento y localización son más fuertes. Esto se refleja en la profundidad de los pozos y el confinamiento de los niveles electrónicos. Aumentando más la presión, se observa una variación casi lineal hasta 100 kbar, una caída más pronunciada se presenta en el intervalo 100 a 120 kbar. Otra característica importante es la posición del nivel de Fermi, el cual en el intervalo de gap indirecto refleja la estructura de valles múltiples, esto es, la carga electrónica se distribuye entre los seis valles ocupando únicamente un nivel. Tendencias análogas se observan en la Fig.37 (b). Sin embargo, el desdoblamiento de los niveles debido a la interacción entre los pozos se hace presente. Se observa desdoblamiento de niveles de 0 a 30 kbar y de 100 a 120 kbar. Se tienen dos niveles ocupados con múltiple degeneración para $P = 100 - 120 \text{ kbar}$.

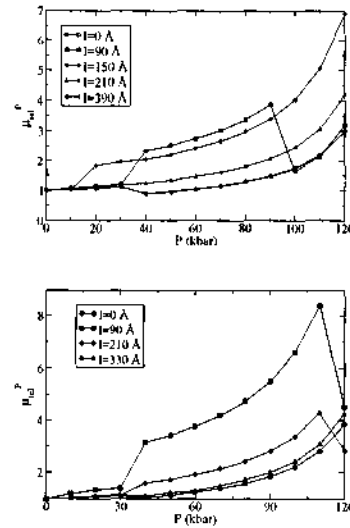


FIG. 38 Movilidad relativa versus presión hidrostática en pozos dobles tipo n en GaAs para (a) $n_{2D} = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $n_{2D} = 3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.

Las características observadas juegan un papel muy importante en las propiedades de transporte. La Fig. 38 muestra la movilidad relativa como función de la presión hidrostática aplicada para dos densidades de donores:(a) $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ y (b) $3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Para cada caso se han considerado varias distancias entre los pozos: 0, 90, 150, 210, and 330 Å. Dos casos límite son $l = 0$ y $l = 330 \text{ \AA}$, que corresponden a un pozo simple y a pozos dobles prácticamente aislados, para los cuales la movilidad tiene que ser la unidad, como se puede apreciar en los gráficos. La movilidad depende de la estructura particular del sistema de referencia ($P = 0$) y el sistema variable ($P \neq 0$). Existen dos contribuciones importantes: (1) la que proviene de la diferencia entre el nivel de Fermi y los niveles electrónicos y (2) del cociente entre las constantes dieléctricas. En el intervalo de 0 a 30 kbar el cociente entre constantes dieléctricas es 1 y la distancia entre los niveles y el nivel de Fermi se acorta (ver Fig. 37), lo que resulta en un pequeño cambio en la movilidad, como se puede apreciar de la Fig. 38. Cambios importantes se esperan debajo y encima del cruce Γ -X debido al cambio significativo de la estructura electrónica. El cambio observado, en el cruce Γ -X, se debe principalmente al acortamiento en la diferencia de energía entre el nivel de Fermi y el nivel básico. Al aumentar la presión aplicada tal diferencia se hace más grande, lo mismo sucede con el cociente de constantes dieléctricas. El efecto neto es un aumento en la movilidad. Otra característica importante que se presenta es la apertura y oclusión de canales de conducción. Esto se presenta a $l = 90 \text{ \AA}$ y $l = 150 \text{ \AA}$ para 20 kbar y 100 kbar, in Fig.38 (a). Para la Fig. 38 (b) la apertura de canales.

90 Å and 210 Å, se refleja en una reducción de la movilidad.

VI. CONCLUSIONES Y PREGUNTAS ABIERTAS

Se ha hecho una revisión de sistemas delta dopados en los cuales el objetivo principal es mejorar las propiedades de transporte (movilidad, conductividad, transconductancia). Desde la propuesta original de Wood, pasando por la propuesta de Yamaguchi, Zheng hasta las más recientes correspondientes a nuestro grupo. A estas últimas se les ha puesto especial atención. Las cuales consisten en pozos dobles, pozos p-n y p-n-p y pozos bajo presión en GaAs, Si y ZnSe. Se ha dado de maneta detallada el marco teórico en el cual se calcula la estructura electrónica y la movilidad relativa. Cabe mencionar que este marco permite calcular los sistemas mencionados sin mucha complicación, lo que representa una ventaja con respecto a cálculos más elaborados (cálculos auto-consistentes). Se ha realizado un análisis tanto de estructura electrónica como de movilidad relativa para los parámetros densidad de impurezas, distancia entre pozos y presión de interés experimental. Para cada uno de los sistemas se ha encontrado el juego de parámetros que optimizan la movilidad. En los pozos p-n-p se obtiene un aumento en la movilidad no es mayor que la de pozos simples, sin embargo son más atractivos para aplicaciones tecnológicas por la densidad de carga que poseen. Se ha encontrado un pico en la movilidad a 170 Å para pozos dobles en GaAs el cual concuerda de manera satisfactoria con el pico observado experimentalmente (200 Å). En los pozos p-n-p se obtiene un aumento en la movilidad de un factor de dos con respecto a un pozo sin barrera tipo p. Esta aumento se atribuye a un confinamiento más efectivo de la nube de carga electrónica, ya que el aumento es monótono conforme se acercan las barreras, y la movilidad en pozos p-n-p es mayor que en pozos p-n. Los pozos dobles en GaAs bajo presión presentan un aumento en la movilidad de hasta ocho veces con respecto a un pozo sin presión. Este aumento se debe al cambio de la masa efectiva, la constante dieléctrica y el mínimo de la banda de conducción con la presión, así como la optimización de la distancia entre los pozos.

Desde el punto de vista experimental cada vez se logra mayor precisión tanto en el crecimiento de estructuras semiconductoras como en los métodos de medición de las propiedades de las mismas. En sistemas delta dopados existen algunos resultados contradictorios en las propiedades de transporte reportadas (5; 9). Estos se pueden atribuir a factores tales como la calidad de las muestras o los métodos implementados para la medición de las propiedades físicas. Sin embargo, no queda claro si en realidad esto factores son los responsables, ya que recientemente resultados similares se siguen observando en esta clase de sistemas (46; 47). Resultados por publicarse muestran que estas posibles contradicciones pueden explicarse por la variación tan particular que presenta la estructura electrónica con la temperatura (48). Evidentemente hacen falta muchos más estudios teóricos en estos sistemas, pero aun más resultados experimentales para verificar si las propuestas aquí presentadas son realistas.

Agradecimientos

Se agradece a J.C. Martínez-Orozco por una lectura crítica del manuscrito.

Bibliografía

- [1] C.F.C Wood, G. Metzger, J. Berry, and I. P. Eastman, "Complex free-carrier profile synthesis by atomic plane doping of MBE GaAs", *J. Appl. Phys.* **51**:1, 383-387 (1980)
- [2] E.F. Schubert and K. Ploog, "The δ -doped Field Effect Transistor", *Jpn. J. Appl. Phys.* **24**:8, L608-L610 (1985)
- [3] K. Yamaguchi, Y. Shiraki, Y. Katayama, and Y. Murayama, "A new short channel MOSFET with an Atomic-Layer-Doped impurity profile (ALD-MOSFET)", *Jpn. J. Appl. Phys. Suppl.* **22**:1, 267-270 (1983)
- [4] K. Nakagawa, A.A. van Gorkum, and Y. Shiraki, "Atomic layer doped field-effect transistor fabricated using molecular beam epitaxy", *Appl. Phys. Lett.* **54**:19, 1866-1871 (1989)
- [5] X. Zheng, T.K. Carns, K.L. Wang, and B. Wu, "Electron mobility enhancement from coupled wells in delta-doped GaAs", *Appl. Phys. Lett.* **62**:5, 504-506 (1993)
- [6] H.H. Radanson, M.R. Sardela, Jr., O. Nur, M. Willander, B.E. Semelius, W.-X. Ni, and G.V. Hansson, "Electron mobility enhancement in Si using doubly δ -doped layers", *Appl. Phys. Lett.* **64**:14, 1842-1844 (1994)
- [7] M.J. Kao, W.C. Hsu, R.T. Hsu, Y.H. Wu, T.Y. Lin, and C.Y. Chang, "Characteristics of graded-like multiple-delta-doped GaAs field effect transistors", *Appl. Phys. Lett.* **66**:19, 2505-2506 (1995)
- [8] G.-Q. Hai, N. Studart, and F.M. Peeters, "Electron mobility in two coupled δ layers", *Phys. Rev. B* **52**, 11273-11276 (1995)
- [9] V.L. Gurtovoi, V.V. Valyaev, S. Yu Shapoval, and A.N. Postovii, "Electron transport properties of double delta-doped GaAs structures grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition", *Appl. Phys. Lett.* **72**:10, 1202-1204 (1998)
- [10] E.F. Schubert, J.E. Cunningham and W.T. Tsang, "Electron-mobility enhancement and electron-concentration enhancement in δ -doped n-GaAs at T = 300K", *Solid State Commun.* **63**:7, 591-594 (1987)
- [11] P.M. Koerwaad, F.A.P. Blom, C.J.G.M. Lamerak, M.R. Leys, J.A.A.J. Perenboom, J. Singleton, S.J.R.M. Spennon, W.C. van der Vleuten, A.P.J. Voncken, J.H. Wolter, "Observation of high mobility and cyclotron resonance in 20 Å silicon delta-doped GaAs grown by MBE at 480 °C", *Semicond. Sci. Technol.* **5**:8, 861-866 (1990)
- [12] D.-H. Huang, W.-C. Hsu, Y.-S. Lin, J.-H. Yeh, and J.-C. Huang, "A metamorphic heterostructure field-effect transistor with a double delta-doped channel", *Semicond. Sci. Technol.* **22**:7, 784-787 (2007)
- [13] C.-S. Lee, C.-H. Chen, J.-C. Huang, and K.-H. Su, "Comparative Studies on Double δ -Doped Al_xGa_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As Symmetrically Graded Doped-Channel Field-Effect Transistors", *J. Electrochem. Soc.* **154**:5, H574-H579 (2007)
- [14] I.-H. Chu, H.-T. Hsu, E.-Y. Chang, T.-L. Lee, S.-H. Chen, Y.-C. Lien and C.-Y. Chang, "Double δ -Doped Enhancement-Mode InGaP/AlGaAs/InGaAs Pseudomorphic High Electron Mobility Transistor for Linearity Application", *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**:35, L932-L934 (2006)
- [15] C.-Y. Lee, H.-P. Shiao, K.-C. Kuo, H.-Y. Wu, and W.-H. Lin, "Mobility and charge density tuning in double δ -doped pseudo-

- morphic high-electron-mobility transistors grown by metal organic chemical vapor deposition", *J. Vac. Sci. Technol. B* **24**:6, 2597-2600 (2006).
- [16] Y.-S. Liu, D.-H. Huang, W.-C. Hsu, T. B. Wang, K. H. Su, J.-C. Huang, and C. H. Ho, "Improved InAlGaP-based heterostructure field-effect transistors", *Semicond. Sci. Technol.* **21**:4, 540-543 (2006).
- [17] K. Kalna, Q. Wang, M. Passlack, and A. Asenov, "Monte Carlo simulations of δ -doping placement in sub-100 nm implant free InGaAs/AlO₂/Si/PEFS", *Mater. Sci. Eng. B* **135**:3, 285-288 (2006).
- [18] I. Saida, L. Bouzaiene, M. H. Gazzah, H. Mejri, and H. Maaref, "Back doping design in delta-doped AlGaIn/GaN heterostructure field-effect transistors", *Solid State Commun.* **140**:6, 308-312 (2006).
- [19] I. Rodríguez-Vargas, M. F. Mora-Ramos, and C. A. Duque, "Influence of the hydrostatic pressure onto the electronic and transport properties of n-type double δ -doped GaAs quantum wells", *Microelectron. J.*, en prensa.
- [20] M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, "Electronic states in n-type GaAs delta-doped quantum wells under hydrostatic pressure", *Braz. J. Phys.* **36**:3B, 896-898 (2006).
- [21] F. Dizhur, A. Voronovsky, I. Kotelnikov, and S. Dizhur, "Pressure induced transition of 2DEG in δ -doped GaAs to insulating state", *phys. stat. sol. (b)* **244**:1, 453-459 (2007).
- [22] E. Dizhur, A. Voronovsky, A. Fedorov, I. Kotelnikov, and S. Dizhur, "Metal-insulator transition in the 2DEG in Al δ -Si/GaAs under pressure", *Physica E* **34**:1-2, 628-631 (2006).
- [23] L. M. Gaggero-Sager, M. F. Mora-Ramos and D. A. Conteras-Solorio, "Thomas-Fermi approximation in p-type δ -doped quantum wells of GaAs and Si", *Phys. Rev. B* **57**:11, 6285-6289 (1998).
- [24] L. M. Gaggero-Sager, and M. E. Mora-Ramos, "Hole energy levels in p-type δ -doped Si quantum wells: Influence of the split-off band", *phys. stat. sol. (b)* **229**:1, 163-166 (2000).
- [25] M. Combescot and P. Nozières, "Condensation of excitons in germanium and silicon", *J. Phys. C* **5**:17, 2369-2391 (1972).
- [26] P. A. Bobbert, H. Wieldraayer, R. van der Weide, M. Kemmerink, P. M. Koentraad and J. H. Wölter, "Exchange-correlation energy of a hole gas including valence band coupling", *Phys. Rev. B* **56**:7, 3664-3671 (1998).
- [27] L. Toriatti, "Thomas-Fermi theory of δ -doped semiconductor structures: Exact analytical results in the high-density limit", *Phys. Rev. B* **41**:12, 8340-8344 (1990).
- [28] L. M. Gaggero-Sager, J. C. M'Peko and R. Pérez-Alvarez, "Thomas-Fermi approximation in two p-type delta-doped quantum wells in GaAs and Si", *Rev. Mex. Fis.* **47**:2, 153-157 (2001).
- [29] L. M. Gaggero-Sager, "Exchange and correlation via functional of Thomas-Fermi in delta-doped quantum wells", *Model. Simul. Mater. Sc.* **9**:1, 1-5 (2001).
- [30] L. M. Gaggero-Sager and R. Pérez-Alvarez, "Electronic structure of delta-doped quantum well as a function of temperature", *Appl. Phys. Lett.* **70**:2, 212-213 (1997).
- [31] V. V. Mitin, V. A. Kochelap and M. A. Stroscio, *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics*, Cambridge University Press, New York (1999).
- [32] W. Künke, E. Hammerl, I. Fisele, D. Schulze and G. Gobsch, "Electrical transport between delta layers in silicon", *J. Appl. Phys.* **72**:8, 3602-3605 (1992).
- [33] I. Rodríguez-Vargas, L. M. Gaggero-Sager and V. R. Velasco, "Thomas-Fermi-Dirac theory of the hole gas of a double p-type δ -doped GaAs quantum wells", *Surf. Sci.* **537**:1-3, 75-83 (2003).
- [34] I. Rodríguez and L. M. Gaggero-Sager, "Subband structure comparison between n- and p-type double delta-doped GaAs quantum wells", *Rev. Mex. Fis.* **50**:6, 614-619 (2004).
- [35] I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, "Hole subband structure and mobility calculations of double p-type δ -doped GaAs quantum wells", *phys. stat. sol. (c)* **2**:10, 3637-3640 (2005).
- [36] I. Rodríguez and L. M. Gaggero-Sager, "Thomas Fermi approximation of double n-type delta-doped GaAs quantum wells: sub-band and transport calculations", *Microelectron. J.* **36**:3-6, 404-406 (2005).
- [37] I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, "Thomas-Fermi-Dirac calculations of valence band states of double p-type δ -doped quantum wells in Si", *phys. stat. sol. (c)* **2**:10, 3634-3636 (2005).
- [38] I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, "Subband and transport calculations in double n-type δ -doped quantum wells in Si", *J. Appl. Phys.* **99**:3, 033702 (2006).
- [39] I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, "Hole-level structure of double δ -doped quantum wells in Si: The influence of the split-off band", *Physica B* **389**:2, 227-233 (2007).
- [40] I. Rodríguez-Vargas, L. M. Gaggero-Sager and J. C. Martínez-Orozco, "Thomas-Fermi-Dirac calculations of valence band states in two p-type delta-doped ZnSe quantum wells", *phys. stat. sol. (b)* **242**:5, 1043-1053 (2005).
- [41] I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, "Electronic structure of pn delta-doped quantum wells in Si", *Rev. Mex. Fis. Suppl.* **53**:71, 109-111 (2007).
- [42] L. M. Gaggero-Sager and I. Rodríguez-Vargas, "p-n-p δ -doped quantum wells in GaAs", *PIERS ONLINE* **3**:6, 855-858 (2007).
- [43] D. A. Ariza-Flores and I. Rodríguez-Vargas, "Electron subband structure and mobility trends in p-n delta-doped quantum wells in Si", *PIER L*, **1**, 159-165 (2008).
- [44] D. A. Ariza-Flores and I. Rodríguez-Vargas, "Enhancement of the electronic confinement improves the mobility in p-n-p delta-doped quantum wells in Si", *PIER L*, **1**, 167-172 (2008).
- [45] C. A. Duque, N. Porras-Montenegro, Z. Baticovic, M. Pacheco and L. E. Oliveira, "Electron-hole transitions in self-assembled InAs GaAs quantum dots: Effects of applied magnetic fields and hydrostatic pressure", *Microelectron. J.* **36**:3-6, 231-233 (2005).
- [46] K. E. J. Güh, L. Oberbeck, M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, and M. J. Butcher, "Influence of doping density on electronic transport in degenerate Si:P δ -doped layers", *Phys. Rev. B* **73**:3, 035401 (2006).
- [47] M. A. Zudov, C. L. Yang, R. R. Du, T.-C. Shen, J.-Y. Ji, J. S. Kline, and J. R. Tucker, "Wave localization in ultradense 2D electron gas in δ -doped Silicon", *cond-mat/0305482*.
- [48] I. M. Gaggero-Sager and I. Rodríguez-Vargas, "Different behavior of mobility with temperature for different Silicon concentrations in Si delta-doped GaAs quantum wells", *unpublished*.

Otros trabajos

PROPAGACIÓN DE LA LUZ EN HETEROESTRUCTURAS DIELECTRICAS DE RUDIN-SHAPIRO

Miguel E. Mora-Ramos⁽¹⁾, Bonifacio Alvarado Tenorio⁽²⁾, Vivechana Agarwal⁽²⁾,

(1) *Fac. de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, CP 62209, México.*

(2) *Centro de Investigaciones en Ingeniería y Ciencias Aplicadas*

Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, CP 62209, México

We study the propagation of electromagnetic waves through dielectric multilayers made of porous silicon. The porous silicon layers are arranged following different generations of the Rudin-Shapiro sequence. The reflectance of this kind of structures is studied both theoretically and experimentally. The reflectance spectra of the structures exhibit photonic band gaps centered at predetermined wavelengths. Numerical simulation of light transmission is performed using transfer matrix method.

Se investiga la transmisión de la luz en heteroestructuras dieléctricas constituidas por multicapas de silicio poroso. Tales sistemas se fabrican siguiendo un arreglo estructural dado a través de diferentes generaciones de la sucesión de Rudin-Shapiro. Se mide el espectro de reflectancia de las muestras encontrándose que las multicapas diseñadas siguiendo un criterio de espesores de tipo $\lambda/4$ presentan una importante brecha fotónica centrada en el valor λ de la longitud de onda de la radiación. También se hace el cálculo teórico del coeficiente de reflexión de las estructuras, utilizando el método de la matriz de transferencia. Se comparan los resultados teóricos y los experimentales.

I. INTRODUCCIÓN

El estudio de sistemas artificiales en los que la propagación de la radiación electromagnética presenta propiedades diferentes a las que habitualmente posee cuando atraviesa un medio homogéneo, ha llevado a la noción de lo que se conoce como cristales fotónicos. Entre otras características, el espectro de frecuencias de las ondas que atraviesan la estructura presenta intervalos de valores "prohibidos"; es decir, las ondas de luz cuyos valores de la frecuencia están dentro de esos intervalos simplemente no pueden propagarse por el sistema.

El interés en las propiedades fotónicas en sistemas cuasi-periódicos ha tomado gran relevancia debido a que se asume que estos sistemas están en el umbral entre los sistemas periódicos y los aleatorios (desordenados). Se ha mostrado hasta ahora que las estructuras multicapa unidimensionales pueden generar modos fotónicos localizados. Actualmente resulta de significativa importancia determinar si los diferentes tipos de sistemas cuasi-periódicos exhiben la misma clase de propiedades ópticas. En el caso del presente trabajo se mostrará la caracterización y discusión de una serie de estructuras multicapa con secuencias de Rudin-Shapiro.

El silicio poroso ha sido un material que ha recibido mucha atención recientemente por su potencialidad en la fabricación de dispositivos ópticos con propiedades fotónicas¹.

La secuencia de la estructura de Rudin-Shapiro para multicapas de silicio poroso es propuesta aquí como un candidato ideal en la investigación de posibles similitudes con los sistemas aleatorios. Se ha clasificado como un sistema determinísticamente aperiódico² y se han presentado algunos estudios relacionados con la aplicación de esta sucesión en la fabricación de sistemas ópticos y electrónicos^{3,4}.

La fabricación de esta serie de multicapas contiene en cada secuencia la presencia de cuatro capas básicas con cuatro diferentes índices de refracción ($n_A = 1.9$, $n_B = 1.7$, $n_C = 1.2$, $n_D = 1.5$). La heteroestructura se genera a par-

tir de las correspondientes reglas de sustitución: $A \rightarrow AC$, $B \rightarrow DC$, $C \rightarrow AB$, $D \rightarrow DB$, tomando como elemento de partida la generación compuesta únicamente por la capa A . Por ejemplo, La figura 1 muestra la secuencia Rudin-Shapiro de orden 5 (32 capas). En el detalle de la micrografía se señalan las primeras siete capas (ACABACD) de la misma. En ella se observa que no es fácil distinguir entre las capas A y B por las tonalidades en gris y negro que muestra la micrografía, debido a que entre ellas el valor del índice de refracción es muy cercano.

Por otra parte, la simulación matemática de la propagación de la onda electromagnética en estructuras multicapa suele hacerse típicamente mediante el empleo del método de la matriz de transferencia. Este es un enfoque muy conocido para la solución de problemas unidimensionales del tipo de Schrödinger en mecánica cuántica y, más recientemente, en óptica. Se estudian así propiedades como la transmisión de señales electromagnéticas, la aparición de brechas fotónicas en superredes etc.

El trabajo se organiza entonces como sigue: En la sección II se presenta una reseña del método de la matriz de transferencia. En la sección siguiente se dan algunos detalles del procedimiento experimental. La sección IV presenta los resultados y su discusión y finalmente se dan la correspondientes conclusiones.

II. RESEÑA DEL MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

Veamos aquí algunos aspectos del método de cálculo que se emplea para hacer la evaluación teórica de las propiedades fundamentales de la propagación de una onda electromagnética a través de un medio dieléctrico compuesto por capas múltiples y caracterizado principalmente por la existencia de intercaras: el espectro de las excitaciones elementales y el coeficiente de transmisión (reflexión).

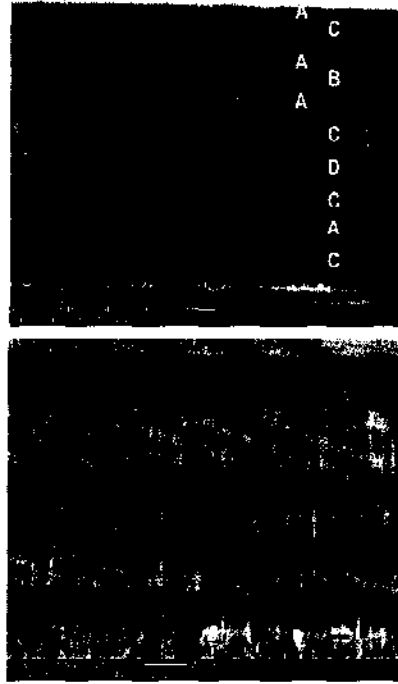


Figura 1: Micrografía electrónica de barrido (HR-SEM) de sección transversal de una multicapa Rudin-Shapiro de orden 5 con secuencia ACABACDCACABDBABACABACDCDBDCACDC.

Se conoce perfectamente de la teoría de las ecuaciones diferenciales que una ecuación diferencial lineal de orden m se puede transformar en un sistema de m ecuaciones diferenciales lineales de primer orden con el mismo número de funciones por determinar. A través de este procedimiento, un conjunto de n ecuaciones diferenciales lineales de orden m puede ser tratado como un sistema de $n \times m$ ecuaciones diferenciales lineales de primer orden, el cual puede escribirse en forma matricial como se ve a continuación:

$$\frac{d\Psi(z)}{dz} = P(z)\Psi(z). \quad (1)$$

En esta expresión, $\Psi(z)$ representa una matriz columna de $n \times m$ componentes. Al mismo tiempo, P es la matriz (de orden $n \times m$) de los coeficientes del sistema.

Colocando el origen de la coordenada z en el valor z_0 , se procede a escoger un conjunto de $n \times m$ soluciones linealmente independientes de la ecuación (1), tales que satisfagan las condiciones

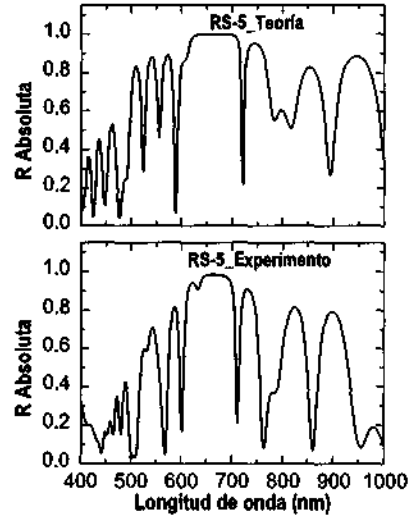


Figura 2: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 5 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 650$ nm

$$h_{uv}(z_0) = \delta_{uv}; \quad (2)$$

La solución del sistema de ecuaciones se puede representar también matricialmente, poniéndola en términos de los valores que adopta en el origen de las coordenadas z :

$$\Psi(z) = M(z, z_0)\Psi(z_0), \quad (3)$$

and $M(z, z_0)$ is known as the transfer matrix:

$$M(z, z_0) = \begin{pmatrix} h_{11}(z) & h_{21}(z) & \dots & h_{nm1}(z) \\ h_{12}(z) & h_{22}(z) & \dots & h_{nm2}(z) \\ h_{13}(z) & h_{23}(z) & \dots & h_{nm3}(z) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ h_{1nm}(z) & h_{2nm}(z) & \dots & h_{nmnm}(z) \end{pmatrix} \quad (4)$$

En un sistema donde la matriz de transferencia pueda construirse a trozos, para diferentes intervalos de la coordenada -partiendo desde cierto valor z_0 -, la matriz de transferencia total se obtiene entonces mediante la multiplicación de las matrices de transferencia asociadas a los diferentes segmentos, de forma tal que la matriz de transferencia que corresponde

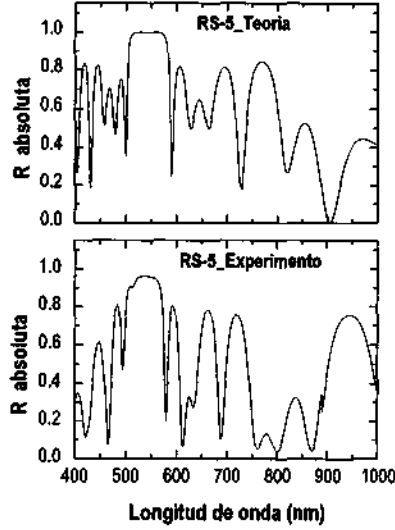


Figura 3: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 5 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 550$ nm

al intervalo (z_0, z_1) se ubica a la extrema derecha del producto de matrices. Entonces, la matriz de transferencia del último segmento (aquel con el mayor valor de z considerado) se posicionará como el primer factor matricial a la izquierda de la multiplicación, siguiendo la condición establecida en la ecuación (3).

En el caso particular de una ecuación de Maxwell en una dimensión, para el campo eléctrico en un sistema dieléctrico estructurado, la matriz de transferencia es una matriz cuadrada de segundo orden. Si el sistema es periódico, la aplicación del teorema de Bloch-Floquet proporciona la ecuación de la estructura de bandas,

$$\cos qd = \frac{1}{2} \text{Tr} M(d, z_0); \quad (5)$$

donde se supone que la longitud del periodo característico es $d = z_0$. Las bandas de transmisión para la señal del campo eléctrico se encuentran haciendo $|\cos qd| \leq 1$.

En un sistema multiestructurado no periódico, con distintos segmentos con diferentes valores de la función dieléctrica, la señal de transmisión también se puede estudiar mediante la matriz de transferencia. La fórmula

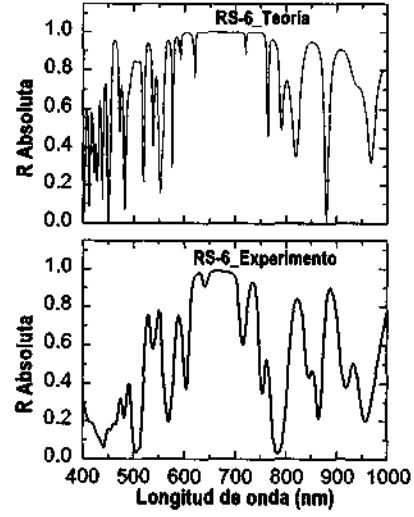


Figura 4: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 6 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 600$ nm

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2, \quad (6)$$

representa la reflectancia de la onda electromagnética en la estructura en términos de los elementos de la matriz de transferencia total.

Entonces, la simulación teórica de la reflectancia en las muestras de Rudin-Shapiro en silicio poroso se realiza al aplicar este método a la ecuación maestra unidimensional

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\epsilon(z)} \frac{dE(z)}{dz} \right] = - \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 E(z), \quad (7)$$

en la cual $E(z)$ es la intensidad del campo eléctrico, $\epsilon(z)$ es la función dieléctrica -constante a trozos-, y λ es la longitud de onda óptica. En las intercaras entre capas con diferentes valores de ϵ , se imponen condiciones de contorno que complementan a la ecuación (7). Estas son: continuidad de $E(z)$, y continuidad de $\epsilon^{-1}(z)dE(z)/dz$. La solución para toda la estructura se obtiene con el método de la matriz de transferencia suponiendo incidencia normal.

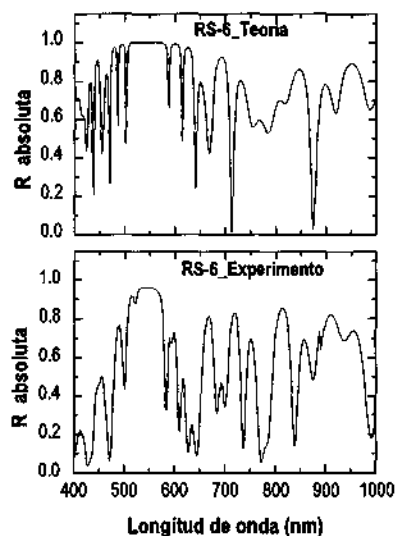


Figura 5: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 6 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 500$ nm

III. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Para la fabricación de las estructuras fotónicas hemos usado obleas de silicio cristalino tipo p^{++} (impurificado con Boro), orientación (100) y con una resistividad de 0.002-0.005 Ωcm . El ataque electroquímico fue realizado a temperatura ambiente con una solución de 30% en volumen de HF, o sea, una solución con una proporción de 3:7 de HF (48%) y alcohol etílico (98%). La densidad de corriente fue controlada con una computadora. Para obtener capas de cuatro diferentes porosidades, fueron empleados valores de corriente de 5(A), 21(B), 33 (D) y 80 (C) mA/cm². Los tiempos de ataque de cada corriente fueron calculados para espesor óptico de 550 y 650nm. Los índices de refracción de las capas fueron estimados al analizar el espectro de reflectancia de una capa de 2 μm de espesor a una longitud de onda de 1500 nm. Las mediciones de reflectancia en heteroestructuras de Rudin-Shapiro fabricadas de silicio poroso fueron realizadas usando un espectrofotómetro Perkin Elmer UV-Vis-NIR modelo Lambda 950 a 8° de incidencia con respecto a la normal. Las estructuras fueron examinadas con un microscopio electrónico de barrido de alta resolución.

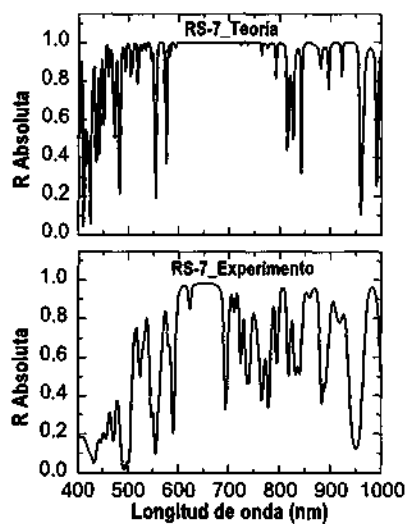


Figura 6: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 7 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 600$ nm

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las figuras 2 y 3 se presentan los resultados de la respuesta óptica de la serie de multicapas fabricadas con secuencia Rudin-Shapiro de orden 5. En la figura 2 se muestra el espectro de reflectancia de una serie de multicapas que fue diseñada con una longitud de onda central de 600 nm. Aparece una brecha fotónica ubicada en un intervalo de longitud de onda de 600 nm a 700 nm y esta brecha se repite en los espectros de las estructuras de órdenes 6 y 7 (ver figuras 4 y 6), con la característica de que se detecta también la presencia de una microcavidad situada en los 630 nm de longitud de onda.

Los espectros calculados de toda la serie Rudin-Shapiro coinciden bastante bien con los resultados experimentales en el intervalo en donde aparecen las brechas fotónicas, en cada uno de los órdenes. Los picos laterales presentes en todos los espectros no coinciden completamente con los picos laterales calculados. Una de las posibles razones de esta discordancia puede ser el bajo contraste de índices de refracción en algunas de las partes de la secuencia. Es decir, hay partes en las que no hay un cambio significativo de este parámetro al pasar de una capa a la siguiente y esto puede estar afectando la generación de la interferencia constructiva necesaria para una máxima reflexión. Otra posibilidad sobre la falta de co-

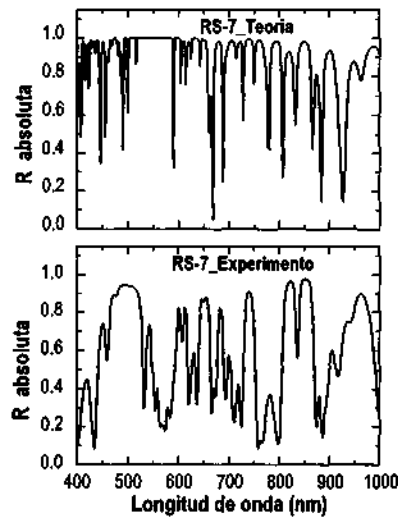


Figura 7: Espectro de reflectancia de una heteroestructura de Rudin-Shapiro de orden 7 basada en silicio poroso centrada en $\lambda = 500$ nm

incidencia entre los picos experimentales y calculados está en la existencia de fenómenos de absorción, dado que es sabido que el silicio poroso tiene una fuerte absorción óptica en la región de altas frecuencias. Además, no hay que olvidar que las irregularidades en las intercaras conducen a efectos dispersivos que provocan una notable disminución de la intensidad de ciertas longitudes de onda que se propagan en la dirección normal a las las intercaras.

Se fabricaron también multicapas de Rudin-Shapiro para una longitud de onda central ubicada en 500 nm con órdenes que van igualmente del quinto al séptimo (figuras 3, 5 y 7). En esta serie de espectros de reflectancia se aprecian características similares a la serie de longitud de onda central en 600 nm discutida previamente.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo presentamos los resultados preliminares sobre la obtención y caracterización de multicapas de silicio poroso con perfil no periódico siguiendo tres diferentes secuencias de Rudin Shapiro. Se concluye que esta clase de sistemas pudiera resultar de interés para su aplicación en la fabricación de espejos y/o filtros ópticos dada la estabilidad de las brechas fotónicas principales que en ellas aparecen.

¹ V. Agarwal, J. A. del Rio, "Tailoring the photonic band gap of a porous silicon dielectric mirror", *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1512-1514 (2003).
² J. M. Luck, "Cantor spectra and scaling of gap widths in deterministic aperiodic systems", *Phys. Rev. B* **39**, 5834-5849 (1989).
³ M. Dulea, M. Johansson, R. Riklund, "Localization of electrons and electromagnetic waves in a deterministic aperiodic system",

Phys. Rev. B **45**, 105-113 (1992).
⁴ M. S. Vasconcelos, E. L. Albuquerque, "Transmission fingerprints in quasiperiodic dielectric multilayers", *Phys. Rev. B* **59**, 11128-11131 (1999).
⁵ M. E. Mora, R. Pérez-Álvarez, Ch. Sommers "Transfer matrix in one-dimensional problems", *J. Physique* **46**, 1021-1026 (1985).

VARIACIÓN DEL GAP DE ENERGÍA BAJO TENSIÓN UNIAXIAL A LO LARGO DE (111) y (211) PARA LOS MATERIALES InAs, GaSb Y GaAs

J. Martín Mozo,¹ B. Salazar-Hernández,² J. Ariaga,³ Javier Olvera Cervantes,⁴ B. S. Soto-Cruz,¹ and S. Alcántara I.¹

¹Centro de Investigación en Dispositivos Semiconductores-IC, BUAP Puebla, 72570, México

²Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, UAEM, Universidad 1001, Col Chamilpa, Cuernavaca, Mor., 62209, México

³Instituto de Física, BUAP, Apartado Postal J-48, Puebla, 72570, México

⁴Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 28049, Cantoblanco, Madrid, España

We study the variation of the energy gap at the Γ point of the Brillouin zone for the semiconducting materials InAs, GaSb and GaAs. This is done by assuming that a uniaxial strain is applied along the symmetry directions (111) and (211). Calculations are performed with the use of an Empirical Tight-Binding Hamiltonian (ETB), with a basis of five atomic orbitals $\{s, p_x, p_y, p_z, s^*\}$, and taking into account the contributions of the nearest neighbors only. Spin-orbit interaction is also included. The generalized Hook's Law is used to find the relationships between the uniaxial strain and the deformations appearing along each symmetry direction. The effects due to the deformations are included in the Hamiltonian through the directing cosines as well as an empirical scaling law $H_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta}^0 \left(\frac{\epsilon}{\epsilon^0}\right)^{n_{\alpha\beta}}$, that reproduces experimental results that have been previously reported.

Se estudia la variación del "gap" de energía electrónica en el punto Γ de la zona de Brillouin para los materiales semiconductores InAs, GaSb y GaAs. Esto se hace suponiendo una tensión uniaxial a lo largo de las direcciones de simetría (111) y (211). Los cálculos son realizados utilizando un Hamiltoniano Tight-Binding Empírico (TBE), con una base de cinco orbitales atómicos $\{s, p_x, p_y, p_z, s^*\}$, considerando la contribución a primeros vecinos e incluyendo la interacción spin-órbita. Se utiliza la ley de Hook generalizada para encontrar las relaciones entre la tensión uniaxial y las deformaciones que se producen a lo largo de cada dirección de simetría. Los efectos que estas producen en los materiales son incluidos en el hamiltoniano a través de los cosenos directores y de una ley empírica de escalado $H_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta}^0 \left(\frac{\epsilon}{\epsilon^0}\right)^{n_{\alpha\beta}}$, que reproduce resultados experimentales.

I. INTRODUCCIÓN

Las propiedades electrónicas de los materiales semiconductores en volumen han sido de gran importancia en la fabricación de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, además de la importancia que estas tienen en la investigación de física básica. De resultados experimentales sabemos que la aplicación de una tensión externa sobre algún material semiconductor cambia el tamaño de la constante de red del material en cuestión. Si la tensión es una presión hidrostática sólo cambian las distancias entre los átomos, sin cambiar la simetría del material; aunque sí modifica los estados electrónicos en el mismo. Por otra parte, se ha encontrado en forma teórica y experimental que la variación del "gap" de energía electrónica para semiconductores de gap directo, en función de la presión hidrostática es de la forma $E_g(P) = E_0 + \alpha P + \beta P^{2.1,2}$. Mientras que cuando la tensión aplicada es uniaxial disminuye la simetría del semiconductor y como consecuencia se produce una separación de los estados degenerados³. Además, la nueva simetría depende de la dirección en la cual la tensión uniaxial se aplique. Esto a su vez cambia la estructura de bandas de energía electrónica.

Por otra parte, el gran avance que han tenido las técnicas de crecimiento ha permitido crecer materiales de espesores muy delgados, que va de unas cuantas capas atómicas a pocas decenas de capas atómicas, que

son además de alta calidad cristalina. Así también ha permitido crecer materiales a lo largo de diferentes direcciones de simetría. En gran parte, los estudios reportados para materiales sometidos a alguna tensión están basados en el cálculo de potenciales de deformación⁴⁻⁷. En este trabajo se reportan los resultados obtenidos para los materiales semiconductores InAs, GaSb y GaAs sometidos a una tensión uniaxial a lo largo de las direcciones cristalográficas (111) y (211). Se utiliza un hamiltoniano TBE el cual da un panorama bastante real de las interacciones que dan origen a la formación de la estructura de bandas y de cómo se modifica esta estructura cuando la configuración electrónica es alterada por algún medio⁸. Se considera una base de 5 orbitales atómicos $\{s, p_x, p_y, p_z, s^*\}$, con interacción a primeros vecinos y se incluye la interacción spin-órbita⁹. Se suponen valores para la deformación que estén dentro del límite elástico del material, lo que permite utilizar la ley de Hook generalizada y obtener la razón de Poisson σ^{N11} , a lo largo de cada una de las direcciones de simetría. Los materiales semiconductores que se estudian tienen simetría cúbica y por lo tanto tres constantes de rigidez elástica C_{11} , C_{12} y C_{13} independientes.

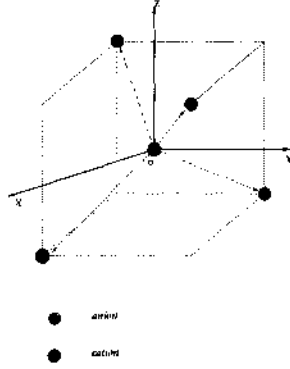


FIG. 1: Estructura zincblenda, mostrando los vectores de posición \vec{d}_i .

II. TEORÍA

Los materiales InAs, GaSb, y GaAs son materiales semiconductores de gap directo con estructura cristalina de tipo Zinc-Blenda. Desde el punto de vista TBE el recomodo atómico producido por la tensión, modifica los elementos de matriz del hamiltoniano debido a variaciones en los ángulos y en las distancias entre los átomos. Estas variaciones son tomadas en cuenta e introducidas en los elementos de matriz del hamiltoniano de la siguiente forma: i) la variación angular en forma exacta a través de los cambios en los cosenos directores y ii) la variación en la distancia en forma empírica, utilizando una ley de escalamiento $H_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta}^0 \left(\frac{r_0}{r}\right)^{\eta_{\alpha\beta}}$, la cual reproduce resultados experimentales de sistemas bajo tensión¹⁰, donde $H_{\alpha\beta}^0$ son los elementos de la matriz hamiltoniana sin deformar, $\left(\frac{r_0}{r}\right)^{\eta_{\alpha\beta}}$ es el factor de rescalamiento siendo r_0 la distancia entre los átomos sin deformar y r la distancia entre los átomos cuando hay deformación. Los valores de los exponentes $\eta_{\alpha\beta}$ pueden depender del par de orbitales atómicos $\{\alpha, \beta\}$ que se consideren¹¹. Las nuevas posiciones atómicas que resultan de la deformación son calculadas utilizando la teoría de elasticidad.

Aplicar la tensión uniaxial a lo largo de las direcciones de simetría (111) o (211); equivale aplicar una tensión biaxial a un plano que tiene como perpendicular a estos ejes respectivamente, donde las deformaciones paralelas al plano se consideran iguales y son denotadas por $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_p$. Para estudiar la respuesta de los materiales causada por la tensión a lo largo de las direcciones de estudio, se hace una rotación de ejes de tal forma que el eje Z del sistema rotado coincida con las direcciones (111) y (211) respectivamente del sistema sin rotar.

Considerando en ambos casos el anión en el origen del sistema de coordenadas (figura 1), las posiciones de los

TABLA 1

Transformación de los vectores \vec{d}_i en los vectores $\vec{d}_{i'}$. Dirección (111) (en unidades de $a_0/4$).

i	\vec{d}_i	$\vec{d}_{i'}$
1	(1, 1, 1)	(0, 0, $\sqrt{3}$)
2	(-1, -1, 1)	$\left(-\frac{2}{\sqrt{2}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$
3	(1, -1, -1)	$\left(0, -\frac{2}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$
4	(-1, 1, -1)	$\left(\frac{2}{\sqrt{2}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

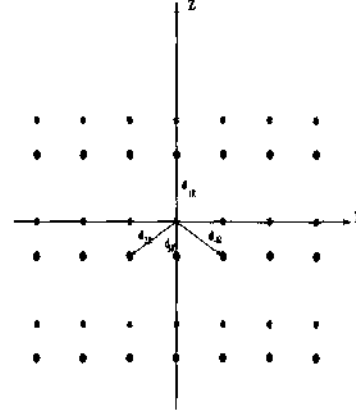


FIG. 2: La geometría de los vectores de posición $\vec{d}_{i'}$ en el plano $X' - Z'$.

cuatro cationes vecinos \vec{d}_i se transforman bajo la rotación en los vectores $\vec{d}_{i'}$ donde $i = 1, 2, 3, 4$.

A. Dirección (111)

Para esta dirección los vectores de posición de los cationes se transforman a través de la matriz de rotación

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Los vectores de posición a lo largo de la dirección (100) y rotados se muestran en la tabla 1.

En la figura 2 se muestra la geometría de los vectores $\vec{d}_{i'}$ en el plano $X - Z$.

De las coordenadas de estos vectores se puede observar que la componente z de los cationes 2, 3 y 4 rotados tienen el mismo valor $z = -\frac{1}{\sqrt{3}}$. Considerando el material

TABLA 2
Cosenos directores. Dirección (111).

$l_1 = 0$	$m_1 = 0$	$n_1 = 1$
$l_2 = -\frac{\sqrt{2}(1+\epsilon_p)}{\sqrt{8(1+\epsilon_p)^2+(1+\epsilon_\perp)^2}}$	$m_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}l_2$	$n_2 = -\frac{(1+\epsilon_\perp)}{\sqrt{8(1+\epsilon_p)^2+(1+\epsilon_\perp)^2}}$
$l_3 = 0$	$m_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}l_2$	$n_3 = n_2$
$l_4 = -l_2$	$m_4 = -\frac{1}{\sqrt{3}}l_2$	$n_4 = n_2$

constituido por planos atómicos, para esta dirección cada plano atómico contiene átomos de una sola especie (aniones o cationes) y el material se puede ver construido a lo largo de esta dirección por planos atómicos alternados de aniones o cationes. Se utiliza la ley de Hooke generalizada $T_{\alpha\beta} + C_{\alpha\beta ij}\epsilon_{ij} = 0$ para encontrar los valores de las deformaciones ϵ_{ij} . Considerando $\alpha, \beta, i, j = 1, 2, 3$ en el sistema de ejes rotados y desarrollando para los valores de $(\alpha\beta) = (33), (23), (13)$ con $T_{\alpha\beta} = 0$, se calculan las deformaciones. Considerando $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_{33}$, entonces $\epsilon_{12} = \epsilon_{13} = \epsilon_{23} = 0^6$. Haciendo $\epsilon_{33} = \epsilon_\perp$ se obtiene:

$$\epsilon_\perp = -\left(\frac{C'_{3311} + C'_{3322}}{C'_{3333}}\right)\epsilon_p \quad (2)$$

Donde, la razón de Poisson en el sistema rotado para esta dirección es: $\sigma = \frac{C'_{3322}}{C'_{3311} + C'_{3322}}$. Las constantes de rigidez elástica C'_{3311}, C'_{3322} y C'_{3333} en términos de las constantes de rigidez en el sistema de referencia no rotado -que como se sabe para un cristal con simetría cúbica son tres diferentes de cero-, están dadas por:

$$\begin{aligned} C'_{3311} = C'_{31} &= \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{3} \\ C'_{3322} = C'_{32} &= \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{3} \\ C'_{3333} = C'_{33} &= \frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3}, \end{aligned} \quad (3)$$

donde hemos usado la notación abreviada.

En términos de las constantes elásticas C_{11}, C_{12} y C_{44} , y usando la ecuación (3) la razón de Poisson en la dirección (111) es:

$$\sigma^{111} = \frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{2C_{11} + 4C_{12} - 4C_{44}} \quad (4)$$

Este resultado permite relacionar la deformación uniaxial a la cual suponemos sometidos los materiales $\epsilon_{33} = \epsilon_\perp$, con las deformaciones $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_p$; es decir $\epsilon_\perp = -\frac{\sigma^{111}}{\sigma^{111}}$.

Los efectos de tensión en un sistema dado pueden conocerse a través de los cambios que produce esta en los vectores unitarios, que para la dirección (111) se reducen a:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_i &= (1 + \epsilon_p)\tilde{x} \\ \tilde{y}_i &= (1 + \epsilon_p)\tilde{y} \\ \tilde{z}_i &= (1 + \epsilon_\perp)\tilde{z}. \end{aligned} \quad (5)$$

Escribiendo los \tilde{d}_{ir} en términos de los vectores unitarios tensionados en el sistema rotado, se tiene:

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{1rt} &= \frac{a_0}{4} \left(0, 0, \frac{\sqrt{3}}{4}(1 + \epsilon_\perp) \right) \\ \tilde{d}_{2rt} &= \frac{a_0}{4} \left(-\frac{1 + \epsilon_p}{2\sqrt{2}}, \frac{1 + \epsilon_p}{2\sqrt{6}}, \frac{1 + \epsilon_\perp}{4\sqrt{3}} \right) \\ \tilde{d}_{3rt} &= \frac{a_0}{4} \left(0, \frac{1 + \epsilon_p}{2\sqrt{6}}, -\frac{1 + \epsilon_\perp}{4\sqrt{3}} \right) \\ \tilde{d}_{4rt} &= \frac{a_0}{4} \left(\frac{1 + \epsilon_p}{2\sqrt{2}}, \frac{1 + \epsilon_p}{2\sqrt{6}}, -\frac{1 + \epsilon_\perp}{4\sqrt{3}} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

Las magnitudes de los cuatro vectores rotados sin tensionar son iguales: $|\tilde{d}_{ir}| = \frac{\sqrt{3}}{4}$ con $i = 1, 2, 3, 4$; mientras que, la de los vectores rotados y tensionados son:

$$\begin{aligned} |\tilde{d}_{1rt}| &= \frac{\sqrt{3}}{4}(1 + \epsilon_\perp), \\ |\tilde{d}_{2rt}| = |\tilde{d}_{3rt}| = |\tilde{d}_{4rt}| &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{8(1 + \epsilon_p)^2 + (1 + \epsilon_\perp)^2}{3}}. \end{aligned} \quad (7)$$

De las expresiones (6) y (7) se obtiene los cosenos directores, mostrados en la Tabla 2, también se obtiene los cocientes de las distancias $\frac{d_{ir}}{d_{1rt}}$ con $i = 1, 2, 3, 4$ cuyos valores son:

$$\begin{aligned} \frac{d_{1r}}{d_{1rt}} &= \frac{1}{1 + \epsilon_\perp}, \\ \frac{d_{2r}}{d_{2rt}} &= \frac{3}{\sqrt{8(1 + \epsilon_p)^2 + (1 + \epsilon_\perp)^2}}. \end{aligned} \quad (8)$$

TABLA 3

Transformación de los vectores \vec{d}_i en los vectores \vec{d}_{ir} .
Dirección (211) (en unidades de $a_0/4$).

i	\vec{d}_i	\vec{d}_{ir}
1	(1, 1, 1)	$(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{6}})$
2	(-1, -1, 1)	$(-\frac{1}{2\sqrt{2}}, \frac{1}{4\sqrt{3}}, -\frac{1}{2\sqrt{6}})$
3	(1, -1, -1)	$(0, -\frac{\sqrt{3}}{4}, 0)$
4	(-1, 1, -1)	$(\frac{1}{2\sqrt{2}}, \frac{1}{4\sqrt{3}}, -\frac{1}{2\sqrt{6}})$

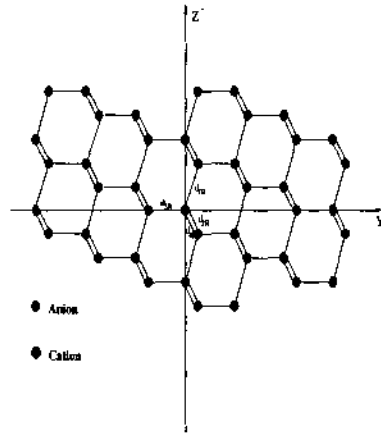


FIG. 3: La geometría de los vectores de posición \vec{d}_{ir} en el plano $Y' - Z'$.

B. Dirección (211)

En la figura 3 se muestra la geometría los vectores \vec{d}_{ir} en el plano $Y' - Z'$ y en la Tabla 3 la nueva posición de los cationes en el sistema rotado a través de la matriz:

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

A diferencia de la dirección (111) los planos atómicos contienen átomos de ambas especies; aniones y cationes.

Nuevamente utilizando la ley de Hooke generalizada $T_{\alpha\beta} + C_{\alpha\beta ij}\epsilon_{ij} = 0$ en el sistema rotado y desarrollando para $(\alpha\beta) = (33), (23), (13)$ con $T_{\alpha\beta} = 0$, $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \epsilon_p$ y $\epsilon_{12} = \epsilon_{21} = 0$, se obtienen las deformaciones para esta dirección. Expresadas estas últimas en términos de las tres constantes independientes de rigidez elásticas quedan:

$$\begin{aligned} \epsilon_{13} = \epsilon_{31} &= 0 \\ \epsilon_{23} = \epsilon_{32} &= \frac{-3(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} - 2C_{44})\epsilon_p}{\sqrt{2}[2(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} + C_{44}^2 - 2C_{12}^2) + 13C_{11}C_{44} - 7C_{12}C_{44}]} \\ \epsilon_{33} = \epsilon_{11} &= -\frac{4(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2) - 7C_{11}C_{44} + 19C_{12}C_{44} - 2C_{44}^2}{2(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} + C_{44}^2 - 2C_{12}^2) + 13C_{11}C_{44} - 7C_{12}C_{44}}\epsilon_p. \end{aligned} \quad (10)$$

Donde la razón de Poisson para esta dirección es:

$$\nu^{211} = \frac{2(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} + C_{44}^2 - 2C_{12}^2) + 13C_{11}C_{44} - 7C_{12}C_{44}}{4(C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2) - 7C_{11}C_{44} + 19C_{12}C_{44} - 2C_{44}^2}. \quad (11)$$

Para esta dirección hemos encontrado que hay una deformación de corte ϵ_{23} diferente de cero. Los vectores

TABLA 4

Parámetros del Hamiltoniano ETB¹² en eV, empleados en los cálculos de la estructura de bandas, incluyendo el acoplamiento spin-órbita λ . El índice $a, (c)$ se refiere al anión (catión) y s, p, s^*, x, y , son las notaciones para los orbitales.

	<i>GaAs</i>	<i>GaSb</i>	<i>InAs</i>
$E(s, a)$	-8.3431	-7.3207	-9.5381
$E(p, a)$	0.9252	0.5982	0.7733
$E(s^*, a)$	7.4249	6.3715	7.2730
$E(s, c)$	-2.6569	-3.8993	-2.7219
$E(p, c)$	3.5523	2.6575	3.5834
$E(s^*, c)$	6.6235	5.7287	6.6095
$V(s, s)$	-6.4513	-6.1567	-5.6052
$V(x, x)$	1.9546	1.5790	1.8398
$V(x, y)$	5.0178	3.9959	4.3977
$V(s_a, p_c)$	4.4607	4.9078	3.0205
$V(s_c, p_a)$	5.7413	4.5880	5.3894
$V(s_a^*, p_c)$	4.3083	4.0954	3.2191
$V(s_c^*, p_a)$	4.6473	3.8791	3.7234
λ_a	0.1338	0.3202	0.1385
λ_c	0.0553	0.0573	0.1290

unitarios en el sistema rotado y tensionado para esta dirección son entonces:

$$\begin{aligned}\hat{x}_t &= (1 + \varepsilon_p)\hat{x} \\ \hat{y}_t &= (1 + \varepsilon_p)\hat{y} + \varepsilon_{23}\hat{z} \\ \hat{z}_t &= \varepsilon_{23}\hat{y} + (1 + \varepsilon_\perp)\hat{z}.\end{aligned}\quad (12)$$

Escribiendo los \vec{d}_p en términos de los vectores unitarios tensionados en el sistema rotado se tiene:

$$\begin{aligned}\vec{d}_{1,t} &= \frac{a_0}{4} \left(0, \frac{1 + \varepsilon_\perp}{4\sqrt{3}} + \frac{\varepsilon_{23}}{\sqrt{6}}, \frac{\varepsilon_{23}}{4\sqrt{3}} + \frac{1 + \varepsilon_\perp}{\sqrt{6}} \right) \\ \vec{d}_{2,t} &= \frac{a_0}{4} \left(-\frac{1 + \varepsilon_p}{2\sqrt{2}}, \frac{1 + \varepsilon_p}{4\sqrt{3}} - \frac{\varepsilon_{23}}{\sqrt{6}}, -\frac{1 + \varepsilon_\perp}{2\sqrt{6}} \right) \\ \vec{d}_{3,t} &= \frac{a_0}{4} \left(0, -\frac{1}{4}\sqrt{3}(1 + \varepsilon_p), -\frac{1}{4}\sqrt{3}\varepsilon_{23} \right) \\ \vec{d}_{4,t} &= \frac{a_0}{4} \left(\frac{1 + \varepsilon_p}{2\sqrt{2}}, \frac{1 + \varepsilon_p}{4\sqrt{3}} - \frac{\varepsilon_{23}}{\sqrt{6}}, \frac{\varepsilon_{23}}{4\sqrt{3}} - \frac{1 + \varepsilon_\perp}{2\sqrt{6}} \right)\end{aligned}\quad (13)$$

Para las dos direcciones que se estudian los valores considerados para los exponentes η_{cs} son $\eta_{ss} = 3.7$, $\eta_{ap} = 2.0$, $\eta_{pp} = 2.0$, $\eta_{sp} = 2.0$, los cuales han reproducido muy bien resultados experimentales para materiales sometidos a una presión hidrostática¹⁰. Los parámetros ETB utilizados para los materiales semiconductores estudiados en este trabajo son mostrados en la Tabla 4 y los valores de las constantes elásticas utilizadas se muestran en la Tabla 5.

Dado que se considera una base con 5 orbitales atómicos por átomo y hay 2 átomos por celda entonces

TABLA 5

Constantes de rigidez elástica¹²

	<i>GaAs</i>	<i>GaSb</i>	<i>InAs</i>
C_{11}	11.26	9.05	8.32
C_{12}	5.71	4.21	4.52
C_{44}	6.00	4.45	3.95

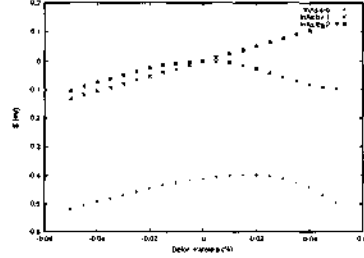


FIG. 4: Variación de la energía en función de la deformación, según la dirección (111), para el InAs en la banda de valencia.

la matriz hamiltoniana a resolver será de 10×10 y al incluir la interacción spin-órbita pasa a ser una matriz de 20×20 .

III. RESULTADOS

Se obtiene la variación del "gap" de energía en función de la deformación paralela al plano, que se produce al aplicar una tensión uniaxial a lo largo de las direcciones (111) y (211). Para esto se encuentran los autovalores de la matriz hamiltoniana en el punto Γ ($k = 0$) de la zona de Brillouin, los cuales tienen como parámetro ε_p . Por lo tanto estos autovalores corresponden a los diferentes valores de energía en dicho punto para una deformación dada paralela al plano. De resultados teóricos y experimentales se conocen las energías de los materiales que se estudian aquí cuando $k = 0$, $T = 0$ K y $\varepsilon_p = 0$. En la Tabla 6 se dan los valores de las energías en eV para el spin-órbita en Γ , el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción de los materiales que se estudian. Tomando estos valores como referencia, los cuales corresponden a la banda de huecos (ligeros y pesados) y la banda del acoplamiento spin-órbita, así como la primera banda de conducción ($E > 0$), se puede seguir el valor de las energías correspondientes a los diferentes valores dados a la deformación paralela.

Se consideran valores para la deformación paralela ε_p desde -0.050 a 0.050 a intervalos de 0.005 . De la relación entre ε_p y ε_\perp a una deformación paralela negativa corresponde una expansión a lo largo del eje (111) o (211), mientras que una deformación paralela positiva corre-

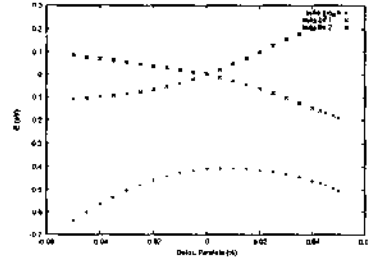


FIG. 5: Variación de la energía en función de la deformación según la dirección (211) para el InAs en la banda de valencia.

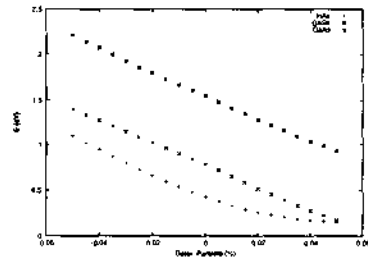


FIG. 6: Variación del gap de energía en función de la deformación, según la dirección (111).

sponde a una compresión a lo largo de estos ejes respectivamente. De los resultados obtenidos se observa que para deformaciones diferentes de cero, el máximo de la banda de valencia se separa en dos valores diferentes, a medida que se aumenta o disminuye la deformación. Los valores obtenidos de la separación también dependen de la dirección a lo largo de la cual se aplica la deformación uniaxial. Uno de los valores corresponde a los huecos ligeros (lh) mientras que el otro a los huecos pesados (hh). El máximo de la banda de valencia también se ve afectado por la deformación aplicada y también depende de la dirección de la deformación uniaxial (figuras 4,5). Se observa también una separación entre el valor correspondiente a la banda de spin-órbita y el máximo de la banda de valencia. En la figura 6 se muestra la variación de gap en función de la deformación paralela para la tensión uniaxial a lo largo de la dirección (111) y en la figura 7 la variación del gap de energía para la

deformación uniaxial a lo largo de la dirección (211).

IV. CONCLUSIONES

Utilizando un hamiltoniano ETB y la ley de Hook generalizada hemos calculado la variación del "gap" de en-

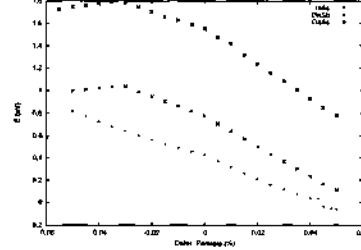


FIG. 7: Variación del gap de energía en función de la deformación, según la dirección (211).

TABLA 6

Energías (en eV) en el punto Γ , para la banda de split-off (S-O), la banda de valencia (B-V) y la de conducción (B-C)

	S-O	B-V	B-C
GaAs	-0.350	0.00	1.550
GaSb	-0.791	0.00	0.780
InAs	-0.410	0.00	0.430

ergía para los materiales semiconductores InAs, GaSb y GaAs cuando se encuentran bajo una tensión uniaxial a lo largo de las direcciones (111) y (211). Los resultados muestran que hay una dependencia en la variación del gap de energía de la dirección a lo largo de la cual se aplica la tensión uniaxial. En ambas direcciones la separación de los valores en la banda de valencia corresponde a un rompimiento de la degeneración existente en el punto Γ que concuerda con resultados obtenidos por otros métodos^{11,13}.

Así también, se pudo observar variación entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción la que es atribuida a la existencia de una deformación hidrostática¹¹ es decir; la deformación uniaxial que se aplica a lo largo de las direcciones (111) y (211) es una mezcla de deformación uniaxial pura y presión hidrostática¹¹.

¹ B. Welber, M. Cardona, C. K. Kim, and S. Rodriguez, Phys. Rev. B **12**, 5729 (1975).

² S. Vas, K. Strossner, C. K. Kim, and M. Cardona, Solid Stat. Commun. **55**, 327 (1985).

³ F. Bassani and G. Pastori, *Electronic States and Optical Transitions in Solids* (Pergamon Press) (1975).

⁴ N. E. Christensen, Phys. Rev. B **30**, 5753 (1984).

⁵ T. B. Bahder, Phys. Rev. B **41**, 11992 (1990).

- ⁶ J. M. Hinkley and J. Singh, *Phys. Rev. B* **42**, 3546 (1990).
- ⁷ M. Cardona, *phys. stat. sol. (b)* **198**, 5 (1996).
- ⁸ C. M. Goringe, D. R. Bowler, and E. Hernandez, *Rep. Prog. Phys.* **60**, 1447 (1997).
- ⁹ P. Vogl, H. P. Hjalmarson, and J. D. Dow, *Phys. Chem. Solids* **44**, 365 (1983).
- ¹⁰ J. Arriaga-Rodríguez, *Estados Electrónicos en Superredes Tensionadas (Ph. D. Thesis Universidad Complutense de Madrid)* (1992).
- ¹¹ C. Priester, G. Allan, and M. Lannoo, *Phys. Rev. B* **37**, 8519 (1988).
- ¹² O. Madelung, *Data in Science and Technology (Springer-Verlag)* (1991).
- ¹³ J. Singh, *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures (McGraw-Hill)* (1993).

Oscilaciones de la red de nitruros cúbicos

Dario G. Santiago-Pérez⁽¹⁾, Fernando de León-Pérez⁽²⁾, R. Pérez-Alvarez⁽³⁾, Miguel E. Mora-Ramos⁽³⁾

(1): Centro Universitario "José Martí Pérez", Avenida de los Mártires 360, Sancti Spiritus, Cuba. Email: dario@sus.co.cu

(2): Departamento de Física de la Materia Condensada,

Universidad de Zaragoza, E-50009 Zaragoza, Spain. Email: fdlp@unizar.es

(3): Fac. de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, CP 62210, México. Email: rpa@buzon.uadm.mx

En el trabajo se estudia la dinámica de los nitruros del grupo III en la estructura blenda de zinc. Se muestra como en direcciones de alta simetría las ramas longitudinales se desacoplan de las transversales. Se reportan las relaciones entre las constantes de fuerza del problema 3D y de la cadena lineal equivalente. También mostramos cómo calcular ajustar las constantes de fuerza 3D del masivo (y consecuentemente la matriz dinámica en su totalidad) a partir de unos pocos puntos experimentales o teóricos.

We study the lattice dynamics of the zincblende phase of bulk group-III nitrides using the linear chains models. It is shown that the 3D oscillation problem reduces to uncoupled linear chain equations for high symmetry directions. The relation between the 3D and 1D force constants has been investigated. Our study helps to understand better the richness of the linear chain models. We also show how to fit the 3D bulk force constants (and consequently the whole dynamical matrix) from a few points, either experimental or theoretical.

PACS numbers: 63.10.+a 63.20.Dj

I. INTRODUCCIÓN

Debido a sus propiedades los nitruros del grupo III son de gran interés para la electrónica; esto hace que actualmente sean muy estudiadas sus propiedades dinámicas,^{1,2} tanto cuando cristalizan en la estructura wurtzita como blenda de zinc. Técnicas experimentales como la dispersión Raman son utilizadas para caracterizar el espectro fonónico.³ Desde el punto de vista teórico las ecuaciones de movimiento son bien conocidas,⁴ pero el número de átomos en materiales masivos es muy grande lo que hace imposible su resolución analítica o numéricamente. Esto hace que sea necesario crear modelos más simples para estudiar los fonones. En este sentido estos materiales se han estudiado utilizando varios modelos, como el modelo de Keating,⁵ el modelo del ión rígido⁶ y cálculos *ab initio*.⁷ Utilizando modelos de cadenas lineales se muestra cómo a lo largo de direcciones de alta simetría las oscilaciones longitudinales y transversales se desacoplan.^{8,9} En este trabajo retomamos las ecuaciones de materiales polares con estructura blenda de zinc, como es el caso de los nitruros semiconductores del grupo III. También mostramos como obtener las constantes de fuerza del problema 3D ajustando las relaciones de dispersión a unos pocos puntos, ya sean experimentales o teóricos. El trabajo está organizado de la siguiente manera: En la próxima sección se enumeran las propiedades de las ecuaciones del movimiento que serán necesarias, en la sección III se considera una estructura blenda de zinc, se estiman las constantes de fuerza y se calculan las relaciones de dispersión para un cristal de GaN. En la última sección se resumen las conclusiones.

II. MATRIZ DINÁMICA Y ECUACIONES DEL MOVIMIENTO

Si se supone que los iones son esferas rígidas no polarizables o deformables al considerar la interacción coulombiana,

estos se comportan como partículas puntuales cargadas, de modo que en la aproximación armónica, separando el campo eléctrico macroscópico de los demás términos de interacción, las ecuaciones de movimiento estarían dadas por las expresiones²

$$\omega^2 e_\alpha(\kappa) = \sum_{\kappa'\beta} D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) e_\beta(\kappa') - \frac{Q_\kappa}{\sqrt{m_\kappa}} E_\alpha, \quad (1)$$

donde ω es la frecuencia del modo, Q_κ es la carga con que el átomo κ -ésimo participa en el enlace, m_κ es la masa del átomo κ -ésimo y E_α es la componente ($\alpha = 1, 2, 3$) del campo eléctrico dada por la expresión²

$$E_\alpha = -\frac{4\pi}{v} \left(\frac{q_\alpha}{|\vec{q}|} \right) \sum_\beta \left(\frac{q_\beta}{|\vec{q}|} \right) \sum_{\kappa'} \frac{Q_{\kappa'}}{\sqrt{m_{\kappa'}}} e_\beta(\kappa'). \quad (2)$$

Aquí v es el volumen de la celda elemental y \vec{q} es el vector de onda. Además tenemos que $e_\alpha(\kappa)$ es la componente α del vector de polarización y la matriz dinámica está dada por

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_\kappa M_{\kappa'}}} \sum_{l,l'} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa') \exp(-i\vec{q} \cdot [\vec{x}(l) - \vec{x}(l')]). \quad (3)$$

$\vec{x}(l)$ es el vector de posición de la celda elemental y las $\Phi_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$ son las matrices de constantes de fuerza.

La invarianza de las constantes de fuerza ante una transformación de simetría S , en forma matricial tiene la forma $S\Phi S^\dagger = \Phi$. Si se considera el problema hasta un número determinado de vecinos, haciendo uso de la invarianza ante la transformación de simetría correspondiente a cada esfera de coordinación, se establece cuales constantes de fuerza son nulas y la relación existente entre las restantes. De este modo

Tabla I: Relación entre las constantes de fuerza de la cadena lineal y las constantes de fuerza del problema 3D para los modos longitudinales y transversales en algunas direcciones de alta simetría.

Cadena Lineal	L[100]	T[100]	L[111]	T[111]	T[110]
$\gamma_{ca} \rightarrow$	$-(2\alpha_{11} + \Omega)$	$-2(\alpha_{11} - \alpha_{12})$	$-(\alpha_{11} + 2\alpha_{12} + \Omega)$	$-(\alpha_{11} - \alpha_{12})$	$-2(\alpha_{11} - \alpha_{12})$
$\gamma_{ca1} \rightarrow$	$-2\alpha_{11}$	$-2(\alpha_{11} + \alpha_{12})$	$-(3\alpha_{11} - 2\alpha_{12})$	$-(3\alpha_{11} + \alpha_{12})$	$-(\alpha_{11} + \alpha_{12})$
$\gamma_{ca2} \rightarrow$	0	0	0	0	$-(\alpha_{11} + \alpha_{12})$
$\gamma_{ca}^{(1)} \rightarrow$	$-4\beta_{11}$	$-2(\beta_{11} + \beta_{33})$	$-(2\beta_{11} - 2\beta_{12} + \beta_{33})$	$-(2\beta_{11} + \beta_{12} + \beta_{33})$	$-2(\beta_{11} + \beta_{33})$
$\gamma_{cc}^{(1)} \rightarrow$	$-4\gamma_{11}$	$-2(\gamma_{11} + \gamma_{33})$	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12} + \gamma_{33})$	$-(2\gamma_{11} + \gamma_{12} + \gamma_{33})$	$-2(\gamma_{11} + \gamma_{33})$
$\gamma_{ca}^{(2)} \rightarrow$	0	0	0	0	$-(\beta_{11} - \beta_{12})$
$\gamma_{cc}^{(2)} \rightarrow$	0	0	0	0	$-(\gamma_{11} - \gamma_{12})$

Tabla II: Constantes de fuerza del problema 3D y constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente en las diferentes direcciones de alta simetría para un cristal de GaN (en unidades de 10^9 din.cm⁻¹).

Problema 3D		Cadena Lineal									
$\alpha_{11}=1.3395$	$\gamma_{ca} \rightarrow$	L[100]	6.8807	T[100]	1.8055	L[111]	6.4147	T[111]	0.9027	T[110]	1.8055
$\alpha_{12}=-0.4367$	$\gamma_{ca1} \rightarrow$		2.6790		3.5524		3.1450		4.4552		1.7762
$\beta_{11}=-0.0291$	$\gamma_{ca2} \rightarrow$		0		0		0		0		1.7762
$\beta_{12}=-0.0378$	$\gamma_{ca}^{(1)} \rightarrow$		0.1164		0.6806		0.2938		0.4072		0.6806
$\beta_{33}=-0.3112$	$\gamma_{ca}^{(2)} \rightarrow$		0		0		0		0		-0.0087
$\gamma_{11}=-0.3977$	$\gamma_{cc}^{(1)} \rightarrow$		1.5908		-0.1919		1.2592		-0.1770		-0.1919
$\gamma_{12}=0.4787$	$\gamma_{cc}^{(2)} \rightarrow$		0		0		0		0		0.8764
$\gamma_{33}=0.4937$											
$\Omega=-4.2017$											

se reduce el número de parámetros del que depende el problema de las oscilaciones de la red en la aproximación considerada, los cuales pueden obtenerse ajustando las expresiones obtenidas para las relaciones de dispersión en puntos de alta simetría de la primera zona de Brillouin.

III. ESTRUCTURA BLENDA DE ZINC. RESULTADOS NUMÉRICOS

Los nitruros en una de sus formas cristalizan en la estructura blenda de zinc. Esta es una estructura cúbica centrada en las caras con dos átomos de diferente especie en la celda elemental (un ion del grupo III, en lo adelante X , y un ion de nitrógeno, en lo adelante N). Las coordenadas de los átomos en la base están dadas por $(0, 0, 0)$ y $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$. Consideraremos la interacción hasta segundos vecinos más cercanos, denotando las constantes de fuerza por α_{ij} para los primeros vecinos (interacción $X-N$) y β_{ij} y γ_{ij} para los segundos (interacción $X-X$ y $N-N$ respectivamente).

En las direcciones de alta simetría [100], [110] y [111] las ecuaciones de movimiento longitudinales se desacoplan de las transversales. De esta forma las ecuaciones de movimiento del problema tridimensional (3D en lo adelante) pueden ser estudiadas como cadenas lineales diatómicas. En la tabla ?? aparecen las relaciones entre las constantes de fuerza del problema 3D y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente en las direcciones mencionadas.

Para una cadena lineal diatómica de este tipo las relaciones

de dispersión están dadas por las expresiones

$$\omega_{ac}[q] = \sqrt{\frac{\Phi_1[q] + \Psi_1[q]}{2}} - \sqrt{\frac{(\Phi_1[q] - \Psi_1[q])^2}{2} + \Upsilon_1[q]}, \quad (4)$$

$$\omega_{op}[q] = \sqrt{\frac{\Phi_1[q] + \Psi_1[q]}{2}} + \sqrt{\frac{(\Phi_1[q] - \Psi_1[q])^2}{2} + \Upsilon_1[q]}, \quad (5)$$

donde,

$$\Phi_1[q] = \frac{1}{M_X} (\gamma_{ca} + \gamma_{ca1} + \gamma_{ca2} + 4\gamma_{cc}^{(1)} \sin^2[\frac{q\pi}{2}] + 4\gamma_{cc}^{(2)} \sin^2[q\pi]), \quad (6)$$

$$\Psi_1[q] = \frac{1}{M_N} (\gamma_{ca} + \gamma_{ca1} + \gamma_{ca2} + 4\gamma_{ca}^{(1)} \sin^2[\frac{q\pi}{2}] + 4\gamma_{ca}^{(2)} \sin^2[q\pi]), \quad (7)$$

$$\Upsilon_1[q] = \frac{1}{M_X M_N} ((\gamma_{ca} + (\gamma_{ca1} + \gamma_{ca2}) \cos[q\pi])^2 + (\gamma_{ca1} - \gamma_{ca2})^2 \sin^2[q\pi]). \quad (8)$$

De esta forma escribiendo las relaciones de dispersión en función de las constantes de fuerza del problema 3D (ver tabla ??), tenemos que éstas dependen de nueve parámetros

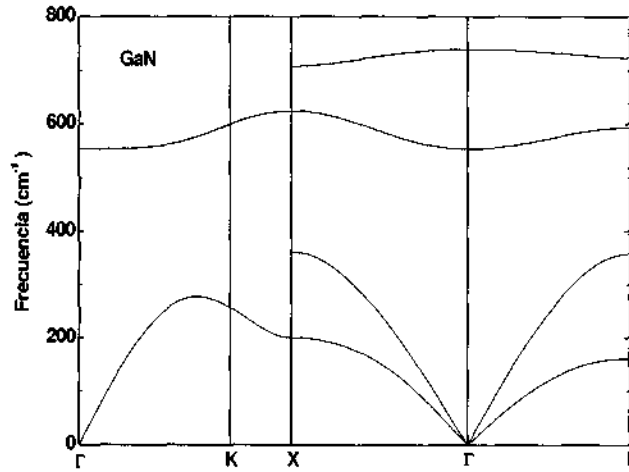


Figura 1: Relaciones de dispersión de GaN calculadas por el método propuesto en el presente trabajo.

independientes, las constantes de fuerza α_{11} , α_{12} , β_{11} , β_{22} , β_{33} , γ_{11} , γ_{22} , γ_{33} y Ω , que resume la contribución del campo eléctrico macroscópico y permite explicar el desdoblamiento entre las ramas longitudinales y transversales en el centro de la zona de Brillouin. Los valores numéricos se obtienen ajustando las relaciones de dispersión (??)-(??) en puntos conocidos en el centro y la frontera de la zona de Brillouin. En la tabla ?? se muestran cálculos hechos para un cristal de GaN. Las frecuencias necesarias para el ajuste se tomaron de la Ref. [?]. Sustituyendo estos valores en las expresiones (??) se obtienen expresiones analíticas para las relaciones de dispersión. La figura ?? muestra los gráficos obtenidos para las relaciones de dispersión en las direcciones de alta simetría estudiadas. Como puede observarse, las curvas reproducen con buena concordancia los resultados presentados en la Ref. [?].

IV. CONCLUSIONES

Hemos obtenido la forma en que las cadenas lineales pueden ser usadas para obtener las relaciones de dispersión a lo largo de direcciones de alta simetría, en aproximación

de segundos vecinos más cercanos en cristales polares con estructura blenda de zinc. En particular mostramos como las ramas longitudinales y transversales se desacoplan y como el campo eléctrico macroscópico hace que se desdoblen en el centro de la zona de Brillouin. El aspecto más relevante es que se obtuvieron expresiones analíticas para las relaciones de dispersión, las cuales pueden ser útiles para calcular otras propiedades de estos materiales. No obstante la relativa sencillez del modelo, las relaciones de dispersión obtenidas para el GaN reproducen con buena exactitud resultados teóricos y experimentales previos.??

Agradecimientos

D.G. S-P agradece a la Sociedad Europea de Física (EPS), y particularmente a su Grupo Interdivisional de Física para el Desarrollo (IGPD) el financiamiento para participar en el Primer Taller de Física del Estado Sólido de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), México. M.E. M-R. agradece el apoyo del CONACyT a través del proyecto 52304. Los cuatro autores agradecemos al Profesor Víctor Velasco (ICMM-CSIC, España) por varios comentarios útiles.

H.M. Titiñcu and G. B. Srivastava, "Phonons in zinc-blende and wurtzite phases of GaN, AlN, and BN with the adiabatic bond-charge model", Phys. Rev. B 62:8, 5028-5035 (2000).
T. Ruf, J. Serrano, and M.Cardona, "Phonon Dispersion Curves in Wurtzite-Structure GaN Determined by Inelastic X-ray Scattering", Phys. Rev. Lett 86:5, 906-909 (2001).

B. Jusserand and M. Cardona, in Light Scattering in Solids V, edited by M. Cardona and G. Guntherodt (Springer-Verlag, Heidelberg, 1989).
M. Born and K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford, Clarendon Press, 1954.
J. Xi, X. Wan, G. Wei, K. Zhan, and X. Xie, "Lattice dynamics

- of zinc-blende GaN and AlN: I. Bulk phonons*". J.Phys.: Condens Matter **8**:35, 6323-6328 (1996).
- V.Yu Davydov, Yu.E. Kitaev, I.N. Goncharuk, A.N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M.B. Smirnov, A.P. Mirgorodsky, and R.A. Evarestov. "Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN", Phys. Rev. B **58**:19, 12899-12907 (1998).
- K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki, "First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN", J. Appl. Phys. **84**:9, 4951-4958 (1998).
- A. Fasolino, E. Molinari, and K. Kunc, "Planar force-constant method for lattice dynamics of structures", Phys. Rev. B **41**:12, 8302-8312 (1990).
- D.G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, "Force constants and dispersion relations for the zincblende and diamond structures revisited", Rev. Mex. Fis. **52**:2, 163-171 (2006).
- K. Karch, J.M. Wagner, and F. Behstedt, "Ab initio study of structural, dielectric, and dynamical properties of GaN", Phys. Rev. B **57**:12, 7043-7049 (1998).

n-type delta-doped quantum well in GaAs under laser radiation and in-plane magnetic field

M.T. Pérez-Maldonado¹, C. Rodríguez-Castellanos¹, and L.M. Gaggero-Sager²

¹ *Facultad de Física, Universidad de La Habana,
San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba*

² *Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos,
Ave. Universidad 1001, Ctd. Chamilpa, 62210 Cuernavaca, Morelos, México*

The availability of intense laser sources has made it possible to study a wide range of nonlinear phenomena in atoms, molecules, plasmas, solids and semiconductor structures under the action of strong electromagnetic fields. It has been previously shown that when an in-plane magnetic field is applied, nonlinear effects can be observed at lower radiation intensities, since the magnetic field introduces a new characteristic frequency (the cyclotron frequency) in the system under consideration, and an enhanced effect of the external electromagnetic field is expected near the resonance conditions. On the other hand, n-type delta-doped quantum wells in GaAs provide an ideal system to study phenomena at extremely high carrier densities and its potential technological applications. The problem of an electron confined in a delta-doped quantum well under the action of an in-plane magnetic field and linearly polarized laser radiation is studied. The Schrödinger equation is solved in the Kramers-Henneberger approximation. We report the dependence of the ground state energy on the intensity of the incident radiation for different impurity concentrations.

La disponibilidad de láseres intensos ha hecho posible el estudio de una amplia variedad de fenómenos no lineales en átomos, moléculas, plasmas, sólidos y estructuras semiconductoras bajo la acción de campos electromagnéticos intensos. Se ha demostrado que cuando se aplica un campo magnético en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento de la estructura, los efectos no lineales pueden ser observados a intensidades más bajas de la radiación, debido a que el campo magnético introduce en el sistema una nueva frecuencia característica (la frecuencia ciclotrónica), y cabe esperar un efecto intensificado del campo electromagnético cerca de la región de resonancia. Por otra parte, los pozos delta-dopados tipo n en GaAs constituyen un sistema ideal para el estudio de fenómenos a altas densidades de portadores y sus aplicaciones tecnológicas. En este trabajo se estudia el problema de un electrón confinado en un pozo delta-dopado bajo la acción de un campo magnético en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento de la estructura y radiación láser linealmente polarizada. Se resuelve la ecuación de Schrödinger en la aproximación de Kramers-Henneberger. Se reporta la dependencia de la energía del estado básico con la intensidad de la radiación incidente para diferentes valores de la concentración de impurezas.

PACS numbers: 73.21.Fg

I. INTRODUCTION

The study of laser-driven semiconductor structures has been possible with the availability of THz laser sources. A number of nonlinear phenomena such as multiphoton absorption, high-harmonic generation, dynamical electron localization, photon-assisted tunneling, negative absolute conductance, negative differential conductivity and formation of electric field domains have been studied theoretically and/or experimentally.¹ In previous works² we have shown that when an in-plane magnetic field is applied, nonlinear effects become important for lower radiation intensities and for radiation polarized in any direction perpendicular to the magnetic field.

On the other hand, delta-doped structures have received attention for their potential technological applications and for being ideal systems to study phenomena at extremely high carrier densities. Simple analytical expressions for the potential of a delta-doped quantum well have been obtained in the Thomas-Fermi approximation avoiding self-consistent calculations.³

In this work we consider the problem of an electron in a semiconductor delta-doped quantum well under the combined action of an in-plane magnetic field and electromagnetic radiation, linearly polarized in a direction perpendicular to the magnetic field. We use the Kramers-Henneberger approximation⁴ to calculate the ground state quasienergy for different values of the intensity of the incident radiation, magnetic field and impurity concentration.

II. KRAMERS-HENNEBERGER UNITARY TRANSFORMATION

Let us consider an electron with effective mass m^* in an unidimensional potential $V(x)$ and under the action of electromagnetic radiation linearly polarized either in OX or OY directions. There is also a constant, uniform magnetic field applied in the OZ direction. The envelope wavefunction can be written as:

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\pi y + kz)\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m^*} t\right) \hat{U} \varphi(x, t). \quad (1)$$

Here S is the transverse area of the sample. \hat{U} is a time-dependent unitary transformation⁵ which can be appropriately chosen to give

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x, \lambda) \cos n\omega t \right) \varphi, \quad (2)$$

where

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{k^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \frac{\omega_c^2}{2} (x - x_c)^2 + V_0(x, \lambda) \quad (3) \\ V_n(x, \lambda) &= \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt \exp(in\omega t) V(x - \lambda \cos \omega t) \quad (4) \\ n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Here $\omega_c = eB/m^*c$ is the cyclotron frequency, $x_c = q/m^*\omega_c$ is the cyclotron orbit center position, and

$$\lambda = \frac{eF}{m^*} \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^s \frac{1}{\omega_c^2 - \omega^2} \quad (5)$$

for $\omega \neq \omega_c$, and the index s takes values 0 or 1 for electromagnetic waves polarized along the OY or OX axes, respectively. The magnitude λ represents the amplitude of the classical oscillations of an electron under the action of a harmonically time dependent electric field. The Hamiltonian \hat{H}_0 in equation (3) describes a harmonic oscillator with mass m^* and frequency ω_c , under the action of the potential $V_0(x, \lambda)$. On the other hand, the time-dependent potential in equation (2) represents a superposition of n -photon emission and absorption processes. The effect of electromagnetic radiation is renormalized in the "dressed" potential $V(x - \lambda \cos \omega t)$. Floquet's theorem⁶ allows equation (2) to have solutions of the form

$$\varphi(x, t) = u_\varepsilon(x, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon t\right), \quad (6)$$

where $u_\varepsilon(x, t) = u_\varepsilon(x, t + 2\pi/\omega)$. The solutions are labeled with quasienergies ε , which are the eigenvalues of the operator $\hat{H}_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} V_n(x, \lambda) \cos n\omega t - i\hbar \partial/\partial t$. The Kramers-Henneberger approximation,⁴ widely used in atoms, approximates quasienergies ε by the eigenvalues of \hat{H}_0 . Discussions about the validity of this approximation are given in Ref. [2]. In this approximation the problem is reduced to the solution of the time-independent Schrödinger equation

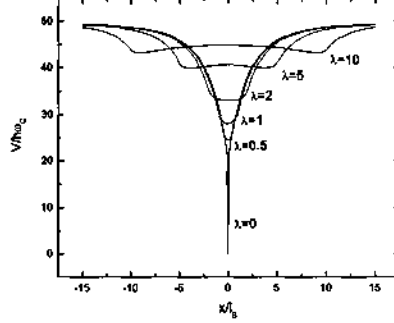


FIG. 1: Renormalized potential $V_0(x, \lambda)$ for different values of λ and impurity concentration $n = 1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

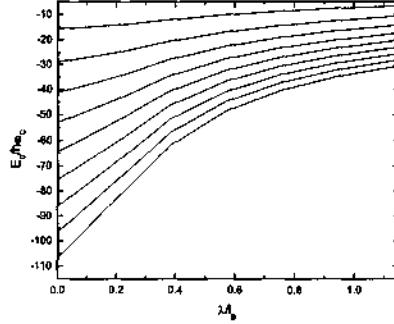


FIG. 2: Ground state of the potential $\frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x - x_c)^2 + V_0(x, \lambda)$ as function of λ for $x_c = 0$ and $B = 1 \text{ T}$. Curves from top to bottom correspond to increasing values of the impurity concentration (from $1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ to $9 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Units are the Landau magnetic length l_B and the cyclotron energy $\hbar\omega_c$.

$$\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \omega_c^2 (x - x_c)^2 + V_0(x, \lambda) \right) u_\varepsilon = \left(\varepsilon - \frac{k^2}{2m^*} \right) u_\varepsilon. \quad (7)$$

In what follows we will consider the potential

$$V(x) = -\frac{\alpha^2}{(\alpha|x| + x_0)^4} \quad (8)$$

which describes the profile of a delta-doped quantum

well within the Thomas-Fermi approximation.³ The parameter $\alpha = \frac{2}{15\pi}$ and $x_0 = \left(\frac{\alpha^3}{\pi n_{2D}}\right)^{1/5}$, where n_{2D} is the two-dimensional density of donors in the delta-doped monolayer. In Fig. 1 we show the renormalized potential $V_0(x, \lambda)$ for different values of λ and impurity concentration $n = 1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

III. RESULTS AND DISCUSSION

Results from numerical solution of (7) are shown in Fig. 2. We have calculated the ground state energy for $B = 1 \text{ T}$ and $x_c = 0$ for impurity concentrations between $1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and $9 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ as functions of the parameter λ . Eigenvalues increase with λ for a given

impurity concentration in agreement with the potential profile shown in Fig. 1. On the other hand, eigenvalues decrease when impurity concentration increases because the quantum wells become deeper.

Acknowledgements

MTPM acknowledges financial support from Red de MacroUniversidades P ublicas de Am rica Latina y el Caribe. She also thanks for the warm hospitality received at the Institute of Physics, UNAM, and the Faculty of Sciences, UAEM, Mexico, where part of this work has been done.

¹ See for example: F.H.M. Faisal and J. Z. Kaminski, Phys. Rev. A **56**, 748 (1997); D. S anchez, G. Platero, and L. Bonilla, Phys. Rev. B **63**, 201306-1 (2001); K.C. Je, S.H. Park, and Y. Kim, Phys. Rev. B **64**, 075111-1 (2001); J.M. Villas-Boas, W. Zhang, S.E. Ulloa, P.H. Rivera, and N. Studart, Phys. Rev. B **66**, 085325-1 (2002); C.E. Creffield, and G. Platero, Phys. Rev. B **66**, 235303-1 (2002).

² C. Rodr guez-Castellanos and M.T. P rez-Maldonado, Superlattices and Microstructures **27**, 15 (2000); M.T. P rez-

Maldonado, C. Rodr guez-Castellanos, and M. S nchez-G cita, Phys. Stat. Sol. (b) **232**, 130 (2002).

³ L.M. Gaggero-Sager, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **9**, 1 (2001); L. Ioratti, Phys. Rev. B **41**, 8340 (1990).

⁴ W.C. Henneberger, Phys. Rev. Lett. **21**, 838 (1968).

⁵ R.M.O. Galv o and L. C. M. Miranda, Am. J. Phys. **51**, 729 (1980).

⁶ M. Holthaus and D. Hone, Phys. Rev. B **47**, 6499 (1993).

Complete transmittance for symmetric heterostructures

R. Pérez-Alvarez⁽¹⁾, G. Tichadini⁽²⁾, and Y. Mutomba⁽³⁾

(1): *Fac. de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, CP 62210, México. Email: rpa@buzon.uaem.mx*

(2): *Department of Theoretical Physics, Havana University, 10400 Havana, Cuba.*

(3): *Department of Theoretical Physics, Havana University, 10400 Havana, Cuba.*

We analyse the propagation of electronic or electromagnetic waves in symmetric layered systems, at the special energy (frequency) in which the phase lengths in all layers are equal to $\pi/2$, and prove that the transmittance is equal to unity irrespective of other facts. We comment the interesting case of binary symmetric quasiregular heterostructures, in particular the one made up by two mirror-symmetric Thue Morse heterostructures.

Analizamos la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas multicapas simétricos a las energías (frecuencias) en que las longitudes de fase son todas iguales a $\pi/2$, y probamos que la transmitancia es igual a la unidad independientemente de otros factores. Comentamos el caso interesante de las heteroestructuras quasiregulares binarias simétricas, en particular la creada por dos heteroestructuras de Thue Morse especularmente simétricas.

PACS numbers: 03.65.Nk, 31.10.+z, 73.43.Jn, 74.50.+r

1. INTRODUCTION

Multilayered semiconductor and dielectric systems are interesting from many points of view.¹⁻⁴ Quantum Wells (QW),^{1,2} Superlattices (SL),^{1,2} and more recently Quasiregular Heterostructures (QH),^{5,6} have proved to be useful in designing electronic, optoelectronic and optical devices for various purposes. The number of interfaces ranges from a few ones to hundreds and occasionally thousands. Usually these interfaces can be assumed to be perfectly parallel and with no imperfection, and the layers are homogeneous.

Among the different basic properties important to the applications, the transmittance of electron and electromagnetic waves has significant relevance. In Refs. [7,8] the multifractal character of the transmittance spectrum has been pointed out for both excitations in simple Fibonacci and Thue Morse QHs. A similar study for some non-Fibonacci QHs is reported in Ref. [9]. Experimental results have been reported in Ref. [10] for SiO₂-TiO₂ multilayers. In Ref. [11] the focus was on the claim that a certain frequency presents complete transmittance for a Binary Fibonacci Sequence, made up by juxtaposing a Fibonacci standard sequence and its mirror image.

In the present paper we analyse any symmetric multilayer structure with sectionally constant parameters at a special value of the energy (frequency) -see below- and show that the complete transmittance property at this particular energy (frequency) is a direct consequence of the structure of the Transfer Matrix and the inversion symmetry. We also demonstrate that a Binary Sequence made up of two mirror-image Thue Morse sequences is an example of this kind of system, and consequently it has the complete transmittance property.

Notice that both problems (electron and electromagnetic waves) can be treated simultaneously as they are isomorphous (see e.g. [12] and references therein).

II. TRANSFER MATRICES

To study any multilayered system we ascribe a Transfer Matrix to each layer. In the present paper we use the so called Associated Transfer Matrix (ATM),¹³⁻¹⁵ i.e. a matrix connecting a field $F(z)$ and a linear form $A(z)$ associated to the corresponding equation of motion. z is the coordinate perpendicular to the interfaces.

$$\begin{pmatrix} F(z) \\ A(z) \end{pmatrix} = T(z, z_0) \cdot \begin{pmatrix} F(z_0) \\ A(z_0) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

In the case of electronic (electromagnetic) states the field is the envelope wave function (component of the magnetic field), and the linear form is the derivative of the field divided by the effective mass (dielectric constant). In both cases the ATM for constant parameters has a simple and known form, namely for the j -th layer

$$T_j = \begin{pmatrix} \cos \delta_j & \mu_j \frac{\sin \delta_j}{\delta_j} \\ -\frac{\delta_j}{\mu_j} \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \quad (2)$$

where μ_j is the effective mass (square of the refraction index) times the layer width, and δ_j is the phase length in both cases, i.e., the wavevector times the layer width. More concretely,

$$\delta_j = k_j d_j \quad (3)$$

$$k_j = \sqrt{\hbar^2(E - V_j)/(2m_j^*)} \quad (4)$$

$$\mu_j = m_j^* d_j, \quad (5)$$

for electrons, and

$$\delta_j = 2\pi n_j d_j / \lambda \quad (6)$$

$$\mu_j = n_j^2 d_j, \quad (7)$$

for electromagnetic waves. d_j is the layer width, m_j^* the effective mass, E the energy, V_j the potential, λ the wavelength, and n_j the refraction index. j is the layer index. We limit ourselves to the case of zero wavevector parallel to the interfaces.

It is known that the field and the associated linear form $A(z)$ are continuous functions everywhere; in particular they are continuous at the interfaces. Then the ATM for the entire structure T is the usual matrix product of the individual ATM for each layer. No connecting matrix¹⁴ is needed at interfaces. This ATM can be used to calculate the transmission coefficient of an entire structure and the result is:^{13,14}

$$D = \frac{4}{[T_{11} + T_{22}]^2 + [-1/\mu_{ext}T_{12} + \mu_{ext}T_{21}]^2}, \quad (8)$$

where μ_{ext} is the parameter associated with the exterior to the structure, supposed left and right sides to be identical.

III. STRUCTURE OF THE ATM FOR A DOUBLE-SLAB BLOCK FOR $\delta = \pi/2$

Let T_j be the ATM for an homogeneous slab whose parameters are supposed to be known. Let's assume that $\delta_j = \pi/2$ for all the layers in the following. Then $\cos \delta_j = 0$, $\sin \delta_j = 1$, T_j adopts a very simple form, and it is straightforwardly obtained that the ATM for a double slab is

$$\begin{aligned} T_{j,j-1} &= T_j \cdot T_{j-1} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\mu_j}{\mu_{j-1}} & 0 \\ 0 & -\frac{\mu_{j-1}}{\mu_j} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9)$$

It is not difficult to generalise this formula to the case of an even number of layers. Indeed for a system of b bilayer-blocks

$$\begin{aligned} T_{j,j-1,\dots,j-2b+1} &= \\ (-1)^b &\begin{pmatrix} \frac{\mu_j}{\mu_{j-1}} \frac{\mu_{j-2}}{\mu_{j-3}} \dots \frac{\mu_{j-2b+2}}{\mu_{j-2b+1}} & 0 \\ 0 & \frac{\mu_{j-1}}{\mu_j} \frac{\mu_{j-3}}{\mu_{j-2}} \dots \frac{\mu_{j-2b+1}}{\mu_{j-2b+2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

μ_j/μ_{j-1} is the factor associated to the interface between layers j and $j-1$. Now suppose that A and B are the constituent materials. For a symmetric structure we have one interface $A-B$ for each interface $B-A$. For the energy (frequency) for which $\delta_j = \pi/2$ these structures have the total ATM equal to \pm the identity matrix. The sign depends on the parity of the number of bilayer blocks b .

Then the conclusion that $T = \pm I$ implies that $T_{11} = T_{22} = \pm 1$, and that $T_{12} = T_{21} = 0$, and consequently, the transmission coefficient $D = 1$ for this energy (frequency). The same situation can be obtained with the values $3\pi/2, 5\pi/2, \dots$, instead of $\pi/2$.

IV. BINARY THUE-MORSE SYMMETRIC SEQUENCE

We study now the symmetric Thue-Morse sequence. The standard Thue-Morse sequence can be generated by the substitutional rule

$$\xi_1(A) = AB \quad (12)$$

$$\xi_1(B) = BA, \quad (13)$$

or equivalently

$$\xi_2(A) = BA \quad (14)$$

$$\xi_2(B) = AB. \quad (15)$$

Before going ahead it is interesting to notice that this rule *duplicates* the number of letters in the word on which it is applied. ξ_1 generates a Thue-Morse sequence. Meanwhile ξ_2 generates another Thue-Morse sequence. The second is the mirror image of the first one, and viceversa.

We shall call *Binary Thue Morse sequence* (BTMS) the sequence whose n -th term is the juxtaposition of the n -th terms of the ξ_1 and ξ_2 Thue Morse sequences. In symbols:

$$A_n = \xi_1^{n-1}(A) \oplus \xi_2^{n-1}(A) \quad (16)$$

if the starting block is the letter -layer- A , and

$$B_n = \xi_1^{n-1}(B) \oplus \xi_2^{n-1}(B) \quad (17)$$

if the starting block is the letter -layer- B . We use the \oplus to denote juxtaposition. In the table I the first A_n 's are compiled.

n	$\xi_1^n(A)$	$\xi_2^n(A)$
1	A	A
2	AB	BA
3	ABBA	ABBA
4	ABBABAAB	BAABABBA
5	ABBABAABBAABABBA	ABBABAABBAABABBA

TABLE I: First generations of the ξ_1 (left column) and the ξ_2 (right column) Thue Morse sequences. The Binary Symmetric Thue Morse Sequence is the juxtaposition of them: $A_1 = AA$, $A_2 = ABBA$, $A_3 = ABBAABBA$, $A_4 = ABBABAABBAABABBA$, etc.

At this stage it is important to notice that i-The BTMS is *symmetric*, and ii-The n -th term of the BTMS have $2 \times 2^{n-1}$ layers, i.e. 2^{n-1} double blocks. Then we can apply the results of the precedent section and conclude that this structure has the property of complete transmittance for the energy (frequency) such that $\delta = \pi/2$ for all the layers.

In Fig. 1 we present some numerical results for the transmittance as a function of δ for a BTMS. The complete transmittance and the selfsimilar structure of this function is clearly seen.

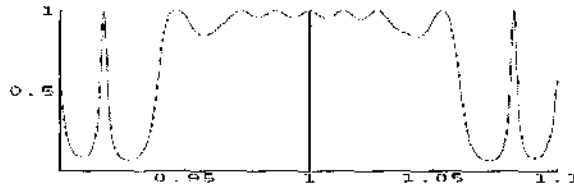


FIG. 1: Transmittance as a function of δ for a 6th generation of a BTMS. We use the values $n_A = 1.45$, $n_B = 2.3$ which correspond to SiO_2 and TiO_2 respectively.

V. CONCLUSIONS

We have proved that a symmetric multilayered structure satisfying the condition $\delta_j = \pi/2$ for all layers j , has complete transmittance at the energy (frequency) given by this equation. If we construct a sequence starting with two layers A and B , the condition $\delta_A = \pi/2$ fixes the special energy (frequency); to be in the situation we are analysing we have to fix the width d_B in order to satisfy the equation $\delta_B = \pi/2$ too. For electromagnetic waves $\delta = 2\pi n d / \lambda$ where n is the refraction index, d the layer width, and λ the wavelength. This means that the second width must be chosen as $d_B = n_A d_A / n_B$, and that complete transmittance will appear at $\lambda_0 = 4n_A d_A = 4n_B d_B$. For electrons a very similar analysis holds with $\delta = k d$, $k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$. But in this case the interesting widths and wavelengths are in the range of nanometers, and the widths are multiples of the corresponding lattice constants; then it may be not so easy as in the electromagnetic case to have $\delta = \pi/2$ in all the layers. The complete transmission property holds for other isomorphic excitations such as the acoustic oscillation modes or spin waves in simple models.¹²

We have used the so called Associated Transfer Matrix, but there are easily conceivable similar proofs based on the Full Transfer Matrix, Coefficient Transfer Matrix, Scattering Matrix, and Green Function concepts.^{13,14} The reason for our preference for the ATM is that it does not need any connecting matrix at interfaces, like T_{AB} in [11], but the reader may prefer some other approach to attain the same result.

The complete transmittance property has nothing to do with

the quasiregular character of the system. Indeed we can imagine symmetric structures created by any rule, or even at random, irrespective of neither the number of layers nor the chosen materials, provided the structure is symmetric and it is investigated near the energy (frequency) where the condition $\delta_j = \pi/2$ is fulfilled at all layers. However, binary structures generated by juxtaposition of mirror-image quasiregular heterostructures is a nice and interesting example of this property. They add to the complete transmittance property other interesting features of the spectrum like the multifractal character, critical states, etc.

The condition $\delta_j = \pi/2$ is sufficient, but not necessary, to have complete transmittance. In fact the quasiregular example exhibits a multifractal set of energies (frequencies) where the complete transmittance property takes place. The spectrum has scaling symmetry around the special values $\delta = \pi/2, 3\pi/2, \dots$.

It is also interesting to note that this property can be used to design filter devices taking widths as the main tuning parameters.

Acknowledgements

G. Tichadini and Y. Mutomba acknowledge support from Bindura University Of Science Education (Zimbabwe). R. Pérez-Alvarez thanks many valuable discussions with F. García-Moliner. We acknowledge H. Rodríguez-Coppola for a critical reading of the manuscript.

¹ G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", Éditions de Physique, Paris (1989).

² B. Vinter and C. Weisbuch, *Quantum Semiconductor Structures*, Academic Press, San Diego (1991).

³ C. Weisbuch, "Applications of MBE-grown heterostructures and quantum wells in fundamental research and in advanced semiconductor devices", *J. Crystal Growth* **127**, 742-751 (1993).

⁴ Pochi Yeh, Amnon Yariv, and Chi-Shain Hong, "Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory", *J. Opt. Soc. Am.* Vol. **67**, No. **4**, 423-438 (1977).

⁵ R. Pérez-Alvarez and F. García-Moliner, *Quasiregular Het-*

erostructures, invited chapter in "Contemporary Problems of the Condensed Matter Physics", Nova Science Publishers, ed. by S. Vlaev and M. Gaggero-Sager (2001).

⁶ R. Pérez-Alvarez, F. García-Moliner and V.R. Velasco "Some elementary questions in the theory of quasiperiodic heterostructures", *J. of Phys.: Condens. Matter* **13**, 3689-3698 (2001).

⁷ M. Kohmoto, B. Sutherland, and K. Iguchi, "Localization in optics: Quasiperiodic media", *Phys. Rev. Lett.* **58**:23, 2436-2438 (1987).

⁸ N-h Liu, "Propagation of light waves in Thue-Morse dielectric multilayers", *Phys. Rev. B* **55**:6, 3543-3547 (1997).

- ⁹ M. Dulea, M. Severin, and R. Riklund, "Transmission of light through deterministic aperiodic non-Fibonacci multilayers", *Phys. Rev. B* **42**:6, 3680-3689 (1990).
- ¹⁰ W. Gellermann, M. Kohmoto, B. Sutherland, and P.C. Taylor, "Localization of light waves in Fibonacci dielectric multilayers", *Phys. Rev. Lett.* **72**:5, 633-636 (1994).
- ¹¹ X. Huang, Y. Wang, and Ch. Gong, "Numerical investigation of light-wave localization in optical Fibonacci superlattices with symmetric internal structure", *J. Phys.:Condens. Matter* **11**, 7645-7651 (1999).
- ¹² D.J. Griffiths and C.A. Steinke, "Waves in locally periodic media", *Am. J. Phys.* **69**:2, 137-154 (2001).
- ¹³ R. Pérez-Álvarez, C. Trallero-Herrero, and F. García-Moliner, "1D Transfer Matrices", *European Journal of Physics* **22**:4, 275-286 (2001).
- ¹⁴ R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner *Transfer Matrix, Green Function and Related Techniques* Ed. Publicacions de la Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, Spain (2004).
- ¹⁵ There are several definitions of TM. Normally we use three of them. One transferring the wavefunction and the derivative in a domain; other transferring the wavefunction and the linear form which must be continuous at the interfaces and finally one transferring the coefficients of the wavefunction in the representation of propagating modes. (See 14). In the present paper we use the second TM mentioned.

Fuerzas de oscilador y propiedades ópticas de heteroestructuras cuasirregulares de Fibonacci y Rudin-Shapiro

R. Pérez-Álvarez⁽¹⁾, C. Trallero-Giner⁽²⁾ y F. García-Moliner⁽³⁾

¹ Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Facultad de Ciencias, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos, México

² Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

³ Cátedra de Ciencia Contemporánea, Universitat Jaume I, Castelló, España

Se propone un método para calcular las integrales de solapamiento de las envolventes en el marco de la Teoría de Masa efectiva y usando las Matrices de Transferencia para sistemas multicapas. Resulta un método algorítmico sencillo y eficiente. Se aplica entonces a un problema de actualidad: las propiedades ópticas de Estructuras Cuasirregulares, reportando resultados para las QHs de Fibonacci, Fibonacci Generalizada y Rudin Shapiro. En el caso de Fibonacci los resultados concuerdan con otros experimentales y teóricos previos, excepto que hacemos precisiones sobre el origen de las estructuras de los espectros en términos de transiciones de las bandas de huecos pesados o ligeros a la banda de conducción. En los casos de Fibonacci Generalizada y Rudin Shapiro, hasta donde conocemos, los resultados son enteramente originales.

The Full Transfer Matrix (Ref. 9) provides a simple and efficient algorithmic method to calculate the envelope overlapping integrals needed to evaluate the imaginary part of the dielectric constant for multilayer heterostructures. This is applied to the calculation the optical properties of GaAs-AlAs Fibonacci, Generalized Fibonacci and Rudin Shapiro Quasiregular Heterostructures in the frame an Effective Mass model. Results for Fibonacci Heterostructures agree with experimental and theoretical previous results but a new description of the nature of the spectrum is reported in terms of the transitions between light and heavy hole and conduction states. New original results are obtained for Generalized Fibonacci and Rudin Shapiro Heterostructures.

PACS numbers: 73.21.-b, 73.21.Ac, 73.21.Fg, 78.66.Fd

I. INTRODUCCIÓN

Es un resultado conocido que en el marco de la Teoría de Masa Efectiva (*Effective Mass Theory*: EMT), las propiedades ópticas en buena medida vienen dadas por las integrales de solapamiento de las envolventes y la Densidad Combinada de Estados (*Joint Density of States*: JDOS) de los estados entre los cuales ocurren las transiciones involucradas.¹ De ahí la importancia de desarrollar métodos sencillos y eficientes para calcular estas magnitudes. Desde la aparición de los sistemas a capas nanométricas como los Pozos Cuánticos (*Quantum Wells*: QW) y Superredes (*Superlattices*: SL) éste ha sido un foco de atención por las implicaciones de estas magnitudes en posibles aplicaciones.¹⁻³

Por otro lado, en los últimos años ha habido gran interés en las Heteroestructuras Cuasirregulares (*Quasiregular Heterostructures*: QH) por sus cualidades tan singulares entre las que destaca el carácter fractal del espectro de las excitaciones elementales. Vea, por ejemplo, las Refs. [4-6] y los trabajos que allí se citan.

A pesar de su interés, pocos trabajos calculan o miden las propiedades ópticas de las QHs. Una de las pocas excepciones es el artículo de Munzar y colaboradores.⁷

El objetivo del presente trabajo es entonces presentar un procedimiento directo y expedito para calcular las propiedades ópticas derivadas de las transiciones interbandas en cualquier sistema a capas y aplicarlo en particular al estudio de QHs tipo Fibonacci, Fibonacci Generalizada y Rudin Shapiro. Para ello, nos basaremos

en las conocidas técnicas de Matrices de Transferencia con los convenios y definiciones que solemos usar y que explicamos en detalles en los trabajos [8,9].

II. MODELO PARA LAS PROPIEDADES ÓPTICAS

Tenemos en mente un sistema como el de la Figura 1, donde hay N_L capas empareadas por dos supuestamente semiinfinitas, y que eventualmente serán consideradas como barreras infinitas para los portadores; no cuesta mucho trabajo relajar esta condición. Por simplicidad se han dibujado todos los pozos iguales. El convenio escogido es que la capa ℓ -ésima está entre z_ℓ y $z_{\ell+1}$. La invariancia en el plano de las capas hace que los estados se puedan caracterizar por un momento de dos componentes κ en dicho plano y por una función envolvente que sólo depende de la coordenada perpendicular a las capas.

Adoptaremos un modelo simple para estimar la parte imaginaria de la constante dieléctrica. Supondremos la temperatura cero absoluto y que no hay impurezas; el nivel de Fermi está entonces en el gap; la banda de conducción está vacía; la banda de valencia está llena. Llamemos E_c^v (E_v^c) a los niveles de energía de la banda de conducción (valencia) a $\kappa = 0$. La parte imaginaria de la constante dieléctrica se expresa entonces como la suma de dos contribuciones: 1) la del espectro continuo; esta parte llevará el subíndice C , y 2) la contribución excitónica, que llevará el subíndice ex .

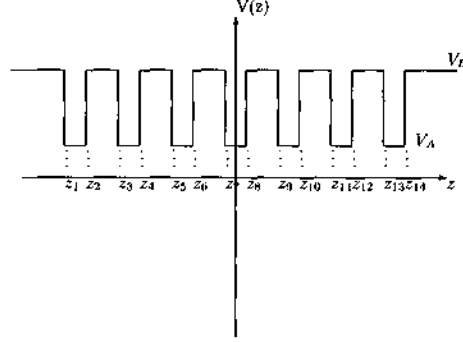


FIG. 1: Potencial/masa de un sistema a capas. Tanto la masa como el potencial dependen de una sola variable cartesiana y son seccionalmente constantes. En el dibujo se ha supuesto que hay $N_\ell = 13$ capas emparejadas por dos supuestamente semiinfinitas. Por simplicidad se han dibujado todos los pozos iguales. El convenio escogido es que la capa ℓ -ésima está entre z_ℓ y $z_{\ell+1}$.

$$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_{2C}(\omega) + \epsilon_{2exc}(\omega) \quad (1)$$

$$\epsilon_{2C}(\omega) = \frac{Q}{E^2} \mu \sum_i \Theta(E - E_g - E_i^c - E_i^v) \quad (2)$$

$$\epsilon_{2exc}(\omega) = \frac{8BQ}{E^2} \mu E_{exc} \sum_x G(E - E_g - E_i^c - E_i^v + E_{exc}) \quad (3)$$

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right] \quad (4)$$

donde μ es la masa reducida *in plane* entre ambas bandas, E_g el gap, $E = \hbar\omega$, E_{exc} la energía de enlace excitónica y

$$Q = e^2 P^2 / (2m_0 d^2) \quad (5)$$

$$P = -i \langle S | p_x | X \rangle \quad (6)$$

P es el elemento matricial interbandas, d es el espesor del sistema; en el caso de condiciones de contorno de barreras infinitas d es simplemente $z_{N_\ell+1} - z_1$; si se ponen condiciones de contorno periódicas d es el periodo. Θ es la función *Paso escalón* de Heaviside, aunque se pudiera sustituir por otra función que suavice los bordes.¹⁰ En (3) la variable B caracteriza el cambio en el elemento matricial entre el caso 2D y el nuestro.

Este modelo es bien simple y se pudiera perfeccionar para tener en cuenta de una mejor manera, por ejemplo, el efecto excitónico, u otras bandas. Aquí nos limitaremos a sumar las contribuciones de las transiciones entre las bandas de huecos pesados y ligeros a la de conducción ($v = \hbar h, \hbar h$).

Un detalle muy importante a notar en las expresiones (1-3): se está sumando sobre estados homólogos de las bandas involucradas (note que E_i^c y E_i^v llevan los mismos subíndices). En realidad habría que sumar sobre dos índices i, j que corran respectivamente sobre los estados de las bandas de conducción y valencia y cada término iría multiplicado por la integral de solapamiento de las respectivas envolventes $\varphi_i^c(z)$ y $\varphi_j^v(z)$. Se ha supuesto sin más que se cumple la condición

$$\left| \int dz \varphi_i^c(z) \varphi_j^v(z) \right|^2 = \delta_{ij} \quad (7)$$

Más adelante comentaremos críticamente la bondad de esta condición.

Teniendo $\epsilon_2(\omega)$ se puede calcular $\epsilon_1(\omega)$ a través de las relaciones de Kramers Kronig¹², y a partir de éstas todas las restantes propiedades ópticas.

III. FUERZAS DE OSCILADOR

Sea $\varphi(z)$ la función de onda (más bien la envolvente), $A(z)$ la forma lineal asociada al problema ($\varphi'(z)/m(z)$, por ejemplo, en el marco de la EMT), y usemos el supraíndice c (v) para la banda de conducción (valencia). Entonces, para la integral de solapamiento entre el estado n de la banda de conducción c y el estado m de la banda de valencia v tendremos que

$$\begin{aligned} S_{vm, cn} &= \int_{z_1}^{z_{N_\ell+1}} dz \varphi_n^c(z) \varphi_m^v(z) \\ &= \sum_{\ell=1}^{\ell=N_\ell} \int_{z_\ell}^{z_{\ell+1}} dz \varphi_n^c(z) \varphi_m^v(z) \\ &= \sum_{\ell=1}^{\ell=N_\ell} \int_{z_\ell}^{z_{\ell+1}} dz \cdot \\ &\quad \left[T_{11}^{cn(\ell)}(z, z_\ell) \varphi_n^c(z_\ell) + \right. \\ &\quad \left. T_{12}^{cn(\ell)}(z, z_\ell) a_n^c(z_\ell) \right] \cdot \\ &\quad \left[T_{11}^{vm(\ell)}(z, z_\ell) \varphi_m^v(z_\ell) + \right. \\ &\quad \left. T_{12}^{vm(\ell)}(z, z_\ell) a_m^v(z_\ell) \right] \end{aligned}$$

donde $\mathbf{T}(z, z_\ell)$ es la matriz de transferencia que transporta $\varphi(z)$ y $A(z)$ de z_ℓ a z . Esta matriz depende de la banda; por eso lleva el índice c o v . Asimismo, depende del estado a través de la energía, y por eso lleva el índice n o m , según el caso. Por último, depende del intervalo ℓ pues los parámetros (masa, potencial, etc) varían de capa a capa. Eventualmente prescindiremos de los índices de las bandas reservando el índice n para numerar los estados de conducción y el índice m para los de valencia. Entonces, un trabajo algebraico sencillo nos lleva a las expresiones

$$\begin{aligned}
S_{mn} &= \\
&= \sum_{\ell=1}^{\ell=N_{\ell}} [\varphi_n^c(z_{\ell}), a_n^c(z_{\ell})] \cdot \begin{vmatrix} S_{11,mn}^{(\ell)} & S_{12,mn}^{(\ell)} \\ S_{21,mn}^{(\ell)} & S_{22,mn}^{(\ell)} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \varphi_m^c(z_{\ell}) \\ a_m^c(z_{\ell}) \end{vmatrix} \\
&= \sum_{\ell=1}^{\ell=N_{\ell}} \Psi_n^c(z_{\ell})^t \cdot \mathbf{S}_{mn}^{(\ell)} \cdot \Psi_m^c(z_{\ell}), \quad (8)
\end{aligned}$$

donde t significa *traspuesta*, y

$$\begin{aligned}
S_{11,mn}^{(\ell)} &= \int_{z_{\ell}}^{z_{\ell+1}} dz T_{11}^{cn(\ell)}(z, z_{\ell}) T_{11}^{sm(\ell)}(z, z_{\ell}) \\
S_{21,mn}^{(\ell)} &= \int_{z_{\ell}}^{z_{\ell+1}} dz T_{12}^{cn(\ell)}(z, z_{\ell}) T_{11}^{sm(\ell)}(z, z_{\ell}) \\
S_{12,mn}^{(\ell)} &= \int_{z_{\ell}}^{z_{\ell+1}} dz T_{11}^{cn(\ell)}(z, z_{\ell}) T_{12}^{sm(\ell)}(z, z_{\ell}) \\
S_{22,mn}^{(\ell)} &= \int_{z_{\ell}}^{z_{\ell+1}} dz T_{12}^{cn(\ell)}(z, z_{\ell}) T_{12}^{sm(\ell)}(z, z_{\ell}).
\end{aligned}$$

Pero la forma general de la matriz de transferencia para un intervalo donde todos los parámetros sean constantes es

$$\begin{aligned}
T_{11}(z, z_0) &= \cos(k(z - z_0)) \\
T_{12}(z, z_0) &= \frac{m}{k} \sin(k(z - z_0)) \\
T_{21}(z, z_0) &= -\frac{k}{m} \sin(k(z - z_0)) \\
T_{22}(z, z_0) &= \cos(k(z - z_0)),
\end{aligned}$$

donde

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) - \kappa^2}. \quad (9)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
S_{11,mn}^{(\ell)} &= \\
&= \frac{\sin((k^{cn(\ell)} - k^{sm(\ell)}) d_i)}{2 (k^{cn(\ell)} - k^{sm(\ell)})} + \frac{\sin((k^{cn(\ell)} + k^{sm(\ell)}) d_i)}{2 (k^{cn(\ell)} + k^{sm(\ell)})}. \quad (10)
\end{aligned}$$

y expresiones análogas para los restantes elementos matriciales.

Un caso particular de interés es aquel en que ambas funciones coinciden; obtenemos así una manera de calcular la norma de estas autofunciones. Para tratar correctamente este caso es útil recordar los siguientes límites notables:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{x} = 1 \quad (11)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x} = 0 \quad (12)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x^2} = \frac{1}{2}. \quad (13)$$

IV. RESULTADOS NUMÉRICOS

En la Tabla I se detallan los datos de entrada para nuestros cálculos.

Magnitud	GaAs	AlAs
Masa c	0.067	0.096
Masa hh	0.403	0.187
Masa lh	0.087	0.109
Ancho	6	3
a_0	2.8 Å	2.8 Å
κ	0	cm ⁻¹
Barrera c	379	meV
Barrera h	187	meV
E_{cvc}	10	meV
σ	2	meV
F^2/m_0	11350	meV
γ	1.4	meV
B	1.5	

Tabla I: Parámetros de entrada de nuestro cálculo. Las masas se dan tomando como unidad la masa del electrón libre. El ancho se refiere al número de capas atómicas.

Las magnitudes σ y B que tomamos aquí difieren grandemente de las reportadas por Muñozar y colaboradores.⁷ Consultados los autores de este trabajo,¹¹ ellos concordaron en que había errores de imprenta en la Ref. [7] y que los valores usados por ellos coinciden al menos en orden de magnitud con los nuestros. Los valores de estas dos magnitudes se corresponden con valores medidos y aceptados en QW y SL de estos materiales.¹⁻³

Presentaremos a continuación los resultados de cada QH. Centraremos el análisis en el cumplimiento de la aproximación diagonal (7) y en el gráfico de $\epsilon_2(\omega)$.

A. Heteroestructura cuasirregular de Fibonacci

En la Tabla II, y a modo de ejemplo, se dan los valores de la integral de solapamiento de las transiciones de huecos pesados para los diez primeros estados de una QH Fibonacci de orden 8. Se aprecia de inmediato que la aproximación diagonal para dicha magnitud es razonablemente buena. Se obtienen resultados similares para

0.97	0.093	0.14	0.002	-0.042	0.112	0.01	0.008	0.052	-0.05
-0.093	0.962	-0.076	-0.12	0.049	-0.641	0.180	0.04	-0.031	-0.009
-0.158	0.079	0.981	0.101	0.071	0.133	0.017	-0.053	0.024	-0.014
0.014	0.121	-0.133	0.943	0.219	0.11	-0.106	0.009	0.006	0.019
0.091	-0.076	-0.019	-0.108	0.908	-0.104	0.033	0.001	0.011	-0.014
-0.096	-0.016	-0.133	-0.135	0.077	0.984	0.087	0.042	-0.062	0.038
-0.032	-0.168	-0.015	0.143	-0.022	-0.089	0.904	-0.083	0.032	0.056
-0.014	-0.045	0.054	0.010	-0.015	-0.033	0.07	0.983	0.121	0.016
-0.041	0.049	-0.041	-0.029	-0.001	0.064	-0.04	-0.114	0.984	0.12
0.062	0.018	0.039	-0.038	0.009	-0.041	-0.046	0.011	-0.188	0.971

Tabla II: Integral de solapamiento para la octava generación de una QH Fibonacci. En la fila i , columna j de esta tabla se da la integral de solapamiento entre el estado i de conducción y el j de valencia (banda de huecos pesados).

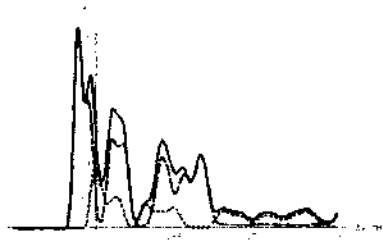


FIG. 2: Parte imaginaria de la constante dieléctrica para una QH Fibonacci en octava generación. En líneas punteada la contribución de los huecos ligeros.

los huecos ligeros. No hay ninguna ley de simetría que obligue a que se cumpla esta propiedad aparentemente insólita. Cabe, no obstante, algún razonamiento cualitativo. En efecto, los estados homólogos, según el Teorema de Ceros¹³ que existe en el problema 1D de Schrödinger, tienen el mismo número de ceros. Si estos se distribuyen más o menos en los mismos lugares, no es de extrañar que electrones y huecos se acumulen en las mismas regiones dando lugar a esta propiedad.

En la Figura 2 se presenta $\epsilon_2(\omega)$. Se aprecia que lo típico es que las estructuras del espectro se deben a la conjunción de varias transiciones siguiendo la agrupación característica de las Estructuras Cuasirregulares. La estructura que Muzzar llama G_1 , y que está a $h\omega \approx 1,69$ eV no es de huecos pesados como estos autores dicen, sino de huecos ligeros.

Para estos cálculos se tomaron en cuenta solamente las transiciones de huecos pesados y ligeros a la banda de conducción. En el intervalo de frecuencias mostrado no es necesario considerar ninguna otra.

B. Heteroestructura cuasirregular de Fibonacci Generalizada

En la Tabla III se puede ver lo mismo que en la Tabla II pero ahora para una Fibonacci Generalizada, gene-

0.908	-0.210	0.013	0.011	0.006	-0.007	-0.005	-0.003	-0.009	0.003
0.217	0.958	0.005	-0.004	0.003	0.006	-0.011	0.012	-0.002	-0.009
0.01	-0.002	0.198	-0.883	-0.107	0.341	0.034	-0.02	0.008	-0.007
-0.015	0.003	0.0	0.140	-0.201	-0.225	0.051	0.017	-0.013	0.003
-0.012	-0.005	0.242	-0.057	0.6	-0.191	-0.403	-0.111	-0.012	-0.008
-0.003	-0.013	0.134	0.324	-0.081	0.767	-0.137	0.26	-0.003	-0.011
0.003	0.008	0.172	0.15	0.415	-0.415	0.737	-0.118	0.003	-0.008
0.002	-0.011	0.002	-0.107	0.182	-0.167	0.16	0.927	0.002	-0.013
0.014	-0.003	0.019	0.014	0.007	-0.009	-0.008	-0.908	0.96	-0.216
0.004	0.014	0.006	-0.005	0.005	0.008	-0.017	0.021	0.216	0.94

Tabla III: Integral de solapamiento para la octava generación de una QH Fibonacci Generalizada. En la fila i , columna j de esta tabla se da la integral de solapamiento entre el estado i de conducción y el j de valencia (banda de huecos pesados).

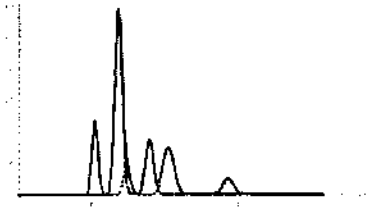


FIG. 3: Parte imaginaria de la constante dieléctrica para una QH Fibonacci Generalizada en octava generación. En línea punteada la contribución de los huecos ligeros.

ración 8. Salta a la vista que hay una violación de la propiedad (7) pues las transiciones $hh3 \rightarrow c3$ y $hh4 \rightarrow c4$ son menos probables que $hh3 \rightarrow c4$ y $hh4 \rightarrow c3$. Resulta interesante notar que otras dos transiciones ($hh5 \rightarrow c7$ y $hh6 \rightarrow c7$) también son importantes; tienen una probabilidad de ocurrencia del orden de la mitad de la fundamental ($hh7 \rightarrow c7$). El análisis en detalle de la tabla lleva a otros casos parecidos.

En la Figura 3 se presenta la parte imaginaria de la constante dieléctrica como función de la frecuencia para este sistema. Se señalan las transiciones de huecos pesados (encima) y de huecos ligeros (debajo). Es evidente que hay estructuras debidas enteramente a huecos pesados y otras a huecos ligeros. Tanto unas como otras tienen contribuciones de grupos más o menos importantes de estados de una y otra banda.

C. Heteroestructura cuasirregular de Rudin-Shapiro

En la Tabla IV se pueden ver los elementos matriciales de las transiciones de huecos pesados a estados de conducción para una QH Rudin Shapiro con los mismos parámetros que las QHs anteriormente estudiadas y tomando las capas $C = A$ y $D = B$.⁴ Se ve que existe una situación similar a la analizada en la Fibonacci Genera-

0.995	0.001	0	0	0.001	-0.011	0.001	0.001	0	-0.009
0	0.923	-0.306	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
0.001	0.725	0.81	0	0.001	0.002	0.162	0.001	0.019	0
0.001	0.001	0.001	0.839	0.001	-0.002	0	0.263	0.001	0.001
-0.009	0.003	0.001	-0.002	0.001	-0.005	-0.003	0	0.054	0.092
0.001	0	0.001	0.001	0.970	0.002	-0.011	0.001	0.005	0
0	-0.046	-0.122	0	0.013	-0.053	0.517	0	-0.517	0.007
0	0	0	-0.263	0.001	0	0.001	0.943	0.001	0
0.001	-0.007	-0.009	0.001	0.003	0.001	0.506	0	0.833	-0.002
0.12	0	0	0	0	0.115	-0.001	0.001	0.002	0.022

Tabla IV: Integral de solapamiento para la octava generación de una QH Rudin Shapiro. En la fila i , columna j de esta tabla se da la integral de solapamiento entre el estado i de conducción y el j de valencia (banda de huecos pesados).

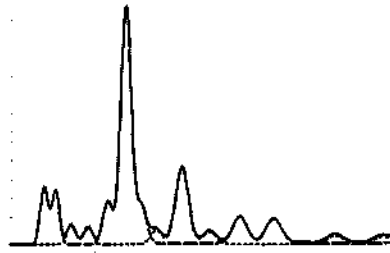


FIG. 4: Parte imaginaria de la constante dieléctrica para una QH Rudin Shapiro en octava generación. En línea punteada la contribución de los huecos ligeros.

lizada, ahora entre los estados 5 y 6. También se ve que hay una probabilidad de transición que eventualmente y tal vez se pueda detectar experimentalmente, entre los estados 7 y 9.

En la Figura 4 se presenta la parte imaginaria de la constante dieléctrica como función de la frecuencia para este sistema. Se señalan las transiciones de huecos pesados (encima) y de huecos ligeros (debajo). Es evidente que hay estructuras debidas enteramente a huecos pesados y otras a huecos ligeros. Tanto unas como otras tienen contribuciones de grupos más o menos importantes de estados de una y otra banda.

V. CONCLUSIONES

Los problemas de autovalores con frecuencia *padecen* de rigidez, y males parecidos.⁹ Esto es debido a la coexis-

tencia de soluciones divergentes junto a otras que tienden a cero rápidamente. Una vez determinados los autovalores, el problema se traslada al cálculo de los autoestados. De ahí que calcular elementos matriciales sea en primera instancia una tarea ardua que debe pasar por el tormento de obtener las amplitudes en muchos puntos.

El procedimiento propuesto para calcular las integrales de solapamiento entre envolventes a partir de la matriz de transferencia se presenta como prometedor en diversos sistemas multicapas pues se centra en calcular los autoestados con buena precisión solamente en las intercaras. Las expresiones (8) y (10) representan entonces una manera fácil, directa y precisa de calcular estas integrales conociendo apenas las amplitudes en las intercaras.

Se ha mostrado en tres casos de interés actual que la propiedad de *diagonalidad* de los elementos matriciales de transición se cumple con bastante buena aproximación, pero también hemos visto que se debe tomar con cautela y estudiar su cumplimiento en cualquier otro nuevo caso que se pretenda estudiar.

Por primera vez se reportan espectros de propiedades ópticas de QHs de tipo Fibonacci Generalizada y Rudin Shapiro. Estos resultados son, por supuesto, preliminares. No hicimos ningún esfuerzo por ajustar parámetros que pudieran ser algo distintos en una estructura u otra (E_{exc} , por ejemplo). Por el momento no hay datos experimentales que puedan ratificar o enmendar estos resultados.

En los tres casos estudiados, y al igual que en los QW y SL, hay una buena cantidad de estructuras de los espectros debida a transiciones de estados de huecos pesados a conducción. Pero, aquí aparecen estructuras nítidamente debidas a transiciones desde estados de huecos ligeros. Normalmente las transiciones de huecos ligeros son apantalladas en los espectros porque las de huecos pesados son más fuertes, pero aquí resulta que se obtienen las primeras donde las segundas son prácticamente nulas.

Agradecimientos

Agradecemos a nuestros colegas de las tres instituciones (UAEM-México, UH-Cuba, UJI-España) por numerosas y enjundiosas discusiones que profundizaron en este trabajo. R. P-A y C. T-G agradecen especialmente la hospitalidad de la UJI.

¹ G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", Editions de Physique, Paris (1989).

² B. Vinter and C. Weisbuch, "Quantum Semiconductor

Structures", Academic Press, San Diego (1991).

³ C. Weisbuch, "Applications of MBE-grown heterostructures and quantum wells in fundamental research and in

- advanced semiconductor devices", J. Crystal Growth 127, 742-751 (1993).
- ⁴ R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner, "The spectrum of quasiregular heterostructures", invited chapter in "Some Contemporary Problems of Condensed Matter Physics", Nova Science Publishers, ed. by S. Vlaev and M. Gaggero-Sager (2000), pp. 1-37.
- ⁵ E. Maciá and F. Domínguez, "Phonons and Excitons in Low Dimensional Aperiodic Systems", Editorial Complutense, Madrid (2000).
- ⁶ R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner, and V.R. Velasco "Some elementary questions in the theory of quasiperiodic heterostructures", J. of Phys.: Condens. Matter 13, 3689-3698 (2001).
- ⁷ D. Munzar, L. Bočáček, J. Humlíček and K. Ploog, "Fractal structure in optical spectra of Fibonacci superlattices", J. Phys.: Condens. Matter 6, 4107-4118 (1994).
- ⁸ M. Mora, R. Pérez-Álvarez, and C. Sommers, "Transfer matrix in one dimensional problems", J. Physique 46:7, 1021-1026 (1985).
- ⁹ R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner, "Transfer Matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures", ed. Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, Spain (2004).
- ¹⁰ Función Error, por ejemplo

$$Err(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma}} \int_{-\infty}^x dt \exp[-t^2/(2\gamma^2)].$$
- ¹¹ D. Munzar, comunicación privada (2002).
- ¹² L.D. Landau y E.M. Lifchitz, "Electrodynamique des milieux continus", éditions Mir, Moscou (1960).
- ¹³ L.D. Landau y E.M. Lifchitz, "Mecánica Cuántica (teoría no-relativista)", editorial Reverté S.A. Barcelona-Buenos Aires-Mexico (1967).

Analytical calculation of the eigen-energies for a quantum lens with finite barriers

Arezky H. Rodríguez

Universidad Autónoma de la Ciudad de México (UACM),

Calzada Ermita Iztapalapa s/n Col. Lomas de Zaragoza, C.P. 09620, Iztapalapa, México D.F., México.

The bound states of a particle in a quantum dot with finite barrier are calculated in the envelope function approximation. The quantum dot has lens shape with a circular base with radius a and maximum cap height b . The potential energy and the mass of the particle have different values inside and outside the quantum dot. A 2D Fourier expansion is used in a semi-sphere domain with infinite walls which contains the original lens shape potential. It is reported the electron energies for different values of lens deformation b/a , lens radius a and barrier height V_0 . The limit case of the infinite barrier height in the quantum dot is recovered.

PACS numbers:

I. INTRODUCTION

The confinement of particles within small regions leads to interesting quantum effects¹. While most of the works consider the confinement as due to impenetrable barriers, the case of a barrier with finite height is sometimes more realistic and has received some attention. When including the finite barrier, different approaches have been used. In Ref. 2 the authors calculated the bound states in rectangular cross-section quantum wires as products of eigenstates of 1D problems with a finite barrier in each direction. The energy levels are then corrected by the first-order perturbation-theory. It was shown that the method is suitable for rectangles with sufficiently large linear dimensions. The same idea was previously applied in Ref. 3 to calculate the electronic states in cylindrical quantum dots of semiconductors. A 2D Fourier expansion has been used in Ref. 4 to calculate the electronic states in InGaAs/InP quantum well-wires structures and in self-assembled InAs pyramidal quantum dots⁵.

The electronic and optical properties in self-assembled quantum dots (SAQD) is also of great importance⁶. Although previous theoretical studies in SAQD with lens shape⁷⁻⁹ considered infinite wall potential, the finite value of the band offset is a fundamental parameter when considering different external potentials or when including others physical effect, such as, for example, the hydrostatic pressure¹⁰. In the present work, it is developed a model which allows the analytical calculations of the electronic levels in self-assembled quantum dots with lens shape including a finite barrier potential. The results obtained are compared with the model which consider the barrier as infinite and the limit case is recover for high enough barrier potential. An analysis is done establishing the cases where the infinite barrier model gives good results.

II. MODEL FOR FINITE POTENTIAL

The eigenvalue problem of the Schroedinger equation in a 3D lens shape with infinite barriers in the effective mass approximation has been solved elsewhere⁷. In our case, the problem for a finite barrier will be modeled including a lens-shape well potential with height V_0 in a hard-walls semi-spherical region has shown in Fig. 1. The semi-spherical re-

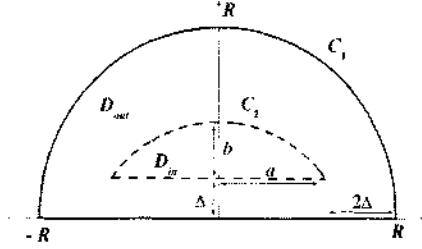


Figure 1: Transversal section of a 3D finite lens-well D_n with barrier height V_0 and contour C_2 inside an infinite semispherical-well with contour C_1 . Contour C_1 and C_2 are separated a distance equal or greater than Δ along the perpendicular axis.

gion is divided in two regions, D_{out} with potential V_0 and region D_{in} where it is zero. The effective masses in region D_{in} and D_{out} are considered as different. The solution of the problem given by the lens with finite barrier in an infinite surrounding medium can be obtained by minimizing the effect of the external boundary C_1 over the wavefunction of the corresponding energy level under study. This can be achieved taken higher enough value of the distance Δ , as it will be shown later. Hence, we have the equation for the whole region D :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(r, \theta, \phi)} \nabla \Psi \right) + V(r, \theta, \phi) \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

$$(r, \theta, \phi) \in D = D_{in} + D_{out}$$

where

$$V(r, \theta, \phi) = \begin{cases} 0 & ; (r, \theta, \phi) \in D_{in} \\ V_0 & ; (r, \theta, \phi) \in D_{out} \end{cases} \quad (2)$$

and

$$m^*(r, \theta, \phi) = \begin{cases} m_{in}^* & ; (r, \theta, \phi) \in D_{in} \\ m_{out}^* & ; (r, \theta, \phi) \in D_{out} \end{cases} \quad (3)$$

The analytical solution of equation (1) is sought in the closed form of an expansion

$$\Psi = \sum_i C_i \Psi_i^{(0)} \quad (4)$$

where the set of functions $\{\Psi_i^{(o)}\}$ is a complete set of functions in the 3D domain D given by the semi-sphere and its explicit representation can be found in Ref. 7. A diagonalization procedure is implemented to obtain the electron states. With the former expansion the functions Ψ satisfy the boundary condition of infinite barrier in the contour C_1 because the set of functions $\{\Psi_i^{(o)}\}$ does. On the other hand, Eq. (1) and the corresponding solution given by Eq. (4) are written in the whole domain D . It guarantees that the matching conditions at the contour C_2 are also satisfied, but only at those points where it is well-defined the derivative of the wavefunction. This does not occur at the corner and, generally speaking, the problem is then not well-defined. The obtained eigenvalues constitute only an estimation of the real problem but we accept this solution as a suitable estimation for the finite barrier case, as it will be shown later. The present formalism has been applied in previous works^{3,11}, but not explicit analysis is done about the fulfillment of the matching conditions between the internal and the external domain.

Equation (1) can be rewritten as:

$$-\nabla^2\Psi - \sigma(r, \theta, \phi)\nabla\left(\frac{1}{\sigma(r, \theta, \phi)}\right)\nabla\Psi + \mathcal{V}(r, \theta, \phi)\sigma(r, \theta, \phi)\Psi = \lambda\sigma(r, \theta, \phi)\Psi \quad (5)$$

where in the internal region D_{in} we have $\sigma(r, \theta, \phi) = 1$ and $\mathcal{V}(r, \theta, \phi) = 0$ and in the external domain D_{out} we have $\sigma(r, \theta, \phi) = \sigma = m_{out}^*/m_{in}^*$ and $\mathcal{V}(r, \theta, \phi) = \mathcal{V}_o = V_o/E_o$. We have the parameter $\lambda = E/E_o$ where $E_o = \hbar^2/2m_{in}^*R^2$ is the unit of energy.

From Eq. (5) and Eq. (4) it is obtained the matrix representation of the problem

$$\sum_i C_i \left\{ \lambda_i^{(o)} \delta_{ij} - C(i, j) + A(i, j) - \lambda B(i, j) \right\} = 0 \quad (6)$$

where $\lambda_i^{(o)}$ are the corresponding eigenvalues of the set of functions $\{\Psi_i^{(o)}\}$. The matrix

$$C(i, j) = \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \sigma \nabla \left(\frac{1}{\sigma} \right) \nabla \Psi_i^{(o)} \right\rangle_D \quad (7)$$

is equal to zero because of the finite discontinuity of $\sigma(r, \theta, \phi)$, and

$$\begin{aligned} A(i, j) &= \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \mathcal{V}(r, \theta, \phi) \sigma(r, \theta, \phi) \Psi_i^{(o)} \right\rangle_D \\ &= \mathcal{V}_o \sigma \left[\delta_{i,j} - \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \Psi_i^{(o)} \right\rangle_{D_{in}} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} B(i, j) &= \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \sigma(r, \theta, \phi) \Psi_i^{(o)} \right\rangle_D \\ &= \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \Psi_i^{(o)} \right\rangle_{D_{in}} + \sigma \left[\delta_{i,j} - \left\langle \Psi_j^{(o)} \left| \Psi_i^{(o)} \right\rangle_{D_{in}} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

According to the axial symmetry, the Hilbert space of the problem given by Eq. (6) is separated in different subspaces, each one characterized by a quantum number m . In Fig. 2 it

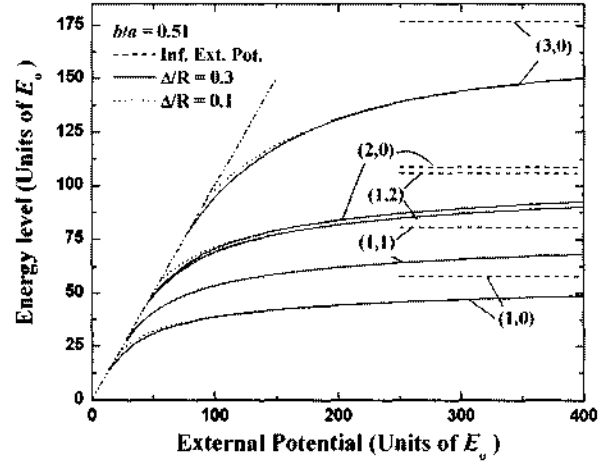


Figure 2: First five energy levels for a quantum lens with $b/a=0.51$ as a function of the external potential barrier \mathcal{V}_o in dimensionless quantities. The calculation is done taken $\Delta/R=0.3$ (solid lines) and $\Delta/R=0.1$ (dotted lines) for comparison. Dashed lines represent the infinite barrier case⁷ while dash-dot-dot is the line where the energy value is equal to the potential value.

is shown the solution of the problem for $b/a=0.51$ and $\sigma=3.5$ in dimensionless quantities, as a function of the external potential \mathcal{V}_o . The first five energy levels are shown. Each one is labeled by a quantum number (N, m) meaning the N -th energy level with quantum number m . It can be seen how, as the external potential increases, also increase the energy levels approaching asymptotically to the values which correspond to the infinite potencial case shown horizontally in dashed lines⁷. For a given value of the barrier, the lower levels are closer to the corresponding energy value of the infinite barrier case. Solid lines are levels calculated using $\Delta/R=0.3$ and dotted lines are levels with $\Delta/R=0.1$ (only for levels with $m = 0$). The different values of the two cases can be seen at low values of the potential barrier while the discrepancy is for a wide range for higher levels where the percent of the wavefunction located at region D_{out} is greater and the influence of the artificial boundary C_1 is stronger. Nevertheless, at those values of the potential barrier where the solution is independent of the parameter Δ , it can be taken the solution as independent of the boundary C_1 and hence, as a good approximation for the finite barrier case in an infinite surrounding medium. Dash-dot-dot line represents the values where the energy value is equal to the potential value.

In order to study a specific material, two different quantum lens configuration of InAs/GaAs have been taken into account. In Fig. 3 it is shown the five first electronic levels as a function of the lens radius. Panel a) is for $b/a=0.91$ while panel b) is for $b/a=0.51$. In both cases it is shown the barrier height V_c of the conduction band in dashed line, the levels calculated with the finite barrier model are the solid lines (using $\Delta/R=0.3$), and the infinite barrier case are the dotted lines. A 500×500 matrix is used in the diagonalization procedure. According to the levels shown, it can be seen that the infinite barrier is a good approximation for radius of the order of 20

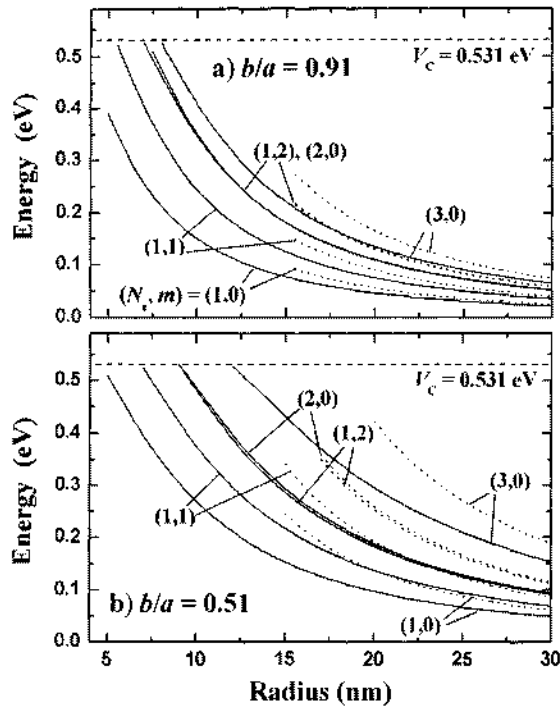


Figure 3: First five electronic levels for an InAs/GaAs quantum lens as a function of the lens radius. a) $b/a=0.91$, b) $b/a=0.51$. The calculation is done taken $\Delta/R=0.3$ (solid lines) and considering the barrier as infinite (dotted lines) for comparison.

nm or higher when $b/a=0.91$. As b/a decreases, it is necessary to include the finite barrier effects to have better approximations of the energy levels distribution for the same range of the radius. The values of the effective masses used here are the same as in Ref. 10, while an average over the masses is taken in the valence band.

III. CONCLUSIONS

In the present work it has been generalized the results of Ref. 7 and Ref. 8 to evaluate electronic energies in self-assembled quantum dots with lens shape geometry taking into account the finite band offset. The results obtained by the present model was compared with the values obtained when considering the potential barrier as infinite and it was established the range of values for the potential barrier, lens deformation b/a and lens radius a where both models produce similar results. The present model can be used to study the effect of an external potentials where it could be of importance to take into consideration the finite barrier.

Acknowledgements

The author thanks many valuable discussions with C. Trallero-Giner.

- ¹ J. Davies, *The Physics of Low-dimensional semiconductors - An Introduction* (Cambridge University Press, London, 1998).
- ² M. Califano and P. Harrison, *J. Appl. Phys.* **86**, 5054 (1999).
- ³ S. L. Goff and B. Stébé, *Phys. Rev. B* **47**, 1383 (1993).
- ⁴ D. Gershoni *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 995 (1988).
- ⁵ M. Califano and P. Harrison, *J. Appl. Phys.* **88**, 5870 (2000).
- ⁶ L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum dots* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- ⁷ A. H. Rodríguez, C. R. Handy, and C. Trallero-Giner, *J. Phys.:*

Condens. Matter **15**, 8465 (2003).

- ⁸ A. H. Rodríguez and C. Trallero-Giner, *J. Appl. Phys.* **95**, 6192 (2004).

- ⁹ A. H. Rodríguez, C. Trallero-Giner, M. Muñoz, and M. C. Tamarago, *Phys. Rev. B* **72**, 045304 (2005).

- ¹⁰ C. A. Duque *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1877 (2006).

- ¹¹ A. Bruno-Alfonso, personal communication.