

PROPIEDADES DIELECTRICAS DE VOLUMEN E INTERFACES DE SEMICONDUCTORES DENTRO DE UN ESQUEMA DE LIGADURA FUERTE

V.D.Elvira y J.C.Durán.

*División Energía Solar, Comisión Nacional de Energía Atómica,
Av.Libertador 8420, 1429 Buenos Aires.*

Como una extensión de un trabajo previo, se utiliza una aproximación de ligadura fuerte para analizar el comportamiento dieléctrico de volumen e interfaces de semiconductores. En esta oportunidad, se incluyen cálculos con parámetros que tienen en cuenta interacciones hasta segundos vecinos y se proponen diferentes modelos electrostáticos simples para describir la densidad de carga inducida alrededor de los átomos. En particular, se calcula la función dieléctrica para C, Si, Ge, As Ga y AsAl, observándose un acuerdo razonable con cálculos más sofisticados. Asimismo, se obtiene la discontinuidad de banda y el apantallamiento en la interface AsGa - As Al (100), y se correlaciona este apantallamiento con propiedades de ambos semiconductores. Los resultados presentados dan un nuevo respaldo al uso del modelo de ligadura fuerte autoconsistente para el análisis de propiedades dieléctricas de volumen e interfaces de semiconductores.

INTRODUCCION

Resultados experimentales y teóricos recientes [1-9] han dado un fuerte sustento al uso del modelo de densidad inducida de estados en la interface (DIEI) [10] para el cálculo de discontinuidades de bandas en heterouniones. Este modelo se utiliza dentro de tres aproximaciones diferentes: (i) modelo de niveles de neutralidad de carga [3,4,5], (ii) método de ligadura fuerte ("tight-binding") autoconsistente [6,11,12], y (iii) cálculo de la densidad local autoconsistente [7,8,9]. La ventaja de la segunda aproximación consiste en que mantiene una gran simplicidad sin dejar de tener en cuenta los principales efectos asociados con la densidad de estados inducida y con los efectos de apantallamiento [13].

El presente artículo es una extensión de Ref. [13] y su objetivo es analizar en profundidad la relación entre dicha aproximación de ligadura fuerte autoconsistente y la respuesta dieléctrica de volumen y de interfaces de semiconductores. Se presentan los resultados obtenidos para diversos semiconductores covalentes y III-V con diferentes parámetros de ligadura fuerte, incluyendo interacciones a primeros y segundos vecinos, y cuatro modelos electrostáticos simples para las cargas inducidas.

FUNCION DIELECTRICA DE VOLUMEN

La función dieléctrica de volumen se calcula utilizando los siguientes modelos de ligadura fuerte: (a) aproximación de Vogl y col. [14], con una base de cinco orbitales por átomo (sp^3s^*) e interacciones sólo a primeros vecinos; (b) modelo de Yuan y Lin Chung

[15] para Si y Ge, con una base de cuatro orbitales por átomo (sp^3) e interacciones a primeros y segundos vecinos; (c) modelo de Talwar y Ting [16] para semiconductores III-V, con igual base e interacciones que (b).

La respuesta del semiconductor a un potencial de tipo cosenoidal y longitudinal de onda λ , se analiza calculando la densidad de carga inducida en cada átomo a partir de las soluciones de la ecuación secular. Como es usual, se considera que dicho potencial perturbativo modifica los niveles diagonales del hamiltoniano de ligadura fuerte considerado en cada caso. La función dieléctrica $\epsilon(\lambda)$ se obtiene como [13]:

$$\epsilon(\lambda) = [V(\lambda) - V^{ind}(\lambda)] / V(\lambda), \quad (1)$$

donde $V^{ind}(\lambda)$ es la amplitud del potencial inducido y $V(\lambda)$ es el potencial total luego de incluida la perturbación. $V^{ind}(\lambda)$ debe calcularse utilizando un modelo que permita obtener los potenciales inducidos a partir de las cargas inducidas.

En este artículo se analiza la función respuesta en una dirección dada ([100] y [110] para Si, y [100] para los demás semiconductores) y se sugieren los siguientes cuatro modelos electrostáticos clásicos para las cargas inducidas:

(i) Distribuidas uniformemente sobre planos de espesor infinitesimal que contienen a los centros de los átomos de cada capa (Fig. 1(a)). Este modelo muy sencillo, en adelante modelo - α , se ha utilizado en numerosas oportunidades en la bibliografía y conduce a muy buenos resultados para las discontinuidades de bandas (ver, por ejemplo, [2]).

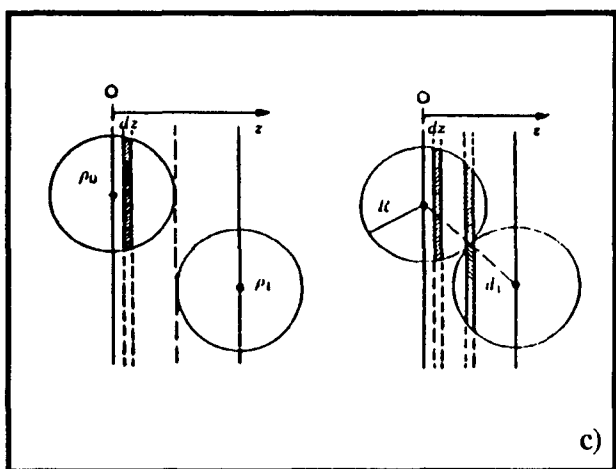
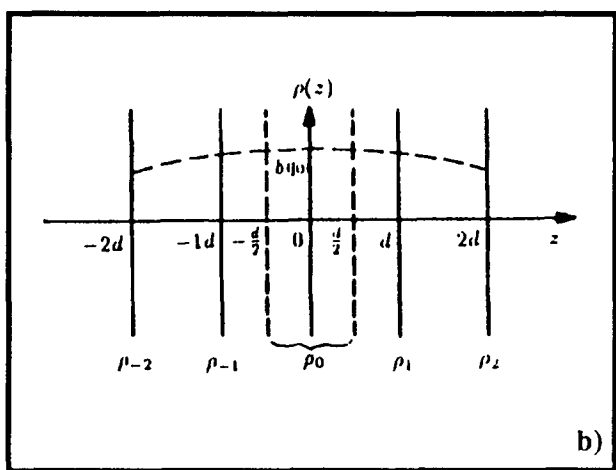
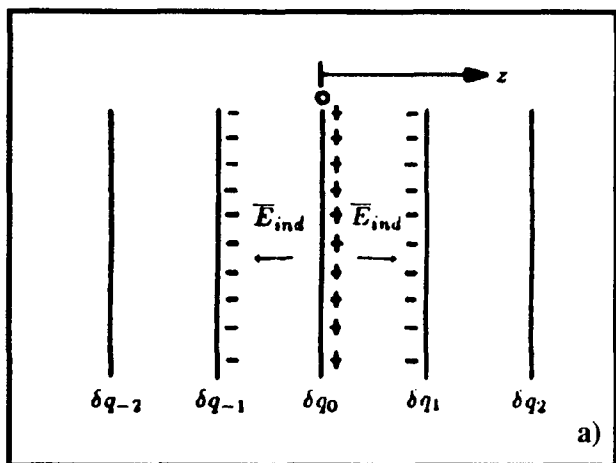


Figura 1: Modelos electrostáticos utilizados para la distribución de carga inducida. (a) Planos infinitos (modelo α); (b) distribución cosenoidal en volumen (modelo β); (c) distribución en esferas (modelo T); (d) distribución en esferas (modelo Δ).

(ii) Distribuidas según una densidad volumétrica con igual dependencia funcional que el potencial perturbativo (modelo β , Fig. 1(b)).

(iii) Distribuidas uniformemente en esferas de radio R alrededor de cada átomo. Este modelo se simplifica definiendo una densidad de carga aproximada obtenida redistribuyendo uniformemente la carga sobre planos perpendiculares a dicha perturbación. Se consideran dos valores diferentes de R según se muestra en las Figs. 1(c) y 1(d) (modelos Γ y Δ , respectivamente).

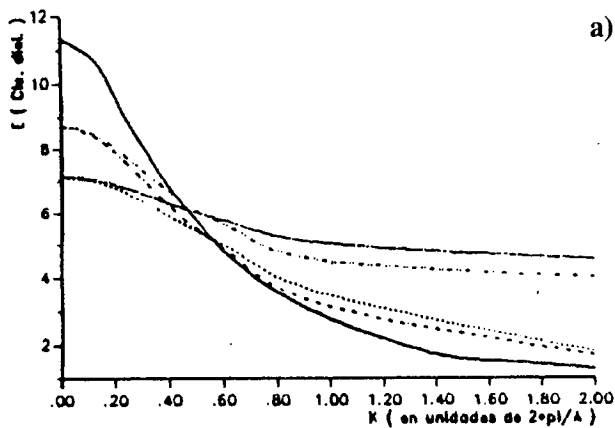
Con respecto a los resultados obtenidos, se observa en algunos casos que para $\lambda \rightarrow 0$ la función $\epsilon(\lambda)$ no se incrementa en forma monótona, presentando un máximo en $\lambda \neq 0$. Este comportamiento aparentemente extraño fue observado por Nara [17] y posteriormente por Srinivasan

[18] quienes notaron que el mismo era sensible a la elección de los elementos de matriz. Walter y Cohen [19] asociaron este efecto a la discontinuidad de las integrales de Slater y Koster [20] para pequeños valores de λ y presentaron una manera de eliminar dicho comportamiento utilizando pseudopotenciales. Un hamiltoniano de ligadura fuerte perturbado puede o no presentar este efecto dependiendo de los parámetros y de las modificaciones incluidas. En los resultados presentados aquí, se elimina por extrapolación.

Material	a	b	c	d	e
Si	7.1	8.7	-	11.3	11.7
C	4	-	-	-	-
Gu	-	11.5	-	14	15.4
AsGa	-	-	8.5	8.9	10.9
AsAl	-	-	7.9	-	-

Tabla 1: Función dieléctrica de volumen de diferentes materiales para $\lambda = 0$. a) Vogl [14], b) Yuang y Lin-Chung [15], c) Talwar y Tiug [16], d) pseudopotenciales [19], e) experimental [13, 21-25].

La Tabla 1 resume los resultados obtenidos y presenta otros cálculos teóricos [19] y valores experimentales. En el caso de Si, se observa claramente una mejor estimación del apantallamiento al pasar de un modelo de interacción a primeros vecinos a uno que incluye segundos vecinos.



a)

Interfase	ϵ_{int}
Abrupta	12.2
2d(Ga)	11.8
2d(As)	11.8
3d	11.2
6d	10.7

Tabla 2: Respuesta dieléctrica en la interface para AsGa-AsGa(1,0,0) con interacción a primeros vecinos, modelo- α y diversos perfiles de perturbación.

RESPUESTA DIELECTRICA EN LA INTER-FACE. DISCONTINUIDADES DE BANDAS.

b)

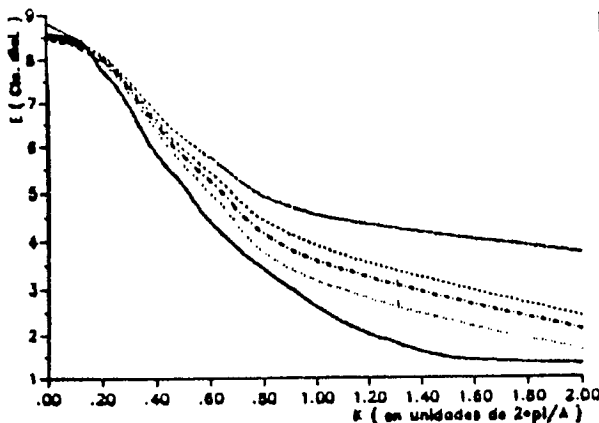


Figura 2: (a): Se comparan los resultados obtenidos para $\epsilon(k)$ en Si utilizando parámetros de Vogl ($\epsilon(0)=7.1$) y de Yuau y Lin-Chung ($\epsilon(0)=8.7$) para los modelos electrostáticos α (menor dispersión) y Δ (mayor dispersión). En línea llena, se incluye el cálculo de Walter y Cohen.

(b): $\epsilon(k)$ en la dirección (1,0,0) para GaAs con parámetros de Talwar y Ting. De arriba hacia abajo las curvas corresponden a los modelos α , β , Γ y Δ . Los resultados de Walter y Cohen se presentan en línea llena.

En la Fig.2. se dan los resultados de $\epsilon(\lambda)$ en la dirección (1,0,0) Si y AsGa, y se los compara con los de Walter y Cohen [19]. Aún con modelos clásicos y muy sencillos como los presentados aquí, se nota claramente que cuanto más realista es la aproximación electrostática, mejor se reproduce la dispersión obtenida con técnicas más sofisticadas. En particular, se observa un buen acuerdo entre los resultados correspondientes al modelo- Δ y los de Walter y Cohen.

Se utiliza una extensión del método de ligadura fuerte autoconsistente descrito en detalle en la Ref. [13]. El hamiltoniano total de la interface se define como un hamiltoniano inicial no perturbado más perturbaciones iniciales, V_i , relacionadas con las cargas electrónicas inducidas mediante ecuaciones electrostáticas elementales correspondientes a los modelos α y Δ (Fig.1). En dicho hamiltoniano, los cristales semi-infinitos se proyectan sobre unas pocas capas utilizando la técnica de decimación [7]. La condición inicial ($V_i = 0$) se define relacionando los fondos de las bandas de conducción de ambos semiconductores entre sí por medio de las afinidades electrónicas empíricas.

En esta sección, se analizan con diferentes aproximaciones de ligadura fuerte interfaces [100] ideales de semiconductores construidas introduciendo una perturbación externa inicial a un cristal infinito. A fin de analizar la influencia del perfil de esta perturbación sobre las propiedades de apantallamiento, se consideran cinco casos diferentes: abrupto, de ancho $2d$ centrado en anión y catión, y de anchos $3d$ y $6d$ siendo d la distancia entre capas consecutivas. En cada caso, se calculan los potenciales consistentes V_i^c , definidos como la suma de la perturbación inicial V_i y los potenciales inducidos V_i^s , generados por las cargas electrónicas inducidas. De estos cálculos, se define la constante dieléctrica de la interface como $\epsilon_{int} = \lim (V_i/V_i^c)$ para $i \rightarrow \infty$. En la Tabla 2 se dan los resultados para AsGa con interacción a primeros vecinos, modelo- α y diversos perfiles. Se observa que ϵ muestra una dependencia con el perfil de la interface, haciéndose cada vez menor a medida que se suaviza la misma. Por su parte, la Tabla 3 muestra los valores obtenidos para tres materiales con el modelo Δ .

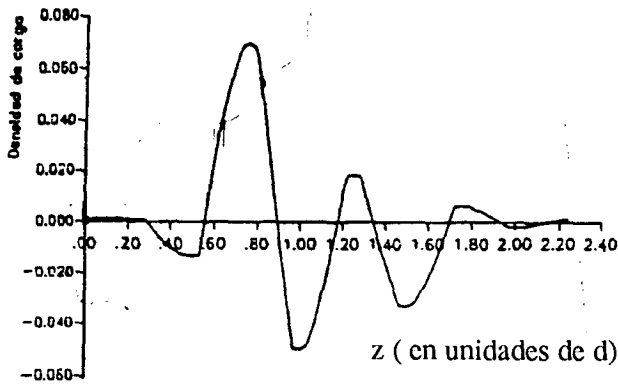


Figura 3: Densidad de carga inducida en función de la coordenada Z en dirección (1,0,0) en las cercanías de la heterounión $CiaAs=AlAs(1,0,0)$; Z se da en unidades de la distancia d entre capas.

Interface	Parámetros	ϵ_{int}
AsGa-AsG1 (1,0,0)	Talwar-Ting	15
AsAl-AsAl (1,0,0)	Talwar-Ting	7.3
Si-Si (1,0,0)	Vogl	6

Tabla 3: Respuesta dieléctrica en interfases (1,0,0) con el modelo Δ .

	Este Trabajo	Otros	Experimental
Autoconsistente	0.518	0.475	0.39
Neutralidad de carga	0.55	0.618	0.55

Tabla 4: Discontinuidad de bandas de energía ΔE_c en la heterounión AsGa-AsAl (1,0,0) obtenida por diferentes métodos. [13,21-25] teóricos y experimentales.

Finalmente, se obtuvo la discontinuidad de bandas ΔE_c y el apantallamiento en la interface AsGa-AsAl (1,0,0) utilizando los parámetros de Talwar y Ting. En la Tabla 4 se presentan los resultados junto con los de otros cálculos teóricos y mediciones experimentales, observándose un buen acuerdo. El valor de la discontinuidad de bandas parece no depender del modelo de distribución de cargas inducidas considerado. Cabe mencionar que se presentan oscilaciones en la densidad de cargas inducida cerca de la

interface, cuando se utiliza el modelo Δ (ver Fig.3). Estas oscilaciones fueron observadas también por W.A.Harrison en Ref. [26].

En una aproximación sencilla [13] puede esperarse que la respuesta dieléctrica en la heterounión esté dada por :

$$\epsilon_{het} \approx 2 / [(1/\epsilon_{int}^{AsGa}) + (1/\epsilon_{int}^{AsAl})] = 2 / [(1/15) + (1/7.3)] = 9.8$$

Se observa que este valor difiere del obtenido mediante la aproximación autoconsistente ($\epsilon_{het} = 12.5$) en aproximadamente el 20%.

CONCLUSIONES

Los resultados presentados muestran que la utilización de parámetros de ligadura fuerte con interacción hasta segundos vecinos juntamente con modelos electrostáticos clásicos más realistas, permite mejorar la descripción del comportamiento dieléctrico de volumen e interfaces de varios semiconductores. Asimismo, los valores de ΔE_c obtenidos para AsGa-AsAl (1,0,0) muestran un buen acuerdo con otros resultados teóricos y con valores experimentales.

REFERENCIAS

- [1] P.Chiaradfa, A.Katnani y H.Sang. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1246 (1984).
- [2] A.Muñoz, J.C.Durán y F.Flores. *Surf. Sci.* **181** L200(1987)
- [3] C.Tejedor y F.Flores, *J.Phys.* **C11**, L19 (1978).
- [4] F.Flores y C.Tejedor. *Phys. Rev. B* **30**, 4874 (1984).
- [5] J.Tersoff. *Phys. Rev. B* **30**, 4874 (1984).
- [6] C.G.Van de Walle y R.M.Martín. *J.Vac.Sci. Technol.* **4**, 1055 (1986).
- [7] F.Guinea, J.Sanchez-Dehesa y F.Flores. *J.Phys.* **C10**, 6499 (1983).
- [8] G.Platero, J.Sanchez-Dchesa y C.Tejedor, *Surf. Sci.* **168**, 553 (1986).
- [9] C.Priester, G.Allan y M.Lanco. *Phys. Rev. B* **33**, 7386 (1986).
- [10] F.Flores y C.Tejedor. *J.Phys. C* **20**, 145 (1987).
- [11] J.Sanchez Dehesa y C.Tejedor. *Phys. Rev. B* **26**, 5824 (1982).
- [12] W.E.Pickot, S.G.Louie y M.L.Cohen. *Phys. Rev. B* **17**, 815 (1978).
- [13] J.C.Durán, A.Muñoz, F.Flores y C.Tejedor. *Phys.Rev. B* **36**, 5920 (1987).
- [14] P.Vogl, H.C.Hjamarlson y J.D.Dow. *J.Phys.*

- Chem. Solids* **44**, 365 (1983).
- [15] Yuan Li y P.J. Lin-Chung. *Phys. Rev.* **B27**, 3465 (1982).
- [16] D.N.Talwar y C.S.Ting. *Phys.Rev.* **B25**, 2660 (1981).
- [17] H.Nara. *J.Phys.Soc.Japan* **20**, 778 (1965).
- [18] G.Srinivasan *Phys.Rev.* **178**, 1244 (1969).
- [19] J.P.Walter y Marvin L.Cohen. *Phys.Rev.* **B2**, 1821 (1970).
- [20] J.C.Slater y G.F.Koster. *Phys. Rev.* **94**, 1498 (1954).
- [21] W.I.Wang, T.S.Kuau, E.E.Mendez y L.Esaki, *Phys.Rev.* **B 31**, 6890 (1985).
- [22] M.Heiblun, M.I.Nathau y M.Eizenberg. *Appl. Phys.Lett.* **47**, 503 (1985).
- [23] J.Batey y S.L.Write. *J.Appl. Phys.* **59**, 200 (1986).
- [24] P.Dawson, B.A. Wilson, C.W. Tu y R.C. Miller. *Appl. Phys. Lett.* **48**, 541 (1986).
- [25] Danan et al. *Phys. Rev. B.* **35**, 6207 (1987).
- [26] W.A.Harrison y J.Klepcis. *Phys. Rev. B* **15** (1987).