

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA CONFINADA EN DOS
DISCOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE**

LIGIA ELENA JAIMES OSORIO

**Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ciencias
Escuela de Física
Agosto 2007**

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA CONFINADA EN DOS
DISCOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE**

Trabajo de grado: requisito parcial para optar el título de Físico

LIGIA ELENA JAIMES OSORIO

Director

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Agosto 2007**

Dedico este trabajo a:
Mis Queridos Padres
Nubia Osorio Díaz
Mario Jaimes León
A mi hermana y sobrinos

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a las personas quienes contribuyeron a dar forma a este trabajo, agradezco principalmente a mis padres por su incondicional apoyo.

A la Escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander.

Al profesor Carlos Leonardo Beltrán Ríos por la dirección de este proyecto de investigación.

Al Doctor Iliia Davidovich Mikhailov por compartir conmigo sus ingeniosas ideas, por ser un gran tutor en el área de la programación y por su colaboración incondicional.

A los compañeros de investigación del grupo FICOMACO, Jairo Marín Cadavid, por sus consejos, chistes, amabilidad y su gran amistad, que ofrece de manera incondicional. Janeth Fernández Pinto, por ser una compañera y amiga durante todo el proceso de formación en la carrera. William Gutiérrez, Juan Piña, Carlos Gómez (Cuervo), por brindarme su amistad.

A los profesores Javier Betancur, Dr. Harold Paredes y Francisco García, por toda la colaboración.

A Heiner Sarmiento por hacer parte de mi vida.

Y por último a los amigos, compañeros y demás que en alguna u otra ocasión me apoyaron, divertieron e incluso molestaron durante la realización de este proyecto.

CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN.....	8
INTRODUCCIÓN.....	10
1. GENERALIDADES.....	12
1.1 Sistemas Cuánticos de Baja Dimensionalidad.....	12
1.2 Impurezas Donadoras en Semiconductores.....	13
2. MODELO MATEMÁTICO.....	14
2.1 Geometría del Disco Cuántico.....	14
2.2 Perfil de Confinamiento.....	15
2.3 Aproximación de Masa Efectiva – (AME).....	16
2.4 Hamiltoniano para la Impureza en Unidades Efectivas.....	17
3. METODOLOGÍA EMPLEADA.....	18
3.1 Aproximación Adiabática (AA).....	18
3.2 Método de Barrido Trigonométrico.....	23
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	26
4.1 Energía de Correlación de la D^0 en Función del Radio de los Discos.....	27
4.2 Energías en Función de las Alturas de los Discos.....	32
4.3 Energía de Correlación en Función de la Posición de la Impureza.....	34
CONCLUSIONES.....	36
ANEXOS.....	37
Apéndice 1. Principio Variacional de Schrödinger.....	37
Apéndice 2. Un Análisis más Detallado de la Solución de la Integral (3.12).....	41
REFERENCIAS.....	43

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Fig.1.1. Esquema de una impureza donadora neutra D^0	13
Fig.2.1 Perfil del punto cuántico en forma de disco.....	14
Fig.2.2 Modelo de confinamiento para una donadora neutra D^0 en discos cuánticos acoplados verticalmente.....	15
Fig.3.1 Funciones par e impar par un pozo doble cuántico unidimensional.....	20
Fig.4.1 Esquema de la posición en el sistema de discos cuánticos verticalmente acoplados.....	26
Fig.4.2: Energía de la D^0 , la energía del electrón libre y la energía de enlace para el estado 1s como función de los radios de los discos para una distancia entre las bicapas $d = 2.0a_0^*$	27
Fig.4.3: Energía de enlace para el estado 1s en función de los radios.....	28
Fig.4.4: Energía de enlace para el estado 1s como función de los radios de los discos para diferentes distancias entre las bicapas.....	30
Fig.4.5: Energía de la D^0 para el estado 1s y 1p en función de los radios con dos alturas de punto cuántico.....	31
Fig.4.6: Energía del electrón para el estado 1s en función de las alturas de los puntos.....	32
Fig.4.7: Energía de correlación para el estado 1s en función de las alturas de los puntos.....	33
Fig. 4.8: Ilustración de1 sistema para el movimiento de la impureza.....	34
Fig.4.9: Energía de enlace en función de la posición de la impureza, para el estado 1s y 1p.....	34

RESUMEN

TÍTULO: ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA CONFINADA EN DOS DISCOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE*

AUTOR: Ligia Elena Jaimes Osorio**

PALABRAS CLAVES: donadora, energía de enlace, puntos cuánticos autoensamblados (SAQDs).

DESCRIPCIÓN: Se estudia el espectro energético de una donadora neutra D^0 , en un sistema compuesto por dos discos cuánticos idénticos y axialmente simétricos, los cuales están acoplados verticalmente. El ión de la donadora neutra esta siempre localizado sobre el eje de simetría axial, mientras el electrón esta obligado a permanecer dentro de cualquiera de los dos puntos cuánticos. Los discos se crecen sobre un sustrato de InAs y luego se recubren con una matriz de GaAs. Debido a que estos sistemas de baja dimensionalidad se caracterizan por poseer espesores muy pequeños en comparación con el radio, el análisis del espectro se realiza usando la aproximación adiabática (AA), la cual permite separar el movimiento rápido del electrón en la dirección de crecimiento del disco cuántico (dirección z), del movimiento lento del electrón en el plano perpendicular a la dirección z . Esta separación reduce el problema inicial del espectro energético de la donadora, en un problema de campo central simple en dos dimensiones con un potencial efectivo renormalizado. Para solucionar la correspondiente ecuación de onda bidimensional, se usa un procedimiento numérico basado en el método de barrido trigonométrico. Para determinar la incidencia de los factores geométricos sobre el espectro energético del sistema, se calcula la energía en función del radio de los discos, de las alturas de los puntos cuánticos, de la distancia de separación entre las capas, de la posición de la donadora y del espesor de la capa húmeda.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director)

ABSTRACT

TITLE: ENERGY SPECTRUM OF ON-AXIS DONORS IN VERTICALLY STACKED QUANTUM DISKS.

AUTHOR: Ligia Elena Jaimes Osorio**

KEY WORDS: donor, binding energy, quantum dot (QD).

ABSTRACT: We study the energy spectrum of on-axis donors in a heterostructure, consisting of two identical coaxial disk-shaped flat InAs quantum dots, imbedded inside a matrix of GaAs and deposited on vertically separated wetting layers. The ion of the neutral donor is always located on the symmetry axis while the electron is forced to remain in a permanent motion into the any of the two quantum dots. We use the adiabatic approximation in order to analyse the spectrum since these low dimensional systems are characterized by their so small thickness compared to their radii. This allows us to separate the rapid electron motion in the direction of the growing of the quantum disks (z direction) from the slow electron motion on the orthogonal plane to the z direction. Such a procedure reduces the initial problem of the on-axis donor energy spectrum to the simpler two-dimensional central force problem with renormalized effective potential. In order to solve the corresponding wave equation we use the numerical procedure based on the trigonometric sweep method. The energies of some low-lying levels are calculated as functions of the quantum disks radii, the heights of quantum dots, the thickness of the wetting layer, the donor position, and the separation between the quantum disks.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director)

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, los investigadores dedicados a la fabricación de nuevos materiales han crecido heteroestructuras semiconductoras de tamaño nanométrico, conocidos como sistemas de baja dimensionalidad. Las principales nanoestructuras semiconductoras más conocidas son pozos (QWs), hilos (QWWs) y puntos cuánticos (QDs) [1]. Lo que hace que la nanoestructura se convierta en un subconjunto especial de estructuras semiconductoras, es el confinamiento de los portadores de carga en una (QWs), dos (QWWs) o en tres (QDs) direcciones, debido a que las longitudes de onda de De Broglie de las partículas, son mayores que las dimensiones de estas nanoestructuras. Esto conlleva a que los portadores de carga tengan un movimiento restringido, haciendo emerger particularidades novedosas en las propiedades electrónicas y opto-electrónicas [2], las cuales son aplicables a la creación de nuevos dispositivos. A partir de ello se ha originado un nuevo campo de interés científico y tecnológico denominado nanotecnología [3].

Últimamente el interés se ha orientado hacia la fabricación de puntos cuánticos autoensamblados (SAQDs) y puntos cuánticos acoplados (CQDs), porque ellos ofrecen grandes perspectivas y gran potencial para futuras aplicaciones [2,3]. Su fabricación se basa en el método de crecimiento de Stranski-Krastanov [4], el cual consiste en depositar sobre un plano o substrato de un cristal semiconductor un segundo material con parámetro de red diferente. La diferencia entre las constantes de red crea ciertas tensiones sobre las capas del nuevo material que terminan por romper los planos superficiales creando pequeñas islas que dan lugar a los puntos cuánticos. Los SAQDs son muy versátiles en cuanto a la gran variedad de formas y tamaños, los cuales se pueden controlar durante el proceso de crecimiento.

De la multiplicidad de trabajos teóricos sobre los sistemas de baja dimensionalidad, sobresale el trabajo pionero de Bastard [5], donde se analizó teóricamente una impureza hidrógenoide en un pozo cuántico con paredes de potencial infinitas y finitas, en la aproximación de masa efectiva y usando el método variacional. Posteriormente se realizaron trabajos de cálculo de los niveles de energía de impurezas hidrógenoides neutras, en QDs esféricos y rectangulares [6].

Cuando se consideran puntos cuánticos acoplados verticalmente y se desprecia el espesor de éstos, se tienen estructuras conocidas con el nombre de bicapas paralelas. Recientemente se ha estudiado el comportamiento de excitones confinados en estos sistemas en ausencia de campos externos [7], donde se calculó la energía de enlace para el estado base de un excitón en función de la distancia entre las bicapas. En este modelo, los portadores están situados en capas diferentes y no existe confinamiento en la dirección radial. Al disminuir la distancia entre las bicapas el sistema se asemeja a un átomo de hidrógeno bidimensional, cuyo valor de energía es bien conocido e igual a $4.0Ry$.

Particularmente, en el grupo de investigación de Física computacional de materia condensada (FICOMACO) de la Escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander, se han llevado a cabo investigaciones sobre impurezas donadoras en sistema de bicapas paralelas en presencia de campos magnéticos. Este trabajo es realmente limitado, pues en el se ha despreciado el espesor de las bicapas [8,9]. Hay que anotar que el modelo de bicapas considerado anteriormente es una aproximación que no corresponde a una situación real, porque es imposible realizar un confinamiento completo de un portador dentro una monocapa, sin entrar en contradicción con el principio de incertidumbre, ya que la posición sería determinada con absoluta certeza, dando lugar a un momentum lineal y energía cinética prácticamente infinitas. Por esta razón es absolutamente necesario, considerar una situación más realista, donde las capas sean delgadas, pero de grosor finito. De esta manera se podrá estudiar el efecto de tamaño de los puntos y de separación entre ellos sobre el espectro energético.

En el presente trabajo se busca resolver las dificultades antes mencionadas, para lograrlo se considerará una estructura compuesta por dos puntos cuánticos con geometría de discos en forma de bicapas paralelas con un grosor pequeño pero finito, bajo la condición que la distancia entre capas sea variable y la localización de la donadora sea siempre sobre el eje de los dos puntos cuánticos.

1. GENERALIDADES

1.1 Sistemas Cuánticos de Baja Dimensionalidad

Los sistemas cuánticos de baja dimensionalidad más ampliamente conocidos son los pozos cuánticos (QWs), hilos cuánticos (QWWs), y puntos cuánticos (QDs), cuyas dimensionalidades son dos, uno y cero respectivamente. Estos sistemas se crecen a partir de dos semiconductores A y B, los cuales tienen parámetros de red diferentes y se disponen de manera alternada ABA. Los electrones y huecos son confinados en la interfase de la heterojuntura. Si el confinamiento es en una dirección, se habla entonces de QWs, si existe el confinamiento en dos direcciones ortogonales se habla entonces de QWWs y si el confinamiento se forma en las tres direcciones, se habla entonces de QDs, siendo estos últimos los que mayores expectativas han generado en la comunidad científica.

Las formas reguladas de estos puntos cuánticos se generan mediante procesos epitaxiales de crecimiento de cristales, como lo es la técnica de Stranski-Krastanov [4], esta técnica consiste en la deposición de una capa de material semiconductor de ancho igual a una molécula sobre un sustrato de otro material semiconductor con parámetro de red ligeramente diferente (menos del 7%). Esta diferencia en sus parámetros, crea tensiones superficiales entre los dos materiales provocando el surgimiento de islas de tamaño nanométrico conocidos como puntos cuánticos autoensamblados (SAQD). Este efecto se presenta consecutivamente, tanto en el mismo plano como en capas apiladas verticalmente, dando lugar a los llamados puntos cuánticos acoplados lateral y verticalmente [10]. Los portadores de carga, electrones o huecos, se confinan en estas estructuras restringiendo su movimiento.

1.2 Impurezas Donadoras en Semiconductores

Si en una red cristalina, por ejemplo de GaAs, se introduce un átomo tetravalente de tal manera que reemplace a un átomo trivalente de Ga, uno de los electrones de este átomo introducido no participa en el enlace químico y queda casi libre en la banda de conducción. Este electrón se encuentra débilmente ligado en una “órbita” de radio muy grande en torno al ión monovalente formando un sistema denominado D^0 , es decir sistema ión-electrón, el cual es muy similar a un átomo de hidrógeno. Tales sistemas son conocidos dentro de la física de los semiconductores como impurezas donadoras.

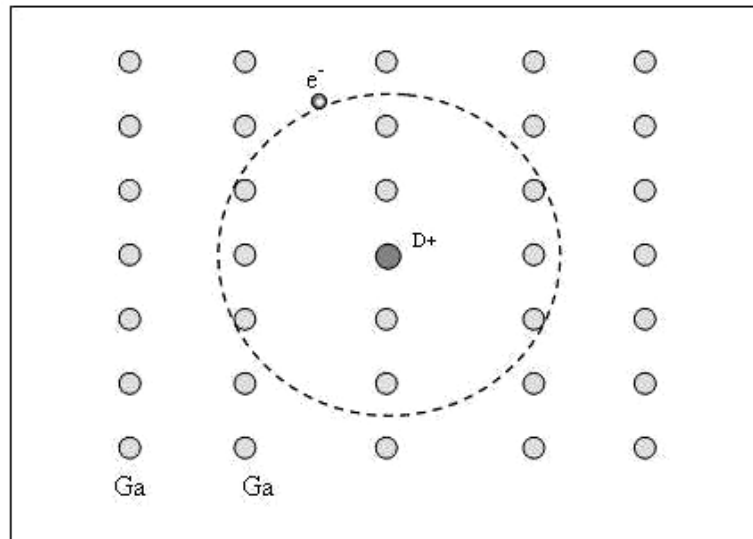


Figura 1.1: Donadora D^0

Cuando una impureza donadora se introduce dentro de una heteroestructura, la situación se hace considerablemente más compleja e interesante que en el cristal, debido principalmente a la presencia de un potencial de confinamiento, el cual surge por las diferencias en las brechas de energía de los semiconductores base. El confinamiento geométrico trae consigo algunos efectos interesantes, como es que la energía de enlace y la forma de la función de onda dependan notoriamente tanto de la forma y dimensiones de dicho confinamiento, como también de la posición de la impureza dentro de la heteroestructura.

2. MODELO MATEMATICO

En las secciones que se exponen a continuación se dará una descripción físico-matemática y se establecerán los diferentes parámetros geométricos que permitan modelar una donadora neutra D^0 confinada en un sistema de discos cuánticos acoplados verticalmente, donde el sistema ión-electrón se encuentra en cualquiera de los dos puntos cuánticos.

2.1 Geometría del Disco Cuántico

La morfología de los puntos cuánticos que vamos a usar para analizar nuestra donadora neutra se asume que tienen forma de disco. En la figura 2.1 se muestra uno de los dos puntos, pero es de advertir que el sistema completo que se va a estudiar está compuesto por dos discos apilados verticalmente y con eje de simetría común.

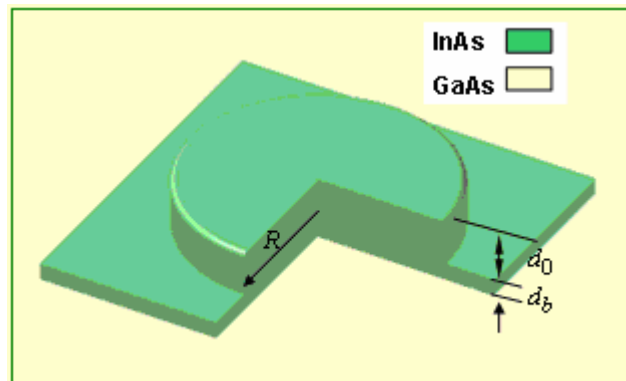


Fig.2.1: perfil del punto cuántico en forma de disco

El perfil del punto cuántico se puede describir por medio de la siguiente ecuación

$$h(\rho) = \begin{cases} d_b & \rho > R \\ d_0 + d_b & \rho < R \end{cases} \quad (2.1)$$

Donde d_b es el espesor de la capa húmeda en la que se encuentra el punto cuántico y d_0 es la distancia medida desde la capa húmeda hasta la parte superior del disco.

2.2 Perfil de Confinamiento

En el modelo que se propone, el electrón se ubica en el plano del disco inferior o superior y la impureza donadora se encuentra localizada sobre el eje de simetría común de los puntos cuánticos. Esto significa que la posición del ión siempre está sobre este eje; es decir, su coordenada radial es siempre cero. La distancia de separación entre las bicapas, d , permanece constante, así como se muestra en el siguiente esquema:

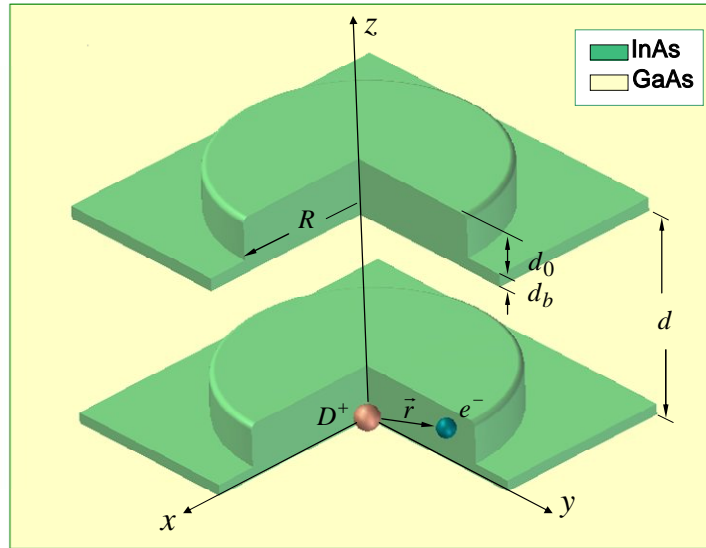


Fig. 2.2 modelo de confinamiento para una donadora neutra D^0 en discos cuánticos acoplados verticalmente

El potencial de confinamiento, debido a la discontinuidad que existe entre las bandas de conducción en las juntas de los puntos cuánticos acoplados verticalmente, VCQDs, se describen en coordenadas cilíndricas:

$$V_{\rho}(\rho, z) = \begin{cases} V_0 & [z < 0 \cup (h(\rho) < z < d) \cup (z > d + h(\rho))] \\ 0 & [z > 0 \cap z < h(\rho)] \cup [z < d + h(\rho)] \end{cases} \quad (2.2)$$

2.3 Aproximación de Masa Efectiva – (AME)

En el tratamiento teórico de los puntos cuánticos se utiliza el modelo de aproximación de masa efectiva para analizar una donadora neutra D^0 , ya que los estados ligados de los electrones de una impureza en un semiconductor en el volumen, pueden tratarse de manera simplificada mediante esta aproximación (AME).

La ecuación de Schrödinger del electrón en una red cristalina perfecta viene dada por una expresión en donde el potencial de la red posee simetría de la misma. Los estados estacionarios de un electrón de masa m en dicho campo se llaman estados mono-electrónicos. Estos estados son cuasi-estacionarios ya que los efectos de la estructura originan procesos de relajación, sin embargo en materiales puros y a bajas temperaturas el proceso de relajación es muy grande, permitiendo que en primera aproximación se puedan despreciar. Esto significa que las autofunciones de la ecuación de Schrödinger satisfagan las funciones de Bloch, en la que si se hace un estudio de la energía en los extremos de las bandas de conducción esta aproximación toma fuerza ya que permite obtener expresiones cualitativamente correctas.

En esta aproximación, la función de onda de los estados electrónicos es igual al producto de la función de Bloch, $\psi_{n,k_0,\alpha}(r)$, correspondiente al extremo de la banda n , con vector de onda k_0 , por una función ϕ_α que varía suavemente en distancias del orden del período de la red cristalina:

$$\psi_{n,k_0,\alpha}(r) = u_{n,k_0}(r)\phi_\alpha(r) \quad (2.3)$$

La función envolvente ϕ satisface la ecuación de onda:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) - E \right] \phi(r) = 0 \quad (2.4)$$

siendo $V(r)$ el potencial no periódico y m^* es la masa efectiva. Esto quiere decir que cuando se estudian los estados electrónicos extendidos, la influencia del potencial periódico de la red puede tenerse en consideración sustituyendo en el Hamiltoniano total la masa del electrón por una masa efectiva. Si sobre el cristal actúa un campo externo que varía de forma suave, al estudiar los estados extendidos, también puede reducirse la influencia del campo periódico de la red cambiando la masa del electrón libre por su masa efectiva. Esta masa efectiva es constante *sólo* para el modelo de banda parabólica, pues matemáticamente corresponde a la concavidad de la curva que describe la relación de dispersión del electrón en el cristal. En general, esta masa efectiva es dependiente de la energía del portador, y por lo tanto, queda determinada por la estructura de bandas del material [11].

2.4 Hamiltoniano Para la Impureza en Unidades Efectivas

El hamiltoniano para una donadora neutra D^0 localizada en el eje común de los dos puntos cuánticos acoplados verticalmente se puede escribir como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_\rho(z, \rho) + V_{coul} \quad (2.5)$$

Donde $V_\rho(z, \rho)$ es el potencial de confinamiento que fue descrito en la ecuación (2.2) y V_{coul} es el potencial de interacción Coulombiana entre el electrón y el ión, cuya forma es:

$$V_{coul} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \quad (2.6)$$

Para simplificar el estudio, se considera conveniente usar unidades adimensionales, esto significa usar como unidad de longitud al radio de Borh efectivo $a_0^* = \frac{\epsilon\hbar}{m^* e^2}$ y al Rydber efectivo como unidad de energía $R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}}$.

En nuestro estudio se considera los parámetros de los materiales iguales, es decir, las diferencias en las masas efectivas del electrón m^* y constantes dieléctricas ϵ , en los pozos y en las barreras no se incluirán en los cálculos, lo cual implica que la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica tanto dentro como fuera de los puntos son $m^* = 0.023m_0$ y $\epsilon = 15.2$, respectivamente, siendo m_0 la masa para el electrón libre. De esta manera el radio de Bohr y Rydberg efectivo para el electrón, toman los valores de 35.04nm y 1.35meV respectivamente [12].

Esta sustitución permite que el Hamiltoniano del sistema se pueda escribir de forma más sencilla, obteniéndose un Hamiltoniano completamente adimensional:

$$H = \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V_\rho(z, \rho) \quad (2.7)$$

3. METODOLOGÍA EMPLEADA

3.1 Aproximación Adiabática – (AA)

La ecuación de Schrödinger adimensional para una D^0 en coordenadas cilíndricas es:

$$\left\{ \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V_\rho(z, \rho) \right\} \psi(\rho, \theta, z) = E_{n,m}^\pm \psi(\rho, \theta, z) \quad (3.1)$$

donde E es la energía del sistema y $\psi(\rho, \theta, z)$ es la función de onda para el electrón.

La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano (3.1) no es completamente separable, pues la presencia del potencial de confinamiento y del potencial Coulombiano no lo permite, aun ni para la situación más simple, la cual corresponde al estado base. No obstante, para encontrar los autovalores de la energía, se puede sacar provecho de las características experimentales de los SAQDs que demuestran que el espesor es menor que el radio ($d_0 \ll R$), pues bajo esta condición será posible hacer uso de la aproximación adiabática.

Para iniciar se realizará un “rescalamiento” de las coordenadas que aparecen en la ecuación de onda con Hamiltoniano (3.1) de tal manera que los desplazamientos en dirección radial ρ y a lo largo del eje z llegan a ser del mismo orden, para ello se hará la siguiente sustitución:

$$z = d_0 \tilde{z} \quad \text{y} \quad \rho = R \tilde{\rho} \quad (3.2)$$

Bajo esta transformación se puede ver que el movimiento electrónico se limita a la región $0 < \tilde{\rho}, \tilde{z} < 1$. Luego la ecuación de Schrödinger para el electrón libre en las nuevas coordenadas se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{1}{d_0^2} \Delta_{\tilde{z}} \tilde{\psi} - \frac{1}{R^2} \Delta_{\tilde{\rho}\tilde{\theta}} \tilde{\psi} + \tilde{V}(\tilde{z}, \tilde{\rho}) \tilde{\psi} = E \tilde{\psi} \quad (3.3)$$

$$\tilde{V}(\tilde{z}, \tilde{\rho}) = \tilde{V}_{\tilde{\rho}}(\tilde{z}, \tilde{\rho}) + \tilde{V}_{coul}$$

La ecuación de Schrödinger (3.3) con función de onda monoeléctronica $\tilde{\psi}(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ tiene un aspecto similar al caso de un átomo hidrógeno libre [13,14], el cual se compone de un protón, cuya masa es mucho mayor que la del electrón y sometidos a un potencial de tipo Coulombiano. En nuestro caso, la ecuación (3.3) se puede interpretar como si describiera el caso de dos partículas que interactúan a través del potencial $\tilde{V}(\tilde{z}, \tilde{\rho})$, donde una de

ellas, la que describe al electrón, en el caso de la comparación con el átomo de hidrógeno, tiene un movimiento unidimensional y se desplaza a lo largo del eje z con una masa d_0^2 y su energía cinética está dada por el primer término de la ecuación (3.3), mientras la segunda de masa R^2 está restringida a moverse en el plano X-Y y su energía cinética corresponde al segundo término de la ecuación (3.3). Al ser $R \gg d_0$, resulta obvio que estamos frente al caso de dos partículas, una ligera que se mueve rápidamente, pues su energía cinética es mucho mayor que la energía cinética de la partícula pesada. Para este tipo de situación, en la teoría de la mecánica cuántica se ha establecido un proceso de solución conocido como *aproximación adiabática* [13,14] y cuyos resultados están acordes con la experimentación.

La función de onda para el sistema bajo análisis puede escribirse como $\psi(\rho, \theta, z) = f_z^\pm(z, \rho) \phi_\pm^m(\rho, \theta)$, lo cual permite separar variables y escribir la ecuación de onda en dirección z así:

$$-\frac{\partial^2 f_z^\pm(z, \rho)}{\partial z^2} + V_\rho(z, \rho) f_z^\pm(z, \rho) = E_z^\pm(\rho) f_z^\pm(z, \rho) \quad (3.4)$$

Esta ecuación describe un problema clásico de un sistema de doble pozo finito unidimensional, siendo la solución analítica para el nivel base y el primer estado excitado como:

$$f_z^\pm(z, \rho) = \begin{cases} \pm D e^{\beta(z+z_2)} & z < -z_2 \\ \mp A^* \text{sen}k(z+z_1) \pm B^* \cos k(z+z_1) & -z_2 < z < -z_1 \\ CX_\pm & |z| < z_1 \\ A^* \text{sen}k(z-z_1) + B^* \cos k(z-z_1) & z_1 < z < z_2 \\ D e^{\beta(z-z_2)} & z > z_2 \end{cases} \quad (3.5)$$

donde $\beta = \sqrt{V_0 - E_z^\pm(\rho)}$, $k = \sqrt{E_z^\pm(\rho)}$, y $X_\mp = \begin{cases} \cosh \beta z \\ \sinh \beta z \end{cases}$.

Los valores base de $E_z^\pm(\rho)$, resultan siendo la menor raíz real de las ecuaciones trascendentes:

- Ecuación trascendente par:

$$\{B * k - A * \beta^2\} * \text{sen}(\beta * z_2) + \{B + \beta * k * A\} * \text{cos}(\beta * z_2) = 0 \quad (3.6a)$$

- Ecuación Trascendente impar:

$$\{A * k^2 - B * \beta^2\} * \text{sen}(\beta * z_2) + \{A + \beta * k * B\} * \text{cos}(\beta * z_2) = 0; \quad (3.6b)$$

con $A = \cosh(k * z_1)$ y $B = \text{senh}(k * z_1)$

La función $f_z^\pm(z, \rho)$ describe el movimiento rápido en dirección vertical dentro del disco inferior o superior. En el primer caso, $f_z^\pm(z, \rho) = c[f_s^+(z, \rho) + f_A^-(z, \rho)]$ y en el segundo caso $f_z^\pm(z, \rho) = c[f_s^+(z, \rho) - f_A^-(z, \rho)]$, siendo cada una de estas la combinación lineal de una función simétrica o par y de una función anti-simétrica o impar, que describe el estado base de la energía y el primer estado excitado. La constante c describe el factor de normalización el cual para nuestro caso toma el valor de $1/\sqrt{2}$.

En la figura 3.1, se muestran el estado base (función simétrica) y el primer estado excitado (función anti-simétrica)

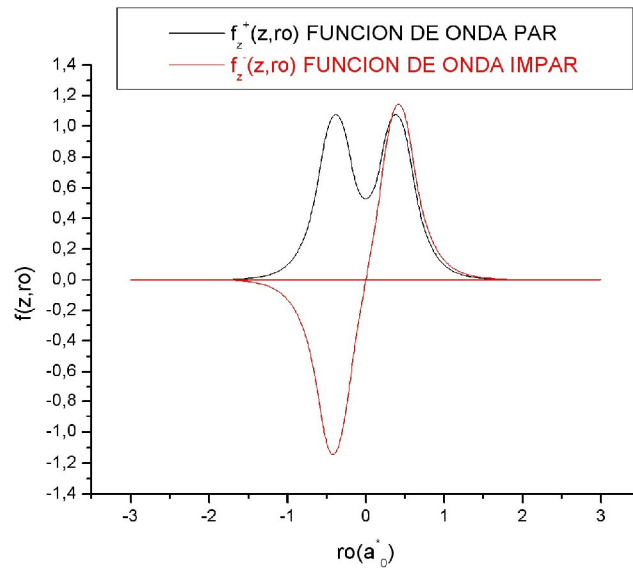


Fig.3.1 Funciones par e impar par un pozo doble cuántico unidimensional

Prosiguiendo con el método de Aproximación Adiabática, es posible separar la función $\phi_{\pm}^m(\rho, \theta)$ que describe el movimiento lento dentro de la capa.

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \left(E_z^{\pm} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right) \right] \phi_{\pm}^m(\rho, \theta) = E_{m,n}^{(\pm)} \phi_{\pm}^m(\rho, \theta) \quad (3.7)$$

Esta ecuación se analiza mediante el uso del principio variacional de Schrödinger el cual establece que la funcional: $F[\phi] = \langle f_z^{\pm} \phi_{\pm}^m | H - E_{m,n}^{(\pm)} | f_z^{\pm} \phi_{\pm}^m \rangle$ debe ser mínima. Esto permite demostrar que la función ϕ_{\pm}^m satisface la una ecuación de un problema de campo central¹:

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \tilde{V}_{\pm}(\rho) \right] \phi_{\pm}^m(\rho, \theta) = E_{m,n}^{(\pm)} \phi_{\pm}^m(\rho, \theta) \quad (3.8)$$

donde el potencial efectivo es de la forma:

$$\tilde{V}_{\pm}(\rho) = \begin{cases} \frac{E_z^+(\rho) + E_z^-(\rho)}{2} - I(\rho) & 0 < \rho < R \\ V_0 - I(\rho) & \rho > R \end{cases} \quad (3.9)$$

Con,

$$I(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\rho, z) dz}{\sqrt{\rho^2 + (z - Z_i)^2}}; \quad F(\rho, z) = [f_+^2(\rho, z) + f_-^2(\rho, z) \pm 2f_+(\rho, z)f_-(\rho, z)] \quad (3.10)$$

Para poder solucionar esta integral se debe hacer un cambio de variables $z = Z_i + x$; $dz = dx$, ya que ésta presenta una singularidad para valores pequeños de ρ . Aquí son consideradas dos integrales, una con x positiva y otra, con x negativa, como se ve en la siguiente expresión:

$$I(\rho) = \int_0^{\infty} \frac{F(\rho, Z_i + x) + F(\rho, Z_i - x)}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx; \quad (3.11)$$

¹ El análisis con más detalle se describe en el apéndice 1

Cabe resaltar que para cálculos numéricos no existe un punto en el infinito, entonces para efectos de programación necesitamos definir hasta donde vamos a integrar (infinito aproximado) el cual suponemos de la forma $Z_{\max}(\rho) = 2 * (d + d_b + h(\rho))$, donde d es la distancia de separación entre los puntos y d_b es el valor de la capa húmeda.

$$I(\rho) \approx \int_0^{Z_{\max}(\rho)} \frac{F(\rho, Z_i + x) + F(\rho, Z_i - x)}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx; \quad (3.12)$$

Esta última integral no tiene singularidad para valores de ρ finitos, sólo tiene la singularidad cuando $\rho = 0$, es decir, $I(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \infty$ (ya que para $\rho = 0$ la integral diverge y se tiende al infinito). Por eso, escogiendo un valor ε suficientemente pequeño estimaremos la integral de la siguiente manera²:

$$I(\rho) \approx \begin{cases} I_0(\rho); & \varepsilon < \rho < R_0 \\ A + \frac{B}{\rho}; & \rho < \varepsilon \end{cases}; \quad I_0(\rho) = \int_0^{Z_{\max}(\rho)} \frac{F(\rho, Z_i + x) + F(\rho, Z_i - x)}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx \quad (3.13)$$

Si retomamos otra vez, el potencial depende sólo de la variable radial, entonces la función ϕ_{\pm}^m puede expresarse como el producto de dos funciones:

$$\phi_{\pm}^m(\rho, \theta) = f_{\rho}^{\pm}(\rho) e^{im\theta} \quad (3.14)$$

El término exponencial de la solución (3.14) expresa la simetría azimutal del Hamiltoniano y se describe a través del número cuántico m . Esto permite que la función $f_{\rho}^{\pm}(\rho)$ satisfaga una ecuación de onda unidimensional:

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + \tilde{V}_{\pm}(\rho) \right] f_{\rho}^{\pm}(\rho) = E_{m,n}^{(\pm)} f_{\rho}^{\pm}(\rho) \quad (3.15)$$

Finalmente, la función de onda completa correspondiente a los niveles energéticos $E_{m,n}^{(\pm)}$ se encuentran como:

$$\psi(\rho, \theta, z) = c [f_s^+(z, \rho) + f_A^-(z, \rho)] e^{im\theta} f_{\rho}^{\pm}(\rho) \quad (3.16)$$

² Un análisis mas detallado de la solución de la integral $I(\rho)$, se muestra en el Apéndice 2

3.2 Método de Barrido Trigonométrico.

La complejidad de la ecuación de Schrödinger (3.15), obtenida en la sección anterior para el problema de la impureza en el sistema de bicapas y la cual describe el movimiento lento, exige la utilización de métodos numéricos para encontrar su solución, para esto se utilizará el “*método de Barrido Trigonométrico*”, el cual permite resolver la ecuación de Schrödinger en el espacio de fase, es decir, usando coordenadas polares de Poincaré [15-17].

Lo primero que hay que notar de esta ecuación (3.15) es que el potencial efectivo escogido anteriormente, presenta una singularidad en el origen $\tilde{V}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{B}{\rho}$ y esto implica que las soluciones de la ecuación de onda para diferentes estados, deben satisfacer unas condiciones especiales.

Si denotamos R'' y R' como la segunda y primera derivada de $f_\rho^\pm(\rho)$ respecto a ρ y consideramos la ecuación de onda para los estados con diferentes momentos angulares m tenemos:

$$R''(\rho) + \frac{R'(\rho)}{\rho} - \left[\frac{m^2}{\rho^2} + \tilde{V}_\pm(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)} \right] R(\rho) = 0 \quad (3.17)$$

Ahora se buscan las condiciones de contorno de manera que la función de onda sea finita en el origen y nula en el infinito. Estas condiciones generan problemas en los cálculos numéricos, pero para evitar estos inconvenientes se hace la sustitución

$$\begin{aligned} R(\rho) &= \rho^m u(\rho) \\ R'(\rho) &= \rho^m u'(\rho) + m\rho^{m-1} u(\rho) \\ R''(\rho) &= \rho^m u''(\rho) + 2m\rho^{m-1} u'(\rho) + m(m-1)\rho^{m-2} u(\rho) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Reemplazando estos cambios en (3.17) lo cual lleva a una nueva función $u(\rho)$, se obtiene una nueva ecuación, donde puede verse que la singularidad cuadrática ha sido removida.

$$u''(\rho) + \frac{2m+1}{\rho} u'(\rho) + \left[E_{m,n}^{(\pm)} - \tilde{V}_\pm(\rho) \right] u(\rho) = 0 \quad (3.19)$$

con $m = 0, 1, 2, \dots$ y $0 < \rho < R$.

Cuando $\rho \rightarrow 0$ en esta ecuación (3.19) son solo importantes los términos con las singularidades:

$$\frac{2m+1}{\rho} u'(\rho) + \frac{B}{\rho} u(\rho) = 0; \quad m = 0, 1, 2, \dots; \quad \rho \rightarrow 0 \quad (3.20)$$

De aquí se obtiene la condición inicial para ecuación (3.19):

$$\frac{u'(0)}{u(0)} = \frac{-B}{2m+1}; \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.21)$$

Para completar el problema de valores propios hay que adicionar la condición en otra frontera, la cual se puede obtener al cocer con la solución exacta en la región fuera del disco.

Esta condición puede hallarse notando que la función $E_z^\pm(\rho)$ se hace constante a partir de $\rho \geq R$. Esto se debe a que la dependencia de $E_z^\pm(\rho)$ se hace a través de la función $h(\rho)$ la cual comienza a hacerse igual d_b a partir de $\rho > R$. Esto permite mostrar que la solución analítica de (3.19) para $\rho > R$ es:

$$u(\rho) = \frac{K_m \left(\rho \sqrt{\tilde{V}_\pm(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)}} \right)}{\rho^m}; \quad \rho > R \quad (3.22)$$

Reemplazando en (3.20) se obtiene:

$$\frac{u'(R)}{u(R)} = \frac{K'_m(R)}{K_m(R)} * \left(\sqrt{\tilde{V}_\pm(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)}} \right) - \frac{m}{\rho} \quad (3.23)$$

Aplicación del Barrido Trigonométrico

Para resolver el problema de contorno, se utiliza el “*método de Barrido Trigonométrico*” en el cual la ecuación diferencial de segundo orden (3.19) se reduce a otra ecuación de primer ordena través de cambio de coordenadas polares de Poincaré [15-17]:

$$\begin{aligned} u(\rho) &= A(\rho) \cos(\theta(\rho)) \\ u'(\rho) &= A(\rho) \operatorname{sen}(\theta(\rho)) \\ \tan(\theta(\rho)) &= \frac{u'(\rho)}{u(\rho)} \end{aligned} \quad (3.23)$$

La ecuación diferencial reducida que se obtiene aplicando este cambio de coordenadas es:

$$\theta'(\rho) = -\left[\text{sen}^2\theta(\rho) + \nu(\rho)\cos^2\theta(\rho) + w(\rho)\text{sen}\theta(\rho)\cos\theta(\rho)\right] \quad (3.24)$$

evaluando en las fronteras, encontramos las condiciones de contorno:

$$\theta(0) = -a \tan\left[\frac{B}{2m+1}\right]; \quad \theta(R) = -a \tan\sqrt{\tilde{V}_{\pm}(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)} - \pi * n}; \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

Una vez encontrada la función $\theta(\rho)$, la amplitud $A(\rho)$ se puede hallar por medio de la relación:

$$A(\rho) = \exp\left\{\int_0^\rho [(\cos\theta(\rho) - \nu(\rho))\text{sen}\theta(\rho)\cos\theta(\rho) - w(\rho)\text{sen}^2\theta(\rho)]d\rho\right\} \quad (3.26)$$

Siendo las funciones $\nu(\rho)$ y $w(\rho)$ descritas como:

$$\nu(\rho) = \left[E_{m,n}^{(\pm)} - \tilde{V}_{\pm}(\rho)\right] \quad (3.27)$$

$$w(\rho) = \frac{2m+1}{\rho}$$

La ecuación (3.24) junto con las condiciones de contorno enunciadas anteriormente, define un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden, el cual se puede resolver de manera numérica para cada parámetro de energía, bajo un soporte computacional.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Sin lugar a dudas, el aspecto teórico-experimental de mayor importancia en el análisis de las diferentes heteroestructuras semiconductoras, es el estudio del espectro energético a partir de las cual es posible determinar, la dependencia que existe entre la energía y la morfología de las nanoestructuras. En esta sección se hace un análisis, lo más minucioso posible, de los resultados obtenidos para el espectro energético de una donadora neutra D^0 confinada en dos discos cuánticos de InAs/GaAs muy delgados, los cuales se encuentran apilados verticalmente. La donadora neutra D^0 en todos nuestros cálculos, será siempre ubicada en el punto cuántico superior, como se observa en la siguiente la figura 4.1

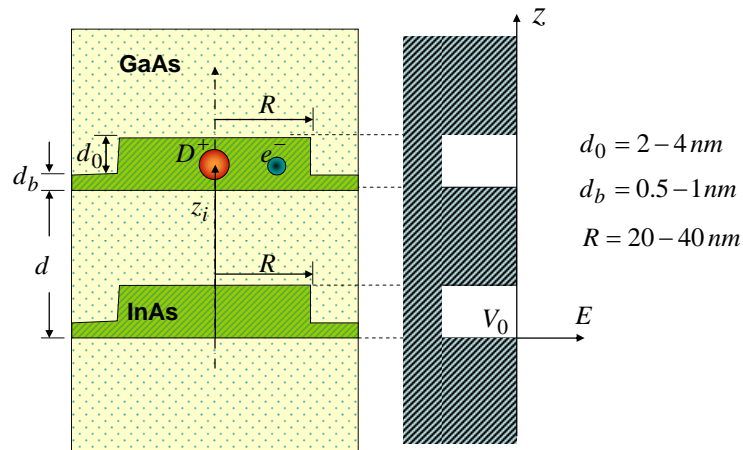


Figura 4.1: Esquema de la posición de la donadora en el sistema de discos cuánticos verticalmente acoplados

Los resultados obtenidos se basan en el cálculo de la energía de enlace: $E_{corr}(n, m, R, d, d_0) = E_{ele}(n, m, R, d, d_0) - E_{D^0}(n, m, R, d, d_0)$, siendo $E_{ele}(n, m, R, d, d_0)$ la energía del electrón sin la impureza presente y $E_{D^0}(n, m, R, d, d_0)$ la energía para el electrón bajo la interacción con la impureza en el estado (n, m) , y la forma como ésta se ve afectada cuando se modifican los diferentes factores geométricos que caracterizan el sistema bajo análisis, esto es: radio (R), separación (d) y altura de los discos cuánticos (d_0). La expresión para la energía de correlación tiene como nivel de referencia el estado base del electrón, sin presencia de la impureza; es decir, cuando n y m son cero.

4.1 Energía de Enlace de la D^0 en función de R

A fin de tener mayor claridad acerca de la manera como varía la ecuación con el radio de la nanoestructura, se ha hecho una gráfica (figura 4.2) en la que se muestra el comportamiento de la energía del electrón libre (E_{ele}), la energía del electrón en presencia de la impureza (E_{D^0}) y la diferencia entre ellas $E_{corr} = E_{ele} - E_{D^0}$, siendo E_{corr} la energía para liberar al electrón. Como se puede apreciar en esta figura, la curva más alta le corresponde a la energía del electrón libre (E_{ele}), como era de esperarse, debido a que el electrón está sometido solamente al confinamiento de la heteroestructura. La energía para el electrón en presencia de la impureza (E_{D^0}) es inferior a la energía E_{ele} , pues E_{D^0} además de sentir el potencial de confinamiento debido a la heteroestructura, siente el potencial Coulombiano (presencia de la impureza), por su carácter atractivo contribuye a disminuir la energía haciendo que siempre se ubique por debajo de E_{ele} . Finalmente, la curva más baja corresponde a la E_{corr} la cual como ya se dijo se obtiene de efectuar la diferencia entre E_{ele} y E_{D^0} .

Se puede ver como la E_{corr} disminuye con el incremento del radio, y para grandes valores de éste cuando el sistema se haga más 2D, la energía debería acercarse al valor de $4R_y^*$ correspondiente al átomo de hidrógeno bidimensional, no obstante la energía de E_{corr} está por debajo de este valor debido a que el disco tiene una altura de $0.3a_0^*$, que si bien es pequeña, hace que el confinamiento en z no sea completo.

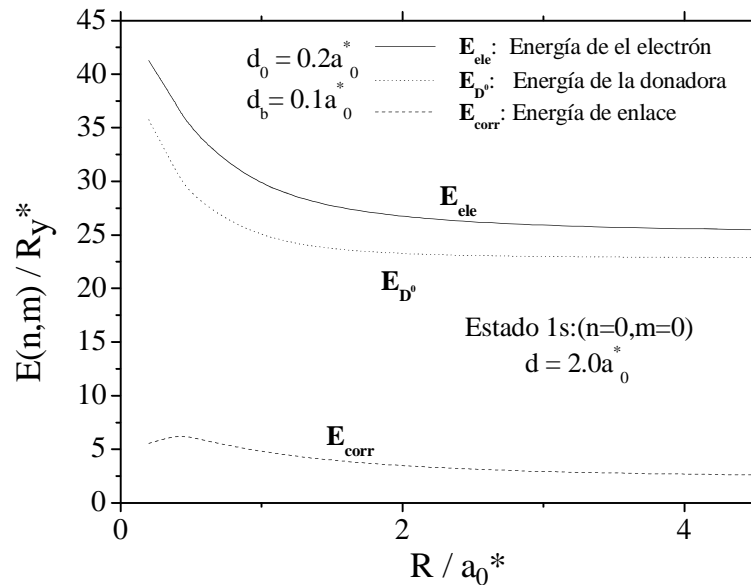


Figura 4.2: Energía de la D^0 , la energía del electrón libre y la energía de enlace para el estado $1s$ como función de los radios de los discos para una distancia entre las bicapas $d = 2.0a_0^*$.

Para determinar el efecto de la altura del disco sobre la energía de correlación, se ha graficado (figura 4.3) la energía de enlace en función del radio de los discos.

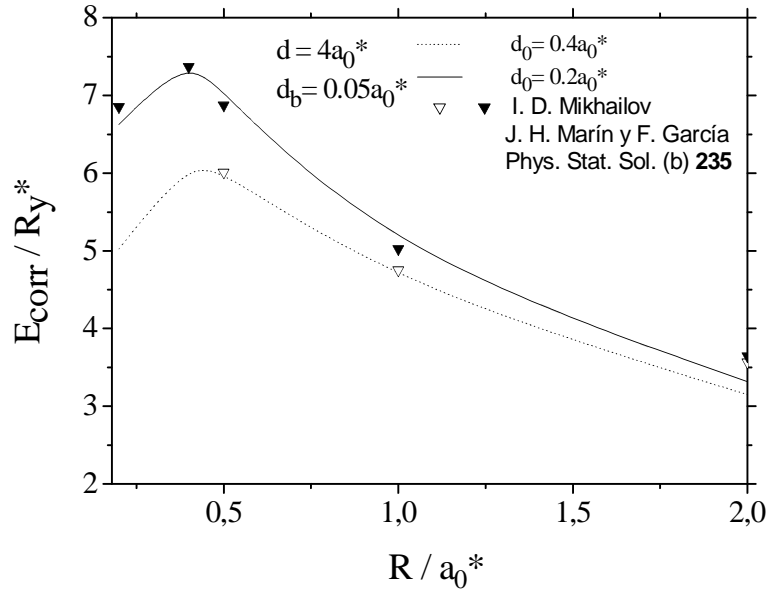


Figura4.3: Energía de enlace para el estado 1s en función de los radios de los discos para dos alturas de los puntos $d_0 = 0.4a_0^*$ y $d_0 = 0.2a_0^*$

En esta figura, independiente de la altura del punto, se puede apreciar un comportamiento muy similar al de una donadora neutra en un pozo cuántico. Es decir, la energía de enlace aumenta con la disminución del radio del disco hasta que éste toma un valor crítico ($R_c \approx 0.5a_0^*$) a partir del cual, si se sigue disminuyendo el radio la energía también decrece. Esto se debe a que el fuerte confinamiento en dirección radial, produce un ascenso de los niveles energéticos del electrón hasta un valor máximo ($E_{\text{max}} \approx 6R_y^*$) para $d_0 \approx 0.4a_0^*$ y ($E_{\text{max}} \approx 7.3R_y^*$) para $d_0 \approx 0.2a_0^*$. A partir de este radio crítico, una disminución adicional en el radio del disco produce un desbordamiento de la función de onda, lo que inexorablemente conduce a una disminución de la energía. Nótese que al aumentar el radio de los discos, la energía de enlace decrece debido a que la distancia promedio ión-electrón aumenta, haciendo que la interacción Coulombiana decrezca.

Los resultados obtenidos para el estado 1s se han comparado con los presentados por I. D. Mikhailov y colaboradores [12], quienes calculan la energía de una impureza donadora en un

sistema de un punto cuántico bidimensional. En la gráfica 4.3 la línea sólida y punteada representan los resultados obtenidos mediante el software elaborado en este trabajo para dos diferentes alturas del punto los cuales son de $0.2a_0^*$ y de $0.4a_0^*$ respectivamente, y los puntos en forma de triángulos representan los resultados de la Ref. [12]

En principio se podría pensar que los resultados que se obtienen en esta tesis, no se pueden comparar con los obtenidos en trabajo antes mencionado, ya que en éste se estudia una donadora neutra en un solo punto cuántico. No obstante, la validez de la comparación se debe al hecho de que en ambos casos la impureza donadora siente un potencial de interacción Coulombiana atractivo, en donde la masa del ión es mucho mayor que la masa del electrón. Debido a esto, los sistemas corresponden análogamente a un átomo de Hidrogeno bidimensional; por lo tanto, la energía de enlace que se obtiene en este trabajo, podría compararse con el correspondiente valor de $4R_y^*$, que es la energía de enlace de una D^0 en un sistema bidimensional. Adicionalmente, a partir de las dos curvas que se presentan en esta grafica se puede advertir como la energía de enlace, para grandes valores del radio ($R \approx 4.0a_0^*$) tiene un comportamiento asintótico, donde los valores que se obtienen, para los dos datos bajo análisis, siempre es menor que $4R_y^*$ ya que en los casos tratados los discos no son completamente bidimensionales y a pesar de que el confinamiento en dirección z es grande, éste es todavía incompleto, razón por la cual no se tiene una coincidencia total. Para el caso en que $d_0 \approx 0.4a_0^*$ la energía de enlace alcanza el valor de $E_{corr} \approx 2.6R_y^*$ y cuando la altura se disminuye a la mitad, la energía aumenta hasta alcanzar el valor $E_{corr} \approx 3.0R_y^*$. De seguirse disminuyendo la altura de los discos de manera progresiva, el valor de la energía de enlace seguirá creciendo y acercándose, siempre por debajo, al valor máximo de $4R_y^*$ que es el valor asintótico correcto al cual deben aproximarse los resultados de la energía de enlace cuando las alturas sean despreciables en comparación con el radio $R \approx 4.0a_0^*$ para el cual la energía se torna aproximadamente constante.

Continuando con el proceso de determinar como la geometría de los puntos afecta el espectro energético, ahora se concentrará todo el esfuerzo en analizar cual es la incidencia de la separación entre capas sobre la energía del estado base de una donadora neutra D^0 confinada por dos discos.

Para ello se tomarán varias separaciones entre las capas: $d = 1.0a_0^*$, $2.0a_0^*$, $4.0a_0^*$ y $8.0a_0^*$ respectivamente, manteniendo constante la altura de los discos.

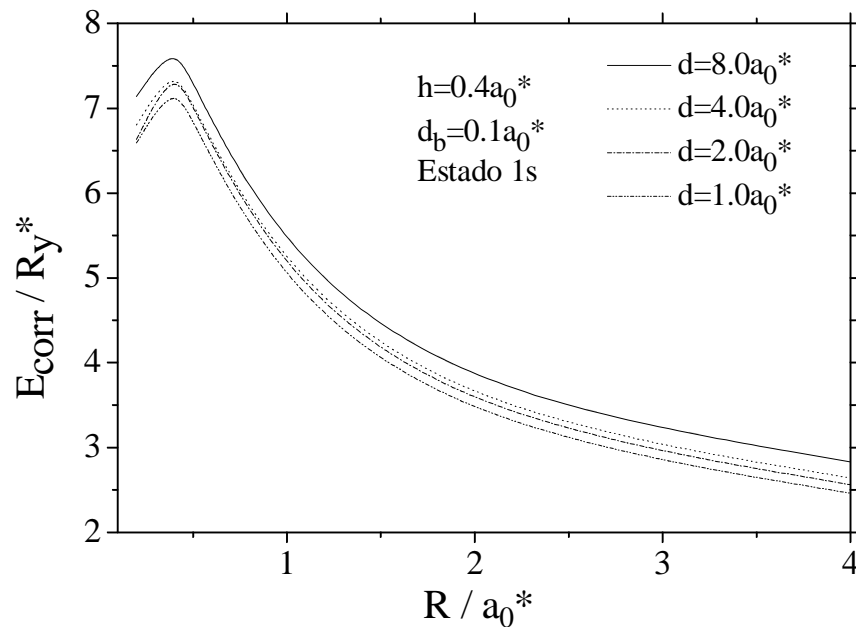


Figura4.4: Energía de enlace para el estado 1s como función de los radios de los discos para diferentes distancias entre las bicapas.

Se puede apreciar en la gráfica que a medida que se alejan los puntos tiene lugar un incremento de la energía de enlace. Este resultado era de esperarse porque con el aumento en la distancia entre capas, menor es la interferencia de un punto sobre el otro; es decir, menor es la posibilidad de tunelamiento electrónico a través de la barrera de potencial que separa a los puntos cuánticos. Esto significa, que la interacción Coulombiana entre el electrón y el ión donador se favorece, lo cual se traduce en un incremento de la energía de enlace. Nótese que siempre los valores están por debajo del valor asintótico máximo que ha establecido para el átomo de hidrógeno bidimensional.

Para complementar los resultados que establecen el efecto de la separación entre las capas, se ha calculado la energía de enlace del primer estado excitado y se ha comparado su comportamiento con el que presenta la energía del estado base. Esto se ha hecho para dos separaciones diferentes entre puntos $d = 2.0a_0^*$ y $8.0a_0^*$, respectivamente y para una altura del punto igual a $d_0 = 0.4a_0^*$. Los resultados de estos cálculos se presentan en la figura 4.5.

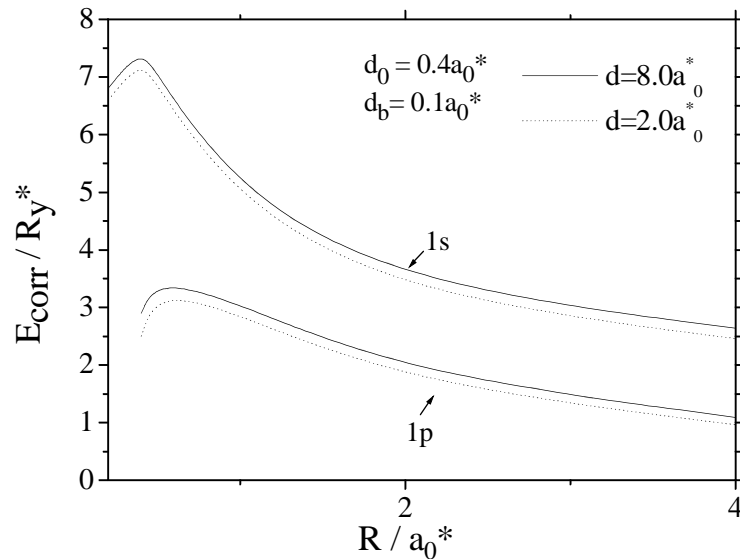


Figura4.5: Energía de la D^0 para el estado 1s y 1p en función de los radios con dos alturas de punto cuántico.

A partir de esta figura se puede apreciar que la energía de enlace varía monótonamente con la variación del radio de los puntos y en cada caso tiene un comportamiento similar a los que hasta ahora hemos descrito, lo cual es válido sin importar la separación entre los puntos y si es el estado es 1s o 1p. Adicionalmente, en ambos estados se preserva el resultado señalado anteriormente de que cuanto mayor es la separación entre puntos, mayor es la energía de enlace y que para un valor crítico del radio la energía alcanza un valor máximo. Es importante señalar que las diferencias de energía entre los estados 1s y 1p, independiente de la separación entre puntos es muy grande en comparación con la diferencia de energía entre los mismos estados, bien sea 1s o 1p, para los dos valores de distancia entre puntos. Por ejemplo, cuando $R = 4.0a_0^*$ la separación entre el estado 1s y 1p con $d = 2.0a_0^*$ es de aproximadamente $1.8R_y^*$, mientras que la diferencia entre las energías para dos mismos estados (1s o 1p) asociados a espesores diferentes es realmente muy pequeña, ya que en ningún caso supera el valor de $0.1R_y^*$, es decir, tan solo un 5.5% de la energía de separación entre dos estados diferentes.

4.2 Energías en Función de las Alturas de los Discos Cuánticos.

Es bien conocido que la geometría condiciona el espectro energético de los sistemas de baja dimensionalidad. Es por eso que en esta sección se estudia otro aspecto importante y tiene que ver con el comportamiento de la energía al variar la altura del punto d_0 . Esto es de interés porque este parámetro geométrico puede ser variado por los experimentalistas durante la fase de crecimiento con el objeto de usar estos sistemas en futuras aplicaciones opto-electrónicas.

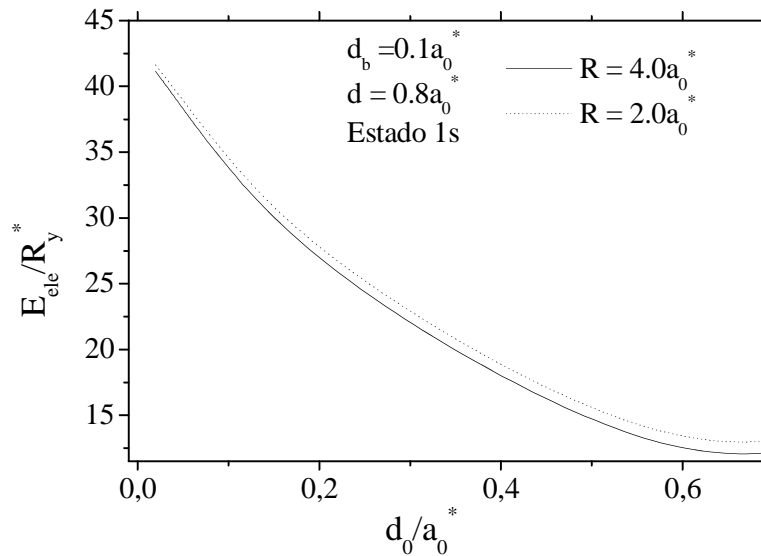


Figura 4.6: Energía del electrón para el estado 1s en función de las alturas de los puntos.

En la figura 4.6 se observa el comportamiento para la energía del electrón libre, es decir sin interacción Coulombiana, en función de las alturas de los discos d_0 para dos diferentes valores de R . En esta figura se observa que las dos curvas de energía tienen un comportamiento muy similar, el cual corresponde a un decrecimiento de la energía conforme aumenta las alturas d_0 de los discos. Esto se debe a que al aumentar d_0 la partícula siente cada vez menos el confinamiento de la heteroestructura en dirección vertical. No obstante, debido a que el confinamiento radial es finito el aumento del volumen del sistema no conlleva a que la función de onda se desborde, pero se puede producir un tunelamiento del electrón en la matriz que rodea el punto haciendo que la energía se torne constante, así como se aprecia al final de la curva $d \geq 0.6a_0^*$. Adicionalmente se observa que la energía del electrón para cuando $R = 2.0a_0^*$ es mayor que para cuando $R = 4.0a_0^*$. Esto se debe a que el electrón para el primer radio se encuentra más confinado que para cuando $R = 4.0a_0^*$. En síntesis, la energía del electrón en el sistema de menor radio, debe ser mayor para que no se viole el principio de incertidumbre de Heissenberg.

Siguiendo con el análisis en la figura 4.7, se observa el comportamiento de la energía de enlace en función de d_0 para dos valores de R . De la misma forma que se mostró en la gráfica anterior, se puede apreciar que el valor de energía de enlace disminuye al aumentar d_0 , ya que aumentar d_0 el volumen de los puntos crece y las partículas sienten menos el confinamiento de la heteroestructura, y en consecuencia se necesita menos energía para liberar al electrón de la interacción con el ión. En la misma figura se observa que la energía de enlace alcanza su valor máximo para una determinada altura crítica del punto, esto se debe a que a medida que se disminuye d_0 , la energía de enlace aumenta por el incremento en el confinamiento de la partícula en dirección vertical, haciendo que en algún momento la función de onda electrónica se desborde hacia la barrera y a partir de este punto, cualquier disminución adicional en la altura del punto conlleva a un incremento en la separación electrón-ión y por ende a una disminución brusca de la energía de enlace.

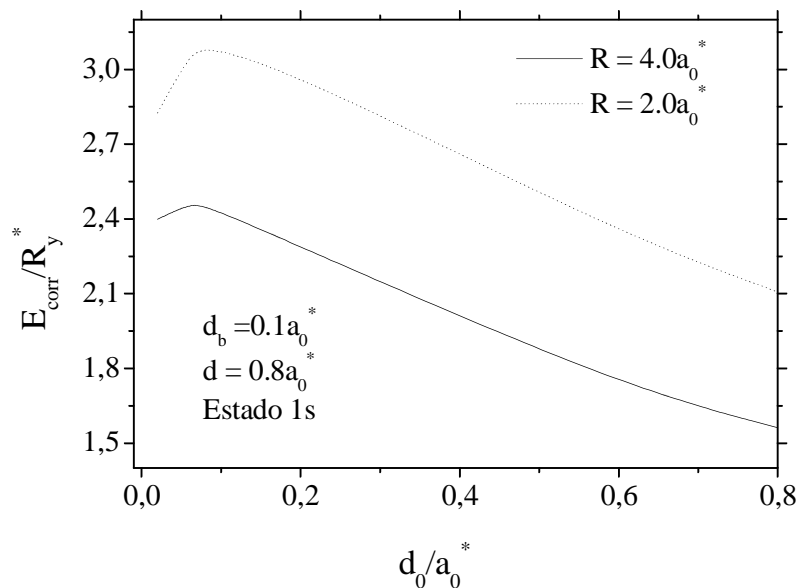


Figura 4.7: Energía de correlación para el estado 1s en función de las alturas de los puntos.

Este valor crítico del espesor d_0 fija una cota mínima para la cual se puede hacer uso de la aproximación adiabática sin que se corra el riesgo de que la partícula haya tunelado hacia la matriz que envuelve al punto cuántico.

4.3 Energía de Enlace en Función de la Posición de la Impureza.

Para finalizar nuestro estudio del espectro energético para una donadora en discos cuánticos acoplados verticalmente, queremos mostrar que en los sistemas de baja dimensionalidad, existe una notable dependencia de la energía de enlace con la posición de la impureza. . Para una mayor claridad, del movimiento del ión, se ha graficado (figura 4.8) un corte trasversal del sistema que muestra el comportamiento ión de manera ilustrativa.

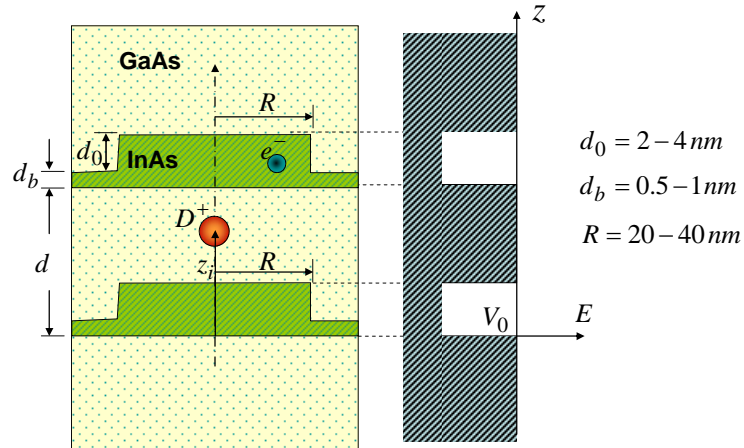


Figura 4.8: Ilustración del sistema para el movimiento de la impureza

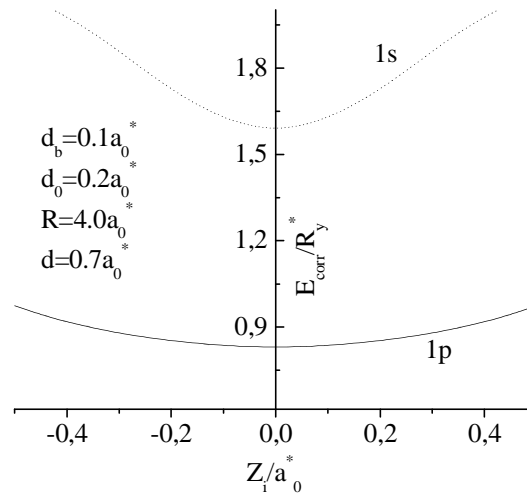


Figura 4.9: Energía de enlace en función de la posición de la impureza, para el estado 1s y 1p

En la figura 4.9 se observa el comportamiento de la energía de enlace en función de la posición de la impureza donadora para los estados 1s y 1p.

La primera parte de la figura 4.9 (izquierda-derecha) representa la impureza donadora ubicada en el punto cuántico superior, aquí se observa una disminución en la energía de enlace, que está relacionado con el movimiento del ión, ya que a medida que el ión se aleja del disco cuántico superior a través de la barrera, en dirección transversal (z) hay un aumento en la separación ión-electrón que provoca una disminución en la interacción Coulombiana y por ende una disminución en la energía de enlace. Cabe resaltar que el electrón está fuertemente ligado con el potencial de la heteroestructura, ya que está restringe su movimiento en este punto cuántico, esto se debe a que el potencial de la estructura $V \approx 47R_y^*$ es mucho mayor que el potencial de interacción Coulombiana $V_{coul} \approx 1R_y^*$. Al llegar al centro de la barrera la energía de enlace toma el valor más bajo que puede alcanzar, sin que antes no haya un cambio en la posición del electrón, ya que si continuamos avanzando a través de la barrera a lo largo de z con la posición del ión, el electrón querrá ubicarse en el punto cuántico inferior para estar más cerca del ión. Al seguir avanzando con el ión, la distancia ión-electrón será cada vez menor, provocando un aumento en el potencial de interacción Coulombiano y de esta manera un aumento en la energía de enlace. El comportamiento de las curvas es completamente simétrico debido a que el sistema también lo es.

5. CONCLUSIONES

- En este trabajo se presenta un método simple basado en la aproximación adiabática para calcular el espectro energético de una D^0 confinada en un sistema de discos cuánticos, verticalmente acoplados. Dicha aproximación permite tener en cuenta el efecto de la altura de los discos y la capa húmeda sobre el espectro energético del sistema. En este aspecto nuestro trabajo se diferencia del realizado por otros autores, que por simplicidad o en primera aproximación analizaron puntos cuánticos como sistemas absolutamente bi-dimensionales.
- Se consiguió determinar cuales son los efectos más sobresalientes que inciden sobre el espectro energético al variar la posición de la impureza, el tamaño de los discos y la distancia de separación entre los discos.
- Se estudió el caso límite para el cual los discos presentaban un confinamiento en dirección transversal casi nula y estaban separados una distancia muy grande uno del otro, con el propósito de compararlo con el análogo clásico correspondiente al átomo de Hidrogeno bidimensional.

ANEXOS

Apéndice 1.

Principio Variacional de Schrödinger

Se propone el funcional, este se soluciona utilizando Principio variacional de Schrödinger, lo cual busca minimizar un funcional de la forma:

$$F[\phi] = \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | H - E_{m,n}^{(\pm)} | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle \rightarrow \text{Minimizar}$$

Reemplazando, el Hamiltoniano obtenemos:

$$F[\phi] = \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(\rho, z) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} - E_{m,n}^{(\pm)} | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle$$

Reescribiendo la expresión tenemos que:

$$F[\phi] = I_1[\phi] + I_2[\phi] + I_3[\phi]$$

- $I_1[\phi] = \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z) | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle$

$$f_z^\pm(z, \rho) = c[f_s^+(z, \rho) + f_A^-(z, \rho)]$$

$$I_1[\phi] = \frac{1}{2} \langle (\phi_\pm^m)^2 [f_s^+(z, \rho) + f_A^-(z, \rho)] | f_s^+(z, \rho) E_z^+ + f_A^-(z, \rho) E_z^- \rangle$$

$$I_1[\phi] = \frac{1}{2} \langle (\phi_\pm^m)^2 [(f_s^+(z, \rho))^2 E_z^+ + (f_A^-(z, \rho))^2 E_z^-] \rangle$$

Ahora proseguimos haciendo un análisis con integrales:

$$I_1[\phi] = \int_{-\infty}^{\infty} (\phi_\pm^m)^2 \left(\frac{1}{2} E_z^+ (f_s^+(z, \rho))^2 + \frac{1}{2} E_z^- (f_A^-(z, \rho))^2 \right) dr; \quad dr = \rho d\rho d\theta dz$$

$$I_1[\phi] = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} \rho (\phi_\pm^m)^2 \left\{ \frac{1}{2} E_z^+ \int_{-\infty}^{\infty} (f_s^+(z, \rho))^2 dz + \frac{1}{2} E_z^- \int_{-\infty}^{\infty} (f_A^-(z, \rho))^2 dz \right\} d\rho$$

Como las funciones de onda para el movimiento en z se normalizan, tenemos que las integrales toman el valor de probabilidad correspondiente uno, en cada caso, por esto $I_1[\phi]$ es:

$$I_1[\phi] = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty \rho (\phi_\pm^m)^2 \left\{ \frac{1}{2} E_z^+ + \frac{1}{2} E_z^- \right\} d\rho$$

$$I_1[\phi] = \int \frac{1}{2} (\phi_\pm^m)^2 \{E_z^+ + E_z^-\} dr' ; dr' = \rho d\rho d\theta$$

- $I_2[\phi] = \left\langle f_z^\pm \phi_\pm^m \left| -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right| f_z^\pm \phi_\pm^m \right\rangle$

Las variaciones de $\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} f_z^\pm \cong 0$, debido a esto se puede decir que:

$$I_2[\phi] = \frac{1}{2} \left\langle (f_z^\pm)^2 \phi_\pm^m \left| -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right| \phi_\pm^m \right\rangle$$

Realizando el análisis con integrales:

$$I_2[\phi] = \frac{1}{2} \int \phi_\pm^m \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} \right) \rho d\rho$$

Si solucionamos la integral:

$$u = \phi; \Rightarrow du = \frac{d\phi}{d\rho} d\rho$$

$$dv = \int -\frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} d\rho \Rightarrow v = -\rho \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho}$$

$$I_2[\phi] = -\phi_\pm^m \rho \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} + \int \rho \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} \frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} d\rho = \int \rho \left(\frac{\partial \phi_\pm^m}{\partial \rho} \right)^2 d\rho$$

El primer término de la derecha de la ecuación es igual a cero, porque la función con su derivada evaluada en el límite es cero, esta solución con la parte en θ nos lleva a una solución general de la forma:

$$I_2[\phi] = \frac{1}{2} \langle (f_z^\pm)^2 \rangle \langle \phi_\pm^m | -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{(\rho)^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} | \phi_\pm^m \rangle = \langle \bar{\nabla}_{\rho\theta}^{(2)} (\phi_\pm^m)^2 \rangle$$

Teniendo en cuenta que $\langle (f_z^\pm)^2 \rangle = \langle (f_s^+)^2 \rangle + \langle (f_A^-)^2 \rangle = 1+1$, debido a la normalización de las funciones.

- $I_3[\phi] = \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} - E_{m,n}^{(\pm)} | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle$

Separando, tenemos:

$$I_3[\phi] = \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle - \langle f_z^\pm \phi_\pm^m | E_{m,n}^{(\pm)} | f_z^\pm \phi_\pm^m \rangle$$

$$I_3[\phi] = \frac{1}{2} \left\langle (\phi_\pm^m)^2 \left(-\frac{2(f_z^+ + f_z^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right) \right\rangle - \frac{1}{2} E_{m,n}^{(\pm)} \langle (f_s^+ + f_A^-)^2 (\phi_\pm^m)^2 \rangle$$

$$I_3[\phi] = \frac{1}{2} \left\langle (\phi_\pm^m)^2 \left(-\frac{2(f_s^+ + f_A^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right) \right\rangle - \frac{1}{2} E_{m,n}^{(\pm)} \langle 2(\phi_\pm^m)^2 \rangle$$

$$I_3[\phi] = \frac{1}{2} \left\langle (\phi_\pm^m)^2 \left(-\frac{2(f_s^+ + f_A^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \right) \right\rangle - E_{m,n}^{(\pm)} \langle (\phi_\pm^m)^2 \rangle$$

Realizando el cálculo con integrales obtenemos:

$$I_3[\phi] = \int_{-\infty}^{\infty} (\phi_\pm^m)^2 dr' \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{(f_s^+ + f_A^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz - \int_{-\infty}^{\infty} E_{m,n}^{(\pm)} (\phi_\pm^m)^2 dr'$$

Si llamamos $\tilde{V}(\rho) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(f_s^+ + f_A^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz$ obtenemos:

$$I_3[\phi] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ (\phi_{\pm}^m)^2 \tilde{V}(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)} (\phi_{\pm}^m)^2 \right\} dr'$$

De esta manera obtenemos la solución total del funcional como:

$$F[\phi] = \int \left\{ \bar{\nabla}_{\rho\theta}^{(2)} (\phi_{\pm}^m)^2 + \frac{1}{2} (\phi_{\pm}^m)^2 [E_z^+ + E_z^-] + (\phi_{\pm}^m)^2 \tilde{V}(\rho) - E_{m,n}^{(\pm)} (\phi_{\pm}^m)^2 \right\} dr'$$

Si escribimos en coordenadas cartesianas

$$F[\phi] = \int \underbrace{\left\{ \left(\frac{\partial \phi_{\pm}^m}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi_{\pm}^m}{\partial y} \right)^2 + \left[\frac{E_z^+ + E_z^-}{2} - E_{m,n}^{(\pm)} + \tilde{V}(\rho) \right] (\phi_{\pm}^m)^2 \right\}}_L dx dy$$

$$\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial \phi_{\pm}^m} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial (\phi_{\pm}^m)_x} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial L}{\partial (\phi_{\pm}^m)_y} = 0$$

Aplicando

$$2 \left[\frac{E_z^+ + E_z^-}{2} - E_{m,n}^{(\pm)} + \tilde{V}(\rho) \right] (\phi_{\pm}^m) - 2(\phi_{\pm}^m)''_{xx} - 2(\phi_{\pm}^m)''_{yy} = 0$$

$$- (\phi_{\pm}^m)''_{xx} - (\phi_{\pm}^m)''_{yy} + \tilde{V}(\rho) (\phi_{\pm}^m) = \left[E_{m,n}^{(\pm)} - \frac{E_z^+ + E_z^-}{2} \right] (\phi_{\pm}^m)$$

Si reescribimos en coordenadas polares

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \phi_{\pm}^m}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \phi_{\pm}^m}{\partial \theta^2} + \tilde{V}(\rho) \phi_{\pm}^m = \left[E_{m,n}^{(\pm)} - \frac{E_z^+ + E_z^-}{2} \right] (\phi_{\pm}^m)$$

$$\text{Si llamamos } \tilde{\tilde{V}}_{\pm}(\rho) = \frac{E_z^+ + E_z^-}{2} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(f_z^+ + f_z^-)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz$$

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \tilde{\tilde{V}}_{\pm}(\rho) \right] \phi_{\pm}^m(\rho, \theta) = E_{m,n}^{(\pm)} \phi_{\pm}^m(\rho, \theta)$$

Apéndice 2.

Un Análisis Más Detallado de la Solución de la Integral (3.12)

$$I(\rho) \approx \int_0^{Z_{\max}(\rho)} \frac{F(\rho, Z_i + x) + F(\rho, Z_i - x)}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx;$$

Esta integral tiene singularidad para $\rho=0$, es decir, $I(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \infty$ (ya que para $\rho=0$ la integral diverge debido a que función subintegral tiene singularidad tipo $\frac{1}{x}$)

Si la evaluamos la integral en $\rho=0$ obtenemos:

$$I(0) \approx \int_0^{Z_{\max}(0)} \frac{F(0, Z_i + x) + F(0, Z_i - x)}{x} dx = \infty;$$

Para encontrar la dependencia de ρ en una forma explícita utilicemos la sustitución $x = t\rho$:

$$I(\rho) \approx \int_0^{Z_{\max}(\rho)/\rho} \frac{F(\rho, Z_i + t\rho) + F(\rho, Z_i - t\rho)}{\sqrt{1+t^2}} dt;$$

Ya la función sub-integral no tiene singularidad, la cual se desplazó en el límite superior de la integral.

Como la función sub-integral es finita se conoce una cota superior para el cual $I(\rho) < M$ y esta tiende al infinito.

$$I(\rho) < \int_0^{Z_{\max}(\rho)/\rho} M dx = M Z_{\max}(\rho) / \rho;$$

Para pequeños valores de ρ , el numerador se puede desarrollar en la serie de Taylor $M Z_{\max}(\rho) = B + A\rho$

Finalmente tenemos:

$$I(\rho) \approx A + B / \rho;$$

Los coeficientes incógnitos A, B los encontraremos al cocer la función y de su derivada en el punto $\rho = \varepsilon$:

$$A + \frac{B}{\varepsilon} = I_0(\varepsilon); \quad -\frac{B}{\varepsilon^2} = I_0'(\varepsilon)$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones respecto a A y B se encuentra:

$$A = I_0(\varepsilon) + \varepsilon I_0'(\varepsilon); \quad B = -\varepsilon^2 I_0'(\varepsilon)$$

Se ha dejado en la serie solo 2 términos para coser el valor de la función y la primera derivada. Claro, se puede tomar más términos pero al coser vamos a tener más derivadas continuas pero no lo necesitamos para nuestra ecuación de onda de segunda orden donde solo suficiente tener continua hasta primera derivada.

En el caso de mejorar aproximación hay que tomar $I(\rho) \approx C\rho + A + B/\rho$; y coser hasta segunda derivada, etc. Esta técnica se llama spline-aproximación.

REFERENCIAS

- [1] Isaac Hernández - Calderón, *Avance y Perspectiva*. **37**, 43. (2003)
- [2] Francisco L. Mesa Ledesma *Complementos de Física*. 95 (2002)
- [3] I.D. Mikhailov, J.H: Marín and F. Garcia, *Phys. stat. sol. (b)* **242**, 1632 (2005).
- [4] C. Ellenberger, T. Ihn, C. Yannouleas, U. Landman, K. Ensslin, D. Driscoll, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **96**,126806 (2006)
- [5] G. Bastard, *Phys. Rev., B* **24**, 4714. (1981)
- [6] J.L. Zhu, *Phys. Rev., B* **39**, 8780. (1989)
- [7] M. Y. J. Tan, N. D. Drummond and R. J. Needs, *Phys. Rev., B* **71**, 033303 (2005)
- [8] Freddy Rodríguez, *Tesis*. (2006)
- [9] I. D. Mikhailov, J.H. Marin and F. Garcia, *Phys. Stat. sol., b* **242**, 1636 (2005).
- [10] Marek Korkusinski and Pawel Hawrylak, *Phys Rev. B*, Volume **63**, 195311 (2001)
- [11] Eduardo Menéndez Proupin, *Tesis Doctoral* (2000)
- [12] I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and F. García *phys. stat. sol. (b)* **235**, (2003)
- [13] R.A Escorcía, J. Sierra-Ortega, I.D Mikhailov, F.J. Betancur, *Phys B* **355**, 255-263, (2005)
- [14] J. Palacios and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **51**, 1769 (1995)
- [15] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, *J. Phys. D* **31**, 3391 (1998).
- [16] Bastard G., *Phys. Rev. B.* **24** 4714 (1981)
- [17] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, J. S. Jr. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 952 (1996)
- [18] B. Partoens, A. Matulis, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **59** 1617 (1999)
- [19] M. Korkusinski and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **63** 195311 (2001)
- [20] I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242** 1636 (2005).
- [21] Betancur F J, Mikhailov I D and Oliveira L E, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391 (1998)
- [22] M. Grundmann, O. Stier and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995).