

**EFFECTO DE CAMPO MAGNÉTICO SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE
DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS**

OSCAR LEONARDO ACEVEDO PABÓN

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2006**

**EFFECTO DE CAMPO MAGNÉTICO SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE
DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS**

OSCAR LEONARDO ACEVEDO PABÓN

**Trabajo de grado para optar
al título de Físico**

**Director
Dr. Iliá Davidovich Mikhailov**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2006**

*A mis queridos padres
Nelsy Pabón Díaz
Leonardo Acevedo Duarte*

A mi familia

A mis amigos

Por todo el apoyo

Agradecimientos

Agradezco a todos y cada uno que, a su manera, contribuyó a la realización de este trabajo.

Agradezco al Dr. Ilia Mikhaïlov, por haber aceptado ser mi director, por la paciencia y diligencia prestadas durante los tropiezos; y especialmente por compartir su valiosa experiencia.

A los demás profesores del FICOMACO, Dr. Carlos Beltrán Ríos, Dr. Harold Paredes, Dr. Javier Betancur y Msc. Franciscos García; los cuales igualmente compartieron su sabiduría y conocimientos. Gracias por permitirme hacer parte de tan agradable grupo.

A los integrantes y ex-integrantes del grupo más veteranos, Msc. Jairo Marín Cadavid, William Gutiérrez, Juan Carlos Piña y Víctor Basto; cuyos consejos, colaboraciones y hasta su buen humor, constituyeron un aliciente para la elaboración de este proyecto.

A mis compañeros de toda la carrera, Jesús Eduardo Galván y Hamilton Carrillo, con los cuales tuve la suerte de enfrentar esta última etapa del proceso. También a mis otros compañeros del grupo, Carlos Gómez, Fredy Rodríguez, William Amado y John Lozada.

Finalmente doy gracias a todos mis amigos y familiares que me acompañaron durante esta parte de mi vida.

CONTENIDO

	Pág.
LISTA DE FIGURAS.....	vii
RESUMEN.....	ix
INTRODUCCIÓN.....	1
1. MODELO MATEMÁTICO.....	3
1.1 HAMILTONIANO DEL SISTEMA.....	3
1.2 PARÁMETROS DEL MATERIAL.....	4
1.3 GEOMETRÍA DEL PUNTO CUÁNTICO.....	4
2. MARCO TEÓRICO Y METODOLOGÍA.....	7
2.1 JUSTIFICACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO.....	7
2.2 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA.....	10
2.3 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL.....	13
2.4 DENSIDAD DE ESTADOS.....	15
2.5 DENSIDAD DE ESTADOS BASE DE DONADORAS NEUTRAS.....	18
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	20
3.1 EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE UNA D^0 EN UN SAQD CON FORMA DE LENTE.....	20
3.2 EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE UNA D^0 EN UN ANILLO CON BORDES SUAVES.....	25
3.3 COMPARACIÓN ENTRE LENTES, VOLCANES Y ANILLOS CON BORDES SUAVES.....	28
3.4 EFECTO SOBRE DISCOS, PIRÁMIDES Y ANILLOS CON BORDES RECTOS.....	32
4. CONCLUSIONES.....	36
BIBLIOGRAFÍA.....	37

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Fig. 1. Imágenes tridimensionales de SAQDs con diferentes perfiles: a) Lente, b) Pirámide, b') Pirámide truncada, c) Anillo con bordes suaves, d) Disco y e) Anillo con bordes rectos. Las dimensiones están representadas en las secciones transversales.....	5
Fig. 2. Corte del potencial $V(\rho, z)$ a lo largo del eje z	6
Fig. 3. Ilustración esquemática de confinamiento en diferentes casos que corresponden a QW (2D), QWW (1D) y QD (0D).....	16
Fig. 4. Densidad de estados para sistemas con diferentes grados de confinamiento.....	18
Fig. 5. Ilustración esquemática del efecto de D^0 sobre el espectro energético y la DOS.....	19
Fig. 6. Efecto de campo magnético sobre a) curvas de potencial efectivo y b) parte radial de la función de onda para un electrón desacoplado en un SAQD con forma de lente.....	20
Fig. 7. Mapas de contorno sobre el plano $\rho - z$ que muestran la densidad de probabilidad del electrón desacoplado en un SAQD con forma de lente a) sin y b) con campo magnético. El perfil de la heteroestructura está indicado por una línea gruesa.....	21
Fig. 8. Curvas de energía de enlace en función de la posición radial ξ_ρ y diferentes posiciones verticales ξ_z de una D^0 en una lente a) sin y b) con campo magnético.....	22
Fig. 9. Efecto del campo magnético sobre la DOS de una impureza D^0 en un SAQD con forma de lente.....	23
Fig. 10. Efecto de campo magnético sobre las curvas de energía de enlace $E_b(\xi_\rho)$ de D^0 en una lente estando la impureza a) sobre la capa de sustrato y b) a una altura $\xi_z = 1.6 \text{ nm}$	24
Fig. 11. Dependencia del nivel base E_0 de un electrón desacoplado en una lente como función del campo magnético variando a) radio externo y capa húmeda, y b) altura de SAQD.....	24
Fig. 12. Efecto de campo magnético sobre a) potencial efectivo y b) nivel base para un electrón desacoplado dentro de un SAQD en forma de anillo con bordes suaves. En b) también se analiza la influencia de los parámetros geométricos.....	25
Fig. 13. Mapas de contorno que muestran el tunelamiento hacia el centro de un electrón libre en un SAQD con forma de anillo de bordes suaves debido al campo magnético.....	26

Fig. 14. Efecto de campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_\rho)$ para anillos de bordes suaves con D^0 s ubicadas en a) el plano del sustrato y b) a una altura $\xi_z = 1.6 \text{ nm}$	27
Fig. 15. Curvas de DOS para D^0 s en SAQD en forma de anillo con bordes suaves sometidas a diversas intensidades de campo magnético.....	28
Fig. 16. Representación tridimensional de un SAQD con forma de volcán. En el corte se ilustra el significado del parámetro a	29
Fig. 17. Influencia del campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_\rho)$ para D^0 s sobre el plano del sustrato en SAQDs cuyas formas pasan del anillo con bordes suaves, al volcán y luego a la lente. Los valores de a están en nanómetros.....	30
Fig. 18. DOS para D^0 en SAQDs cuya forma varía del anillo con bordes suaves, luego al volcán y luego a la lente; en ausencia de campo magnético.....	31
Fig. 19. Efecto de un campo magnético de intensidad $\gamma = 3$ sobre las curvas de DOS en la Fig. 18.....	32
Fig. 20. Efecto de campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_\rho)$ de D^0 s ubicadas en el plano de sustrato de un SAQD con forma de a) Disco, b) Pirámide, c) Pirámide truncada y d) Anillo con bordes rectos.....	33
Fig. 21. Efecto de campo magnético sobre la DOS de D^0 s en SAQDs con forma de a) Disco, b) Pirámide, c) Pirámide truncada y d) Anillo con bordes rectos.....	34

TÍTULO: EFECTO DE CAMPO MAGNÉTICO SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS*.

AUTOR: ACEVEDO PABÓN, Oscar Leonardo**.

PALABRAS CLAVE: Punto cuántico auto-ensamblado, densidad de estados de impureza, aproximación adiabática, método de dimensión fractal.

DESCRIPCIÓN: Se analiza el efecto de un campo magnético externo sobre la densidad de estados de donadoras neutras (D^0) distribuidas aleatoriamente dentro de puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQD) de $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con forma de disco, lente, pirámide, anillo y volcán; partiendo de curvas de energía de enlace de D^0 en función de la distancia desde la posición de la impureza al eje de simetría del SAQD y considerando diferentes posiciones verticales de la donadora. Se usa la aproximación adiabática para calcular la energía de estado base del electrón desacoplado. El nivel base del sistema ligado D^0 se halla mediante el método de dimensión fractal. La energía de enlace se define como la diferencia entre la energía de nivel base del sistema libre y la del sistema ligado. Para resolver estos problemas se usan varios métodos numéricos como el barrido trigonométrico y la interpolación por B-splines cúbicas. Se observa una fuerte competencia entre el confinamiento causado por la heteroestructura y el tunelamiento hacia al eje del punto cuántico que es reforzado por el campo magnético. Dentro del análisis de estos efectos, se presentan curvas novedosas no halladas antes en la literatura. Se muestra también que los efectos del campo magnético están estrechamente relacionados con la forma y las dimensiones del SAQD.

* Proyecto de Grado.

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. DIRECTOR: Ilia Davidovich Mikhailov.

TITLE: EFFECT OF MAGNETIC FIELD ON DENSITY OF STATES OF NEUTRAL DONORS IN SELF-ASSEMBLED QUANTUM DOTS^{*}.

AUTHOR: ACEVEDO PABÓN, Oscar Leonardo^{**}.

KEY WORDS: Self-assembled quantum dot, density of impurity states, adiabatic approximation, fractal dimension method.

ABSTRACT: We analyze the effect of an external magnetic field on the density of states of neutral donors (D^0) randomly distributed within $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ Self Assembled Quantum Dots (SAQD) with different shapes, disk, lens, pyramid, ring and volcano; starting from curves of D^0 binding energies as a function of the distance from the impurity position to the symmetry axis of the SAQD, and by considering different vertical positions of the donor. Adiabatic approximation is used in order to compute the ground state energy of the free electron. The ground level of the D^0 coupled system is found by means of fractal dimension method. The binding energy is defined as the difference between the ground level energy of the free system and that of the coupled system. In order to solve these problems, several numerical methods are used, such as trigonometric sweep and cubic B-splines interpolation. We observe a strong competition between confinement caused by heterostructure and tunneling toward the axis which is enhanced by magnetic field. Inside this analysis, we present novel curves not found in literature before. We also show that the magnetic field effects are strongly related to the shape and dimensions of SAQD.

^{*} Proyecto de Grado.

^{**} Facultad de Ciencias. Escuela de Física. DIRECTOR: Ilia Davidovich Mikhailov.

INTRODUCCIÓN

Se espera que en el futuro cercano el campo de las nanoestructuras semiconductoras lidere buena parte de los avances en electrónica y opto-electrónica. Estos sistemas de baja dimensionalidad prometen efectos inusitados, ya que aprovechan la riqueza de los fenómenos mecano-cuánticos presentes sólo a pequeña escala. En las últimas décadas se han creado y perfeccionado métodos de fabricación y manipulación de dispositivos basados en estas estructuras. Por tal razón, ha habido una explosión de trabajos, ya sean teóricos o experimentales, en torno a este tópico [3-12].

Buena parte de las investigaciones sobre las propiedades de nanoestructuras se concentra en el movimiento de los portadores de carga; el cual es alterado notablemente por el confinamiento debido a las restricciones en la movilidad ubicadas en las interfaces semiconductoras. Las interfases actúan como verdaderas barreras de potencial para las partículas. Como consecuencia, surge un conjunto discreto de niveles energéticos correspondientes a un movimiento del portador bastante restringido a la región de confinamiento formada por las barreras.

Con frecuencia, el movimiento de los portadores es perturbado adicionalmente por la presencia de pequeños centros que alteran la simetría traslacional de la red cristalina. Las donadoras neutras D^0 son uno de los ejemplos más típicos de alteraciones someras. Estas son impurezas causadas por la sustitución de un átomo de la red por uno cuya valencia es mayor en una unidad. Esto trae como resultado un electrón desapareado que puede moverse con relativa libertad y que es atraído hacia el núcleo del átomo donador. En las nanoestructuras, las donadoras producen un descenso en los niveles energéticos debido a la atracción electrostática. La diferencia entre la energía inicial del electrón desacoplado con respecto a la del sistema ligado se conoce como energía de enlace.

Otra posible alteración del movimiento electrónico en un sistema semiconductor resulta de la presencia de un campo magnético externo. El efecto del campo magnético sobre la partícula cargada es doble. Por un lado, el campo magnético hace orbitar la partícula alrededor de un eje paralelo al campo. Entre mayor sea la intensidad del campo, menor será el radio de la órbita y mayor será el confinamiento producido por el campo. Este primer efecto es llamado paramagnético, siempre aumenta la energía de la partícula y no depende del sentido del campo magnético. Por otro lado, existe un segundo efecto llamado diamagnético y se debe a la interacción del campo magnético con el momento orbital magnético del electrón; en este caso el corrimiento de la energía es lineal con relación a la intensidad del campo y su signo depende de si el momento angular está orientado paralelo o antiparalelo respecto al vector de campo.

Existe una amplia lista de publicaciones dedicadas al estudio de los efectos de confinamiento sobre el espectro energético de donadoras D^0 inmersas en diferentes tipos de sistemas de baja dimensionalidad tales como pozos cuánticos (QW), puntos cuánticos (QD) rectangulares, esféricos (SQD), entre otros [5]. También se han estudiado casos en los que el espectro de la donadora se encuentra afectado por un campo magnético en un QW, un hilo cuántico (QWW), entre otros [6]. En ocasiones, cuando el sistema es relativamente simple (para posiciones especiales donde la D^0 no rompe la simetría del sistema), las soluciones pueden ser encontradas en una forma analítica. En caso contrario, se requiere el uso de técnicas aproximadas, tales como el método variacional, diferencias o elementos finitos, diagonalización o Monte Carlo.

En los últimas dos décadas, se ha perfeccionado la fabricación de una clase de nanoestructuras conocidas como puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQD). Su formación se basa en el método de crecimiento de Stranski-Krastanov [3-4], el cual deposita sobre una plano o sustrato de un cristal semiconductor un segundo material con constante de red cristalina similar al primero. La diferencia entre constantes de red crea ciertas tensiones sobre las capas del nuevo material que terminan por romper los planos superiores formándose pequeñas ‘gotas’ a lo largo y ancho del sustrato. Después, estas gotas son recubiertas por más sustrato obteniéndose una gran cantidad de puntos cuánticos embebidos en el material. Los SAQD son muy versátiles en cuanto a la gran variedad de formas y otros factores que pueden ser controlados y estudiados durante su crecimiento. Esa gran diversidad llama la atención de los investigadores, quienes ven en estos sistemas un gran potencial para futuras aplicaciones.

Recientemente, se ha desarrollado una metodología de cálculo que permite estudiar las energías de enlace para niveles base en donadoras D^0 [9], incluso en presencia de campo magnético [10]. El método ha demostrado ser compatible con los resultados obtenidos a través de otros procedimientos. Esta técnica primero resuelve el problema sin impureza; luego, interpreta la influencia de la donadora mediante una función envolvente puntualmente simétrica respecto al centro de la impureza para después hacer uso del principio variacional de Schrödinger (Véase [11]). La clave central de esta metodología es que la ecuación variacional es interpretada a través del método de dimensión fractal [7]; el cual considera al sistema como una D^0 imbuida en un espacio distorsionado por el confinamiento (Véase sección 2.3).

De otra parte, la energía de enlace de D^0 depende notablemente de la posición que tenga la impureza dentro de la heteroestructura. Para el caso en que haya muchos sistemas similares (Como ocurre en los SAQD), puede hablarse de una densidad de estados de impureza (DOS) que defina la probabilidad de que alguna D^0 tenga una energía de enlace dentro de un intervalo $[E_b, E_b + \delta E_b]$. Acerca de esta densidad de estados, se han llevado a cabo estudios en sistemas como QW [11] y SQD [8]. Sin embargo, no se conoce hasta el momento un estudio sobre la DOS de una impureza D^0 en SAQDs y mucho menos en presencia de un campo magnético externo. En el presente trabajo se extiende el método de dimensión fractal y las demás técnicas expuestas en las referencias [9] y [10] para analizar el efecto de un campo magnético transversal sobre las densidades de estado base de estos sistemas. Para empezar, en la sección 1 se explicará el modelo matemático empleado. La sección 2 esclarece e introduce aspectos teóricos sobre el modelo y la metodología utilizada. En la sección 3 se presentan y discuten los resultados para que, finalmente, en la sección 4 se establezcan las conclusiones. Se demostrará que las curvas de densidad de estados son el resultado de una intrincada relación entre forma, dimensiones y campo magnético externo; al punto que el estudio de este efecto puede dar pie a técnicas de caracterización de SAQDs así como la modulación de propiedades electrónicas.

1. MODELO MATEMÁTICO

1.1 HAMILTONIANO DEL SISTEMA

Una donadora incorporada a un semiconductor presenta, por un lado, una fuente que inyecta un electrón excesivo en la banda de conducción y, por otro lado, un centro de atracción sobre este electrón. Para el caso de los SAQD, existen dos posibles situaciones para este electrón sobrante. En la primera, resulta un electrón viajero que ha abandonado su fuente y se encuentra atrapado en un SAQD lejos de la donadora. La otra alternativa es que el electrón y la donadora estén ambos atrapados en el mismo SAQD. En el primer caso el espectro energético del electrón es discreto y se define por el potencial de confinamiento estructural; mientras que en el segundo caso el electrón puede considerarse acoplado con un descenso en los niveles energéticos a causa de la atracción de la donadora. Para analizar la diferencia entre electrones libres y electrones acoplados, en el presente trabajo se van a resolver dos ecuaciones de Schrödinger correspondientes a dos Hamiltonianos distintos. El primero corresponde al sistema conformado por un electrón en el SAQD y, adicionalmente, la presencia de un campo magnético homogéneo orientado en la dirección de crecimiento del cristal o dirección transversal. En este caso, y haciendo uso de la aproximación de masa efectiva (Véase sección 2.1), el Hamiltoniano resulta:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\rho, z), \quad (1.1)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, la cual se supondrá igual tanto dentro como fuera de la heteroestructura, $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ el operador de momento lineal, y $\vec{A}$ el vector potencial del campo magnético. La presencia del SAQD se manifiesta mediante el potencial de confinamiento estructural $V(\rho, z)$ el cual es cero dentro de la heteroestructura y V_0 por fuera de ella. El valor de V_0 corresponde a la diferencia en las energías del piso de la banda de conducción entre los dos materiales.

El segundo Hamiltoniano, corresponde al electrón acoplado a la donadora; sólo se diferencia de (1.1) en que se añade un potencial coulombiano de atracción entre la donadora y el electrón. Haciendo uso del Gauge simétrico $\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$, este Hamiltoniano puede escribirse en coordenadas cilíndricas como:

$$\hat{H} = -\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - i\gamma \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + V(\rho, z) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|}. \quad (1.2)$$

De aquí en adelante se hará uso de un sistema de unidades adimensionales. Como unidad de longitud se tomará el *radio de Bohr efectivo* $a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{e^2 m^*}$ (Unidades gaussianas), como unidad de energía el *Rydberg efectivo* $Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^* (a_0^*)^2}$, y como unidad del campo

magnético la energía del primer nivel de Landau $\gamma = \frac{\hbar e}{m^* c (Ry^*)} B$. El vector $\vec{\xi} = \xi_\rho \hat{x} + \xi_z \hat{z}$

representa la posición de la donadora medida desde el centro del SAQD; su orientación axial es irrelevante y por eso se ha optado por el eje x positivo. Tanto en el Hamiltoniano (1.1) como el (1.2) se ha despreciado la diferencia entre los parámetros del material (masa efectiva m^* y constante dieléctrica ε) del punto cuántico y de la matriz en que está sumergido el SAQD.

1.2 PARÁMETROS DEL MATERIAL

En esta tesis se realizan los cálculos para un electrón y una donadora dentro de un SAQD de $In_{0.55}Al_{0.45}As / Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, donde los puntos cuánticos de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ están sumergidos dentro de una matriz de $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ [12]. Los parámetros físicos, a excepción desde luego del salto entre bandas de conducción, se toman del material correspondiente a la región interior del SAQD debido a que el confinamiento hace que el electrón se encuentre fundamentalmente en esta región. Estos parámetros son $\varepsilon = 12.71$ y $m^* = 0.076m_e$, siendo m_e la masa del electrón en el vacío [12]. El salto entre las bandas de conducción del electrón es $V_0 = 172 \text{ meV} \approx 40 Ry^*$ [12].

El radio de Bohr efectivo correspondiente a estos parámetros del material es $a_0^* = 8.86 \text{ nm}$, el Rydberg efectivo es $Ry^* = 6.4 \text{ meV}$ y la unidad de campo magnético es $\gamma = 1 \rightarrow B = 8.4 \text{ T}$. La constante de red de estos cristales es cercana a los 0.6 nm .

1.3 GEOMETRÍA DEL PUNTO CUÁNTICO

Se han realizado muchas investigaciones para visualizar la forma del punto cuántico así como para crear nuevas técnicas para obtener nuevas geometrías. Con este fin, en investigaciones más recientes se han perfeccionado las técnicas de crecimiento auto-ensamblado ("self-organized growth" o método de crecimiento de Stranski-Krastanov) [3-4] cuando el material que forma un punto cuántico se deposita encima de un sustrato con una constante de red un poco diferente. La diferencia entre las constantes de red produce una tensión en las juntas dentro de una región de tamaño limitado, que se acomoda en una capa de ancho de orden 4 nm . Como se encontró experimentalmente, este tipo de heterojuntas llamadas puntos cuánticos auto-ensamblados tensos ("strained self-assembled quantum dots"), crecen por lo general del mismo tamaño y de la misma forma. Utilizando diferentes técnicas, de microscopía electrónica y de fuerza atómica, los investigadores han logrado establecer que los puntos cuánticos auto-ensamblados fabricados mediante el método de crecimiento de Stranski-Krastanov son de diversas morfologías y en la mayoría de los casos tienen forma de discos, lentes, pirámides o pirámides truncadas. También se ha demostrado que los perfiles de los puntos cuánticos se pueden alterar drásticamente, interrumpiendo el proceso de crecimiento de éstos a través del recubrimiento por capas más delgadas (de espesor menor que 3 nm) que la altura del punto cuántico. En la etapa inicial del proceso de recubrimiento, el punto cuántico empieza a crecer en la dirección lateral de tal manera que el material del punto cuántico se redistribuye en una forma anisotrópica, hasta que el proceso de crecimiento se interrumpe. Como consecuencia, los puntos cuánticos se transforman a veces en una especie de anillos estirados con un hueco en forma de cráter en el centro (volcán, véase sección 3.3). La geometría de estos

anillos fue investigada recientemente en los artículos [10,11-13] a través de microscopía de fuerza atómica. En la Fig. 1 se presentan las imágenes de SAQDs con las diferentes formas geométricas posibles.

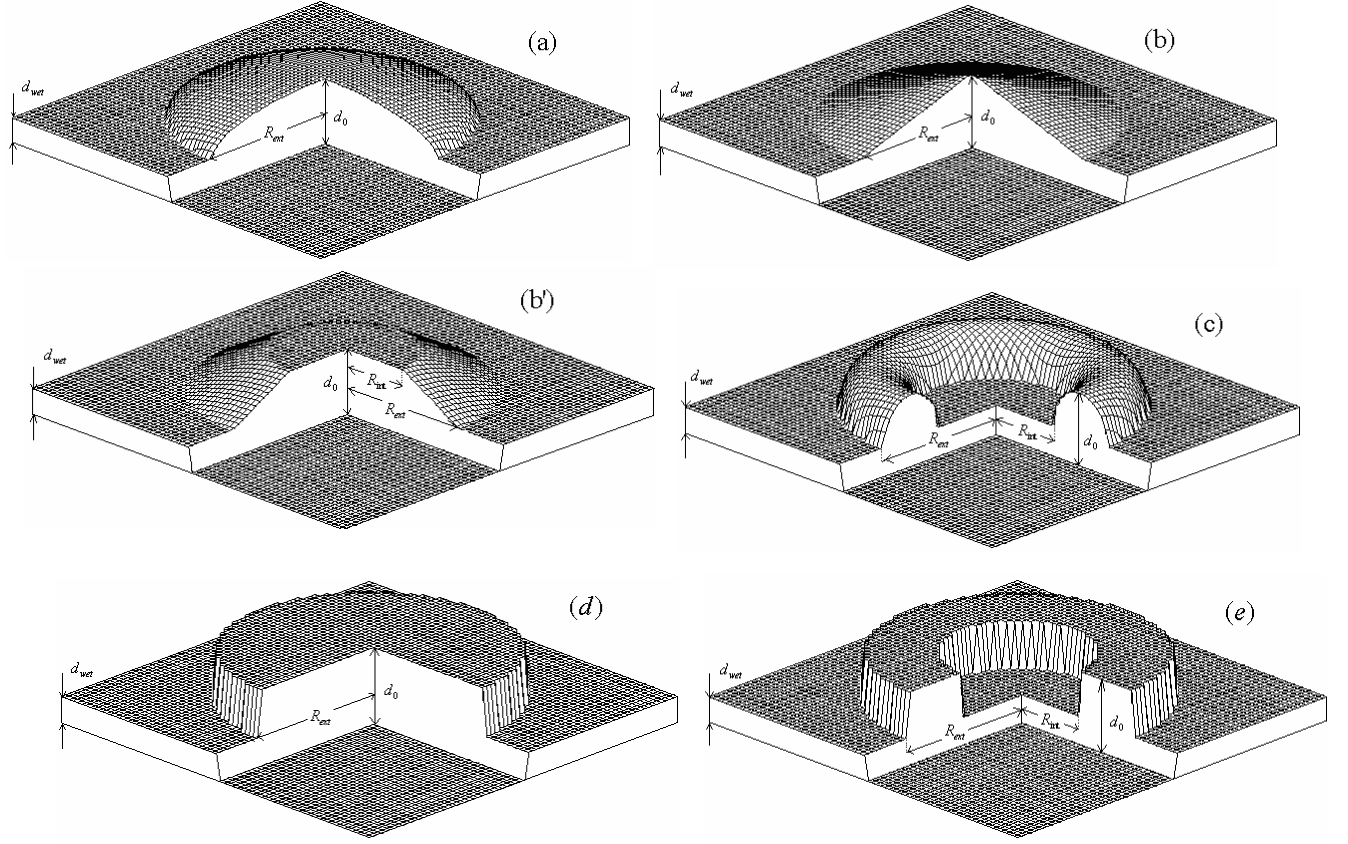


Fig. 1. Imágenes tridimensionales de SAQD con diferentes perfiles: a) Lente, b) Pirámide, b') Pirámide truncada, c) Anillo con bordes suaves, d) Disco y e) Anillo con bordes rectos. Las dimensiones están representadas en las secciones transversales.

Todos los modelos de puntos cuánticos presentados en la Fig.1 tienen simetría axial y por eso sus formas se pueden modelar a través de una función de una variable $z = h(\rho)$ (Se sobreentiende que el eje z va en dirección vertical hacia arriba) con la que se define la altura del SAQD en función de la distancia al eje de simetría. Haciendo una correspondencia entre las nomenclatura por letras de la Fig.1, estos modelos pueden describirse analíticamente mediante las ecuaciones que se dan a continuación:

$$h(\rho) = \begin{cases} (d_0 - d_{wet}) \sqrt{1 - \left(\frac{\rho}{R_{ext}}\right)^2} + d_{wet} & \text{para } \rho \leq R_{ext} \\ d_{wet} & \text{para } \rho > R_{ext} \end{cases} \quad (1.3a)$$

$$h(\rho) = \begin{cases} d_0 & \text{para } \rho < R_{int} \\ (d_0 - d_{wet}) \left[1 - \left(\frac{\rho - R_{int}}{R_{ext} - R_{int}}\right) \right] + d_{wet} & \text{para } R_{int} \leq \rho \leq R_{ext} \\ d_{wet} & \text{para } \rho > R_{ext} \end{cases} \quad (1.3b)$$

$$h(\rho) = \begin{cases} (d_0 - d_{wet}) \sqrt{1 - \left[\frac{2\rho - (R_{ext} + R_{int})}{(R_{ext} - R_{int})} \right]^2} + d_{wet} & \text{para } R_{int} \leq \rho \leq R_{ext} , \\ d_{wet} & \text{para } \rho < R_{int} \cup \rho > R_{ext} \end{cases} \quad (1.3c)$$

$$h(\rho) = \begin{cases} d_0 & \text{para } \rho \leq R_{ext} \\ d_{wet} & \text{para } \rho > R_{ext} \end{cases} , \quad (1.3d)$$

$$h(\rho) = \begin{cases} d_0 & \text{para } R_{int} \leq \rho \leq R_{ext} \\ d_{wet} & \text{para } \rho < R_{int} \cup \rho > R_{ext} \end{cases} . \quad (1.3e)$$

Puede notarse que en el caso de las pirámides existe una posibilidad de truncamiento para cuando $\rho < R_{int}$, a partir del cual la altura se hace constante (Fig. 1b'). Las dimensiones que se usarán con más frecuencia en este trabajo son $d_0 = 4.0 \text{ nm}$, $R_{ext} = 40 \text{ nm}$, y $d_{wet} = 0.8 \text{ nm}$. La altura de la capa húmeda se eligió para que por lo menos fuera igual o mayor que una monocapa del cristal. Nótese además que a lo largo de todo el diámetro lateral del punto se tiene más de un centenar de átomos, mientras que en dirección transversal no alcanza siquiera a haber una decena.

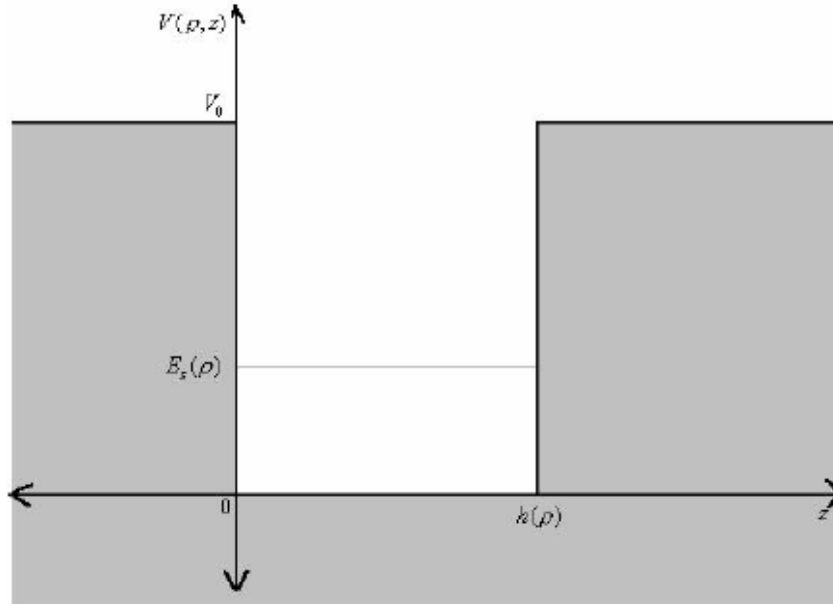


Fig. 2. Corte del potencial $V(\rho, z)$ a lo largo del eje z .

Una vez que se define esta función $h(\rho)$, el potencial de confinamiento se puede escribir como:

$$V(\rho, z) = V_0 (\theta[z - h(\rho)] + \theta[-z]) , \quad (1.4)$$

siendo $\theta(x)$ la función escalón de Heavside. Puede verse que para cualquier corte de punto cuántico en la dirección vertical (a lo largo de eje z) el potencial no es más que un pozo rectangular de ancho $h(\rho)$ con la altura de la barrera V_0 (ver Fig.2).

2. MARCO TEÓRICO Y METODOLOGÍA

2.1 JUSTIFICACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

El problema general de analizar el movimiento de una red cristalina con sus electrones es prácticamente irresoluble en su totalidad. Esto se debe a que el hamiltoniano de tal sistema incluye dentro de sus variables la posición y el momento del gran número de electrones y núcleos que conforman el cristal. Frente a estas limitaciones, se hace necesario hacer una gran serie de aproximaciones para poder obtener resultados útiles con un esfuerzo razonable. En esta sección se hará revisión de estas aproximaciones que tienen como desenlace la formulación de los Hamiltonianos (1.1) y (1.2).

La primera gran aproximación que se lleva a cabo es considerar a los núcleos y a sus electrones internos fuertemente ligados como una única partícula, de tal forma que cada uno de estos puntos de la red cristalina se considera como una coraza iónica cuya carga neta es la del núcleo menos la de sus electrones internos que lo apantallan. Por lo tanto, los únicos electrones que se van a considerar como separados son los *electrones de valencia*. Estos electrones están débilmente ligados a los iones hasta el punto que tienen una movilidad relativamente alta; en contraste, los centros iónicos, que son mucho más masivos, se mueven significativamente más lento y prácticamente están quietos desde el punto de vista del electrón. Este hecho otorga la posibilidad de una segunda aproximación conocida como *aproximación de Born-Oppenheimer*, la cual separa un Hamiltoniano de electrones de valencia que interactúan con una red iónica estática, del Hamiltoniano que considera los posibles desplazamientos de esta red (Interacción entre iones o de red más la interacción fonón-electrón). Este segundo término, como ya se ha indicado, puede despreciarse en el análisis de muchos fenómenos, donde los movimientos electrónicos son los únicos relevantes.

Aún con toda la reducción que se ha hecho, todavía resta un Hamiltoniano que incluye las órbitas de todos los electrones de valencia, lo cual es un número todavía extraordinariamente grande (10^{23} electrones por cm^3). El siguiente gran paso, es suponer que cada electrón de valencia percibe aproximadamente un mismo potencial promedio efectuado por todos los otros electrones, el cual, debido a las simetrías de la red cristalina, se puede suponer periódico. Esta consideración, llamada *aproximación de campo promedio*, reduce el problema al análisis del movimiento de un electrón con función de onda $\Phi(\vec{r})$ sometido a la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}_{1e}\Phi(\vec{r}) = \left(\frac{p^2}{2m_e} + V_{red}(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) = E_{1e}\Phi(\vec{r}), \quad (2.1)$$

donde el potencial periódico $V_{red}(\vec{r})$ condensa la interacción del electrón con el campo electrónico promedio y la red iónica. Según el *teorema de Bloch*, las soluciones de (2.1) pueden escribirse como una función de Bloch $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ donde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ es periódica bajo cualquier traslación a lo largo de un vector de la red cristalina $\vec{R}$, esto es, las funciones de Bloch son funciones propias de un operador de traslación: $\hat{T}_{\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Para probar que en verdad existe un tal conjunto de funciones de Bloch que resuelva la ecuación (2.1) basta notar que, debido a la periodicidad de la red, el hamiltoniano $\hat{H}_{1e}$ conmuta con el

operador $\hat{T}_{\vec{R}}$ y por lo tanto ambos pueden ser diagonalizados simultáneamente. Debido a que existe cierta arbitrariedad en la elección de $\vec{k}$ en cuanto que cualquier vector $\vec{k} + \vec{G}_n$ (con $\vec{G}_n$ un vector de la red recíproca) es también una posible función de Bloch, estas funciones se clasifican más frecuentemente con los dos índices $\Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ donde $\vec{k}$ debe encontrarse dentro de la primera zona de Brillouin (*Esquema en zona reducida*). La dependencia del valor propio $E_{1e}(n, \vec{k})$ es la bien conocida *estructura de bandas electrónica* donde el número n expresa justamente el *índice de la banda*.

Todo lo dicho hasta ahora, vale para el espectro electrónico de un semiconductor volumétrico sin considerar el efecto de ninguna perturbación externa (como un campo magnético) o la presencia de iones distintos (sea una impureza o toda una heteroestructura). Debido a que en este trabajo se deben considerar justamente estas alteraciones respecto al hamiltoniano $\hat{H}_{1e}$, es preciso explicar cómo se incluyen. La primera aproximación que se puede considerar es el potencial coulombiano $U(\vec{r})$ debido a la presencia de la donadora:

$$\hat{H}'_{1e} = \hat{H}_{1e} + U(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_e} + V_{red}(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|}. \quad (2.2)$$

La forma de este potencial, donde el efecto electromagnético de la red cristalina se resume en el apantallamiento hecho por la constante dieléctrica ϵ , se justifica si el movimiento electrónico se desarrolla en una región de un tamaño significativamente mayor al de una celda unitaria. El siguiente paso para resolver (2.2) es el uso de un procedimiento conocido como *aproximación de masa efectiva*, al cual puede llegarse definiendo primero unas funciones llamadas *funciones de Wannier* $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ las cuales están relacionadas con las funciones de Bloch de la siguiente manera:

$$a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = N^{-1/2} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) \quad , \quad (2.3)$$

siendo N el número de celdas unitarias del cristal. Los vectores $\vec{R}_i$ son vectores de traslación del cristal. El hecho de que el cristal sea finito obliga a que se deban imponer unas *condiciones de frontera periódica* (Condiciones de Born-von Kármán) sobre los posibles valores de $\vec{k}$ a tal punto que estos se reducen a un número finito y todos ellos dentro de la primera zona de Brillouin. Por esta razón, para cada valor de n , el conjunto de funciones de Wannier $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ forma un conjunto completo de funciones para una solución del hamiltoniano en (2.2) de tal forma que si se tiene un valor propio E' el vector propio se puede escribir como $\Phi'(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} \psi(\vec{R}_i) a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$. A la función $\psi(\vec{R})$ se le conoce como función envolvente. Si el potencial $U(\vec{r})$ varía muy lentamente a lo largo de la red se puede suponer de cierta manera que $\vec{R}$ varía en forma continua y que $U(\vec{r}) \approx U(\vec{R}) + (\vec{r} - \vec{R}) \cdot \nabla_{\vec{R}} U(\vec{R})$. Dadas

estas suposiciones y aplicando la forma de $\Phi'(\vec{R})$, la ortonormalidad de las funciones de Wannier y de Bloch, y la ecuación (2.3) en la (2.2) se obtiene que

$$\left[E(n, \vec{k}) + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E \psi(\vec{R}); \quad (2.4)$$

en este caso se debe interpretar $\vec{k} = -i\nabla_{\vec{R}}$ debido a que en el límite continuo $\hbar\vec{k}$ y $\vec{R}$ forman pares de variables canónicas conjugadas análogos a $\vec{p}$ y $\vec{r}$.

El electrón sobrante de la donadora es un electrón que está relativamente libre en comparación con los otros electrones de la red; por consiguiente, se puede hacer uso del *modelo de electrones casi libres* y suponer que la energía de este electrón se encuentra algo por encima del piso de la banda de conducción. Si se supone que sobre esa banda hay un punto mínimo en el centro de la primera zona, isotrópico y no degenerado¹; y que la energía no se separa demasiado de la del piso de la banda de conducción, el operador $E(n, -i\nabla_{\vec{R}})$ se puede aproximar a

$$E(c, \vec{k}) \approx E(c, 0) + \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right] k^2 = E_C - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2, \quad (2.5)$$

con $E_C = E(c, 0)$ la energía del piso de la banda de conducción y $m^* \triangleq \frac{\hbar^2}{2 \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right]}$ la masa efectiva de los electrones de conducción del material. La ecuación (2.4) queda entonces:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2 + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = (E' - E_C) \psi(\vec{R}). \quad (2.6)$$

Una vez considerado el efecto de la donadora, la presencia de una heteroestructura puede hacerse mediante lo que se conoce como la *aproximación de la función envolvente* la cual interpreta las heterojunturas como barreras de potencial cuya altura es la diferencia entre los pisos de las bandas de conducción². En el modelo matemático empleado aquí, esto es equivalente a introducir el potencial adicional $V(\rho, z)$.

Resta, finalmente, la inclusión del campo magnético. Si la función envolvente $\psi(\vec{R})$ fuera realmente un orbital electrónico, la presencia del campo magnético podría incluirse cambiando el operador $-i\hbar\nabla_{\vec{R}} = \vec{p}$ por $\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)$. Es posible interpretar la función envolvente como un auténtico orbital en el caso de que el movimiento electrónico sea bastante confinado. Debido a que los campos magnéticos aquí considerados son bastante grandes ($\sim 8.5 \text{ T}$) y el SAQD ofrece una gran barrera de potencial, ese gran confinamiento está asegurado y por tanto dicha interpretación es válida. Se ha llegado entonces a la

¹ Los compuestos considerados en este trabajo cumplen en buen grado estas condiciones, [2,11].

² También habría una diferencia entre las masas efectivas y las constantes dieléctricas pero estas se despreciarán en este trabajo.

ecuación de Schrödinger central en esta investigación, que no es más que la correspondiente al hamiltoniano (1.2):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\rho, z) - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|} \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (2.7)$$

donde se ha cambiado $\vec{R}$ por $\vec{r}$ para enfatizar que Ψ se interpreta como un orbital electrónico. Con esto se justifica también la ecuación del hamiltoniano (2.1), que no es más que (2.7) menos el término coulombiano:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\rho, z) \right] \psi_0(\vec{r}) = E_0 \psi_0(\vec{r}). \quad (2.8)$$

De acuerdo con la que se ha dicho en esta sección, debe recordarse siempre que tanto E como E_0 deben interpretarse como la energía del electrón medida a partir del piso de la banda de conducción del cristal que conforma el interior del SAQD.

El problema primario de este trabajo comenzará en hallar las energías del nivel fundamental para los sistemas descritos mediante las ecuaciones (2.7) y (2.8). La solución de esta última, o de electrón sin donadora, se discutirá en la sección 2.2; mientras que la consideración de la impureza se analizará en la sección 2.3.

2.2 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

A pesar de que la ecuación (2.8) es relativamente simple, todavía no da cabida a una solución analítica debido a que no existe separabilidad entre la componente lateral (paralela al plano de crecimiento del SAQD) y la componente transversal (perpendicular al plano) de la posición del electrón. El acoplamiento de estas dos componentes es introducido por el potencial de confinamiento estructural $V(\rho, z)$, ya que relaciona ambas variables. Sin embargo, existe un método aproximado de solución que separa un movimiento rápido transversal del movimiento relativamente lento en dirección paralela. Este método se conoce como *aproximación adiabática* y se basa en que la altura del SAQD es bastante más pequeña que su diámetro ($d_0 = 0.1R_{ext}$) haciendo que el confinamiento en dirección perpendicular sea mucho mayor y que, por lo tanto, el movimiento transversal dé una contribución a la energía total mucho más relevante. Consecuentemente, en primera aproximación se puede tener en cuenta sólo el potencial de confinamiento y los operadores con derivada en z de la energía cinética:

$$-\frac{\partial^2 f_z(\rho, z)}{\partial z^2} + V(\rho, z) f_z(\rho, z) = E_z(\rho) f_z(\rho, z). \quad (2.9)$$

Como ya se ha visto en la Fig. 2, este problema no es más que el clásico pozo rectangular finito unidimensional. La bien conocida solución analítica para el nivel base de este problema es:

$$f_z(\rho, z) = \begin{cases} A \cos(k_1 b) e^{k_0 z} & \text{para } z < 0 \\ A \cos[k_1(z - b)] & \text{para } 0 \leq z \leq h(\rho), \\ A \cos(k_1 b) e^{-k_0(z - 2b)} & \text{para } z > h(\rho) \end{cases} \quad (2.10)$$

donde $k_1 = \sqrt{V_0 - E_z(\rho)}$, $k_0 = \sqrt{E_z(\rho)}$ y $b = h(\rho)/2$. La constante A es una constante de normalización irrelevante para el caso. El valor base $E_z(\rho)$ resulta siendo la menor raíz real de la ecuación trascendente:

$$k_1 \sin(k_1 b) - k_0 \cos(k_1 b) = 0. \quad (2.11)$$

Cuando ya se tiene esta solución, se puede aproximar la solución total incluyendo una corrección envolvente en $f_\rho(\rho)$ de tal forma que $\psi_0 = f_z(\rho, z) f_\rho(\rho) e^{im\phi}$. El término exponencial expresa la simetría azimutal de $\hat{H}_0$ que hace que para este caso el número cuántico magnético m sea un valor propio junto a la energía. Como se está analizando el nivel base, éste habrá de ser un nivel con momento angular nulo (Nivel s) y por tanto $m = 0$. Si se prosigue con el argumento de la aproximación adiabática, es posible separar la función $f_\rho(\rho)$ y los operadores diferenciales respecto a ρ interpretando la influencia del confinamiento transversal únicamente mediante el potencial $E_z(\rho)$:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{df_\rho}{d\rho} \right) + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 f_\rho(\rho) + E_z(\rho) f_\rho(\rho) = E_0 f_\rho(\rho). \quad (2.12)$$

La ecuación diferencial de segundo orden (2.12) puede resolverse mediante métodos computacionales precisos. Basta notar primero que se tiene una singularidad en $\rho = 0$ la cual se evita únicamente si se supone que la derivada $\left(\frac{df_\rho}{d\rho} \right)_0 = 0$. Además, la linealidad de (2.12) permite, salvo condiciones de normalización, elegir arbitrariamente un valor no nulo de la función en $\rho = 0$, el cual por comodidad se puede hacer $f_\rho(0) = 1$. Con esto ya se tiene un problema de valores iniciales a partir del origen. Toda vez que se elija E_0 , se puede virtualmente conocer computacionalmente la función $f_\rho(\rho)$ para todo ρ . En este trabajo se hace uso de un método numérico conocido como *barrido trigonométrico* que agiliza la solución de la ecuación (2.12) como un problema de valores iniciales. Este método comienza con la sustitución de $f_\rho(\rho)$ en dos funciones $A_\rho(\rho)$ y $\theta_\rho(\rho)$:

$$\begin{aligned} f_\rho(\rho) &= A_\rho(\rho) \cos[\theta_\rho(\rho)] \\ f'_\rho(\rho) &= \frac{df_\rho}{d\rho} = A_\rho(\rho) \sin[\theta_\rho(\rho)] \end{aligned} \quad (2.13)$$

Si se sustituye (2.13) en (2.12) se puede encontrar una ecuación diferencial ordinaria de primer orden respecto a $\theta_\rho(\rho)$:

$$\theta'_\rho = - \left[\sin^2 \theta_\rho + \frac{1}{\rho} \sin \theta_\rho \cos \theta_\rho - \alpha_\rho(\rho) \cos^2 \theta_\rho \right], \quad (2.14)$$

con $\alpha_\rho(\rho) = \gamma^2 \rho^2 / 4 + E_z(\rho) - E_0 = V_{efect}(\rho) - E_0$. Si se aplican las condiciones iniciales de $f_\rho(\rho)$ puede verse que es totalmente compatible poner como condición inicial $\theta_\rho(0) = 0$. En cuanto se solucione (2.14) (Por método de Runge-Kutta) la función $A_\rho(\rho)$ puede hallarse mediante:

$$A_\rho(\rho) = \exp \left\{ \int_0^\rho \sin \theta_\rho \left(\cos \theta_\rho [1 + \alpha_\rho(\bar{\rho})] - \frac{1}{\rho} \sin \theta_\rho \right) d\bar{\rho} \right\}. \quad (2.15)$$

Con esto se completa el cálculo de $f_\rho(\rho)$ hasta cualquier valor ρ_{final} .

Para hallar el valor propio E_0 es preciso tener también una condición en la frontera para un ρ_{final} . Esta condición puede hallarse notando que la función $E_z(\rho)$ se hace constante a partir de $\rho \geq R_{ext}$. Esto es debido a que la dependencia $E_z(\rho)$ se hace a través de la función $h(\rho)$ la cual comienza a hacerse igual a d_{wet} a partir de R_{ext} . Esta situación permite hallar una solución analítica de (2.12) para $\rho \geq R_{ext}$:

$$f_{\rho,ext}(\rho) = c \exp \left[-\frac{1}{4} \gamma \rho^2 \right] U \left[\frac{V_{ext} - E_0}{2\gamma} + \frac{1}{2}, 1; \frac{1}{2} \gamma \rho^2 \right] \quad \text{para } \gamma \neq 0, \quad (2.16a)$$

$$f_{\rho,ext}(\rho) = c K_0 \left[(V_{ext} - E_0)^{1/2} \rho \right] \quad \text{para } \gamma = 0, \quad (2.16b)$$

donde $V_{ext} = E_z(R_{ext})$, $U[a, b; x]$ es la función hipergeométrica confluyente del segundo tipo y $K_0[x]$ es la función de Bessel modificada del segundo tipo de orden 0. La condición en la frontera $\rho_{final} = R_{ext}$ es la continuidad de la derivada logarítmica, la cual otorga la ecuación trascendente que determina el valor de E_0 :

$$\tan \left[\theta_\rho(R_{ext}) \right] = \frac{f'_{\rho,ext}(R_{ext})}{f_{\rho,ext}(R_{ext})}. \quad (2.17)$$

2.3 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL

Con el método expuesto en la sección 2.2 es posible hallar el nivel base E_0 y su vector de onda ψ_0 para un electrón dentro de un SAQD en presencia de una campo magnético transversal. Para considerar además la presencia de una impureza D^0 , puede suponerse que el efecto de la donadora sobre Ψ es a través de una función envolvente $\varphi(\vec{r} - \vec{\xi}) = \varphi(R_\xi)$ tal que $\Psi = \psi_0(\vec{r})\varphi(R_\xi)$. La función φ depende únicamente de la distancia R_ξ entre el electrón y la donadora. La forma de Ψ (tipo Bastard, [9,11]) se justifica porque la modificación en (2.8) para llegar a (2.7) también depende únicamente de R_ξ . Físicamente, este tipo de función puede entenderse como si la donadora interactuase con una nube electrónica cuya densidad de carga es proporcional a $\|\psi_0\|^2$. La función φ y la energía de estado base de donadora E pueden hallarse utilizando el principio variacional de Schrödinger haciendo extremo el funcional:

$$F(\varphi) = \langle \Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle = \langle \psi_0 \varphi | \hat{H} - E | \psi_0 \varphi \rangle. \quad (2.18)$$

Aplicando (2.1) en (2.18), recordando que $\hat{H} = \hat{H}_0 - 2/R_\xi$ y que $\hat{H}_0 \psi_0 = E_0 \psi_0$; y además haciendo algunos cambios sobre los operadores diferenciales se obtiene:

$$F(\varphi) = \left\langle \left(E_b - \frac{2}{R_\xi} \right) \psi_0^2 \varphi^2 - \varphi \nabla \cdot (\psi_0^2 \nabla \varphi) \right\rangle. \quad (2.19)$$

El valor $E_b = E_0 - E$ se conoce como *energía de enlace* entre el electrón y la donadora. Significa el descenso en energía respecto del electrón libre debido a la atracción coulombiana. Ahora, si se aplica el teorema de Green sobre integrales de volumen $(\iiint \psi \nabla \varphi dV = \psi \varphi - \iiint \varphi \nabla \psi dV)$, el acotamiento ($\psi_0(\infty) = 0$) y se observa que

$$(\nabla \varphi)^2 = \left(\frac{d\varphi}{dR_\xi} \right)^2; \quad (2.19) \text{ se puede escribir}$$

$$F(\varphi) = \iiint \psi_0^2(\rho, \xi) \left[\left(E_b - \frac{2}{R_\xi} \right) \varphi^2 + \left(\frac{d\varphi}{dR_\xi} \right)^2 \right] d^3 \vec{r}. \quad (2.20)$$

El término entre paréntesis cuadrados depende únicamente de φ y de R_ξ . Esto da pie para expresar (2.20) como:

$$F(\varphi) = \int_0^\infty J(R) \left[\left(E_b - \frac{2}{R} \right) \varphi^2 + \left(\frac{d\varphi}{dR} \right)^2 \right] dR, \quad (2.21)$$

donde el término $J(R)$ se conoce como *jacobiano* y puede hallarse mediante

$$J(R) = \iiint \psi_0^2(\rho, z) \delta\left(R - \left|\vec{r} - \vec{\xi}\right|\right) d^3\vec{r}, \quad (2.22)$$

con $\delta(x - x_0)$ la función delta de Dirac.

Como el funcional en (2.21) debe hacerse extremo, su integrando debe satisfacer una ecuación de Euler, la cual puede escribirse como:

$$-\frac{1}{J(R)} \frac{d}{dR} \left(J(R) \frac{d\varphi}{dR} \right) - \frac{2}{R} \varphi = -E_b \varphi. \quad (2.23)$$

La ecuación (2.23) tiene una gran semejanza con la ecuación radial de un átomo de hidrógeno, sólo que en este último caso se debería hacer $J(R) = 4\pi R^2$. Esta semejanza no es una mera coincidencia. Se dice con frecuencia que las donadoras neutras en un material volumétrico son un sistema hidrogenoide. Eso se debe a que, dentro de la aproximación de masa efectiva, su hamiltoniano es esencialmente el mismo al de un átomo de hidrógeno, excepto por la masa efectiva y la constante dieléctrica. Es más, es debido a esta analogía que se habla de radio de Bohr efectivo y Rydberg efectivo. Sin embargo, el sistema aquí estudiado difiere del átomo de hidrógeno en cuanto el movimiento electrónico se encuentra altamente perturbado por el confinamiento, ya sea éste causado por el SAQD o el campo magnético. La disponibilidad de movimiento del electrón se encuentra esencialmente en $J(R)$. El jacobiano a su vez depende tan sólo de ψ_0^2 , que no es más que la densidad de probabilidad de distribución del electrón desacoplado. En consecuencia, la ecuación (2.23) es una especie de generalización de la ecuación hidrogenoide para el caso general en el que el electrón no se puede mover en un espacio tridimensional isotrópico, sino en uno altamente distorsionado según la forma de la nube electrónica inicial. Este enfoque de solución es conocido como *método de dimensión fractal*, debido a que la forma como se calcula el jacobiano es idéntica a como se calcula la dimensión local en un objeto fractal cualquiera [7,13].

Volviendo a la solución de (2.23), puede verse que ésta podría resolverse si se tuvieran condiciones adecuadas en dos puntos distintos, tal como sucedió con el caso de la ecuación (2.12). La primera condición es fácil de obtener, ya que la ecuación (2.23) tiene ciertamente una singularidad en $R = 0$. No obstante, esta singularidad involucra tanto a φ como a su derivada φ' ya que el jacobiano alrededor de $R = 0$ se comporta de forma cuadrática, como si estuviera en tres dimensiones. El sentido físico de este comportamiento del jacobiano es que la densidad de probabilidad no varía de forma muy abrupta y para pequeños volúmenes se puede considerar constante (isotropía tridimensional local). Por lo tanto, en $R = 0$ se llega a la *condición de cúspide* ("cusp condition" [1]):

$$R \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{2}{R}(\varphi' + \varphi) \neq \infty \Rightarrow \varphi(0) = -\varphi'(0). \quad (2.24)$$

Ahora bien, utilizando una sustitución de barrido trigonométrico como (2.13) se puede transformar (2.23) en

$$\theta'_R = - \left[\sin^2 \theta_R + \left(\frac{d}{dR} [\ln J(R)] \right) \cos \theta_R \sin \theta_R - \left(E_b - \frac{2}{R} \right) \cos^2 \theta_R \right] \quad (2.25)$$

y la condición (2.24) puede escribirse como $\tan[\theta_R(0)] = -1 \Rightarrow \theta_R(0) = -\pi/4$.

La solución de (2.23) puede hacerse entonces de la misma forma como ya se explicó en la sección 2.2 pues ya se tienen las condiciones iniciales pertinentes. La dificultad está ahora en encontrar las condiciones de frontera en las cuales se pueda llegar a una ecuación trascendente como (2.17). En este caso es difícil dar cuenta de la forma de $\varphi(R)$ para grandes valores de R . Una manera es notar que $J(R)$ disminuye rápidamente para estos valores. Esta razón de disminución, si no se está muy lejos, puede considerarse del orden $\sim R^{-k}$ con lo que la ecuación (2.23) puede aproximarse a $\varphi'' - E_b \varphi = 0$ cuya solución convergente es $\varphi = B \exp(-\sqrt{E_b} R)$. Dada esta aproximación, puede elegirse un valor $R = R_f$ en el que se reúnan las condiciones adecuadas para formar la ecuación trascendente:

$$\tan[\theta_R(R_f)] = -\sqrt{E_b}, \quad (2.26)$$

la cual permite finalmente hallar la energía de enlace de estado base de la donadora neutra.

2.4 DENSIDAD DE ESTADOS

En todo lo dicho anteriormente, se ha dado cuenta tan sólo de un caso particular en el que se hallan ciertos niveles energéticos y sus estados o autovectores correspondientes. Este conocimiento conjunto de vectores y autovalores propios del hamiltoniano se resume con frecuencia en el concepto de *densidad de estados*. Este se define como el número de estados, por unidad de volumen y por unidad de energía, cuya energía se encuentra entre un valor E y un valor $E + dE$. La presencia de la unidad de volumen surge, en el caso de los semiconductores, de la finitud del cristal y por lo tanto de las condiciones de Born-von Kármán. De no existir esa restricción de finitud, habría infinitos estados en el intervalo $[E, E + dE]$. La densidad de estados puede escribirse como:

$$G(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_i \delta(E - E_i) = \frac{1}{\Omega} \sum_k \delta(E - E_k) \eta_k, \quad (2.27)$$

donde el índice i denota la suma sobre todos los posibles estados mientras que el índice k denota la suma sobre todos los posibles niveles energéticos. La presencia del número η_k representa la posible degeneración del nivel energético. El número Ω representa el volumen total. Evidentemente, el número Ω actúa sólo como una constante de normalización y es posible que se prefieran otros criterios de normalización.

Debido a que los efectos de confinamiento son fundamentales en este trabajo, es preciso ilustrar dicho efecto mediante cuatro casos ejemplares. Piénsese en un pozo infinito, cúbico y tridimensional de tamaño volumétrico (sistema 3D); también piénsese que se van

reduciendo cada una de sus tres dimensiones, una por una, para dar lugar a estructuras con alto confinamiento ya sea en una (sistema 2D), dos (sistema 1D) o tres dimensiones (sistema 0D); tal como se muestra en la Fig.3.

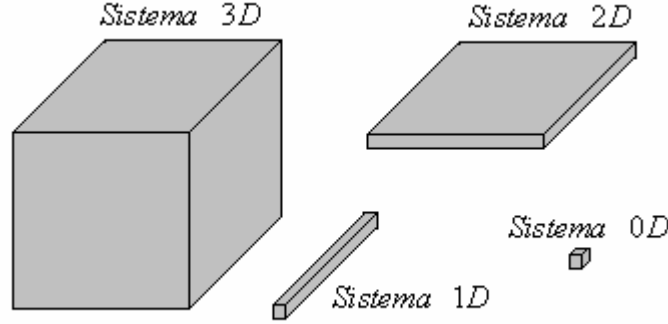


Fig. 3. Ilustración esquemática de confinamiento en diferentes casos que corresponden a QW (2D), QWW (1D) y QD (0D).

Es bien conocido que en todos los cuatro casos la función de onda de una partícula moviéndose libremente dentro del pozo puede escribirse mediante su vector de onda $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ y los valores propios son de la forma:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad (2.28)$$

donde k_i es la componente del vector de onda $\vec{k}$ en dirección i . Si el tamaño del pozo en dirección i es volumétrico, entonces la variación de k_i puede considerarse continua; si no, discreta según la fórmula $k_i = n_i \pi / L_i$, con $n_i \in \mathbb{Z}$ y L_i el tamaño del pozo en esa dirección. Teniendo en cuenta esto, para el sistema tridimensional la densidad de estados puede hallarse:

$$G(E)_{3D} = \frac{1}{\Omega} \int_0^\infty \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) 4\pi k^2 dk \frac{dn}{d^3 \vec{k}}, \quad (2.29)$$

donde el término $\frac{dn}{d^3 \vec{k}}$ es la densidad de estados por volumen en el espacio recíproco, este

valor se halla por las condiciones de Born-von Kármán y es igual V / π^3 (Si se analiza una partícula de espín $1/2$ esta densidad será el doble por los dos posibles estados de momento angular intrínseco). La integral se ha hecho en coordenadas recíprocas esféricas por simplicidad. Se puede seguir un procedimiento similar para el sistema 2D pero ahora se debe tener en cuenta que una de las tres direcciones está altamente confinada en un tamaño d :

$$G(E)_{2D} = \frac{1}{\Omega} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty \delta\left(E - \frac{\hbar^2 n_z^2}{8md^2} - \frac{\hbar^2}{2m} k_{xy}^2\right) 2\pi k_{xy} dk_{xy} \frac{dn}{d^2 \vec{k}_{xy}}, \quad (2.30)$$

donde se han usado coordenadas polares bidimensionales y una densidad de estados por unidad de área del espacio recíproco que es igual a A/π^2 . También existe una fórmula integral para el sistema 1D:

$$G(E)_{1D} = \frac{1}{\Omega} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \delta \left(E - \frac{h^2}{8md^2} (n_z^2 + n_y^2) - \frac{\hbar^2}{2m} |k_x|^2 \right) d|k_x| \frac{2\pi}{L}, \quad (2.31)$$

donde se ha hecho uso de una densidad unidimensional. Las fórmulas (2.29), (2.30) y (2.31) pueden desarrollarse teniendo en cuenta que $\int_0^{\infty} \delta(x - x_0) dx = \theta(x_0)$, siendo $\theta(x)$ la función escalón de Heavside. El caso 0D no tiene ninguna fórmula integral y sólo remite a una suma discreta de funciones delta. Las densidades de estados para estos cuatro sistemas serán entonces:

$$\begin{aligned} G(E)_{3D} &= \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \\ G(E)_{2D} &= \frac{1}{\pi d} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \theta \left[E - \frac{h^2 n_z^2}{8md^2} \right] \\ G(E)_{1D} &= \frac{1}{\pi d^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \theta \left[E - \frac{h^2}{8md^2} (n_z^2 + n_y^2) \right] \left(E - \frac{h^2}{8md^2} (n_z^2 + n_y^2) \right)^{-1/2} \\ G(E)_{0D} &= \frac{1}{d^3} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \delta \left[E - \frac{h^2}{8md^2} (n_z^2 + n_y^2 + n_x^2) \right] \end{aligned} \quad (2.32)$$

En la Fig. 4 se muestra la forma de estas funciones de densidad de estado que distinguen claramente las dimensiones de confinamiento. Una densidad parabólica es característica de una partícula que se mueve libremente en las tres dimensiones, la forma escalonada demuestra un movimiento casi bidimensional, el movimiento unidimensional se distingue por la presencia de picos con ciertas 'colas' o lastres; finalmente, el movimiento puramente confinado otorga un espectro completamente discreto que da densidades con picos altísimos sin ancho alguno.

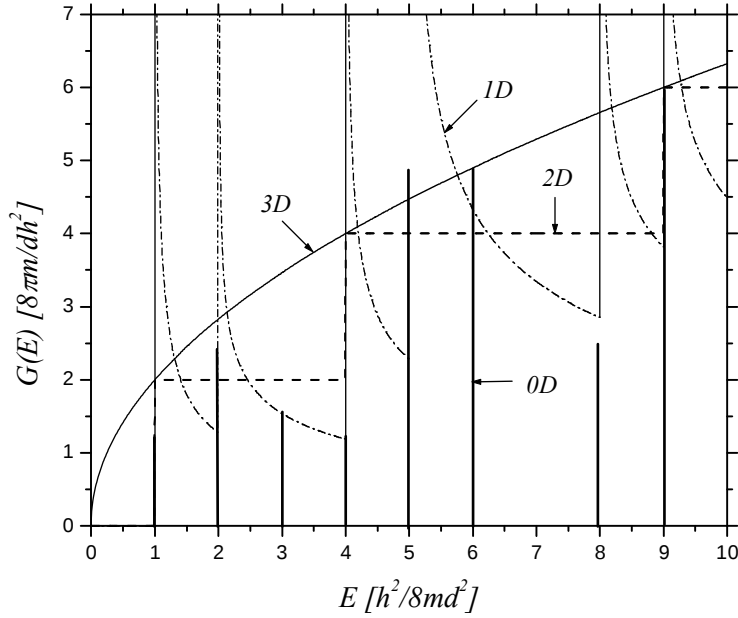


Fig. 4. Densidad de estados para sistemas con diferentes grados de confinamiento.

2.5 DENSIDAD DE ESTADOS BASE DE DONADORAS NEUTRAS

La aproximación de masa efectiva asevera que el movimiento de los electrones en un semiconductor será casi libre y por tanto su densidad de estados tiene la forma parabólica de un sistema 3D haciendo la salvedad de que la parábola debe tener su vértice en el piso de la banda de conducción. Sin embargo, la presencia de una heteroestructura como los SAQD considerados da un confinamiento adicional que origina algunos estados ligados por debajo de la banda de conducción del material externo. El movimiento de estos estados ligados está completamente confinado así que su presencia debería aparecer en la DOS como picos cero-dimensionales. En la Fig. 5 se ilustra este efecto. En la Fig. 5a se ha dibujado un pozo de potencial que representa la heteroestructura, el cuadro gris indica que el espectro es continuo a partir del borde del pozo E_c mientras que las líneas gruesas y segmentadas indican los niveles ligados E_0 , E_1 y E_2 que conforman un espectro discreto. La Fig. 5b ilustra ese mismo espectro pero en términos de densidades de estados.

Ahora bien, supóngase que se desea añadir la presencia de una donadora al estado ligado base E_0 . La interacción coulombiana hará descender el valor de la energía del nivel base en una cantidad E_b correspondiente a la energía de enlace. Sin embargo, el valor de la energía de enlace depende de la posición de la donadora. Debe recordarse que los SAQDs crecen en grandes cantidades sobre un sustrato lo cual permite que se puede hablar de un conjunto de cientos de SAQDs con una donadora neutra, de tal manera que la posición de la impureza se puede suponer aleatoria. Si se calcula estadísticamente el espectro de este conjunto de SAQDs, las energías de electrón libre permanecen inalteradas porque los

sistemas se consideran idénticos entre sí³; en cambio, la diferencia está en la posición de la impureza y es por eso que se forma una especie de *banda de donadora* [11] tal como se ilustra con gris oscuro en la Fig. 5a. Existe una probabilidad por unidad de energía de que haya una donadora cuya energía de enlace modifique el estado base entre un valor E_b y uno $E_b + dE_b$. La forma de esta probabilidad es la que define cómo la banda de donadora se hace presente en la gráfica de densidad de estados del conjunto de SAQDs (Fig. 5b). Dicha probabilidad merece el nombre de *densidad de estados de la donadora neutra* (DOS).

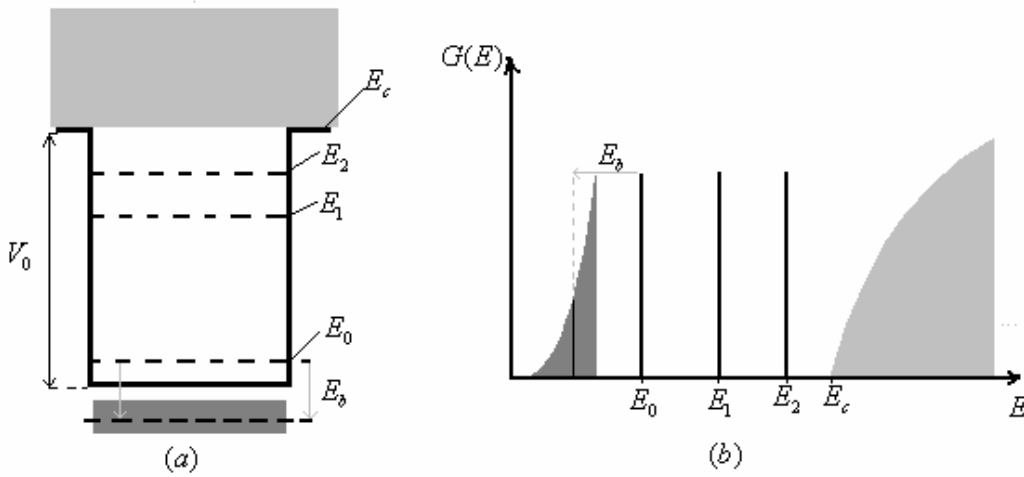


Fig. 5. Ilustración esquemática del efecto de D^0 sobre el espectro energético y la DOS.

Dada su definición, la DOS depende fundamentalmente de cómo varía la energía de enlace en función de la posición de la D^0 en un SAQD. Debido a que la posición de la donadora queda perfectamente especificada mediante los valores en coordenadas cilíndricas $(\xi_\rho, \xi_\phi, \xi_z)$ esta densidad de estados puede expresarse como:

$$g(E_B) = \sum_{\xi_\rho} \sum_{\xi_\phi} \sum_{\xi_z} p(\xi_\rho, \xi_\phi, \xi_z) \delta[E_B - E_b(\xi_\rho, \xi_z)], \quad (2.33)$$

con $p(\xi_\rho, \xi_\phi, \xi_z)$ la probabilidad de encontrar la donadora en la posición $(\xi_\rho, \xi_\phi, \xi_z)$. En cuanto la posición de la donadora es completamente aleatoria, este valor puede hacerse constante y hallarse por una condición de normalización. Nótese que la energía de enlace no depende de ξ_ϕ por la simetría azimutal del SAQD. Gracias al gran tamaño que suelen tener los SAQDs en dirección transversal, es posible suponer que las variables ξ_ρ y ξ_ϕ pueden hacerse continuas, se convierten entonces sus sumas en integrales cuyos elemento diferencial de área debe estar expresado adecuadamente:

$$g(E_B) = p_0 \sum_{\xi_z} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \delta[E_B - E_b(\xi_\rho, \xi_z)] \xi_\rho d\xi_\phi d\xi_\rho \quad (2.34)$$

Al evaluar (2.34) se obtiene:

$$g(E_B) = 2\pi p_0 \sum_{\xi_z} \sum_x x \left| \frac{\partial E_b}{\partial \xi_\rho} \right|_{x}^{-1}, \quad x = \xi_\rho : E_b(\xi_\rho, \xi_z) = E_B. \quad (2.35)$$

³ También se ha supuesto, como otra aproximación, que cada SAQD no interactúa con los demás.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE UNA D^0 EN UN SAQD CON FORMA DE LENTE

La aproximación adiabática otorga la oportunidad de observar por separado los efectos de confinamiento, ya sea en dirección transversal o radial. Esto resulta particularmente útil cuando se trata de analizar un campo magnético transversal en caso de que no haya momento angular total, ya que el efecto se limita a un confinamiento en dirección transversal mediante un potencial parabólico proporcional al cuadrado de la intensidad del campo magnético –Véase la ecuación (1.2)–. En la Fig. 6a se muestra el potencial efectivo $V_{\text{efect}}(\rho) = \alpha_\rho(\rho) + E_0$ hallado mediante (2.11) para el caso de un electrón en un SAQD con forma de lente en un campo magnético con intensidad $\gamma = 0$ y $\gamma = 2$. Puede verse que en el caso de $\gamma = 0$ el confinamiento debido a la heteroestructura se manifiesta mediante una curva que se asemeja bastante a la función $h(\rho)$ del perfil del SAQD aunque invertida verticalmente. Esto se debe a que la función $E_z(\rho)$ se halla solucionando el pozo de potencial finito de la Fig. 2 cuyo ancho es precisamente $h(\rho)$. Es bien sabido que entre más estrecho es el pozo, más alto debe ser el nivel base. Por tal razón, el potencial efectivo en la Fig. 6a es máximo para $\rho > R_{\text{ext}}$, donde la altura del SAQD es apenas la de la capa húmeda d_{wet} , mientras que es mínimo en $\rho = 0$, cuando se alcanza la altura máxima d_0 . Nótese que el potencial efectivo para $\gamma = 0$ nunca alcanza ni sobrepasa la altura del pozo V_0 , ya que de ser así no habría ningún estado confinado. El efecto del campo magnético en la Fig. 6a consiste simplemente en añadir un término cuadrático $\gamma^2 \rho^2 / 2$ al potencial; a causa de esto, la influencia del campo magnético es pequeña para posiciones cercanas al eje del SAQD mientras que crece rápidamente a medida que el electrón se aleja del centro.

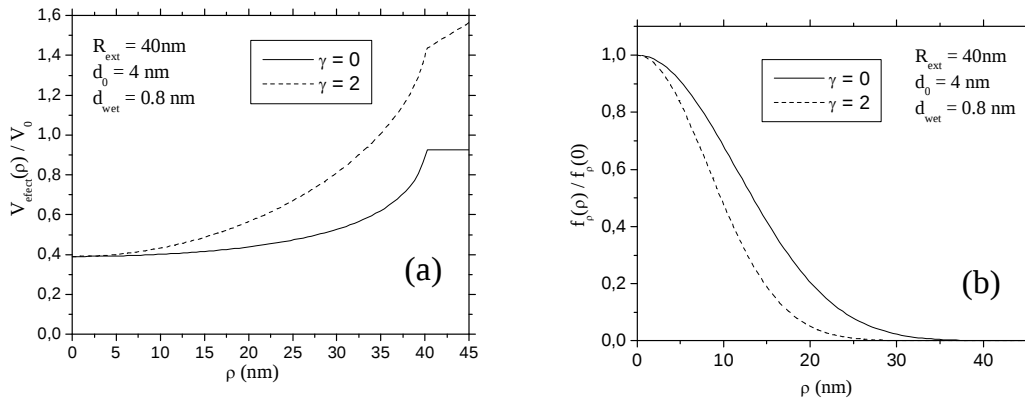


Fig. 6. Efecto de campo magnético sobre a) curvas de potencial efectivo y b) parte radial de la función de onda para un electrón desacoplado en un SAQD con forma de lente.

En la Fig. 6b se muestran las soluciones de la componente radial $f_\rho(\rho)$ de la función de onda cuando se aplican los potenciales efectivos de la Fig. 6a a la ecuación (2.12). Ambas soluciones reflejan movimientos confinados hacia el centro del SAQD. La solución

para $\gamma = 2$ es más estrecha debido a que el campo magnético ha reforzado el confinamiento hacia el centro.

Una mejor manera de mostrar la función de onda para el electrón libre resulta de combinar las soluciones computacionales de la Fig. 6b con la solución analítica (2.10) para dar lugar a la función de onda $\psi_0(\vec{r}) = f_\rho(\rho)f_z(\rho, z)$. En las Fig. 7 se muestran estas soluciones al cuadrado mediante mapas de contorno, ya sea para $\gamma = 0$ (Fig. 7a) ó $\gamma = 2$ (Fig. 7b). Se ha preferido graficar las soluciones al cuadrado porque es en esta forma que ellas van a intervenir en el jacobiano (2.22) y todos los demás cálculos que llevan a la energía de enlace. En la Fig. 7a puede notarse que el confinamiento estructural es bastante mayor en dirección transversal que en dirección lateral, ya que ψ_0^2 cae desde su valor máximo en el centro del SAQD hasta la mitad en tan sólo 1.5 nm caminando en dirección de crecimiento del cristal. En contraposición, se requiere avanzar unos 8 nm en dirección lateral para alcanzar el mismo valor. No obstante, la forma de la heteroestructura, que va disminuyendo gradualmente su altura hasta alcanzar el mínimo en R_{ext} , refuerza el confinamiento lateral, puesto que el movimiento electrónico se restringe a unos 15 nm de los 40 nm que tiene en total. En la Fig. 7b se deja patente que el campo magnético sólo refuerza el confinamiento en dirección lateral dejando intacto el transversal. En las Fig. 7 también se exponen las energías de electrón libre E_0 para ambos casos. El valor de ellas es casi la mitad de los 40 Ry^* que otorga el SAQD como heteroestructura. Estos elevados valores son producto del alto confinamiento, especialmente aquél de la dirección transversal. En la Fig. 6a se observa que el potencial efectivo tiene como mínimo un valor de $0.4 V_0$, lo que significa que el confinamiento transversal del SAQD obliga a que E_0 sea de por lo menos 16 Ry^* . La contribución del confinamiento lateral es por tanto exigua y contribuye con menos de un 1 Ry^* . El campo magnético tampoco logra aportar mucho más, ya que sólo logra aumentar E_0 en un poco más de ese valor.

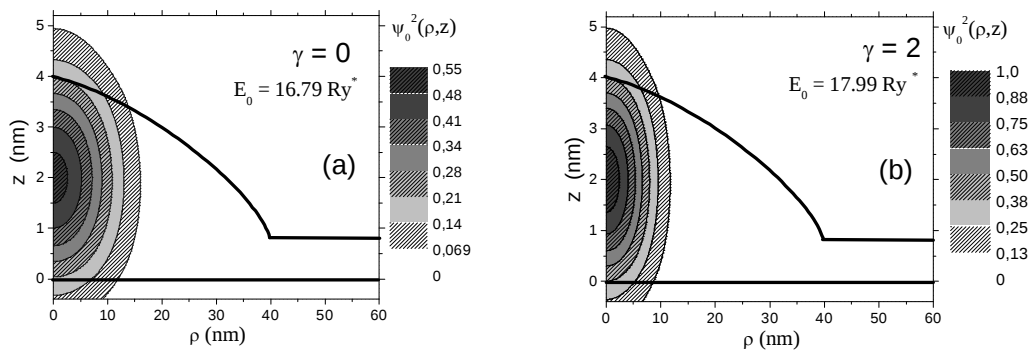


Fig. 7. Mapas de contorno sobre el plano $\rho - z$ que muestran la densidad de probabilidad de distribución del electrón desacoplado en un SAQD con forma de lente a) sin y b) con campo magnético. El perfil de la heteroestructura está indicado por una línea gruesa.

Dadas las soluciones mostradas en la Fig. 7 es virtualmente posible hallar la energía de enlace de una donadora ubicada en cualquier parte del SAQD. Sin embargo, la forma de la ecuación (2.35) para hallar densidades de estados exige que se considere la posición radial de la impureza como una variable continua a lo largo de un intervalo mientras que, a su vez, se considere un conjunto discreto de posiciones verticales. En la Fig. 8 se muestran

estas energías de enlace en el intervalo⁴ de ξ_p que va entre 0 y 40 nm. Las posiciones verticales seleccionadas fueron seis, aumentando en 0.8 nm desde el piso del SAQD hasta la altura máxima $d_0 = 4$ nm. Estas posiciones discretas pueden interpretarse como la eventual posición de la impureza sobre las diferentes monocapas del cristal; lo que significaría que, para efectos de cálculo, los 0.8 nm de separación juegan el rol de la constante de red del cristal. De la Fig. 8 puede notarse que las curvas para diversas alturas tienden a agruparse por pares de acuerdo a su lejanía respecto al centro del SAQD; siendo que entre más cerca se esté de la altura media, más energía de enlace se tiene. Por tanto las donadoras ubicadas a 0 nm tienen una energía de enlace casi idéntica a las de 4 nm; y así también para los pares de 0.8-3.2 nm y 1.6-2.4 nm. En la Fig. 7 se da explicación de esto, pues se muestra que las nubes electrónicas son cercanamente simétricas respecto a un plano horizontal que pasa por la altura $d_0/2$, donde reside la máxima probabilidad. Según el método de dimensión fractal, la energía de enlace depende únicamente de la interacción entre el núcleo atractivo (D^+) y esta nube electrónica: si esta nube es aproximadamente simétrica significará que la energía de enlace será casi la misma si se ubica el centro D^+ a uno u otro lado del plano de simetría. Sin embargo la solución $f_z(\rho, z)$ en (2.10) no contiene esta simetría y, en cambio, favorece las energías de enlace por debajo de la altura media; por eso las energías de enlace de las posiciones inferiores son ligeramente más altas que las de sus pares superiores. Es el confinamiento estructural lateral el que ayuda a formar esta simetría aproximada, restringiendo el movimiento electrónico a posiciones cerca del eje donde la asimetría de $f_z(\rho, z)$ es pequeña. El campo magnético aumenta el confinamiento lateral y la simetría es mayor en la Fig. 8b. El campo magnético se manifiesta también en un incremento neto en las energías de enlace de donadoras cerca del eje, pues entonces el electrón se encuentra con más probabilidad en esta zona. Este efecto se da a expensas de las donadoras lejanas al eje, las cuales sufren una disminución en E_b .

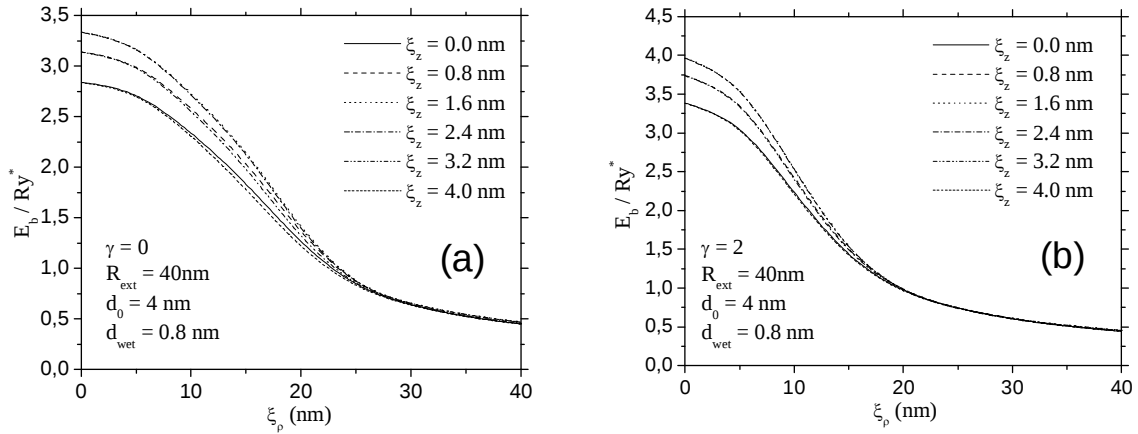


Fig. 8. Curvas de energía de enlace en función de la posición radial ξ_p y diferentes posiciones verticales ξ_z de una D^0 en un lente a) sin y b) con campo magnético.

⁴ En realidad se hizo el cálculo hasta 60 nm. En principio se debería llegar hasta el infinito, pero esto es imposible ya que las soluciones son computacionales y no analíticas. En todo caso, a partir de 40 nm las curvas se comportan en forma monótona casi constante por lo que no son muy interesantes los valores posteriores. Algo similar acaece para ξ_z .

En la Fig. 9 se muestran las densidades de estado de impureza halladas aplicando los datos de la Fig. 8 en la ecuación (2.35). Hay un alto pico para energías E_b bajas, que corresponde a la gran probabilidad de que haya núcleos D^+ alejados del centro del SAQD los cuales interactúan débilmente con la nube electrónica. Éstas D^0 tienen energías de enlace muy similares entre sí del orden de 0.3 Ry^* . El pico es más alto y más pronunciado cuando hay campo magnético, pues el confinamiento lateral disminuye el tamaño de la nube electrónica y así aumenta el número relativo de centros D^+ que tienen poco chance de interactuar con el electrón. Fuera de este alto pico para E_b bajas, existe una 'cola' o lastre hacia las energías de enlace más altas. Este lastre equivale a D^0 s que forman un estado más fuertemente ligado. A menor distancia axial, disminuye también la probabilidad de que la D^0 esté ubicada a dicha distancia. Debido a que la nube electrónica está bastante confinada hacia las posiciones axiales, el número de donadoras fuertemente ligadas es poco y por eso la DOS sobre las energías de enlace altas se distribuye pobremente. El confinamiento axial adicional del campo magnético hace esta escasez mayor. La última característica de las curvas en la Fig. 9 son unos diminutos escalones al final de la cola que se hacen visibles únicamente a través de un gran aumento (gráficas secundarias). Estos son los valores máximos correspondientes a los tres pares de curvas en la Fig. 8. Cuando se sobrepasa la energía máxima de una curva, ésta deja de contribuir a la densidad de estados y por tal razón se producen caídas repentinas. El único efecto apreciable del campo magnético sobre esta parte de la curva es que los escalones se hacen un poco más anchos, fruto de una gama más amplia de energías máximas en las curvas de la Fig. 8b.

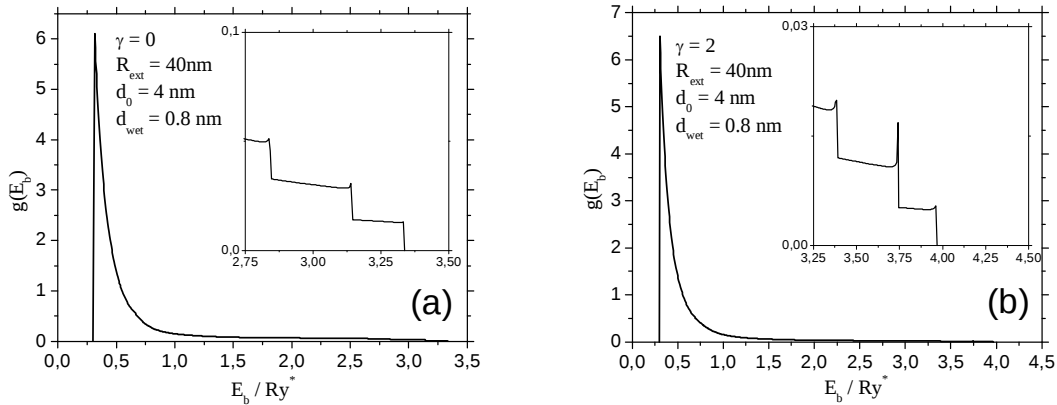


Fig. 9. Efecto del campo magnético sobre la DOS de una impureza D^0 en un SAQD con forma de lente.

En la Fig. 10 se muestran diferentes curvas $E_b(\xi_\rho)$ para diversos campos magnéticos estando la impureza (Fig. 10a) en el plano del sustrato o (Fig. 10b) cerca de la altura central $d_0/2$. Estas gráficas muestran que los efectos de campo magnético descritos anteriormente son de la misma índole independientemente del valor de γ . Lo único que cambia es su intensidad. En la Fig. 10 también se aprecia que todas las curvas parecen cortarse en un mismo punto, ambas en valores de ξ_ρ cercanos al radio de Bohr efectivo. El potencial coulombiano de la impureza tiende a ubicar al electrón a una distancia de a_0^* mientras el campo magnético tiende a ubicarlos sobre el eje. Si la donadora está a un radio

de Bohr del eje, el efecto de ambos factores se hace idéntico y por tal razón las donadoras a esta distancia axial casi no perciben la influencia del campo magnético [10].

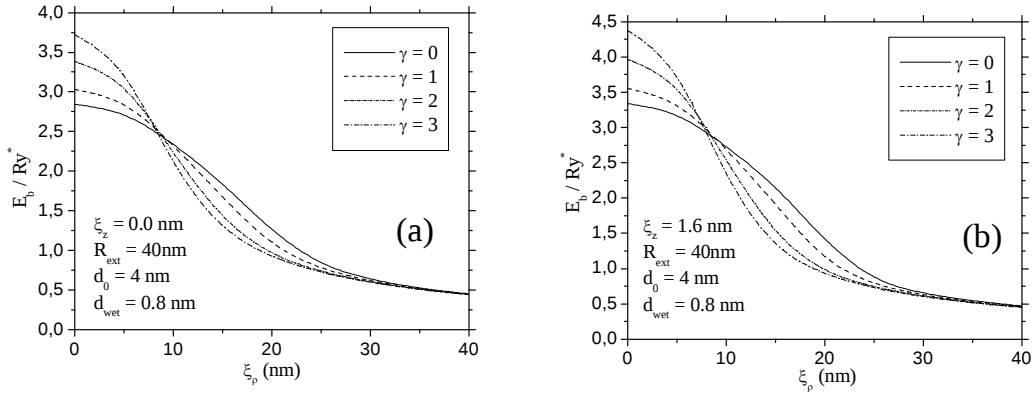


Fig. 10. Efecto de campo magnético sobre las curvas de energía de enlace $E_b(\xi_\rho)$ de D^0 en una lente estando la impureza a) sobre la capa de sustrato y b) a una altura $\xi_z = 1.6 \text{ nm}$.

En la Fig. 11 se ilustra la interrelación entre el efecto del campo magnético y los parámetros geométricos. A pesar de los muy diversos parámetros, todas las curvas demuestran un comportamiento similar. Se aprecian en la Fig. 11a curvas cóncavas para pequeños valores de γ que luego van estabilizando su pendiente. La pendiente constante es una dependencia análoga a la fórmula $E_0 = \hbar\omega$ del oscilador armónico bidimensional. A partir de Fig. 11a queda claro que tanto la capa húmeda como el tamaño lateral disminuyen el confinamiento lateral y gracias a esto el comportamiento lineal se alcanza más rápido. El efecto de capa húmeda disminuye con el radio externo pues ésta estará cada vez más lejos del eje. En la Fig. 11b se evidencia que el mayor aporte a la energía de electrón libre E_0 lo da el confinamiento transversal; sin embargo, esta influencia es prácticamente independiente del campo magnético. A pesar de que en Fig. 11 sólo se especifican las energías E_0 , las conclusiones fundamentales pueden extenderse a todas las otras variables estudiadas, incluida la densidad de estados.

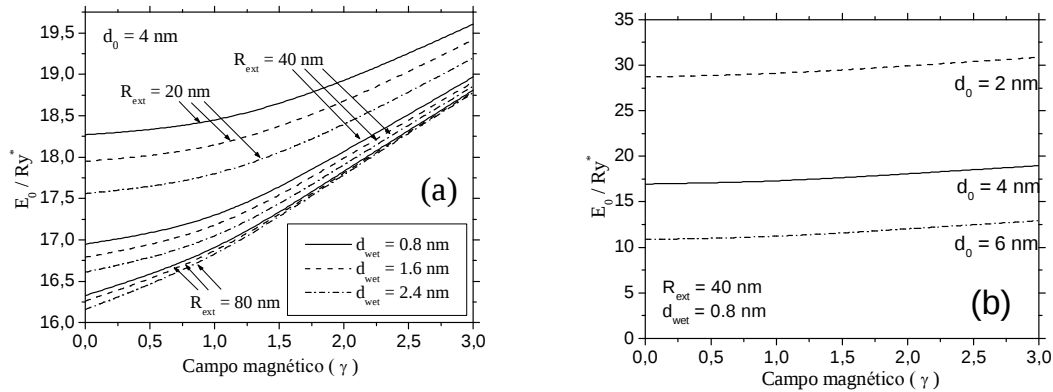


Fig. 11. Dependencia del nivel base E_0 de un electrón desacoplado en una lente como función del campo magnético variando a) radio externo y capa húmeda, y b) altura de SAQD.

3.2 EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE UNA D^0 EN UN ANILLO CON BORDES SUAVES

La Fig. 12a muestra el efecto del campo magnético sobre el potencial efectivo en un SAQD con forma de anillo de bordes suaves. Para $\gamma = 0$ se mantiene la misma lógica de la Fig. 6a y el potencial efectivo se asemeja al perfil del SAQD pero invertido verticalmente. La diferencia esencial es que la heteroestructura tipo anillo crea un confinamiento lateral alejado del eje. Esto hace que, a diferencia de las lentes, el campo magnético y la heteroestructura generen confinamientos laterales dispares: uno hacia el eje y el otro descentrado. A medida que el campo magnético crece, va haciendo que el confinamiento axial sea mayor y poco a poco se va despreciando el pozo producido por la heteroestructura. Mediante la energía del electrón desacoplado, en la Fig. 12b se muestra cómo ocurre dicha evolución dados diversos parámetros geométricos. Todas las curvas tienden al comportamiento lineal característico de grandes valores de γ , en esta región la capa húmeda es el valor predominante pues ésta es la que define la ubicación del vértice de la parábola en la Fig. 12a. Para pequeños valores de γ influye fundamentalmente la altura del punto, aunque la capa húmeda también tiene una ligera importancia. También puede notarse que las energías en $\gamma = 0$ no dependen del radio externo, efecto que no ocurriría en las lentes. Esto se debe a que tan sólo se está trasladando el pozo de potencial efectivo, sin modificar el ancho. En general se puede apreciar que la interrelación entre campo magnético y dimensiones en anillos suaves es mucho más rica que en el caso de las lentes. Tanto una disminución en d_0 como un aumento en R_{ext} hacen más notoria la influencia del campo magnético pero por mecanismos distintos: la primera disminuye el confinamiento estructural, el segundo agudiza el efecto del campo magnético pues ubica al pozo de potencial causado por la heteroestructura en zonas donde el término $\gamma^2 \rho^2 / 2$ es mayor. Una mayor capa húmeda también agiliza el efecto de campo magnético.

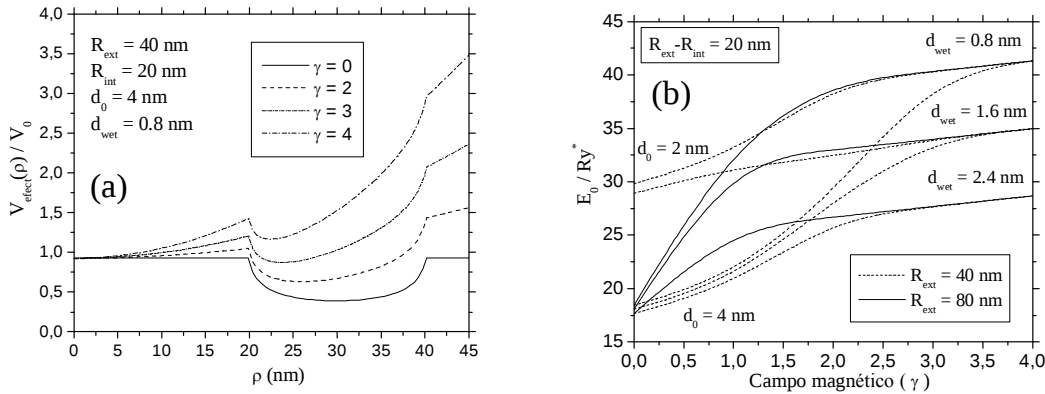


Fig. 12. Efecto de campo magnético sobre a) potencial efectivo y b) nivel base para un electrón desacoplado dentro de un SAQD en forma de anillo con bordes suaves. En b) también se analiza la influencia de los parámetros geométricos.

La Fig. 13 muestra en detalle cómo el campo magnético afecta la función de onda del electrón libre. De esta manera se explica mejor la transición que va de un confinamiento descentrado, donde prima el efecto del SAQD, a un confinamiento axial, donde prima el campo magnético. En la Fig. 13a se muestra a la nube electrónica concentrada dentro del anillo y puede verse que ésta es un poco más ancha hacia la parte inferior (efecto de la forma y la capa húmeda). En la Fig. 13b el campo magnético ha trasladado la nube hacia la

parte interior del anillo, el desplazamiento es mayor en las partes bajas del perfil, indicio de un tunelamiento propiciado por la capa húmeda. La función de onda en la Fig. 13c es bastante especial pues en ella parte de la nube electrónica se encuentra concentrada en el centro de la heteroestructura y no dentro del anillo; para esta parte, el confinamiento transversal es el estrecho pozo causado por la capa húmeda. Finalmente, la Fig. 13d muestra el caso cuando el campo magnético ha llevado toda la nube electrónica hacia el centro del SAQD, es claro entonces por qué en este caso el único parámetro geométrico relevante es d_{wet} .

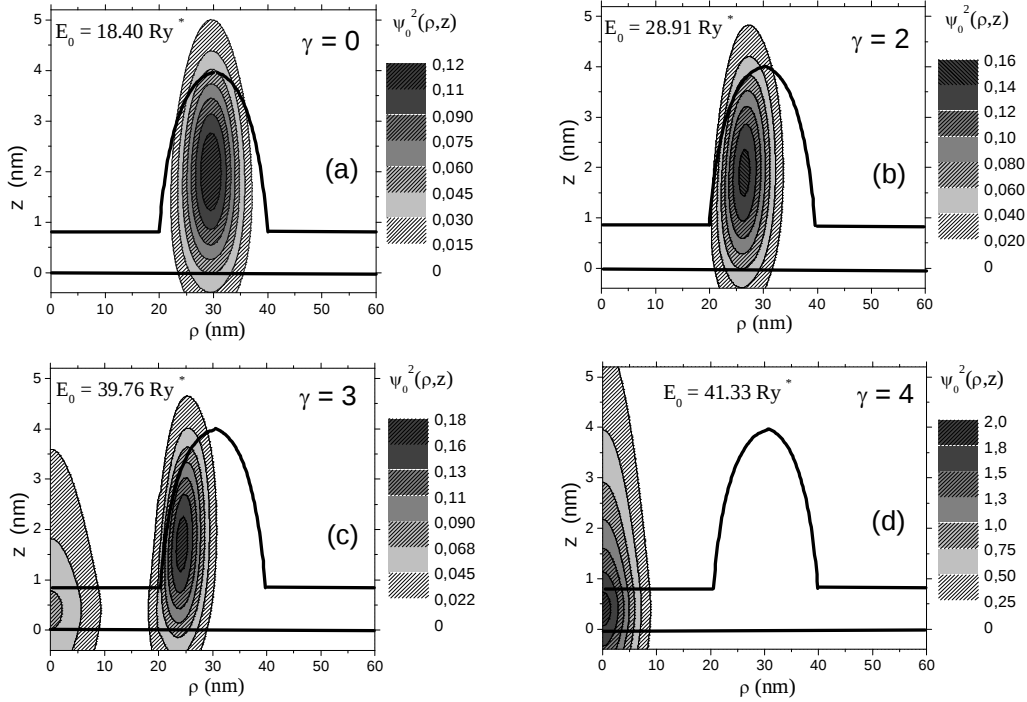


Fig. 13. Mapas de contorno que muestran el tunelamiento hacia el centro de un electrón libre en un SAQD con forma de anillo de bordes suaves debido al campo magnético.

En la Fig. 14 se muestran las energías de enlace correspondientes a las soluciones de la Fig. 13. La Fig. 14a es para $\xi_z = 0 \text{ nm}$ y la Fig. 14b para $\xi_z = 1.6 \text{ nm}$. Queda en evidencia que las curvas de energía de enlace son cualitativamente similares al perfil lateral de las funciones de onda de electrón libre. Igualmente, las curvas de la Fig. 14 reflejan los efectos de las partes más bajas de los potenciales efectivos de la Fig. 12a. Cuando $\gamma = 0$ se tiene en la Fig. 12a un pozo de ancho 20 nm con centro en $\rho = 30 \text{ nm}$ y por eso hay un máximo de energía de enlace en $\xi_\rho = 30 \text{ nm}$. Cuando $\gamma = 1$ el fondo del pozo se traslada hacia el interior del anillo y en $\gamma = 2$ el desplazamiento es mayor; por eso, los máximos en las curvas de energía de enlace se trasladan hacia radios inferiores. Las partes bajas del potencial efectivo en $\gamma = 3$ constituyen un doble pozo con fondos en $\rho = 0$ y el otro descentrado; eso explica los dos máximos que tienen las curvas de energía de enlace. En $\gamma = 4$ la parte más baja es un pozo centrado, por eso el máximo de E_b ocurre cuando

$\xi_\rho = 0$. Los máximos locales de las energías de enlace para $\xi_\rho \neq 0$ son mayores en Fig. 14a mientras que los máximos cuando $\xi_\rho = 0$ son mayores en Fig. 14b. Esto es debido a que la energía de enlace es mayor cuanto más cerca esté el valor de ξ_z respecto a $h(\xi_\rho)/2$.

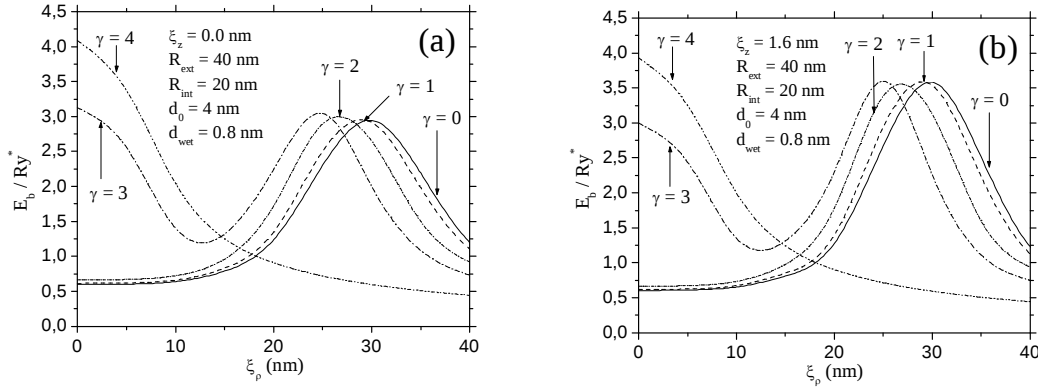


Fig. 14. Efecto de campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_\rho)$ para anillos de bordes suaves con D⁰s ubicadas en a) el plano de sustrato y b) a una altura $\xi_z = 1.6 \text{ nm}$.

En la Fig. 15a se muestran las DOS para una D⁰ en una lente de bordes suaves dados diferentes valores de γ . Si se comparan con las curvas de la Fig. 9, salta a la vista la mayor riqueza que tienen las curvas de anillo suave; tanto así que se ha hecho necesario usar letras para indicar los aspectos más importantes y mostrar en la Fig. 15b detalles de algunas curvas. Los picos designados con la letra A son los que corresponden a las donadoras lejanas al SAQD y es una característica compartida con las curvas de Fig. 9. Los picos B aparecen sólo cuando las curvas de la Fig. 14 tienen un único máximo en $\xi_\rho \neq 0$. Estos picos B corresponden a donadoras ubicadas cerca del eje del SAQD las cuales poseen bajas energías de enlace porque se encuentran lejos de la nube electrónica ubicada dentro del anillo. Se trata de un buen número de donadoras pues se aprecia en la Fig. 14 que E_b es casi constante para $\xi_\rho \leq 10 \text{ nm}$. Una vez que el campo magnético empieza a primar sobre los efectos de la heteroestructura, los picos B desaparecen. Con la letra C se designan cinco picos, los cuales sólo aparecen cuando $\gamma = 3$, caso en el que el potencial efectivo se asemeja a un doble pozo. Los picos C corresponden al mínimo local entre los dos máximos de las curvas de la Fig. 14, un punto donde las derivadas $\partial E_b(\xi_\rho, \xi_z) / \partial \xi_\rho$ se hacen cero y por tanto ocurre una singularidad en (2.35). A pesar de haber seis diferentes alturas ξ_z , sólo hay cinco picos pues en uno de ellos (el de energía de enlace mayor) coinciden las curvas de DOS para las posiciones $\xi_z = 0$ y $\xi_z = 0.8 \text{ nm}$ que están ubicadas simétricamente respecto a la capa húmeda. La letra D indica un hombro. Aunque éste se indica sólo para $\gamma = 0$, éste también es visible en $\gamma = 1, 2, 3$. El origen de D es un punto de inflexión particularmente abrupto (punto extremo de la función derivada $\partial E_b(\xi_\rho, \xi_z) / \partial \xi_\rho$ agudo) en las Fig. 14, el cambio de concavidad se hace más suave con el campo magnético y es por eso que el hombro D va desapareciendo a medida que γ crece. Con las letra E, F y G se designan pares de picos los cuales aparecen para las curvas de la Fig. 14 que tengan

máximo en $\xi_\rho \neq 0$, incluida la de $\gamma = 3$. Son puntos donde $\partial E_b(\xi_\rho, \xi_z)/\partial \xi_\rho$ es cero. Los picos E son los de menor energía de enlace y corresponden al par de posiciones ξ_z más alejado de $d_0/2$. Las donadoras correspondientes a F están en la parte más interna del anillo y por eso su energía de enlace es la mayor. Entre más agudo sea un máximo en $E_b(\rho)$, menos densidad de estados va a tener ya que hay una menor gama de valores de ξ_ρ con dicha E_b ; esto explica las diferentes alturas de los picos. El hecho de que los picos pertenecientes a cada par se puedan distinguir entre sí implica que hay una asimetría entre los pares de alturas respecto a $d_0/2$. La Fig. 13 muestra que el campo magnético acentúa esta asimetría y por tal razón la separación entre los pares de picos se hace mayor a medida que γ crece. La capa húmeda juega un papel crucial en este proceso y por eso la mayor separación ocurre en los picos E. Finalmente, la letra H indica una cola para la curva de $\gamma = 4$, la curva de la Fig. 14 correspondiente es muy similar a la de una lente y por eso H es un cola que acaba en forma de escalera al igual que las curvas de la Fig. 9.

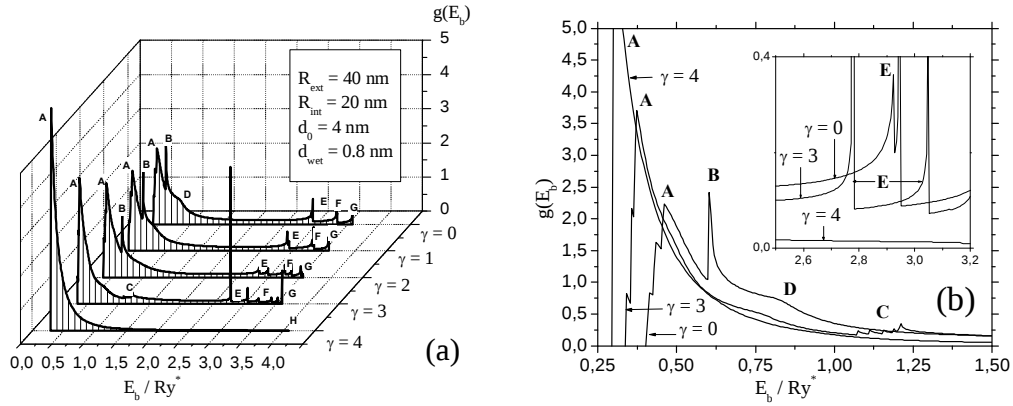


Fig. 15. Curvas de DOS para D^0s en SAQD en forma de anillo con bordes suaves sometidas a diversas intensidades de campo magnético.

3.3 COMPARACIÓN ENTRE LENTES, VOLCANES Y ANILLOS CON BORDES SUAVES

En las dos secciones precedentes se ha estudiado la influencia del campo magnético sobre la densidad de estados para dos tipos básicos de puntos cuánticos: lente y anillo con bordes suaves. Si se observa la ecuación (2.3) se puede notar que las fórmulas que describen los perfiles de estos SAQD son muy similares. De hecho, si se recuerda que $\rho \geq 0$, el perfil de una lente puede ser descrito por la fórmula del anillo siempre y cuando se haga $R_{int} = -R_{ext}$. Es posible entonces pensar que la ecuación (2.3c) describe tanto a anillos como a lentes pero que lo único que cambia es el valor de un parámetro geométrico (p.e. R_{int}). No obstante, el radio interno no es un parámetro muy adecuado, ya que para conservar su generalidad debe admitir valores negativos. Es preferible definir un parámetro $a = (R_{ext} + R_{int})/2$ y decir que $a \in [0, R_{ext})$. Este parámetro es de fácil interpretación y corresponde al punto donde se alcanza la altura máxima ($h(a) = d_0$). Además, para ciertos valores del parámetro a , la forma de la heteroestructura no puede ser descrita ni como anillo,

ni como lente. La Fig. 16 muestra el caso de un SAQD donde $0 < a < R_{ext}/2$. Puede notarse que para valores de $\rho < a$, la altura comienza a decrecer pero esta no alcanza el valor mínimo d_{wet} cuando $\rho = 0$; en cambio, se forma una especie de ‘cráter’ de radio a sobre la cima del SAQD. De ahí que a este tipo de SAQD se le pueda llamar *volcán*. Este tipo de configuración se ha encontrado experimentalmente y ha llamado la atención para investigaciones teóricas [4]. Para el análisis de esta sección, los volcanes se pueden considerar como una forma de transición entre las lentes y los anillos suaves.

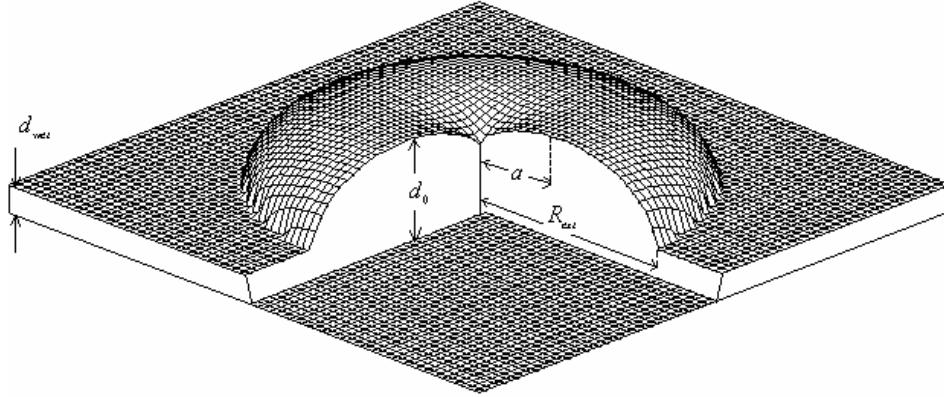


Fig.16. Representación tridimensional de un SAQD con forma de volcán. En el corte se ilustra el significado del parámetro a .

En la Fig. 17 se muestran curvas de energía de enlace de donadoras ubicadas a $\xi_z = 0$ en SAQDs con diferentes valores de a . En la Fig. 17a no hay campo magnético y se puede apreciar que las curvas de $E_b(\rho)$ se asemejan bastante al perfil mismo del SAQD salvo algunas diferencias. Puede verse que el valor máximo de E_b suele ocurrir justo en el radio del cráter cuando la altura es máxima. La excepción ocurre para $a = 10 \text{ nm}$ donde el máximo ocurre en $\xi_\rho = 0$; en este caso el cráter es tan pequeño que no ofrece una verdadera barrera para el movimiento electrónico hacia el centro de la heteroestructura. Otra observación sobre la Fig. 17a es que las energías máximas de cada curva aumentan con el valor de a para los SAQD tipo anillo ($a > 20$) y en cambio van disminuyendo a medida que crece el radio del cráter para los volcanes ($0 < a < 20$). Las mayores energías de enlaces se obtienen entonces para el anillo más delgado y para la lente, pues son los de mayor confinamiento estructural. La Fig. 17b muestra el caso cuando $\gamma = 3$ donde el fuerte confinamiento axial del campo magnético ha producido un fuerte tunelamiento hacia el centro en las curvas tipo anillo. Los SAQD tipo volcán han perdido los efectos del cráter y sus curvas son muy cercanas a la de la lente. Un resultado, casi paradójico, en la Fig. 17b es que las dos curvas más parecidas son las que corresponden a los valores de a más alejados ($a = 0$ y $a = 35$), signo de que el tunelamiento hacia el centro ha primado en estas estructuras. La conclusión es que cuando el campo magnético es lo suficientemente fuerte, los confinamientos descentrados causados por los SAQD tipo anillo son eliminados y el potencial efectivo más bajo es prácticamente el de una lente. Cuanto más descentrado es el confinamiento del anillo, más rápido puede ser anulado por el campo magnético gracias a su dependencia cuadrática respecto a ρ .

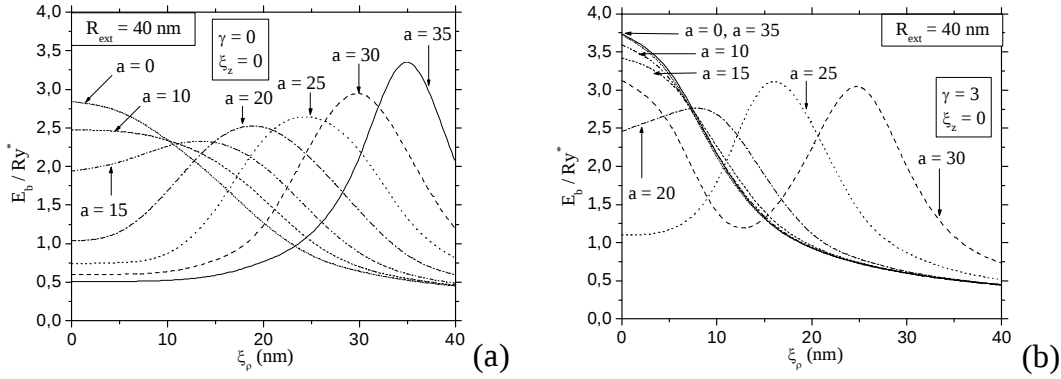


Fig. 17. Influencia del campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_\rho)$ D^0 s sobre el plano de sustrato en SAQDs cuyas formas pasan del anillo con bordes suaves, al volcán y luego a la lente. Los valores de a están en nanómetros.

La Fig. 18 muestra las curvas de densidad de estados de impureza con $\gamma = 0$ para los SAQDs estudiados en la Fig. 17. Todos las formas contienen el pico A característico de las impurezas lejanas a la nube electrónica, la altura de estos picos va disminuyendo conforme a decrece. Los picos B son las impurezas que se encuentran al interior del aro de los SAQD con forma de anillo. En realidad, la gráfica para $a = 35$ también contiene este pico B pero las donadoras axiales en este caso se encuentra casi tan lejanas de la nube electrónica como las que se encuentran a grandes distancias del eje y como consecuencia el pico B se confunde con el pico A. Con la letra C se indican unos escalones que representan a las donadoras en radios interiores al cráter de los SAQD tipo volcán ($a = 15$ y $a = 20$), éstos no alcanzan a ser picos porque no logra haber un número considerable de donadoras con iguales energías. Las letras D, E y F representan usualmente los picos de los máximos descentrados ($\xi_\rho \neq 0$) tal como se vio en el caso de anillos. Es curioso que la gráfica de $a = 10$ también tenga estos picos a pesar de tener un máximo en $\xi_\rho = 0$. A partir de la ecuación (2.34) se observa que un punto extremo del tipo $\partial E_b(\xi_\rho, \xi_z) / \partial \xi_\rho = 0$ en $\xi_\rho = 0$ causará una singularidad en la densidad de estados si y sólo si el orden del punto extremo es superior al cuadrático [$E_b - E_b(0) \sim (\xi_\rho)^k$ con $k > 2$]; esto implica máximos más planos y por tanto mayor probabilidad de que ciertas donadoras tengan la misma energía de enlace. Es esta diferencia la que explica por qué para $a = 0$ existe la cola tipo G mientras que en $a = 10$ hay picos en el máximo cuando $\xi_\rho = 0$. Como ya se sabe, los picos D, E y F se encuentran agrupados por pares de posiciones ξ_z . La separación entre los pares de picos para los valores de $a = 15$, 20 y 25 es imperceptible, lo que significa una alta simetría de las nubes electrónicas respecto al plano en $d_0/2$.

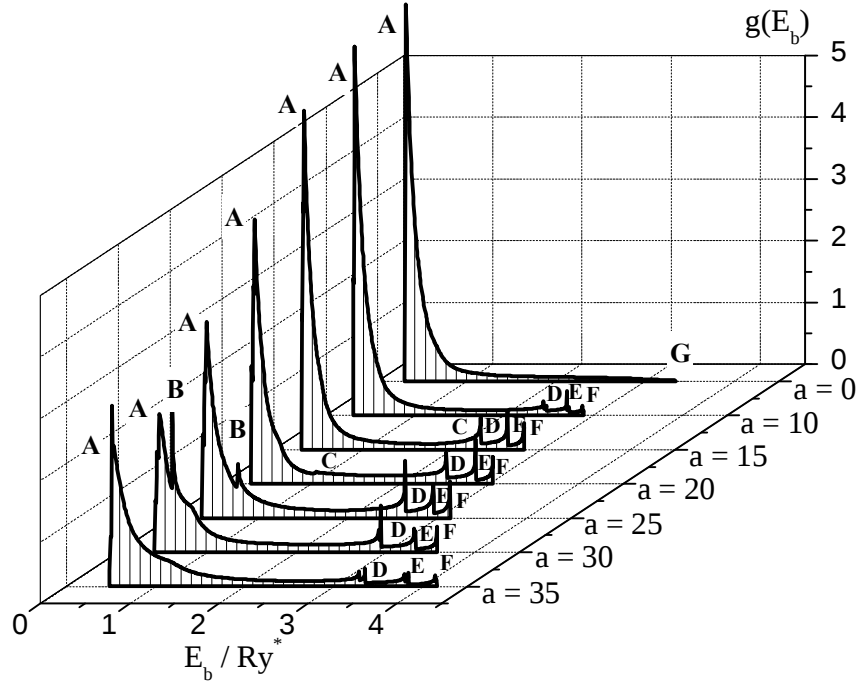


Fig. 18. DOS para D^0 s en SAQDs cuya forma varía del anillo con bordes suaves, luego al volcán y luego a la lente; en ausencia de campo magnético.

En la Fig. 19 se continúa el análisis de los sistemas estudiados en la Fig. 18 pero ahora con $\gamma = 3$. Los picos A han aumentado su altura y ahora los únicos relativamente bajos son los que pertenecen a anillos no muy descentrados ($a = 25$ y $a = 30$). El pico tipo B, de donadoras en partes interiores al aro del anillo, sólo se hace presente en $a = 25$ pues este parece ser el anillo que más conserva la nube electrónica en su interior y evita así el tunelamiento hacia el centro del aro. Los picos C ya fueron discutidos en la sección 4.2. Los picos D, E, y F siguen siendo importantes para los anillos anchos mientras que en los volcanes se han reducido bastante. Pese a esto, todos estos picos se han desaparecido indicando la disminución de la simetría de $d_0/2$. Esa separación existe incluso en la cola escalonada G de $a = 10$ (Véase aumento al fondo) indicando que el cráter aporta algo de asimetría. La cola G en $a = 35$ se diferencia de la lente en que contiene cinco escalones y no tres, dado que el confinamiento en z es de tamaño d_{wet} y no d_0 (Compárese con la Fig. 9). Las curvas en general se acercan más a la forma de lente y los SAQD que menos tienen esa tendencia homogeneizadora son los anillos anchos y no muy descentrados.

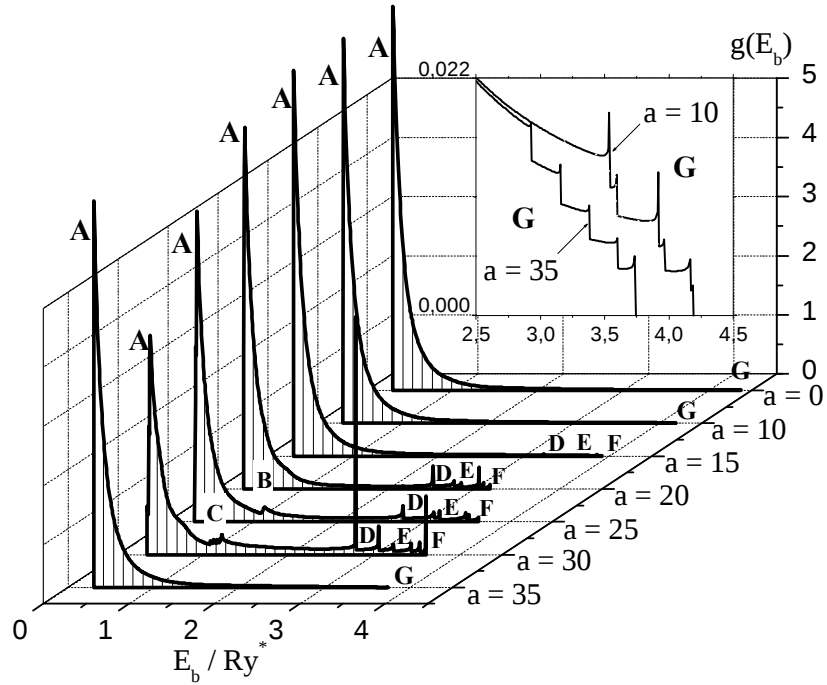


Fig. 19. Efecto de un campo magnético de intensidad $\gamma = 3$ sobre las curvas de DOS en la Fig. 18.

3.4 EFECTO SOBRE DISCOS, PIRÁMIDES Y ANILLOS CON BORDES RECTOS

La Fig. 20 muestra las curvas de energía de enlace en función de γ para donadoras sobre la capa del sustrato en los demás tipos de SAQD representados en las Fig. 1. En la Fig. 20a se analiza el caso del disco recto donde se aprecia una curva de $\gamma = 0$ mucho más achatada en comparación con la lente. Esto se debe a que la heteroestructura ofrece una barrera recta de confinamiento lateral únicamente hasta los 40 nm ; por lo que el electrón puede moverse con mucha mayor libertad dentro del SAQD y las energías de enlace son prácticamente iguales durante un buen intervalo de posiciones ξ_p . En la Fig. 20a el campo magnético cambia rápidamente la curva en forma de meseta de $\gamma = 0$ hacia formas más empinadas, haciendo que en valores de $\gamma = 2$ y $\gamma = 3$ las curvas se parezcan cada vez más a las mostradas en la Fig. 10. Esto demuestra que el confinamiento axial del campo magnético cobra importancia rápidamente. Por el contrario, en la Fig. 20b se aprecia que el efecto del campo magnético en las pirámides es muy pequeño. Entre los SAQD estudiados, la pirámide es la estructura con mayor confinamiento axial. El campo magnético cambia dramáticamente el aspecto de la nube electrónica si esta puede extenderse hacia valores relativamente grandes de ρ . La pirámide restringe tanto el movimiento alrededor del eje que no hay una gran probabilidad de que el campo magnético lo altere; la curva de $\gamma = 0$ en la Fig. 20b ya es lo bastante empinada. El caso de la pirámide truncada en la Fig. 20c resulta ser una mezcla de las curvas de Fig. 20a y Fig. 20b. La pirámide truncada brinda al electrón la misma libertad de movimiento de un disco para valores de $\rho < R_{\text{int}}$ y por tal razón las donadoras de esta zona tienen energías de enlace similares al disco. En cambio, para

valores de $\rho > R_{\text{int}}$, el confinamiento lateral aumenta a la misma velocidad que en una pirámide no trunca; por eso en esta zona las curvas de la Fig. 20c alcanzan rápido las energías de enlace pequeñas tal como la hacen las curvas de la Fig. 20b. Los SAQD de la Fig. 20a, la Fig. 20b y la Fig. 20c poseen la misma topología básica de las lentes (Fig. 10); por eso el efecto del campo magnético es similar: reforzar el confinamiento axial, ya sea este débil (disco) o fuerte (pirámide no trunca). Las curvas de la Fig. 20a son las únicas de su especie que no se cortan aproximadamente en $\xi_p = a_0^*$ ya que el movimiento electrónico es tan libre en el disco que las donadoras no sólo tienden a acercar el electrón al eje en un radio de Bohr sino también a apartarlo en dirección contraria.

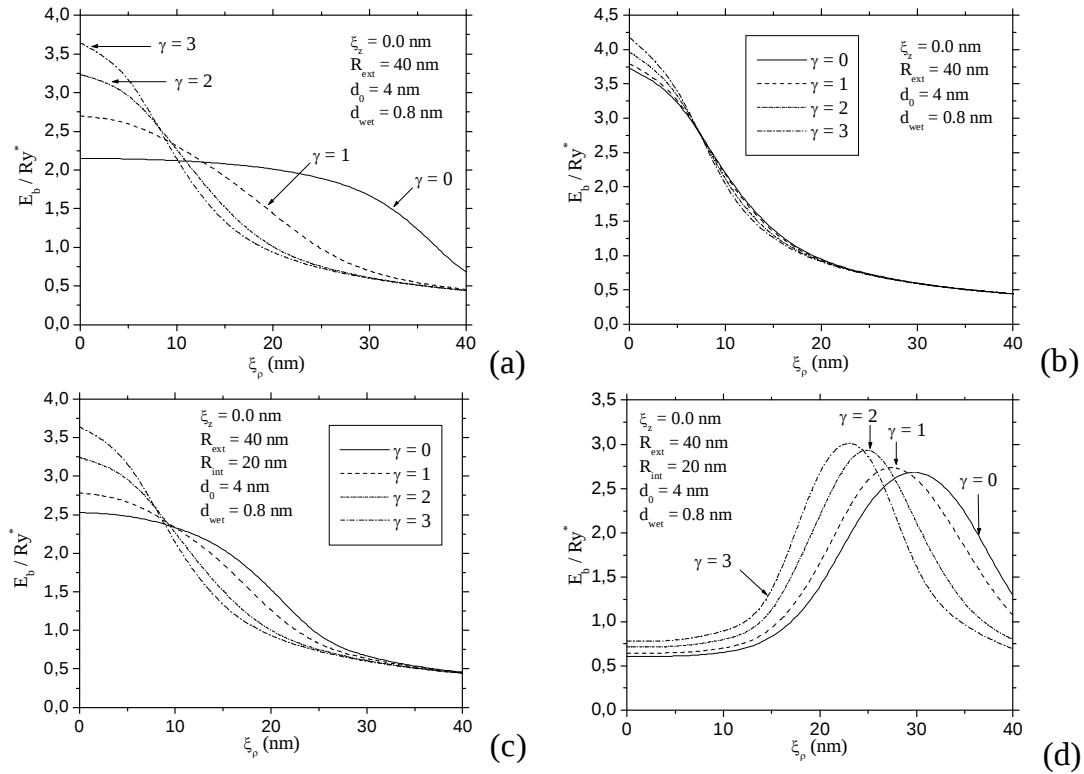


Fig. 20. Efecto de campo magnético sobre las curvas $E_b(\xi_p)$ de D^0 s ubicadas en el plano de sustrato de un SAQD con forma de a) Disco, b) Pirámide, c) Pirámide truncada y d) Anillo con bordes rectos.

La Fig. 20d muestra las energías de enlace en el caso de un anillo con bordes rectos y se aprecia una gran similitud con las curvas del anillo de bordes suaves de la Fig. 14. La diferencia esencial es que en $\gamma = 3$ no se aprecia todavía un gran tunelamiento hacia el centro del aro como sí ocurría en el caso de las lentes de bordes suaves. En este sentido, el anillo recto es más resistente a los efectos del campo magnético. Sin embargo, puede verse que el campo magnético altera más las E_b máximas en la Fig. 20d que en la Fig. 14a. Así que, en este otro sentido, el anillo recto es más sensible al campo magnético. La causa estriba en que el confinamiento descentrado del anillo recto está mejor definido (un pozo de profundidad constante con altas paredes rectas) pero a la vez permite mayor libertad de movimiento en su interior. Por eso la nube electrónica se puede acomodar mejor y así no hay

necesidad de tunelar hacia el centro del aro. Sin embargo, esto implica también una respuesta más elástica.

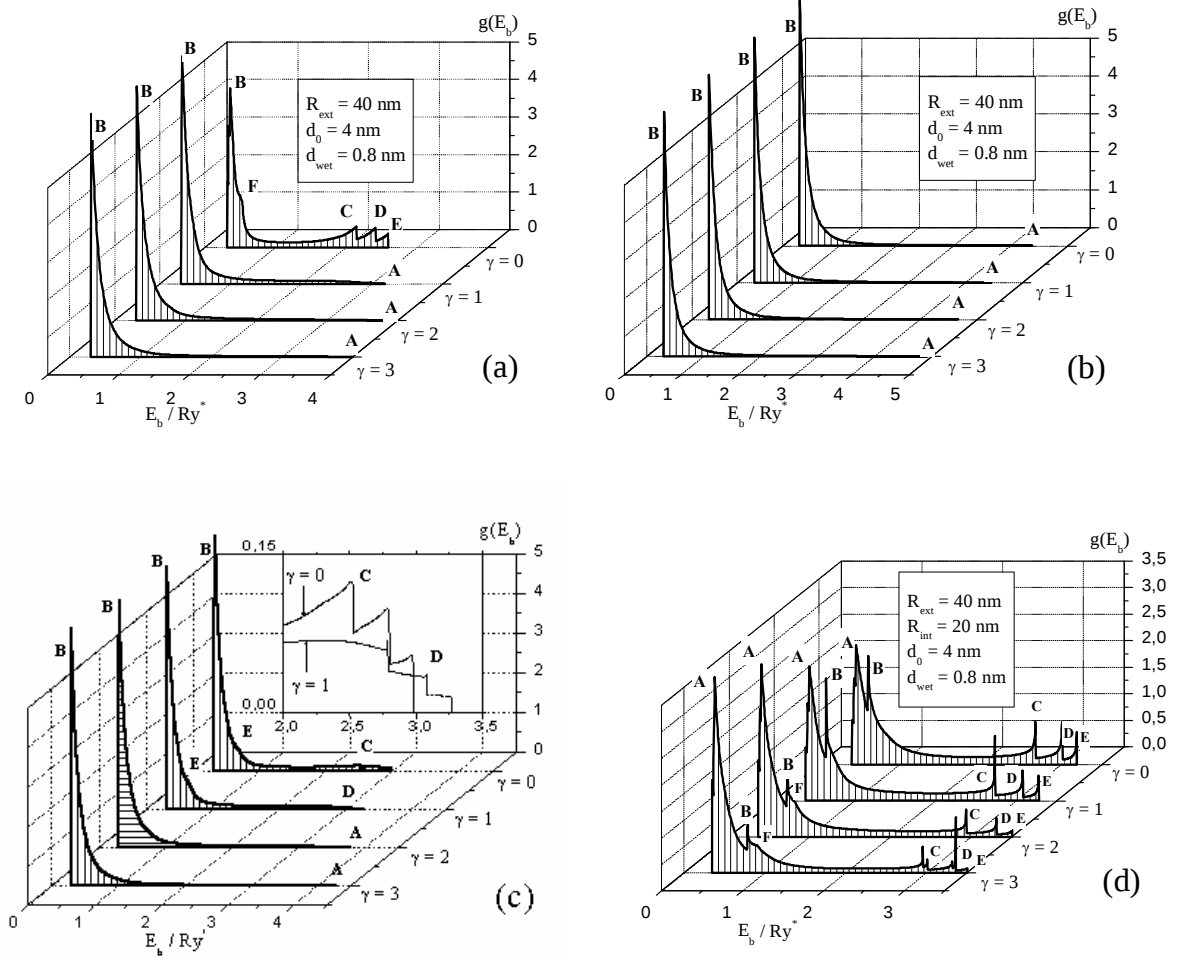


Fig. 21. Efecto de campo magnético sobre la DOS de D^0 s en SAQDs con forma de a) Disco, b) Pirámide, c) Pirámide truncada y d) Anillo con bordes rectos.

La Fig. 21a muestra curvas de densidad de estados de impureza para el SAQD con forma de disco. Cuando $\gamma = 0$ la curva tiene ciertas propiedades que son borradas por el campo magnético. Las curvas para $\gamma \neq 0$ sólo tienen las propiedades características de una lente: el pico B de donadoras de baja energía y la cola escalonada A. Los picos C, D y E cuando $\gamma = 0$ corresponden a las energías máximas en $\xi_p = 0$. El máximo para discos es bastante plano y por eso estos picos son tan pronunciados. Estos picos se encuentran muy bien agrupados por pares de valores de ξ_z ya que cuando $\rho < R_{ext}$ el disco tiene una forma simétrica respecto al plano horizontal en $d_0/2$. En la Fig. 21a también se aprecia un hombro F fruto de un abrupto punto de inflexión en las curvas de la Fig. 20a; el campo magnético suaviza el punto de inflexión y por tal razón el hombro F se va borrando. La Fig. 21b muestra las densidades de estado para una pirámide. Como se esperaba a partir de la Fig. 20b, las curvas no son afectadas considerablemente por el campo magnético salvo una ligera agudización en los picos B y las colas A. Igualmente, ya se observaba que el caso de una

pirámide truncada en la Fig. 20c es una especie de híbrido entre pirámides no truncas (en la región de bajas energías de enlace) y discos (en la región de altas energías de enlace). Los picos B son muy similares en todas las curvas y por eso las características de pirámide a bajas E_b apenas se manifiestan mediante una mayor agudeza. En cambio, las características de disco son visibles en los picos C (Véase aumento) y los hombros E aunque son mucho menos pronunciados que en la Fig. 21a. El aumento en la Fig. 20c muestra también la cola D para $\gamma = 1$ que es una mezcla entre las colas escalonadas A y las colas con picos C. Finalmente, la Fig. 21d muestra las curvas de densidad de estado para anillos con bordes rectos. Las características típicas del confinamiento descentrado se encuentran presentes para todos los valores de γ considerados: los picos B de donadoras al interior del aro y los picos C, D y E de las E_b máximas en $\xi_\rho \neq 0$. Entre más grande es γ , los picos B ocurren para valores mayores de E_b . La superposición de los pares de picos C, D y E refleja la mayor simetría respecto a $z = d_0 / 2$ que tienen los anillos con bordes rectos con respecto a los de bordes suaves. Sin embargo, aquí también se aprecia que el campo magnético logra separar los pares de picos debido a que acerca la nube electrónica a la pared interior del anillo, donde la capa húmeda propicia mayores energías de enlace para $\xi_z < d_0 / 2$. Con la letra F se designan unos hombros de puntos de inflexión que son acentuados por el campo magnético, estos hombros se deben a que las curvas de energía de enlace en la Fig. 20d tienden a agolparse sobre la pared interior del anillo recto. Es notable que incluso en Fig. 21d se aprecia la tendencia general del campo magnético a formar curvas de densidad de estados cuyas propiedades se limiten a los picos A con colas decrecientes sin detalles.

4. CONCLUSIONES

En conclusión presentamos algunos resultados de esta tesis:

- ❖ Se presentaron los resultados de cálculo de DOS de impurezas D^0 distribuidas en SAQD de manera aleatoria en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento del cristal. Se utilizaron procedimientos desarrollados anteriormente para otras heteroestructuras y se consideraron diferentes formas de SAQD, tales como disco, lente, pirámide, volcán y anillos tanto con bordes suaves como con bordes rectos. Para todas estas estructuras se calcularon curvas de dependencia de la energía de enlace en función de la distancia al eje de simetría. Con base en estas curvas, fueron construidos los histogramas de DOS.
- ❖ Se realizó un análisis detallado del efecto del campo magnético sobre las D^0 inmersas en lentes y anillos con bordes suaves, ya que se encontraron resultados no ordinarios con relación a lo que otros investigadores observaron en sistemas diferentes. Debido a una fuerte competencia entre el confinamiento estructural y el tunelamiento hacia el eje generado por el campo magnético, se observó una transformación brusca tanto de las curvas de energía de enlace como las de DOS. Este es un resultado nuevo con posibles aplicaciones en el futuro.
- ❖ Se encontró que la influencia del campo magnético sobre el espectro y la DOS de D^0 es muy sensible a las variaciones en la forma y tamaño del SAQD, así como a la presencia de capa húmeda. Los efectos más notorios fueron encontrados en anillos, luego en volcanes, discos, lentes y finalmente pirámides. En este último tipo de SAQD, casi no se encontraron efectos sobresalientes.
- ❖ Los resultados de esta tesis muestran que a través del campo magnético es posible modificar de manera controlada las propiedades electrónicas de SAQDs, compensándose de manera parcial las insuficiencias que se puedan presentar a causa del confinamiento estructural.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] S.E. Koonin, *Computational Physics* (Addison-Wesley Publishing Co., New York, 1986), p. 289.
- [2] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* (Springer, Berlin, 1996).
- [3] L. Jacak, P. Hawrylack and A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1997);
D. Leonard, K. Pond and P. M. Petroff, *Phys. Rev. B* **50**, 1168 (1994);
D. Granados and J. M. García *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401 (2003);
T. Raz, D. Ritter and G. Bahir, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003).
- [4] A. Lorke, R.J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J.M. García and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [5] S. Fraizzoli, F. Bassani and R. Buczko, *Phys. Rev. B* **41**, 5096 (1990);
F. J. Ribeiro and A. Latgé, *Phys. Rev. B* **50**, 4913 (1994);
J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong, *Phys. Rev. B* **50**, 1832 (1994).
- [6] T. Pang and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990);
S. Aktas, F. K. Boz and S. S. Dalgic, *Physica E* **28**, 96 (2005);
E. Niculescu, A. Gearba, G. Cone and C. Neguta, *Superlattices and Microstructures* **29**, 319 (2001).
- [7] F. J. Betancur, J. Sierra-Ortega, R.A. Escorcía, J.D. González and I. D. Mikhailov, *Physica B* **348**, 66 (2004);
F. J. Betancur, E. A. Orozco, J. D. González and I. D. Mikhailov, *phys. stat. sol. (b)* **242**, 1833 (2005).
- [8] G. Weber, P. A. Schulz and L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **38**, 2179 (1988);
I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. Escorcía and J. Sierra-Ortega, *phys. stat. sol. (b)* **234**, 590 (2002);
I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. Escorcía and J. Sierra-Ortega, *Phys. Rev. B* **67**, 156317 (2003).
- [9] I. D. Mikhailov, J. H. Marín and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 1636 (2005).
- [10] J. H. Marín, F. J. Betancur and I. D. Mikhailov, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1005 (2006) .
- [11] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981).
- [12] K. L. Janssens, F. M. Peeters and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **63**, 205311 (2001);
I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan. *Appl. Phys. Rev.* **89**, 5815 (2001).
- [13] B.B. MandelBrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1982).