

EFFECTO DE LA ANISOTROPÍA SOBRE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE UN PUNTO
CUÁNTICO AUTOENSAMBLADO

ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2015

EFFECTO DE LA ANISOTROPÍA SOBRE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE UN PUNTO
CUÁNTICO AUTOENSAMBLADO

ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS

Trabajo de grado para optar al título de
Físico

Director
WILLIAN GUTIERREZ NIÑO
Doctor en Ciencias Naturales-Física

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2015

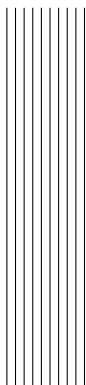
*Es posible que no lo diga muy a menudo,
pero en verdad estoy agradecida con mi familia y amigos.*

*El tiempo que pasamos juntos es muy especial,
nunca podría remplazar a ninguno de ellos.*

*Prometo que jamás olvidaré a mis seres queridos,
que ríen conmigo, que me soportan y me hacen continuar.*

Transforma tu tristeza en bondad

*Haz de las cosas que te hacen ser tú mismo tu fuerza
Está bien perderse en el camino, comiéndalo una vez más.*



Agradecimientos

A mi director el profesor Willian Gutierrez, por toda la ayuda prestada en la realización de este trabajo y por la confianza depositada en mí al recibirme como su alumna.

A mi madre Laura Esther Cortes y mi padre Gustavo Gévez Manco, por todo lo que han hecho por mí, aun cuando esto les ha costado grandes sacrificios.

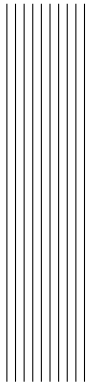
A mi hermano Sergio Augusto Gévez Cortes, por confiar en que soy capaz de hacer las cosas y por prestarme su computador para correr los programas.

A mi nona Victoria, por consentirme a su manera, y a mis nonos Tomas y Alix, que desde el cielo me motivan a esmerarme siempre; y a mis tías, tíos y primos, por la confianza y por toda la risa que, con sus "cuentos", me producen constantemente.

A los "cirilos" y Jessica por brindarme su amistad siempre; y a todos los compañeros y amigos que conocí durante la carrera y que de alguna manera me ayudaron en este proceso: Yeison, Laura, Ana María, Sissas, Sandra, Mario, Alfredo, Eduard, Elber, Teo y José.

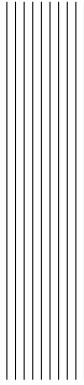
A los profesores e integrantes del grupo de investigación FICOMACO. Especialmente al profesor Iliia Mikhailov cuyas clases motivaron mi aprendizaje.

A el "refugio animal" que habita en casa, Ru-Ru, Kira, Lizzy, Dasha y Katty, por alegrarme todos los días con sus juegos y su compañía; y a Ronalda a quien siempre tengo presente.



Índice general

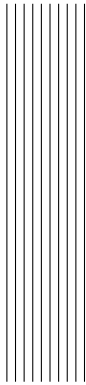
Introducción	14
1. Fundamentos Teóricos Generales	17
1.1. Puntos cuánticos autoensamblados	17
1.2. Electrón confinado en un punto cuántico en presencia de campo magnético	19
1.3. Aproximación de masa efectiva	19
1.4. Aproximación adiabática	21
2. Modelo Teórico	22
2.1. Modelo del confinamiento estructural del QD	22
2.2. Punto cuántico axialmente simétrico	23
2.3. Punto cuántico con anisotropía acimutal	27
3. Resultados y Análisis	29
Conclusiones	37
Bibliografía	38



Índice de figuras

1.1. (a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico. (b) Posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.	18
1.2. Secuencia de figuras de AFM que muestran la evolución de la morfología superficial después del cubrimiento de los QDs de InAs con la cantidad indicada de GaAs a $T_s = 460^\circ\text{C}$. Figura tomada de [1]	18
1.3. Esquema de la estructura de bandas de los semiconductores.	19
1.4. Curvas de energía en función del vector de onda para un electrón en GaAs, InAs y en el vacío	20
2.1. Corte transversal del punto cuántico, aquí el valor de h varía de acuerdo a la función (2.1) para $\varphi = 0$	22
2.2. Ilustraciones del modelo de punto cuántico para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$	23
3.1. Representación del potencial de confinamiento del punto para diferentes valores del parámetro de forma n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$	29
3.2. Niveles energéticos más bajos para un electrón en un QD con diferentes valores del parámetro n y en ausencia de campo magnético.	31
3.3. Primeros niveles energéticos para un QD axialmente simétrico ($n = 0$) en función del campo magnético.	32
3.4. Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 2$ y $\alpha = 0,1$	32

3.5. Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 2$. (a) $\alpha = 0,3$. (b) $\alpha = 0,5$	33
3.6. Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 4$ y $\alpha = 0,1$	34
3.7. Niveles de energía más bajos como función del parámetro radial R , en ausencia de campo magnético para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$	35
3.8. Primeros niveles energéticos, en ausencia de campo magnético, en función del parámetro α para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 2$ (b) $n = 4$	36



Índice de tablas

2.1. Parámetros de los materiales, extraídos de [2]	23
3.1. Primeros estados electrónicos para un QD axialmente simétrico ($n = 0$).	30



Resumen

TÍTULO: EFECTO DE LA ANISOTROPÍA SOBRE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE UN PUNTO CUÁNTICO AUTOENSAMBLADO*

AUTOR: ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS **

PALABRAS CLAVE: Sistemas de baja dimensionalidad, puntos cuánticos, aproximación de masa efectiva, aproximación adiabática, método de Galerkin.

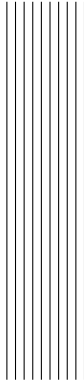
DESCRIPCIÓN:

Se analiza el efecto de la anisotropía estructural de un punto cuántico autoensamblado de InAs/-GaAs sobre el espectro energético de un electrón confinado en su interior y en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. Dicha anisotropía es modelada mediante variaciones periódicas en la altura del punto respecto al ángulo acimutal, obteniéndose de esta manera una estructura con confinamiento axialmente no simétrico. Se considera primero un problema de QD lenticular con simetría axial el cual se puede resolver completamente mediante la aplicación de la aproximación adiabática para separar los movimientos en las direcciones vertical y horizontal. El problema del QD anisótropo es resuelto haciendo uso del método de Galerkin tomando como base la solución obtenida para el punto lenticular axialmente simétrico.

Se estudió el espectro electrónico en función de la intensidad del campo magnético aplicado para estructuras con diferentes configuraciones y grado de anisotropía. Se encontró que para los casos de simetrías rotacionales C2 y C4 se destruye la degeneración de los niveles presentada en el caso isotrópico y aparecen anti-cruces entre ellos debido a la ruptura de la simetría rotacional. Se analizó la dependencia de los primeros niveles energéticos del QD en función del tamaño del punto para diferentes configuraciones de anisotropía. Nuestros resultados revelan que la existencia de cierto grado de anisotropía en un QD puede favorecer la aparición de estados moleculares, similares a los observados en sistemas de QDs acoplados.

*Trabajo de grado

**Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutierrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales-Física



Abstract

TITLE: EFFECT OF ANISOTROPY ON THE ELECTRONIC PROPERTIES OF A SELF-ASSEMBLED QUANTUM DOT *

AUTHOR: ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS **

KEYWORDS: Low dimensional systems, quantum dots, mass-effective approximation, adiabatic approximation, Galerkin method.

DESCRIPTION:

We analyzed the effect of the structural anisotropy of a self-assembled quantum dot of InAs/GaAs on the energy spectrum of an electron confined inside it and in the presence of an external magnetic field applied along growth direction. The anisotropy is modeled by periodic variations in the dot height with respect to the azimuthal angle, which generate a structure with axially nonsymmetrical confinement. First, we considered a problem of a lens-shaped quantum dot with axial symmetry that can be resolved completely by the application of the adiabatic approximation to separate the movements on the vertical and horizontal directions. Second, we resolved the problem of anisotropic quantum dot by using the Galerkin method taking as a base the solution of the axially symmetric lenticular dot.

We studied the energy spectrum as a function of the magnetic field intensity for different configurations and grades of anisotropy. It was found that for the cases of rotational symmetries C₂ and C₄, the degeneration of the levels that was observed in the isotropic case was destroyed and appeared anti-crosses between them because the breaking of the rotational symmetry. We analyzed the dependency of the first energetic levels of the quantum dot as a function of the dot size for different anisotropy configurations. Our results reveal that the existence of some degree of anisotropy on a QD may promote the development of similar molecular states which arise in systems of coupled QDs.

*Bachelor Thesis

**Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutierrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales-Física



Introducción

No se sabe con exactitud en que momento el ser humano comenzó a aprovechar las ventajas de las estructuras de dimensiones nanométricas (una milmillonésima de metro, 1×10^{-9} [nm]), pero si se tiene claro que la comprensión de sus propiedades particulares y de los fenómenos que tienen lugar con su manipulación es un hecho reciente. Un ejemplo de la utilización de materiales nanométricos en la antigüedad lo constituye la copa de Licurgo, utensilio romano fabricado en el siglo IV a. C. que se encuentra en el Museo Británico de Londres, la cual es famosa debido a que su color varía de verde a rojo intenso dependiendo de si la luz la atraviesa o no. La causa de tal comportamiento se vino a entender muchos años adelante, y obedece a un efecto puramente nanoscópico, ya que el vidrio de sosa y cal con el que fue construida contiene nanopartículas de oro y plata [3]. En la actualidad la manipulación de la materia en la escala nano para la creación de nuevos materiales y dispositivos se conoce como nanotecnología y cuenta con un extenso rango de aplicaciones, que se incrementa continuamente, pues es una de las áreas de investigación de mayor impacto a nivel mundial. Dentro de sus mayores logros se encuentra la fabricación de sistemas nanométricos artificiales en donde se pueden observar los efectos del confinamiento cuántico en una, dos y hasta tres dimensiones, conocidos como nanoestructuras.

Dentro de las nanoestructuras, las que son fabricadas con materiales semiconductores son de gran interés para la comunidad científica, puesto que el aprovechamiento de las propiedades físicas de los semiconductores en conjunto con el confinamiento cuántico permitió la creación de la electrónica moderna. El estudio de lo que ahora se conoce como estructuras de baja dimensionalidad (LDS, del inglés *low dimensional structures*), comenzó a finales de la década de los 70's cuando se lograron producir películas epitaxiales suficientemente delgadas conocidas como pozos cuánticos, las cuales se pueden considerar como estructuras bidimensionales. Como es bien sabido, a menor dimensionalidad en la estructura, mayor cuantización en sus propiedades optoelectrónicas, es por ello que ciertas nanoestructuras que imponen un confinamiento cuántico para los portadores de carga en las tres dimensiones, conocidos como puntos cuánticos (QDs, del inglés *quantum dots*) generan mayores expectativas en la investigación, especialmente por sus aplicaciones potenciales, que son principalmente en el campo de la computación cuántica, en el almacenamiento de información para computadoras tradicionales, en biología, óptica y en optoelectrónica. Uno de los mecanismos más estudiados para la construcción de estas estructuras es el autoensamblado basado en la epitaxia de haces moleculares (MBE, del inglés *molecular beam epitaxy*) en el modo de crecimiento de Stranski-Krastanov [4, 5]. El crecimiento de puntos cuánticos autoensamblados se ha llevado a cabo en una amplia variedad de aleaciones semiconductoras. Uno de

los casos más estudiados a nivel mundial es el de puntos cuánticos autoensamblados de InAs en un sustrato de GaAs. Tales estructuras crecen con las más variadas morfologías, dependiendo de las condiciones de crecimiento tales como: temperatura de crecimiento, velocidad de deposición, presión, parámetros de red de los materiales, etc.

De la mano con la fabricación de tales estructuras casi cero dimensionales ha tenido lugar la realización de un importante número de estudios teóricos realizados para sistemas de pocas partículas. La importancia de estos estudios radica en poder comprender los efectos que tiene el confinamiento cuántico impuesto por la estructura sobre las propiedades opto-electrónicas de los diferentes sistemas de portadores de carga. Para el caso particular de un electrón confinado en un QD, existe a la fecha un gran volumen de trabajos donde se analizan sus propiedades opto-electrónicas en presencia de campos externos, pero vale la pena destacar que son muy pocos los trabajos donde se haya incluido anisotropía estructural en dirección acimutal. Entre los primeros trabajos que incluyeron anisotropía en los QDs se encuentra el realizado por Madhav y Chakraborty en 1994 [6], en donde consideraron un potencial de confinamiento parabólico anisotrópico. Wojs y colaboradores, en 1996 [7], estudiaron la estructura electrónica de puntos cuánticos autoensamblados con forma de lentes en función del tamaño del punto, la altura del potencial de confinamiento y el campo magnético externo. Un caso muy interesante de punto cuántico que exhibe anisotropía estructural es el que tiene forma de estadio (del inglés *Stadium-shaped QD*) como el estudiado por Ji y Berggren [8], para el cual encontraron que en presencia de campos magnéticos altos los estados convergen a estados degenerados de Landau como los de un punto circular, mientras que en campos bajos hay cruces y anti-cruces de niveles.

Cuando se busca modelar teóricamente con más fidelidad las morfologías reales que presentan los puntos cuánticos autoensamblados, la solución de la ecuación de Schrödinger se hace más compleja y en muy pocos casos es separable analíticamente, por lo tanto se debe recurrir a métodos numéricos para resolverla. Esaki y colaboradores [9], en 1997, calcularon las estructuras electrónicas de uno o pocos electrones confinados en QDs circulares, elípticos y de forma triangular, por medio de la diagonalización numérica del Hamiltoniano. Ngo y coinvestigadores [10] en el 2006, estudiaron la dependencia de los espectros electrónicos del tamaño y la forma del punto cuántico, las formas consideradas fueron: cubica, cilíndrica, piramidal, cónica y de lente; y las variaciones de tamaño: volumétrica, ancho de la base y de altura.

Una de las características más particulares de los puntos cuánticos autoensamblados en el modo de crecimiento de Stranski - Krastanov es que su altura es mucho menor que las dimensiones de su base, esto permite utilizar la aproximación adiabática (AA) [11], y con ella se reduce la dimensionalidad del problema de tres a dos o una dimensión, dependiendo del caso dado. En el grupo de investigación FICOMACO (Física computacional de la materia condensada) de la Universidad Industrial de Santander se han estudiado problemas de diferentes nanoestructuras haciendo uso de esta aproximación. Particularmente para QDs autoensamblados se han realizado trabajos en donde se calcula el espectro energético de diferentes portadores confinados en su interior [12], y para el caso específico de un solo electrón en puntos cuánticos, se han trabajado diferentes morfologías de acuerdo con las estructuras geométricas que más se acercan a la forma exhibida por ellos: disco, lente, pirámide y anillo, en presencia tanto de campos eléctricos [13], como de magnéticos [14].

Dado que las morfologías de punto cuántico estudiadas en su mayoría presentan un grado alto de simetría, la motivación de la presente tesis es construir teóricamente una estructura con confinamiento axialmente no simétrico, modelada mediante variaciones en la altura tanto en dirección

radial como acimutal, con el fin de analizar el efecto que tiene la presencia de anisotropía estructural acimutal sobre el espectro energético de un electrón confinado en su interior y en presencia de un campo magnético externo aplicado en la dirección del crecimiento.



1 Fundamentos Teóricos Generales

Los puntos cuánticos (QD, del inglés *Quantum Dot*) son estructuras con tamaño nanométrico en sus tres dimensiones, los cuales confinan en su interior portadores de carga, como electrones o huecos. Los movimientos de tales partículas, desde el punto de vista corpuscular, están restringidos por las dimensiones del punto y son del mismo orden que las longitudes de las ondas de De Broglie asociadas con su comportamiento ondulatorio. Como resultado, el espectro energético que muestran dichos sistemas es discreto, de la misma manera que en los átomos, y por tal razón los QDs son conocidos como "átomos artificiales". En el presente capítulo se pretenden introducir los conceptos y aproximaciones teóricas necesarias para el desarrollo de este trabajo. Inicialmente se explica cómo tiene lugar el proceso de formación de puntos cuánticos autoensamblados, luego se da una introducción al problema de un electrón confinado en el interior de un QD en presencia de campo magnético, continuando con una sección donde se aborda la aproximación de masa efectiva, y por último se expone la aproximación adiabática o de Born-Oppenheimer para el caso de nanoestructuras.

1.1. Puntos cuánticos autoensamblados

En la actualidad uno de los métodos más utilizados para la formación de puntos cuánticos es el autoensamblaje por medio del método de epitaxia de haces moleculares en el modo de crecimiento de Stransky-Krastanov (S-K). Tal método consiste en la propulsión de los elementos constituyentes del material a crecer, en forma de haces moleculares, hacia un substrato cristalino sobre el cual se formará la película epitaxial en crecimiento. La obtención de puntos cuánticos autoensamblados mediante el modo de crecimiento de Stransky-Krastanov (S-K) se basa en la relajación de la energía elástica producida por la diferencia en las constantes de red del material a depositar y el substrato. Los cristales de InAs y GaAs poseen diferentes constantes de red, 6.05\AA y 5.65\AA , respectivamente, lo cual conduce a un desacople de redes de aproximadamente el 7%. En las etapas iniciales del depósito de InAs, éste crece acoplado a la red cristalina del substrato GaAs. A esta primera capa que cubre toda la superficie del substrato se le conoce como capa de mojado. Sin embargo, los esfuerzos debidos al desajuste de los parámetros de red provocan la deformación elástica del InAs acumulando energía elástica conforme avanza el crecimiento. A esta etapa del crecimiento se le denomina régimen pseudomórfico. Con el aumento del volumen de InAs depositado, la energía elástica se va acumulando. Esta situación persiste hasta alcanzar un determinado espesor, deno-

minado espesor crítico, para el que la energía acumulada se libera mediante la formación espontánea (o autoensamble) de nano-islas tridimensionales de InAs [5] (Figura 1.1).

Una característica que llama la atención de los QDs autoensamblados es que su tamaño y forma se puede variar de acuerdo al material con el que se forma el punto y a las condiciones de crecimiento del mismo, lo que permite la obtención de diferentes espectros energéticos, y por ende diferentes propiedades eléctricas y ópticas, tales como fuerza oscilador, polarizabilidad, espectros de absorción y fotoluminiscencia, entre otras. Un proceso que permite proporcionar un confinamiento más marcado es el recubrimiento de las nano-islas con capas del material del sustrato, pero esto puede generar fuertes cambios en la morfología de los QDs. Por medio de técnicas de microscopía como: microscopía de fuerza atómica (AFM, del inglés *Atomic Force Microscopy*), microscopía de efecto túnel (STM, *Scanning Tunneling Microscopy*), entre otros; ha sido posible visualizar la morfología de distintos puntos cuánticos. Generalmente, los QDs sepultados son menos altos que las nano-islas sin recubrir, la figura 1.2 presenta un ejemplo de puntos cuánticos de InAs que crecieron a una temperatura de 500 °C y fueron cubiertos con su sustrato GaAs a 460 °C.

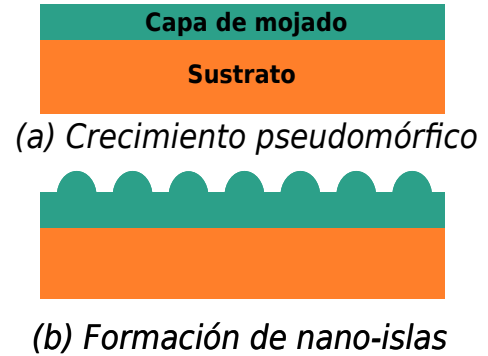


Figura 1.1: (a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico. (b) Posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.

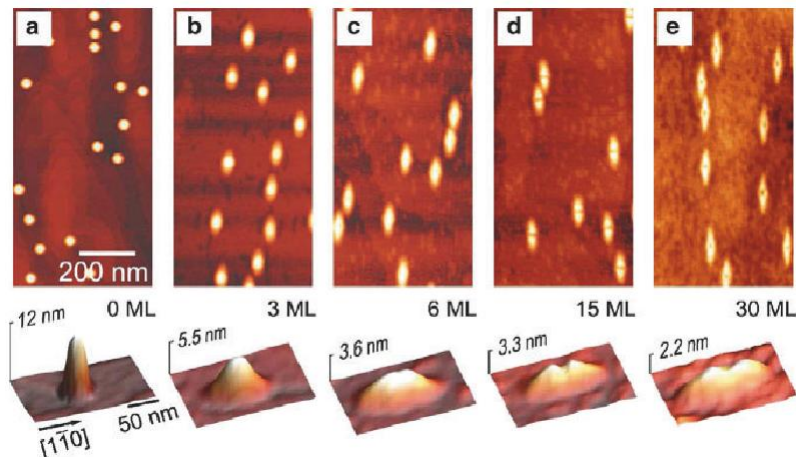


Figura 1.2: Secuencia de figuras de AFM que muestran la evolución de la morfología superficial después del cubrimiento de los QDs de InAs con la cantidad indicada de GaAs a $T_s = 460$ °C. Figura tomada de [1]

1.2. Electrón confinado en un punto cuántico en presencia de campo magnético

Los campos magnéticos alteran el espectro energético de los átomos, y se esperaba que influyeran sobre sus análogos artificiales de una forma similar. Cuando se aplica un campo magnético externo a un átomo, sus líneas espectrales se desdoblán en varios componentes. Este fenómeno fue observado por primera vez por Pieter Zeeman en 1896, y en honor a él se conoce como efecto Zeeman. El estudio teórico de un átomo de Hidrogeno en un campo magnético constante, por ejemplo, evidencia la aparición de términos en el Hamiltoniano que corresponden a diamagnetismo y paramagnetismo, y al resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente se encuentra que los niveles energéticos se desplazan con respecto a la solución sin campo. La naturaleza de tal desplazamiento depende críticamente de la fuerza del campo externo en comparación con el interno que da lugar el acoplamiento spin-órbita [11].

El problema de un solo electrón en un QD circular, confinado por un potencial parabólico en presencia de un campo magnético externo fue resuelto en 1928 por Fock y luego por Darwin[15]. Es interesante notar que el mismo problema (pero para potencial de confinamiento cero) fue estudiado dos años después del trabajo de Fock por Landau conduciendo al termino de Niveles de Landau [16]. Para este mismo potencial parabólico P. A. Maksym y Tapash Chakraborty en 1990 [17] presentaron los espectros energéticos de uno y dos electrones en el interior de un punto cuántico, sin embargo cuando el potencial de confinamiento es cuadrático, las energías de excitación óptica de sistemas de muchos cuerpos son las mismas que para las de un solo electrón, haciendo a los efectos de la interacción difíciles de observar directamente.

1.3. Aproximación de masa efectiva

En el estado sólido, la energía de los electrones que constituyen el material no toma la forma de niveles bien definidos como en los átomos aislados, en su lugar se constituyen anchas bandas de energías permitidas, debido a que el número de orbitales de valencia es grande y la diferencia de energía entre cada uno muy pequeña. Algunos intervalos de energía no contienen orbitales, independiente del número de átomos agregados, generando así una separación entre las bandas por intervalos de energía prohibidas para los electrones. Los electrones ocupan primero las bandas de menor energía, la última banda llena se conoce banda de valencia y la primera cuyos estados no están ocupados recibe el nombre de banda de conducción (Figura 1.3).

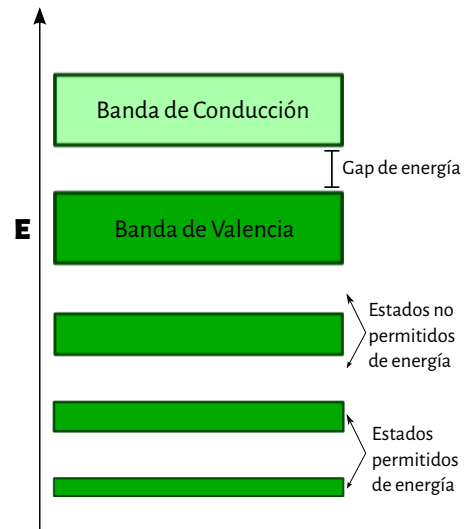


Figura 1.3: Esquema de la estructura de bandas de los semiconductores.

Si se desea entender el comportamiento de un electrón libre dentro de un sólido, es necesario entender que ya no estaría sometido al potencial Coulombiano de su respectivo "átomo padre", sino al combinado de toda la red, por ello si se está interesado en conocer sus niveles energéticos se debe resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente a ese potencial de todos los átomos combinados, lo cual es un problema muy difícil de solucionar. Una de las maneras de acercarse a este dilema es teniendo en cuenta que, cerca a los extremos de las bandas es posible aproximar la energía de los electrones como una función con dependencia cuadrática respecto al vector de onda k a través de la expresión:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.1)$$

Donde m^* es la masa efectiva del electrón. Diferenciando ambos lados con respecto a k ,

$$\frac{k}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{dE}{dk} \quad (1.2)$$

y diferenciando por segunda vez:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad (1.3)$$

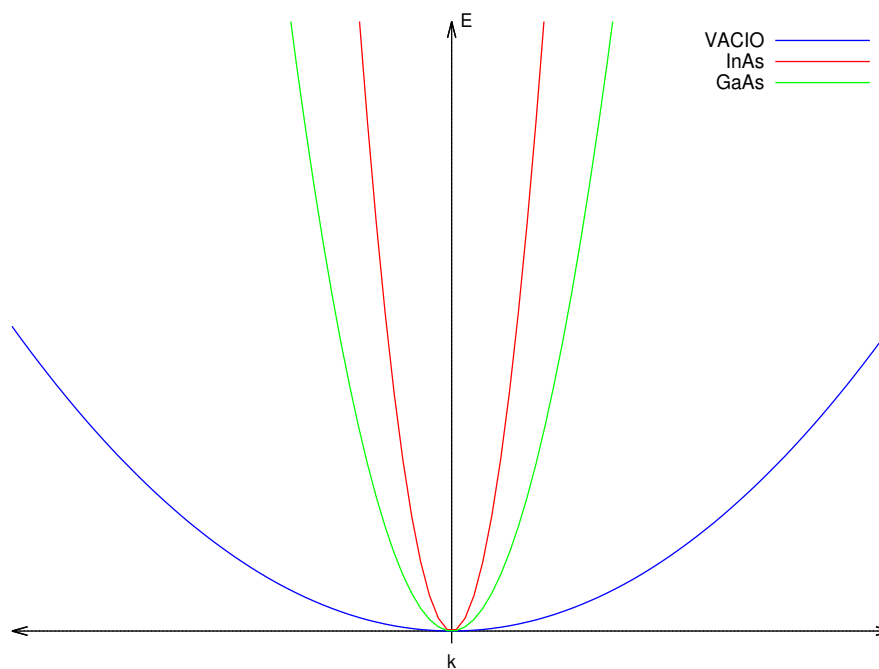


Figura 1.4: Curvas de energía en función del vector de onda para un electrón en GaAs, InAs y en el vacío

La masa efectiva del electrón esta inversamente relacionada con la curvatura del diagrama $E(k)$ (Fi-

gura 1.4), y se puede simplificar la estructura de bandas empleando esta masa en el Hamiltoniano que describe al electrón, condensando en ella todo los efectos del potencial de la red. Además, es una cantidad que se usa para simplificar la estructura de bandas mediante la construcción de una analogía con el comportamiento de una partícula libre en el vacío con esa masa. En este trabajo no se desea profundizar en la estructura de bandas de los semiconductores que componen el sistema, es por esto que se emplea esta aproximación. El QD se considera de InAs, inmerso en un mar de GaAs, los cuales poseen masas efectivas de $0,022m_e$ y $0,067m_e$, respectivamente [18].

1.4. Aproximación adiabática

Se podría decir que un proceso adiabático es aquel en el que las condiciones externas de un sistema cambian gradualmente. Posee dos tiempos característicos: T_i , el tiempo interno, que representa el movimiento del sistema que se analiza, y T_e , el tiempo externo, sobre el cual los parámetros del sistema cambian apreciablemente; y cumple con que $T_e \gg T_i$. Esta diferencia notable en los tiempos permite analizar el problema manteniendo constantes los parámetros externos, y solo al final de los cálculos permitirles variar lentamente. Esta es la idea básica empleada en el análisis de la molécula ionizada de Hidrogeno (H_2^+), pues primero se considera que los núcleos están en reposo, a una distancia R , y se resuelve únicamente el movimiento del electrón. Una vez que se ha encontrado la energía del estado base del sistema en función de R , se localiza la separación de equilibrio y de la curvatura de la gráfica de energía como función de R/a (a : el radio de Bohr), se obtiene la frecuencia de vibración de los núcleos [11]. En física molecular esta técnica (comenzar con los núcleos en reposo, calcular las funciones de onda electrónicas, y usar estas últimas para obtener información acerca de las posiciones de los núcleos y su movimiento relativamente lento) es conocida como **Aproximación de Bohr-Oppenheimer**.

Debido a las características topológicas exhibidas por los puntos cuánticos autoensamblados, para los cuales su altura es mucho menor que las dimensiones de su base, se hace posible emplear la aproximación adiabática en el análisis del movimiento de los portadores confinados en su interior. Esto debido a que el movimiento de los portadores en la dirección de crecimiento de la estructura, donde hay gran confinamiento cuántico, se daría con una velocidad mucho más grande que la que tendría su movimiento en la dirección transversal, cuyo confinamiento es menor.

En este trabajo se estudia un solo electrón confinado en un punto cuántico descrito por coordenadas cilíndricas, la función de onda se puede expresar, de acuerdo con la aproximación adiabática, como el producto de dos funciones:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = f_z(\rho, z) \phi(\rho, \varphi) \quad (1.4)$$

las cuales describen los movimientos desacoplados, primero en la dirección z para diferentes posiciones radiales, y luego en el plano para las direcciones ρ y φ .

2 Modelo Teórico

En este trabajo se estudia el espectro energético de un electrón confinado en un punto cuántico autoensamblado de InAs/GaAs, que exhibe anisotropía estructural y que adicionalmente, se encuentra en presencia de un campo magnético externo constante en la dirección de crecimiento. En el presente capítulo se describe el modelo teórico del sistema y se presenta el formalismo matemático usado para resolverlo. Primero se plantea el modelo matemático del confinamiento estructural que impone el QD sobre el electrón, luego se analiza la solución para el caso del QD con simetría axial, y por último se plantea la solución para el QD que exhibe anisotropía estructural mediante el método de Galerkin.

2.1. Modelo del confinamiento estructural del QD

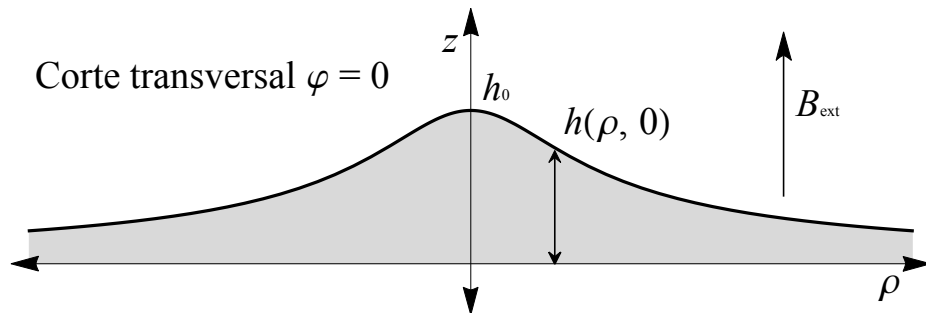


Figura 2.1: Corte transversal del punto cuántico, aquí el valor de h varía de acuerdo a la función (2.1) para $\varphi = 0$.

La morfología estructural del QD será modelada matemáticamente mediante la siguiente función en coordenadas cilíndricas:

$$h(\rho, \varphi) = \frac{h_0}{\sqrt{1 + \left(\frac{\rho}{R}\right)^2 + \alpha [1 - \cos(n\varphi)]}} \quad (2.1)$$

Aquí h define la altura del punto en función de la coordenada radial y el ángulo acimutal. La anisotropía estructural estará incluida en el término cosenoidal y mediante los parámetros α y n será posible modular tanto su amplitud como su periodicidad. En la figura 2.1 se presenta un corte transversal del modelo del QD en mención, donde el ángulo acimutal se ha dejado como un parámetro fijo $\varphi = 0$. La figura 2.2 presenta el modelo tridimensional del QD para tres valores diferentes del parámetro n , para $\alpha = 0,5$.

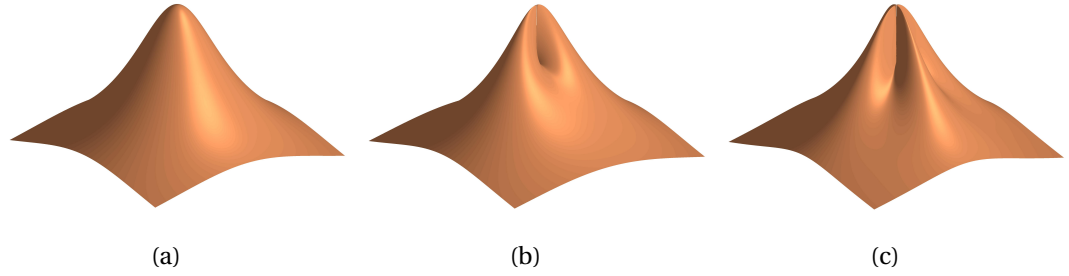


Figura 2.2: Ilustraciones del modelo de punto cuántico para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$

Dado que el interés particular de este trabajo es estudiar el efecto de anisotropía del confinamiento estructural en dirección acimutal sobre el espectro energético del sistema, sin tener en cuenta demasiados detalles sobre la estructura de bandas de los materiales involucrados, entonces resulta conveniente hacer uso de la aproximación de masa efectiva (Sección 1.3). En la siguiente tabla se relacionan los parámetros de los materiales de la estructura a estudiar dentro del marco de dicha aproximación:

	InAs	GaAs
Constante de red $a[nm]$	0.6058	0.5658
Densidad de masa $d[Mgm^{-3}]$	5.67	5.318
Masa relativa de electrón $\frac{m_e^*}{m_e}$	0.022	0.067
Constante dieléctrica estática (permitividad relativa)	15.1	13.2

Tabla 2.1: Parámetros de los materiales, extraídos de [2]

2.2. Punto cuántico axialmente simétrico

Con el objeto de aplicar el método de Galerkin [19] al problema del QD anisotrópico se ha tomado como punto de partida el problema de un electrón confinado en el interior de un punto cuántico axialmente simétrico cuya altura esta dada por la siguiente ecuación en coordenadas cilíndricas:

$$h(\rho) = \frac{h_0}{\sqrt{1 + \left(\frac{\rho}{R}\right)^2}} \quad (2.2)$$

En este caso la altura máxima del QD se obtiene para $\rho = 0$ y es igual a $h(0) = h_0$, y R es un parámetro que nos dice que para un valor de $\rho = R$ la altura del QD ha decrecido hasta $h(R) = h_0/\sqrt{2}$.

El Hamiltoniano que describe al electrón confinado en el interior del QD isotrópico en presencia de un campo magnético en el marco de la aproximación de masa efectiva, es:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{p} - e\vec{A} \right]^2 + V(\rho, z) \quad (2.3)$$

El potencial de confinamiento $V(\rho, z)$, el cual es inducido por la discontinuidad existente entre la banda de conducción de los materiales, está ligado con la función altura $h(\rho)$ que modela la morfología del punto. En nuestro caso se considera un potencial de confinamiento estructural de barrera infinita, esto es:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0; & 0 < z < h(\rho) \\ \infty; & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.4)$$

Al hacer uso del Gauge de Coulomb $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$ para el caso de un campo magnético uniforme dirigido en la dirección de crecimiento y expresar el operador momento $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ en coordenadas cilíndricas, tenemos entonces que el Hamiltoniano toma la forma:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(\rho, z) + \frac{i\hbar e}{2m^*} B \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2}{8m^*} \rho^2 B^2 \quad (2.5)$$

Debido a que en este trabajo se obtienen ecuaciones que luego serán sometidas a cálculos numéricos se hace necesario realizar un proceso de adimensionalización en las unidades tanto de longitud como de energía. La nueva unidad de longitud será ahora el radio de Bohr efectivo a_0^* , mientras que para la energía tendremos como unidad el Rydberg efectivo Ry^* . En estos términos tenemos entonces un Hamiltoniano adimensional:

$$H = - \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(\rho, z) + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 \quad (2.6)$$

Donde el término $\gamma = \frac{e\hbar B}{2m^* Ry^*}$ se considera como la unidad para la intensidad del campo magnético.

Para resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente a este Hamiltoniano (2.6) se hace uso de la aproximación adiabática (Sección 1.4). En primer lugar se congela el movimiento en las direcciones ρ y φ , luego las variaciones a lo largo de estas coordenadas se hacen cero, generando un

Hamiltoniano solo para la dirección z , en el cual la coordenada radial se toma como parámetro. En este sentido, las funciones de onda para este Hamiltoniano en z satisfacen entonces la siguiente ecuación de onda:

$$-\frac{\partial^2 f_z(\rho, z)}{\partial z^2} + V(\rho, z) = E_z(\rho) f_z(\rho, z) \quad (2.7)$$

Como el potencial de confinamiento es infinito por fuera del punto cuántico y cero en su interior, este problema corresponde con el problema de un pozo cuántico de barrera infinita y ancho $h(\rho)$. De esta manera las funciones de onda y los niveles energéticos vienen dados por:

$$f_{n_z}(\rho, z) = \sqrt{\frac{2}{h(\rho)}} \sin \frac{n_z \pi z}{h(\rho)} \quad (2.8a)$$

$$E_z^{(n_z)}(\rho) = \frac{n_z^2 \pi^2}{h(\rho)^2} \quad (2.8b)$$

Dado que nuestro interés está enfocado en los estados correspondientes a los niveles energéticos más bajos, tomaremos solo el estado base para el movimiento en dirección z , esto es $n_z = 1$, lo cual se traduce en la siguiente función de onda:

$$f_1(\rho, z) = \sqrt{\frac{2}{h(\rho)}} \sin \frac{\pi z}{h(\rho)} \quad (2.9a)$$

y su nivel de energía correspondiente:

$$E_z^{(1)}(\rho) = \frac{\pi^2}{h_0^2} + \frac{\pi^2 \rho^2}{h_0^2 R^2} \quad (2.9b)$$

Ahora reemplazando este valor de energía para el movimiento en dirección z en el Hamiltoniano completo (2.6) se obtiene un Hamiltoniano bidimensional para el movimiento en el plano de crecimiento que tiene la siguiente forma:

$$H = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(\frac{\pi^2}{h_0^2 R^2} + \frac{\gamma^2}{4} \right) \rho^2 + \frac{\pi^2}{h_0^2} \quad (2.10)$$

Dada la simetría axial de la estructura tenemos que la función de onda para el movimiento planar se puede expresar como $\phi(\rho, \varphi) = R(\rho) e^{im\varphi}$, donde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, lo cual conduce a la siguiente ecuación diferencial para la parte radial:

$$-\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} + \left(\lambda^2 \rho^2 + \frac{m^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = k^2 R(\rho) \quad (2.11)$$

Donde $k^2 = E_{\rho,\varphi} + m\gamma - \frac{\pi^2}{h_0^2}$ y $\lambda^2 = \frac{\pi^2}{h_0^2 R^2} + \frac{\gamma^2}{4}$. Igualando a cero, y realizando la sustitución $R(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\frac{1}{2}\rho^2} F(\rho)$, se llega a:

$$\frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2|m|+1}{\rho} - 2\lambda\rho \right) \frac{dF(\rho)}{d\rho} - [2\lambda(|m|+1) - k^2] F(\rho) = 0 \quad (2.12)$$

Por último, al reemplazar la variable ρ por $t = \lambda\rho^2$, $\rho^2 = t/\lambda$, se obtiene una ecuación diferencial de Kummer:

$$t \frac{d^2 F}{dt^2} + [(|m|+1) - t] \frac{dF}{dt} - \frac{1}{2} \left[(|m|+1) - \frac{k^2}{4\lambda} \right] F = 0 \quad (2.13)$$

Cuya solución regular en $t = 0$ es la serie confluyente:

$$F(t) = {}_1F_1(a, |m|+1, t) \quad (2.14)$$

Donde $a = \frac{1}{2} (|m|+1) - \frac{k^2}{4\lambda}$. Para grandes valores de t , esta función diverge de la misma manera que e^t , impidiendo de esta manera la normalización. Si, y solo si: $a = -n_\rho$ con $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$, entonces la serie confluyente se convierte en polinomial y la función de onda puede ser normalizada. Por lo tanto se tienen las soluciones:

$$\phi_{n_\rho, m}(\rho, \varphi) = C_{n_\rho, |m|} \rho^{|m|} e^{-\frac{1}{2}\rho^2} {}_1F_1(-n_\rho, |m|+1, \lambda\rho^2) e^{im\varphi} \quad (2.15a)$$

$$E = \sqrt{\frac{4\pi^2}{h_0^2 R^2} + \gamma^2 (|m|+2n_\rho+1) - m\gamma + \frac{\pi^2}{h_0^2}}, \quad (2.15b)$$

$$n_\rho = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Donde n_ρ y m son los números cuánticos radial y acimutal, respectivamente.

La función $\phi_{n_\rho, m}(\rho, \varphi)$ puede reescribirse en función de las funciones asociadas de Laguerre, teniendo en cuenta que estas últimas están definidas por la función de Kummer como:

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x) = \frac{(n+m)!}{n!m!} {}_1F_1(-n, m+1, x)$$

Entonces reemplazando las funciones asociadas de Laguerre, tomando $x = \lambda\rho^2$, y normalizando la función $\phi_{n_\rho, m}(\rho, \varphi)$, la solución completa viene dada por:

$$\psi_{n_\rho, m, 1}(\rho, \varphi, z) = C_{n_\rho, |m|} \sqrt{\frac{2}{h(\rho)}} \rho^{|m|} e^{-\frac{\lambda}{2} \rho^2} L_{n_\rho}^{|m|}(\lambda \rho^2) e^{im\varphi} \sin \frac{\pi z}{h(\rho)} \quad (2.16)$$

Donde la constante de normalización está dada como: $C_{n_\rho, |m|} = \sqrt{\frac{\lambda^{|m|+1} n_\rho!}{\pi (|m| + n_\rho)!}}$.

2.3. Punto cuántico con anisotropía acimutal

Como las condiciones del problema del punto cuántico anisótropo dado por el perfil (2.1), son las mismas que las del problema axialmente simétrico resuelto anteriormente, se puede emplear el mismo procedimiento de la aproximación adiabática. De esta manera las funciones de onda y energías en la dirección vertical se describen también por la ecuación (2.8a), solo que se emplea la función altura del problema respectivo. Así la energía del estado base del movimiento a lo largo de z es:

$$E_1(\rho) = \frac{\pi^2}{h_0^2} + \frac{\pi^2 \rho^2}{h_0^2 R^2} + \frac{\pi^2 \alpha [1 - \cos(n\varphi)]}{h_0^2} \quad (2.17)$$

Entonces al reemplazar esta energía por los términos de z en el Hamiltoniano adimensional (2.6), se obtiene una ecuación muy similar a (2.10):

$$H = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(\frac{\pi^2}{h_0^2 R^2} + \frac{\gamma^2}{4} \right) \rho^2 + \frac{\pi^2}{h_0^2} + \frac{\pi^2 \alpha [1 - \cos(n\varphi)]}{h_0^2} \quad (2.18)$$

Gracias a su similitud con el Hamiltoniano del problema del punto simétrico, es posible emplear el método de Galerkin. Tal método está basado en el hecho de que el problema que se quiere resolver se puede dividir en dos partes, una de las cuales tiene solución exacta, y este resultado conforma un conjunto completo de estados; y otra que puede considerarse como una perturbación:

$$H = H_0 + V(\varphi) \quad (2.19)$$

En este caso la ecuación (2.18) es el problema completo, (2.10) es H_0 cuyas soluciones vienen dadas por $H_0 |\psi_j\rangle = E_j |\psi_j\rangle$, y la parte desconocida es $V(\varphi) = \frac{\pi^2 \alpha [1 - \cos(n\varphi)]}{h_0^2}$. Las funciones de onda solución de H serian:

$$H |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle \quad (2.20)$$

Pero como se conocen las funciones de onda solución de H_0 , se puede describir cualquier estado del sistema completo $|\Psi_i\rangle$ como combinación lineal de las $|\psi_j\rangle$:

$$|\Psi_i\rangle = \sum_j C_j |\psi_j\rangle \quad (2.21)$$

Escribiendo la ecuación de Schrödinger de H en función de $|\psi_j\rangle$, y multiplicando por $\langle\psi_{j'}|$, se llega a:

$$\sum_j C_j \langle\psi_{j'}| H_0 + V(\varphi) |\psi_j\rangle = E_i \sum_j C_j \langle\psi_{j'}|\psi_j\rangle \quad (2.22)$$

Teniendo en cuenta que $\langle\psi_{j'}|\psi_j\rangle = \delta_{j'j}$, $H_0 \langle\psi_{j'}|\psi_j\rangle = E_j$ y $\langle\psi_{j'}| V(\varphi) |\psi_j\rangle = V(\varphi)_{j'j}$, se llega a la siguiente relación:

$$\sum_j C_j \left[(E_i - E_j) \delta_{j'j} - V(\varphi)_{j'j} \right] = 0, \quad j', j = 1, 2, 3, \dots, k \quad (2.23)$$

La condición de que el anterior sistema de ecuaciones tenga una solución diferente de cero lleva a la siguiente ecuación secular de grado k :

$$\det \left\| C_j \left[(E_i - E_j) \delta_{j'j} - V(\varphi)_{j'j} \right] \right\| = 0, \quad j', j = 1, 2, 3, \dots, k \quad (2.24)$$

Diagonalizando la ecuación secular, se obtiene el j -ésimo nivel de energía y su correspondiente función de onda.

Cada elemento matricial $j'j$ está dado por:

$$V(\varphi)_{j'j} = C_{n_{\rho'}, |m'|} C_{n_{\rho}, |m|} \int_0^{h(\rho)} \frac{2}{h(\rho)} \sin^2 \left(\frac{\pi z}{h(\rho)} \right) dz \quad (2.25)$$

$$* \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(m-m')\varphi} V(\varphi) d\varphi \int_0^{\infty} e^{-\lambda\rho^2} \rho^{|m'|} \rho^{|m|} L_{n_{\rho'}}^{|m'|}(\lambda\rho^2) L_{n_{\rho}}^{|m|}(\lambda\rho^2) \rho d\rho$$

Desarrollando las integrales en las direcciones vertical y acimutal, se obtiene:

$$V(\varphi)_{j'j} = C_{n_{\rho'}, |m'|} C_{n_{\rho}, |m|} \left[\frac{\pi^2 \alpha}{h_0^2} (2\delta_{m,m'} - \delta_{m,m'-n} - \delta_{m,m'+n}) \right] \quad (2.26)$$

$$* \int_0^{\infty} e^{-\lambda\rho^2} \rho^{|m'|} \rho^{|m|} L_{n_{\rho'}}^{|m'|}(\lambda\rho^2) L_{n_{\rho}}^{|m|}(\lambda\rho^2) \rho d\rho$$

La integral de la ecuación 2.26 se calcula numéricamente aplicando una cuadratura de Newton-Cotes y la ecuación secular 2.24 se diagonaliza por medio de la librería LAPACK [20].

3 Resultados y Análisis

Con el objeto de analizar el efecto que tiene la presencia de anisotropía estructural en dirección acimutal en un punto cuántico autoensamblado tridimensional de InAs/GaAs sobre el espectro energético de un electrón confinado en su interior y en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento, se han realizado cálculos de los niveles de energía más bajos en función de la intensidad del campo magnético aplicado, considerando diferentes configuraciones de asimetría axial. También se ha incluido la evolución de los niveles de energía más bajos ante la variación de los parámetros de forma n y α , y el parámetro R relacionado con el radio de la estructura.

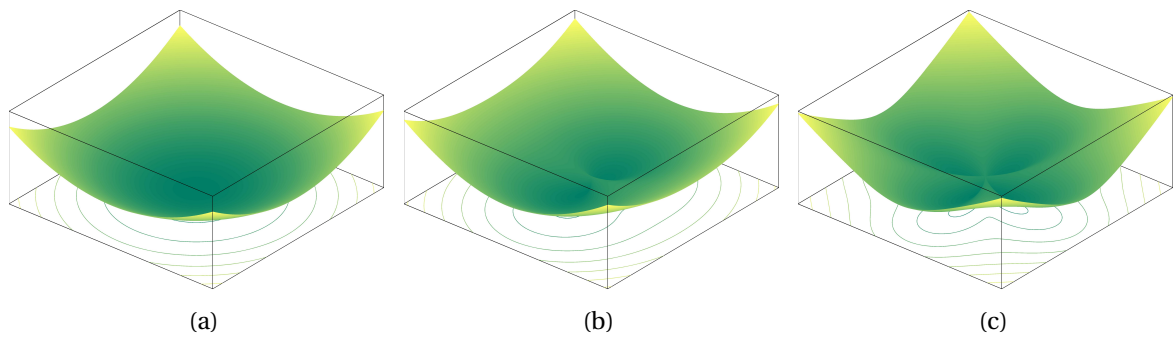


Figura 3.1: Representación del potencial de confinamiento del punto para diferentes valores del parámetro de forma n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$

En primer lugar se considera el efecto que tiene la presencia de diferentes grados de anisotropía acimutal en el QD sobre su espectro electrónico en ausencia de campos externos. Los resultados que se presentan a continuación corresponden a un punto cuántico de altura $h_0 = 5$ [nm] y parámetro $R = 100$ [nm]. El radio de Bohr efectivo del material del QD (InAs), calculado por medio de sus parámetros (Tabla 2.1) es $a_0^* \approx 36,32$ [nm], y el Rydberg efectivo es $Ry^* \approx 1,3$ [meV]. El potencial de confinamiento del punto, dado por la energía del estado base del movimiento en la dirección vertical, para diferentes valores de n se muestra en la ilustración 3.1. En la figura 3.2 se presenta una comparación entre los niveles energéticos más bajos para un QD con diferentes configuraciones de asimetría axial, esto es para valores diferentes del parámetro n , en ausencia de

Estado	Números cuánticos (n_ρ, m)	Energía $\epsilon_0 \approx 0,69859$ [eV] $\Delta\epsilon \approx 0,02155$ [eV]
Estado base	(0, 0)	ϵ_0
Primer estado excitado	(0, -1) (0, 1)	$\epsilon_0 + \Delta\epsilon$
Segundo estado excitado	(0, -2) (0, 2) (1, 0)	$\epsilon_0 + 2\Delta\epsilon$
Tercer estado excitado	(0, -3) (0, 3) (1, -1) (1, 1)	$\epsilon_0 + 3\Delta\epsilon$
Cuarto estado excitado	(0, -4) (0, 4) (1, -2) (1, 2) (2, 0)	$\epsilon_0 + 4\Delta\epsilon$
Quinto estado excitado	(0, -5) (0, 5) (1, -3) (1, 3) (2, -1) (2, 1)	$\epsilon_0 + 5\Delta\epsilon$
Sexto estado excitado	(0, -6) (0, 6) (1, -4) (1, 4) (2, -2) (2, 2) (3, 0)	$\epsilon_0 + 6\Delta\epsilon$
Séptimo estado excitado	(0, -7) (0, 7) (1, -5) (1, 5) (2, -3) (2, 3) (3, -1) (3, 1)	$\epsilon_0 + 7\Delta\epsilon$

Tabla 3.1: Primeros estados electrónicos para un QD axialmente simétrico ($n = 0$).

campo magnético y para $\alpha = 0,1$. Se observa que para el caso $n = 0$, que constituye un QD axialmente simétrico, los niveles energéticos presentan $(m + 1)$ grados de degeneración y son equidistantes entre sí, lo cual era de esperarse, pues el perfil estructural del QD lleva a un pozo de potencial de tipo oscilador armónico bidimensional para el movimiento en el plano XY . En la sección anterior fue obtenida la expresión que gobierna los niveles energéticos para el caso isotrópico ($n = 0$) de manera analítica haciendo uso de la aproximación adiabática (2.15). En la tabla 3.1 se presentan algunos de los estados más bajos para el caso isotrópico con sus respectivos números cuánticos y valores de energía.

Por otro lado, en la figura 3.2 se puede ver como la ruptura de la simetría axial, esto es cuando el parámetro n toma valores diferentes de cero, lleva a que la degeneración de los niveles se destruya, y a que el patrón equidistante entre estos desaparezca, dado que ya no se tiene un potencial de tipo oscilador armónico circular. Es de anotar que este parámetro n es quien introduce variaciones en la altura del QD al variar la coordenada acimutal, y para nuestro modelo particular (Ecuación (2.1)) dicha variación será periódica, con n máximos y n mínimos al recorrer completamente la estructura, por lo que podríamos decir que n es un parámetro que modula la frecuencia con que varía la altura del QD al recorrerlo en dirección acimutal. Es interesante notar como las diferentes configuraciones estructurales llevan a una completa reconfiguración de la estructura espectral, así por ejemplo para los estados menos energéticos se forman pequeños grupos de n -niveles según sea el parámetro n , de manera similar a como ocurre con las moléculas. En este sentido, puede

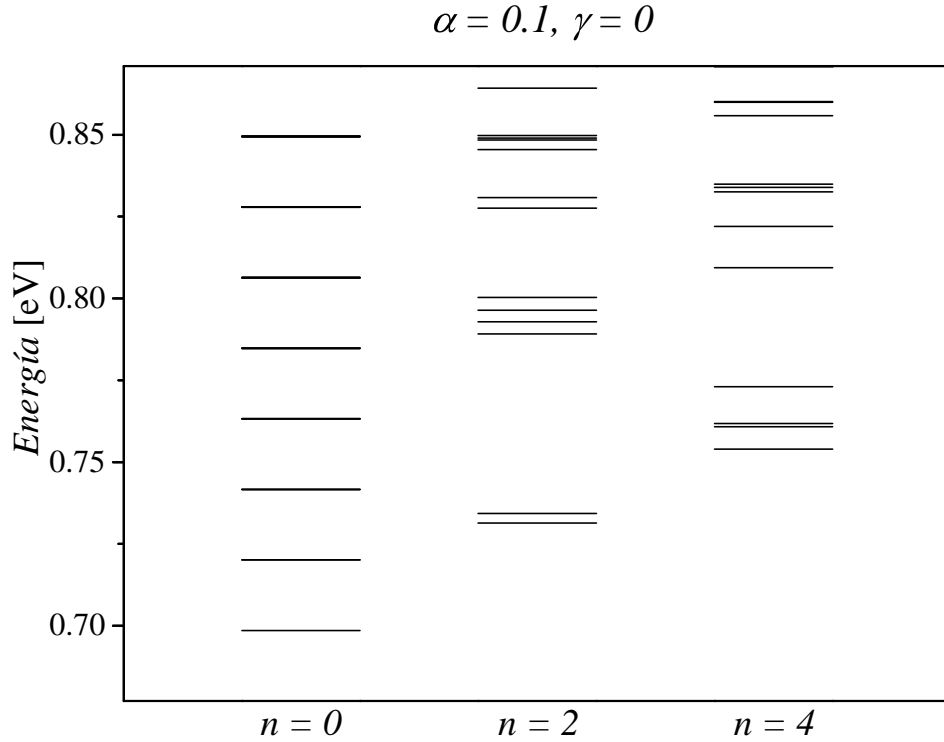


Figura 3.2: Niveles energéticos más bajos para un electrón en un QD con diferentes valores del parámetro n y en ausencia de campo magnético.

concluirse que la presencia de esta anisotropía acimutal puede llevar a la formación de estados moleculares dentro de un único QD. Esta característica se debe a la existencia de algunas regiones prominentes y de algunos valles dentro del QD cuando se incluye la anisotropía acimutal, lo cual llevará naturalmente, desde el punto de vista energético, a tener regiones que actúen como verdaderos pozos de potencial (zonas prominentes) y regiones que sean barreras (valles) para el electrón. Por lo tanto un QD con $n = 2$ ofrecerá dos focos idénticos de atracción para el electrón (2 mínimos de potencial), similar a lo que ocurre en una molécula natural H_2^+ , en la cual el electrón es compartido entre los dos protones y se forman parejas de estados con carácter enlazante y anti-enlazante. En términos generales podemos decir entonces que un QD con n regiones prominentes mostrará entonces un comportamiento análogo al de n -átomos acoplados que comparten un único electrón, como es el caso para $n = 4$ donde se tiene una estructura cuyo análogo atómico podría ser una molécula ionizada de H_4^{+3} . Es importante aclarar que aun dada la similitud existente entre los sistemas moleculares naturales y nuestro sistema artificial vale la pena destacar que existen notables diferencias que deben guardarse, como es el caso del tipo de potencial de confinamiento, ya que para el primer caso es un potencial eléctrico Coulombiano, mientras para el segundo es un potencial de confinamiento estructural. Por otro lado nuestro sistema es un sistema rígido, mientras para el caso molecular, los protones tienen la libertad de vibrar y rotar, además es importante tener en cuenta la notable diferencia en los órdenes de magnitud de sus dimensiones (2-3 órdenes de magnitud). Por otro lado la figura 3.2 también muestra como la energía del estado base se incrementa al aumentar el parámetro de forma n , lo cual muestra que el incremento del número de pliegues en el QD lleva a un mayor grado de confinamiento para el portador de carga.

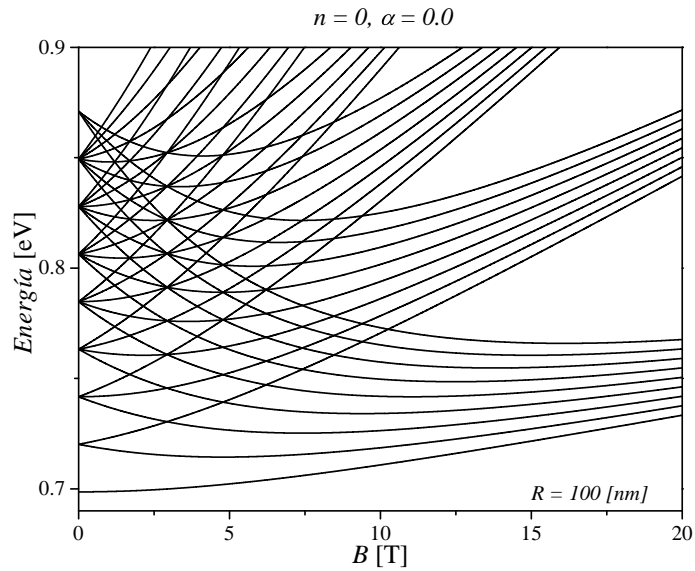


Figura 3.3: Primeros niveles energéticos para un QD axialmente simétrico ($n = 0$) en función del campo magnético.

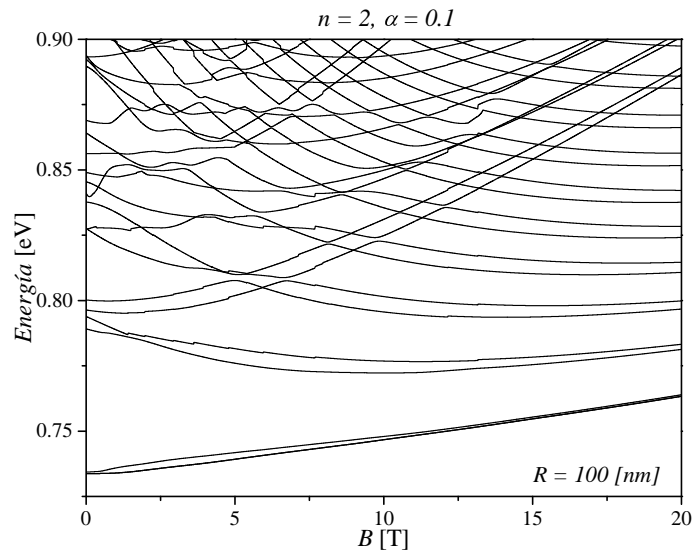


Figura 3.4: Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 2$ y $\alpha = 0,1$.

Los 60 niveles energéticos más bajos para el QD axialmente simétrico en función de la intensidad del campo magnético son mostrados en la figura 3.3. Vale la pena destacar que este espectro presenta la misma forma que el obtenido por Fock y Darwin [15] para el caso de un electrón confinado por un potencial parabólico bidimensional y bajo un campo magnético externo. Este nivel de concordancia, a pesar de que nuestro modelo es tridimensional, se debe básicamente al hecho de que la dependencia particular que tiene la altura del QD respecto a la distancia radial ρ , una vez se aplica la aproximación adiabática para desacoplar el movimiento del electrón en dirección

z, lleva a un potencial parabólico en el plano de la estructura (Sección 2.2). Los niveles de energía de nuestro sistema en función de la intensidad de campo magnético muestran los siguientes comportamientos al límite: cuando el confinamiento magnético es comparable con el confinamiento estructural, esto es para campos bajos, entonces hay una hibridación de los niveles de Landau con los niveles que surgen del confinamiento espacial. Por otro lado, a medida que se incrementa el campo magnético entonces se ve como la estructura espectral adquiere una configuración tipo niveles de Landau, lo cual evidencia la existencia de una transición gradual de una cuantización espacial a una magnética.

Con el ánimo de estudiar los efectos que producirá la existencia de anisotropía acimutal sobre los niveles de energía más bajos en presencia de un campo magnético externo, se presentan a continuación los gráficos de energía en función de la intensidad de campo magnético para diferentes valores de los parámetros n y α . En la figura 3.4 se muestra el caso para $n = 2$ y $\alpha = 0,1$ caso para el cual la estructura presenta una simetría C_2 . Este grafico revela la aparición de parejas de niveles muy cercanos entre si debido a la existencia de un pozo doble y simétrico de potencial, similar a lo que ocurre en una molécula natural H_2^+ , como ya se mencionó al analizar la figura 3.2. Es de resaltar que a pesar de que el grado de anisotropía es pequeño, esto es, las variaciones en la altura del QD son del 5% aproximadamente para $\alpha = 0,1$, al comparar estas curvas con las obtenidas para el caso simétrico (Figura 3.3) para valores bajos de campo magnético, se observan notables diferencias, como es el caso de la aparición de anticruces o repulsión entre niveles, lo cual se puede traducir como la eliminación de la degeneración entre niveles debida a la ruptura de la simetría circular del QD. Puede también mencionarse el hecho de que los cambios más notables en el espectro se observan para el caso en el que el confinamiento magnético es menor o apenas comparable con el confinamiento estructural, lo cual implicará un mayor efecto de la anisotropía estructural sobre los diferentes estados electrónicos. Por otro lado, para valores altos de campo magnético se observa, con menos claridad que para el caso isotrópico, la tendencia de los niveles de energía hacia los niveles de Landau, lo cual es de esperarse dado que en este caso la presencia de anisotropía destruye la configuración parabólica del potencial de confinamiento.

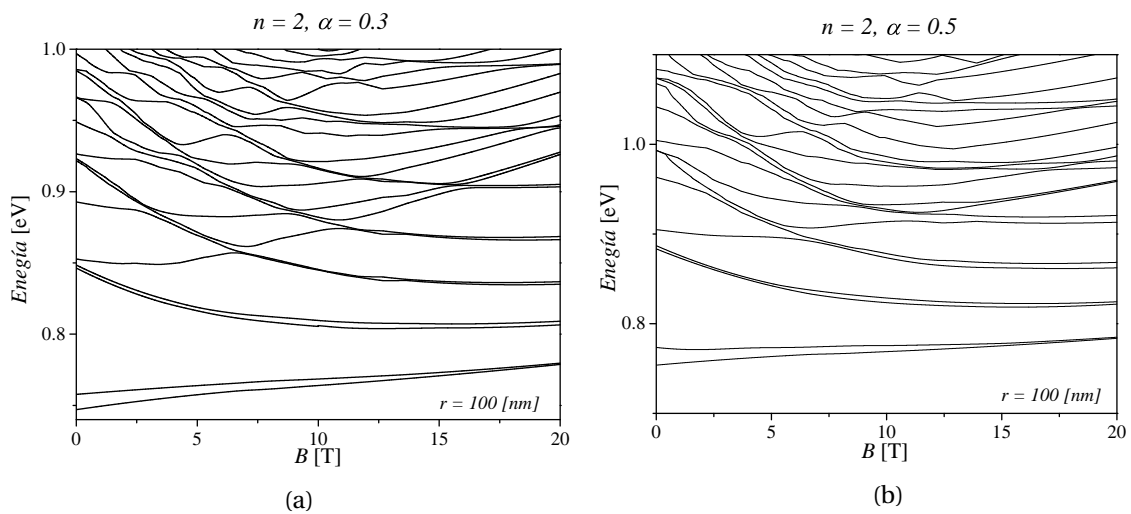


Figura 3.5: Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 2$. (a) $\alpha = 0,3$. (b) $\alpha = 0,5$.

En las figuras 3.5a y 3.5b se muestra el comportamiento de la energía en función de la intensidad de campo magnético, manteniendo fijo el parámetro que modula la frecuencia con la cual varía la altura del QD ($n = 2$), para dos valores diferentes del parámetro que modula la amplitud de dichas variaciones de altura en dirección acimutal, esto es $\alpha = 0,3$ y $\alpha = 0,5$, respectivamente. En estos dos gráficos salta a la vista el hecho de que entre mayor sea el valor del parámetro α mayor será el número de anti-cruces que se presenten, consecuencia de que a mayor grado de anisotropía en el QD trae como consecuencia un predominio del confinamiento estructural sobre el magnético. También se puede destacar el hecho de que los niveles más bajos se hacen más llanos, es decir menos sensibles a las variaciones del campo magnético como consecuencia de la imposibilidad que tiene el electrón de realizar una rotación acimutal completa. Esto último puede entenderse, según el método de Galerkin, como la necesidad de una mayor mezcla de los estados puros, es decir los correspondientes al QD simétrico que tenían la rotación acimutal como uno de sus grados de libertad, para configurar los nuevos estados correspondientes al QD anisótropo, en los cuales la rotación acimutal se ve reducida a una vibración. Por otro lado cuando la anisotropía del QD es más marcada, es decir cuando α se incrementa, entonces se forman parejas de líneas bien definidas, las cuales tienden a superponerse, lo cual es consecuencia del incremento en la profundidad de los pozos del potencial de confinamiento estructural. Estos emparejamientos manifiestan un acoplamiento débil entre las dos regiones prominentes del QD.

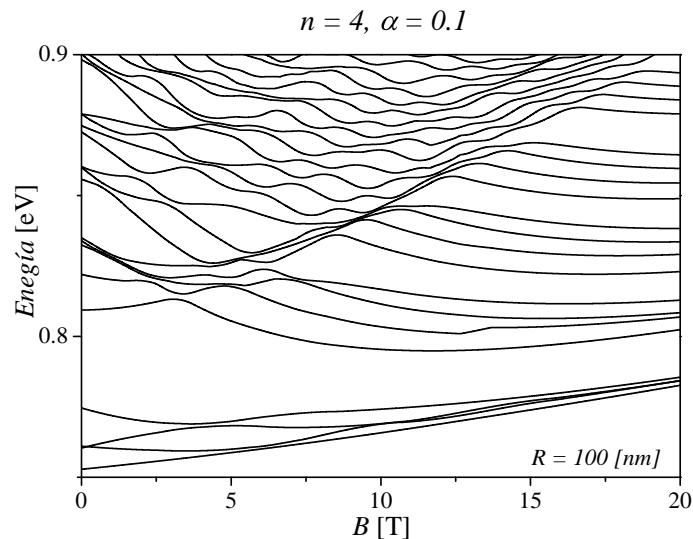


Figura 3.6: Primeros niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético para un QD anisótropo con $n = 4$ y $\alpha = 0,1$.

En la figura 3.6 se muestran los niveles de energía más bajos en función de la intensidad de campo magnético para un QD con parámetros $n = 4$ y $\alpha = 0,1$. Este gráfico revela la aparición de grupos de 4 de niveles muy cercanos entre sí, como si fueran bandas de energía poco densas, resultado que era de esperarse ya que la estructura presenta una simetría rotacional C_4 . En este caso la existencia de 4 pozos de potencial idénticos dispuestos simétricamente alrededor del eje acimutal llevaría a pensar en esta estructura como en una molécula artificial de 4 centros de atracción entre los cuales se comparte un único electrón. Vale la pena destacar que aunque esta estructura presente una mayor complejidad morfológica que la correspondiente a $n = 2$, para valores altos de campo magnético aún se pueden apreciar los niveles de Landau.

A continuación se aborda el análisis de los niveles de energía más bajos en función del parámetro radial R , para las 3 configuraciones estructurales presentadas anteriormente, en ausencia de campo magnético ($B = 0$), para una altura $h_0 = 5$ [nm] y fijando el parámetro α en 0,1. Los resultados se presentan en las figuras 3.7a, 3.7b y 3.7c. Las tres gráficas demuestran un decaimiento de la energía con el aumento de la dimensión radial del punto debido a la reducción del confinamiento estructural. Para el caso del punto cuántico simétrico ($n = 0$) todos los niveles se encuentran degenerados de acuerdo con la tabla 3.1 y se observa cómo se mantienen equidistantes entre si para cualquier valor de R . Por otro lado, cuando el parámetro n toma valores diferentes de cero, esto es 2 y 4, se rompe la simetría circular y el confinamiento estructural provoca un desdoblamiento en los niveles, la aparición de cruces entre niveles y la formación de una estructura energética no equidistante. A medida que n aumenta el espectro adquiere valores de energías más altos y el decaimiento de la energía no es tan uniforme como en el caso simétrico.

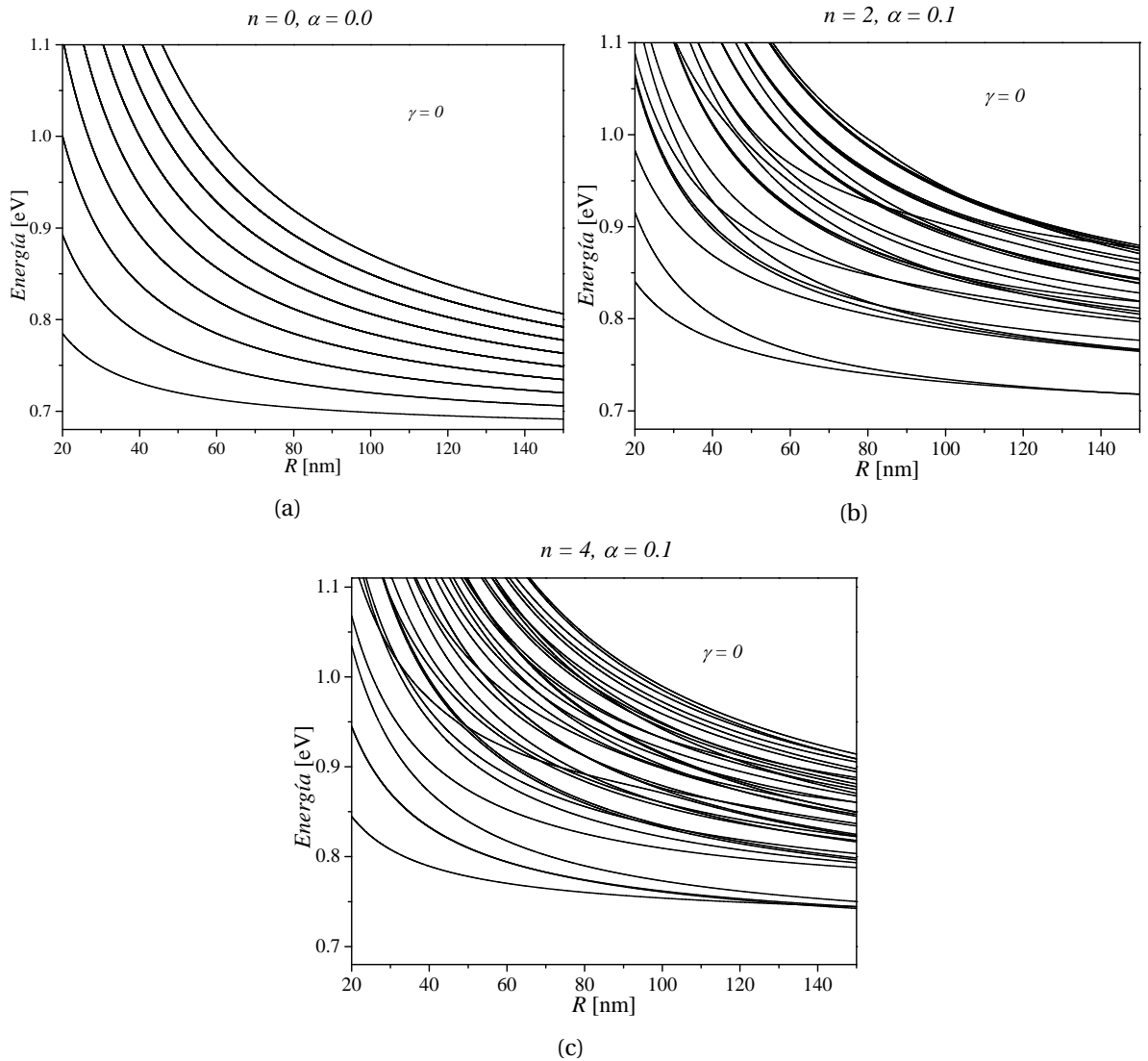


Figura 3.7: Niveles de energía más bajos como función del parámetro radial R , en ausencia de campo magnético para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 0$ (b) $n = 2$ (c) $n = 4$.

Por último, se presenta la evolución de los niveles energéticos más bajos al variar el parámetro de forma α para $n = 2$ y 4 , en ausencia de campo magnético y manteniendo la altura y el parámetro radial en los mismos valores establecidos inicialmente, esto es $h_0 = 5$ [nm] y $R = 100$ [nm]. Los resultados se exponen en las gráficas 8a y 8b. En los tres casos se observa como cuando $\alpha = 0$ existe un degeneramiento en los niveles y se evidencia como un desdoblamiento de los mismos tiene lugar al incrementar el parámetro α .

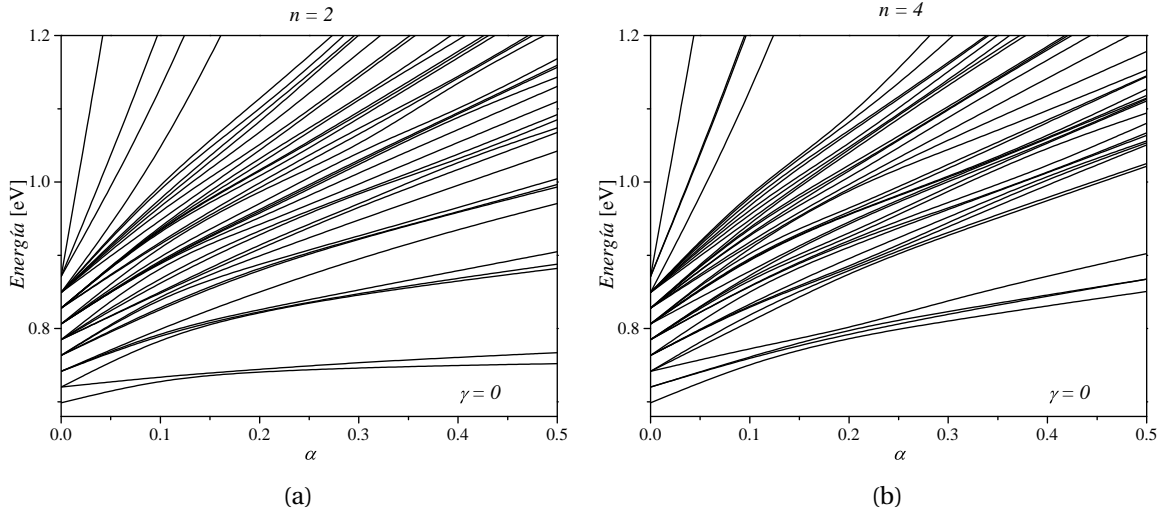


Figura 3.8: Primeros niveles energéticos, en ausencia de campo magnético, en función del parámetro α para diferentes valores del parámetro n . (a) $n = 2$ (b) $n = 4$.

Todos los niveles exhiben un comportamiento monótonamente creciente y casi lineal para las dos configuraciones estructurales, lo cual confirma el hecho de que al incrementarse el parámetro α se incrementa el grado de confinamiento estructural. Es interesante ver como las dos gráficas muestran una mayor densidad de niveles de energía en la vecindad de $\alpha = 0,15$ y se observa también en esta misma región una reducción notable en la pendiente con la cual crecen los niveles. Este comportamiento puede tener su origen en el acople cuántico que existe entre los diferentes pozos de potencial que genera la anisotropía estructural, ya que para valores pequeños de α se tienen pozos de potencial poco profundos y ancho considerable, mientras para valores grandes de α los pozos se hacen muy profundos respecto de su ancho. En este sentido puede entonces hablarse de una estructura que presenta un régimen molecular, es decir una estructura en la cual existe un fuerte acople cuántico o una estructura compuesta de dos regiones cuánticamente aisladas entre sí.



Conclusiones

Habiendo finalizado el presente trabajo de investigación se pueden establecer las siguientes conclusiones:

- Empleando la aproximación adiabática se logró encontrar una solución completamente analítica a un problema de un electrón confinado en un punto cuántico lenticular tridimensional que presentaba simetría axial y que se encontraba bajo el efecto de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. Tomando como base la anterior solución se hizo uso del método de Galerkin para calcular los primeros niveles energéticos de un electrón en el interior de un QD que exhibía anisotropía acimutal en distinto grado. La característica más atractiva del método empleado es la posibilidad de estudiar modelos de puntos cuánticos con diferentes defectos estructurales a partir de un modelo estructural exacto.
- Se encontró que para los casos de anisotropía estudiados (simetrías rotacionales C2 y C4) se rompe el degeneramiento de los niveles energéticos y aparecen anti-cruces o repulsión entre ellos en las regiones de campo magnético bajo, debido a la ruptura de la simetría rotacional. Por otro lado, para valores altos de campo magnético se observa, con menos claridad que para el modelo estructural axialmente simétrico, la tendencia de los niveles de energía hacia los niveles de Landau.
- Al estudiar la dependencia de los niveles energéticos del tamaño de la estructura en ausencia de campo magnético, se encontró que a medida que la dimensión de la base del punto aumenta la energía decae, pero al aumentar la irregularidad morfológica el espectro adquiere valores de energías más altos y el decaimiento de la energía no es tan uniforme como en el caso isotrópico.
- Nuestros resultados revelan que la existencia de cierto grado de anisotropía en un punto cuántico puede favorecer la aparición de estados moleculares, similares a los observados en sistemas de QDs acoplados. Esta característica se debe a la existencia de algunas regiones prominentes y de algunos valles dentro del QD cuando se incluye la anisotropía acimutal, que actúan, desde el punto de vista energético, como pozos y barreras de potencial para el electrón. El caso de simetría rotacional C2 ofrece dos focos idénticos de atracción para

el electrón (2 mínimos de potencial), similar a lo que ocurre en una molécula natural H_2^+ , mientras que la estructura C4 podría tener como análogo atómico a una molécula ionizada de H_4^{+3} .



Bibliografía

- [1] P. Michler, *Single Semiconductor Quantum Dots*. NanoScience and Technology, Springer, 2009.
- [2] J. H. Davies, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*. Cambridge University Press, 1998.
- [3] C. Poole and F. Owens, *Introduction to Nanotechnology*. A John Wiley & Sons, Inc., publication, John Wiley & Sons, 2003.
- [4] M. Henini, *Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics*. Elsevier Science, 2011.
- [5] M. López López and V. H. Méndez García, “Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores,” *Cinvestav*, 2008.
- [6] A. V. Madhav and T. Chakraborty, “Electronic properties of anisotropic quantum dots in a magnetic field,” *Phys. Rev. B*, vol. 49, pp. 8163–8168, Mar 1994.
- [7] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, and L. Jacak, “Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 5604–5608, Aug 1996.
- [8] Z.-L. Ji and K.-F. Berggren, “Transition from chaotic to regular behavior of electrons in a stadium-shaped quantum dot in a perpendicular magnetic field,” *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 1745–1750, Jul 1995.
- [9] T. Ezaki, N. Mori, and C. Hamaguchi, “Electronic structures in circular, elliptic, and triangular quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 56, pp. 6428–6431, Sep 1997.
- [10] C. Y. Ngo, S. F. Yoon, W. J. Fan, and S. J. Chua, “Effects of size and shape on electronic states of quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 245331, Dec 2006.
- [11] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Custom Library, Pearson, 2013.
- [12] L. F. García Russi, *Aproximación adiabática para sistemas de dos partículas en puntos cuánticos autoensamblados*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander, 2007.
- [13] J. C. Piña Velásquez, “Efecto de campo eléctrico sobre el espectro electrónico de puntos cuánticos autoensamblados,” 2005.

- [14] F. A. Quiñónez Granados, “Efecto del campo magnético sobre el espectro de un electrón en puntos cuánticos auto-ensamblados,” 2005.
- [15] T. Chakraborty, *Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms*. Elsevier Science, 1999.
- [16] L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics, Elsevier Science, 1981.
- [17] P. A. Maksym and T. Chakraborty, “Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 108–111, Jul 1990.
- [18] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. Wiley, 2011.
- [19] V. Thomée, *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Springer series in computational mathematics, Springer, 2010.
- [20] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammerling, A. McKenney, *et al.*, *LAPACK Users’ Guide: Third Edition*. Software, Environments, and Tools, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.
- [21] G. Arfken and H. Weber, *Mathematical Methods For Physicists International Student Edition*. Elsevier Science, 2005.
- [22] R. Ashoori, “Electrons in artificial atoms,” *Nature*, vol. 379, pp. 413–419, 1996.
- [23] L. Bo, Z. Guang-cai, D. Jian-hua, and Z. Hong-jun, “Eigenvalues and eigenfunctions of a stadium-shaped quantum dot subjected to a perpendicular magnetic field,” *Chinese Physics Letters*, vol. 15, no. 9, p. 628, 1998.
- [24] M. C. Cha and M. H. Chung, “Single-electron energy levels of a parallel double-quantum dot,” 2002.
- [25] M. A. Cusack, P. R. Briddon, and M. Jaros, “Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. R2300–R2303, Jul 1996.
- [26] L. Esaki and R. Tsu, “Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 14, pp. 61–65, Jan 1970.
- [27] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*. Classics in Mathematics, Springer Berlin Heidelberg, 1994.
- [28] W. Gutiérrez Niño, “Espectro energético de d^0 y d^- en sistemas casi-unidimensionales,” Master’s thesis, Universidad Industrial de Santander, 2007.
- [29] W. Gutiérrez Niño, *Estados ligados de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander, 2011.
- [30] A. Jeffrey and D. Zwillinger, *Table of Integrals, Series, and Products*. Table of Integrals, Series, and Products Series, Elsevier Science, 2007.
- [31] L. P. Kouwenhoven, T. Oosterkamp, M. Danoesastro, M. Eto, D. Austing, T. Honda, and S. Tarucha, “Excitation spectra of circular, few-electron quantum dots,” *Science*, vol. 278, no. 5344, pp. 1788–1792, 1997.

- [32] A. Kumar, S. E. Laux, and F. Stern, "Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field," *Phys. Rev. B*, vol. 42, pp. 5166–5175, Sep 1990.
- [33] J. Kumar, S. Kapoor, S. K. Gupta, and P. K. Sen, "Theoretical investigation of the effect of asymmetry on optical anisotropy and electronic structure of Stranski-Krastanov quantum dots," *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 115326, Sep 2006.
- [34] C. S. Lent, "Edge states in a circular quantum dot," *Physical Review B*, vol. 43, no. 5, p. 4179, 1991.
- [35] Y. Li, O. Voskoboynikov, C. Lee, and S. Sze, "Computer simulation of electron energy levels for different shape InAs/GaAs semiconductor quantum dots," *Computer Physics Communications*, vol. 141, no. 1, pp. 66–72, 2001.
- [36] Y. Tokura, S. Sasaki, D. Austing, and S. Tarucha, "Excitation spectra and exchange interactions in circular and elliptical quantum dots," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 298, no. 1, pp. 260–266, 2001.
- [37] Y. V. Vorobiev, T. Torchynska, and P. Horley, "Effect of aspect ratio on energy of optical transitions in a pyramid-shaped quantum dot," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 51, pp. 42–47, 2013.
- [38] A. J. Williamson, L. W. Wang, and A. Zunger, "Theoretical interpretation of the experimental electronic structure of lens-shaped self-assembled InAs/GaAs quantum dots," *Phys. Rev. B*, vol. 62, pp. 12963–12977, Nov 2000.
- [39] P. Boonpeng, W. Jevasuwan, S. Suraprapapich, S. Ratanathamaphan, and S. Panyakeow, "Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application," *Microelectronic Engineering*, vol. 86, no. 4, pp. 853–856, 2009.