EFECTO DE LA MORFOLOGÍA DE PUNTOS ACOPLADOS VERTICALMENTE SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA

JANETH FERNÁNDEZ PINTO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2007

EFECTO DE LA MORFOLOGIA DE PUNTOS ACOPLADOS VERTICALMENTE SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA.

JANETH FERNÁNDEZ PINTO

Requisito parcial para optar al título de Físico

Director
Dr. Carlos L. Beltrán Ríos

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2007

Dedico este trabajo a mis padres Blacinia Pinto y Luis Fernández quienes con su sacrificio, amor, dedicación y mucha paciencia me han permitido alcanzar esta meta, los amo.

A mis hermanos Pedro, Roque, Carlos y Henry quienes son mi ejemplo a seguir, gracias por todo su apoyo.

Agradecimientos

Al Dr. Carlos Leonardo Beltrán Ríos director de este trabajo.

Al Dr. Ilia Mikhailov gracias por toda su colaboración.

Al Dr Javier Betancur por permitirme ser parte de un grupo tan prestigioso como el FICOMACO y por sus acertados consejos.

A Msc Jairo Marin un excelente amigo y compañero de grupo.

Al Dr Francisco Russi, William Gutierrez y Juan Carlos Piña por su colaboración y apoyo.

A Ligia Elena quien ha sido mi compañera y amiga en todos estos años de estudio y especialmente en esta etapa final.

A Carlos Arnulfo Gómez el amor en mi vida.

A Marly Patricia, Maria Edelmira, Juan Carlos, Sandra, Alba, Rosa, Fredy, Jesus, Hamilton, Chacon y Elber quienes me regalaron momentos especiales y muchas sonrisas, espero siempre poder contar con su presencia.

CONTENIDO

Pág.

LISTA DE FIGURAS.....vii

LISTA DE TABLAS…….....viii

RESUMEN.....ix

INTRODUCCIÓN.....1

1. GENERALIDADES.....3

1.1 IMPUREZA DONADORA.....3

1.2 SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD.....3

1.3 POTENCIAL DE CONFINAMIENTO.....4

2. MARCO TEÓRICO.....7

2.1 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA.....7

2.2 PARAMETROS EFECTIVOS.....7

2.3 HAMILTONIANO DEL SISTEMA.....8

2.4 APROXIMACIÓN ADIABATICA.....8

2.5 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMETRICO APLICADO AL SISTEMA….....16

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....18

4. CONCLUSIONES.....26

APENDICE…….....27

BIBLIOGRAFÍA.....28

LISTA DE FIGURAS

Pág.

Fig. 1 Imágenes tridimensionales de SAQD con diferentes perfiles: a) disco, b) pirámide, c) lente…….....4

Fig. 2 Sistema de dos puntos cuánticos auto-ensamblados acoplados verticalmente con forma de pirámide, en el cual se localiza el D^0 dentro del SAQD inferior…….5

Fig. 3 Corte del potencial $v(\rho, z)$ a lo largo del eje z ……..…….6

Fig. 4 Sistema de doble pozo simétrico unidimensional…….....10

Fig. 5 Impureza centrada en el SAQD inferior…….....18

Fig. 6 Energía de enlace de la donadora en función del radio del SAQD con forma de disco, lente y pirámide……..…….....19

Fig. 7 Energía de enlace en función del radio del SAQD para estados 1s y 1p……21

Fig. 8 Energía del electrón en función de la altura del SAQD……...….....21

Fig. 9 Disminución de altura de SAQD con forma de disco, lente y pirámide…...……22

Fig. 10 Energía de enlace en función de la altura del SAQD para los estados 1s y 1p….....22

Fig. 11 Energía de enlace en función de la altura del SAQD con diferentes radios….....23

Fig. 12 Posición del ión en el eje z ……24

Fig. 13 Energía de enlace en función de la posición de la impureza para SAQD con diferentes perfiles geométricos.....25

LISTA DE TABLAS

Pág.
Tabla 1 Nomenclatura para los estados del sistema……..……...20

RESUMEN

TÍTULO: EFECTO DE LA MORFOLOGÍA DE PUNTOS ACOPLADOS VERTICALMENTE SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA DONADORA NEUTRA[1]

AUTOR: Janeth Fernández Pinto[**]

PALABRAS CLAVES: Donadora, energía de enlace, punto cuántico auto-ensamblados (SAQD)

DESCRIPCIÓN: Se analiza el efecto de la morfología de dos puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQD) de $InAs$ embebidos en una matriz de $GaAs$ acoplados verticalmente, axialmente simétricos e idénticos, sobre el espectro energético de una impureza donadora neutra, en donde su ión esta localizado sobre el eje de simetría, pero tanto el ión como el electrón se consideran confinados dentro del SAQD inferior. Se utiliza el método de aproximación adiabática (A.A), el cual permite el desacoplamiento del movimiento del electrón en uno rápido perpendicular a la interface de crecimiento (Dirección z) y otro lento paralelo al plano (Dirección radial). Esta aproximación reduce la ecuación de onda del sistema inicial a un problema de campo central bidimensional, con un potencial efectivo que depende de la morfología de los puntos, esta ecuación se soluciona utilizando el método numérico barrido trigonométrico. Se muestra que la altura del SAQD tiene una gran incidencia sobre el espectro energético y por tal razón los puntos cuánticos no se pueden considerar bidimensionales. Se muestra que el espectro energético de la donadora en puntos cuánticos auto-ensamblados es fuertemente dependiente de los factores geométricos que caracterizan el sistema: Radio, altura, espesor de la capa húmeda. Se muestra que el espectro energético del D^0 es fuertemente dependiente de la morfología de los SAQD, donde los mayores valores de la energía de enlace se obtienen en los puntos con formas mas agudas. Se evidencia como la energía de enlace del sistema es sensible a las variaciones en la posición del ión.

[1] Proyecto de grado
[**] Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. Carlos L. Beltrán Ríos

ABSTRACT

TÍTLE: EFECT OF THE MORPHOLOGY OF VERTICAL STACKED QUANTUM DOTS ON THE ENERGY SPECTRUM OF A NEUTRAL DONOR[2]

AUTHOR: Janeth Fernández Pinto[**]

KEYWORDS: Donors, binding energy, self-assembled quantum dots.

DESCRIPTION: We analyse the effect of the morphology of a couple of identical coaxial, vertical stacked, self-assembled InAs quantum dots (SAQD) imbedded inside a matrix of GaAs, on the energy spectrum of an neutral donor impurity, where its ion is located on the symmetry axis, but where both the ion and the electron are considered confined inside the lower SAQD. We used the adiabatic approximation method, which allows us to decouple the electron movement in a rapid motion orthogonal to the growing interface (z direction) and a slow motion parallel to the plane (radial direction). This approximation reduces the wave equation of the initial system to a two dimensional central force problem with an effective potential that depends on the morphology of the dots. Such an equation is solved by using the numerical trigonometric sweep method. It is shown that the height of the SQAD has a big impact on the energy spectrum and, because of this, the quantum dots may not be considered as two dimensional. We also show that the energy spectrum of the donor in self-assembled quantum dots is highly dependent on the geometrical factors that characterize the system: radius, height, and thickness of the wetting layer. It is shown that the energy spectrum of the D^0 is highly dependent on the morphology of the SAQD, where the higher binding energy values are obtained in the most sharped dots. It is made evident how the binding energy of the system is sensitive to the variations in the ion location.

[1] Degree project
[**] Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. Carlos L. Beltrán Ríos

INTRODUCCIÓN

La constante búsqueda y obtención de nuevos materiales semiconductores, han permitido el desarrollo de sofisticados métodos de procesamiento a escala microscópica los cuales, han conducido al desarrollo de estructuras cuyas dimensiones son del orden nanométrico. Estos sistemas denominamos nanoestructuras [1] o estructuras de baja dimensionalidad prometen efectos excepcionales, ya que aprovechan la riqueza de los fenómenos mecano-cuánticos presentes sólo a pequeña escala.

Las primeras estructuras fabricadas fueron los pozos cuánticos bidimensionales (QWs), en la década del 70 [2-3], los cuales consisten en una lámina de un semiconductor embebida en un semiconductor diferente. En este caso se logra confinar el movimiento de los electrones en una región plana muy estrecha, de modo que su movimiento se hace cuasi-bidimensional.

El avance en técnicas de crecimiento de cristales, a mediados de los 80's, permitieron la construcción de otro tipo de heteroestructuras de dimensiones menores: los hilos cuánticos (QWWs) [4-5], que permiten un confinamiento en dos direcciones espaciales y los puntos cuánticos (QDs) [4-6], que confina el portador en las tres dimensiones. Estos últimos generaron grandes expectativas en torno a sus potenciales aplicaciones, debido a que ofrecen una gran variedad de fenómenos cuánticos por tener un mayor grado de confinamiento.

Muy a menudo, el movimiento de los portadores de carga es adicionalmente perturbado por la incorporación al material de impurezas que rompen la simetría del cristal. Sí como consecuencia de tal incorporación se genera un portador de carga negativa casi libre, se habla de una donadora neutra D^0. En las nanoestructuras, las donadoras producen un descenso en los niveles energéticos debido a la atracción electrostática aumentando la energía de enlace.

Existe una extensa lista de publicaciones dedicadas al estudio de los efectos de confinamiento sobre el espectro energético de donadoras D^0 confinadas en diferentes tipos de sistemas tales como pozos cuánticos (QWs), puntos cuánticos (QD) rectangulares, esféricos (SQD), entre otros [7]. 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.

Con el método de crecimiento epitaxial de cristales y bajo la técnica de Stransky-Krastanov [8] se han desarrollado los denominados puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQD). Este tipo de puntos han llamado la atención por la homogeneidad de sus formas, unas estructuras cristalinas perfectas y casi libres de defectos de borde. Lo que permitirá el surgimiento de nuevos dispositivos opto-electrónicos entre los cuales se puede mencionar, el láser de punto cuántico [9-10], transistores de silicón, etc.

Debido al proceso de creación de los SAQD, estos tienen formas achatadas y sus dimensiones transversales son mucho mayores que su altura (aproximadamente unas diez veces mayor), estos puntos generalmente tienen una diversidad de formas como: lente, pirámide, discos y anillos. Estudios realizados acerca del espectro energético del portador de carga dentro de SAQD han ignorando su altura, considerando solo el movimiento transversal [11-12]. Realizar esta aproximación quizás permita una solución analítica del problema, pero se aleja de un

hecho ya evidenciado en el trabajo realizado por [13] que muestra que estas alturas influyen considerablemente en el espectro electrónico.

En los últimos años ha habido una explosión de trabajos sobre el acoplamiento vertical de SAQD [14-16]. Este tipo de acoplamiento es de alguna forma mas real desde el punto de vista experimental, debido a que en la formación de los SAQD no se crea un solo punto, muy por el contrario, estos se forman a lo largo y ancho del semiconductor, obviamente que es mas real considerar todo el sistema, pero este sistema de dos puntos acoplados tiene dentro sus aplicaciones tecnológicas su posible utilización como compuerta lógica en computación cuántica [21-22].

En el presente trabajo se ha calculado el espectro energético de una impureza donadora neutra, para un sistema de dos puntos cuánticos auto-ensamblados SAQD con acoplamiento vertical. En los resultados se analiza como se afecta el espectro energético ante la variación de las dimensiones del punto y la posición de la impureza. La ecuación de Schröndinger del sistema se ha planteado bajo la aproximación de masa efectiva y su solución se ha realizado por medio de la aproximación adiabática (A.A) y el método de barrido trigonométrico. Los diferentes resultados, a partir de los cálculos, se han obtenido por medio del lenguaje de programación FORTRAN.

La tesis esta organizada de la siguiente forma: en el capitulo 1 se presenta la definición de una impureza donadora neutra, seguido se presenta una breve descripción del método de fabricación de los SAQD y morfología, por último se formula el potencial de confinamiento del sistema que se estudio. En el capitulo 2 se presenta el marco teórico, se da una definición breve de la aproximación de masa efectiva, se hace una breve reseña de los parámetros físicos del material, se plantea el Hamiltoniano del sistema, se describen con detalle los métodos para la solución de ecuación de Schröndinger resultante: la A.A y el método de barrido trigonométrico. En el capitulo 3, se presentan los resultados obtenidos acompañados del análisis respectivo. Finalmente en el capitulo 4 se plantean las conclusiones.

1. GENERALIDADES

1.1 IMPUREZAS DONADORAS

Un Semiconductor tipo n se obtiene llevando a cabo un proceso de dopado, añadiendo un cierto tipo de átomos al semiconductor, para poder aumentar el número de portadores de carga libres negativas. Este tipo de agente dopante es también conocido como ***material donante*** ya que dona algunos de sus electrones.

Para ayudar a entender como se produce el dopaje, considérese el caso del silicio (Si). Los átomos del silicio tienen una valencia atómica de cuatro, por lo que se forma un enlace covalente con cada uno de los átomos de silicio adyacentes. Si un átomo con cinco electrones de valencia, tales como (Ej. arsénico (As) o antimonio (Sb)), se incorpora a la red cristalina en el lugar de un átomo de Silicio, entonces ese átomo tendrá cuatro enlaces covalentes y un electrón no enlazado. Este electrón extra está débilmente vinculado al átomo y puede ser excitado fácilmente hasta la banda de conducción. A causa de que los átomos con cinco electrones de valencia tienen un electrón extra que "dar", son llamados **átomos donadores**. Nótese que cada electrón libre en el semiconductor nunca está lejos de un ión dopante positivo inmóvil, el cual liga débilmente al electrón formándose una estructura tipo hidrogenoide, que se conoce como donadora neutra D^0.

1.2 SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD

Las nanoestructuras o estructuras de baja dimensionalidad fabricadas en semiconductores (pozos cuánticos, superredes, hilos y puntos cuánticos) son la base de dispositivos electrónicos y opto-electrónicos, razón por la cual tecnológicamente se han desarrollado métodos para el crecimiento de este tipo de nanoestructuras, entre ellos se puede nombrar epitaxia por fase liquida, fase gaseosa y fase molecular [17], las cuales se designan de forma genérica por método de crecimiento epitaxial de cristales. Bajo este método se encuentra la técnica de Stranky-Krastanov [8], cuya importancia radica en el crecimiento natural o espontáneo de las nanoestructuras, permitiendo manejar de manera controlada su forma y tamaño, mediante un manejo estricto de la rapidez de crecimiento y la temperatura. Esta técnica consiste en la deposición de un material sobre un sustrato, con constante de red diferente, esta diferencia entre las constantes de red crea tensiones superficiales, provocando el surgimiento de islas a lo largo y ancho del sustrato, formándose así los denominados puntos cuánticos auto-ensamblados tensos (SAQD). Se ha encontrado que estos puntos son de diversas morfologías y en la mayoría de los casos tienen forma de discos, lentes, pirámides o pirámides truncadas. En la figura 1 se muestran las formas geométricamente que se consideran en este trabajo.

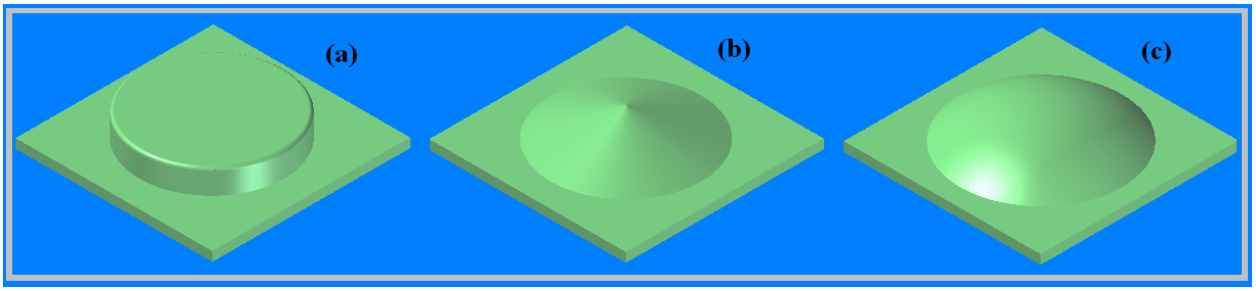

Fig. 1 Imágenes tridimensionales de SAQD con diferentes perfiles: a) Disco, b) Pirámide, c) Lente.

Todos los modelos de puntos mostrados en la Figura 1 tienen simetría axial y sus formas se pueden modelar a través de una función $z = h(\rho)$. Haciendo una correspondencia entre las nomenclaturas por letras de la Figura 1, estos modelos pueden describirse analíticamente mediante las ecuaciones que se dan a continuación:

Disco: $$h(\rho) = \begin{cases} h_d & para \quad \rho \le R_0 \\ h_w & para \quad \rho > R_0 \end{cases} \tag{1.2a}$$

Pirámide: $$h(\rho) = \begin{cases} (h_d - h_w)\left[1 - \left(\dfrac{\rho}{R_0}\right)\right] + h_w & para \quad \rho \le R_0 \\ h_w \quad para \quad \rho > R_0 \end{cases} \tag{1.2b}$$

Lente: $$h(\rho) = \begin{cases} (h_d - h_w)\sqrt{1 - \left(\dfrac{\rho}{R_0}\right)^2} + h_w & para \quad \rho \le R_0 \\ h_w \quad para \quad \rho > R_0 \end{cases} \tag{1.2c}$$

Siendo h_d la altura del punto, h_w la capa húmeda y R_0 el radio del SAQD.

1.3 POTENCIAL DE CONFINAMIENTO

En la Figura 2 se presenta de manera ilustrativa dos puntos cuánticos auto-ensamblados con forma de pirámide, de altura h_d, una capa húmeda h_w y radio R_0. Estos puntos están acoplados verticalmente y separados por una distancia h_i. En esta formación se encuentra inmersa la donadora D^0, en donde el ión se ubica sobre el eje z, pero tanto el ión como el electrón se consideran confinados dentro del SAQD inferior. Para este sistema se analizará el espectro energético de la donadora neutra y se extenderá este estudio para cada una de las geometrías de los puntos cuánticos mencionados en la sección 1.2.

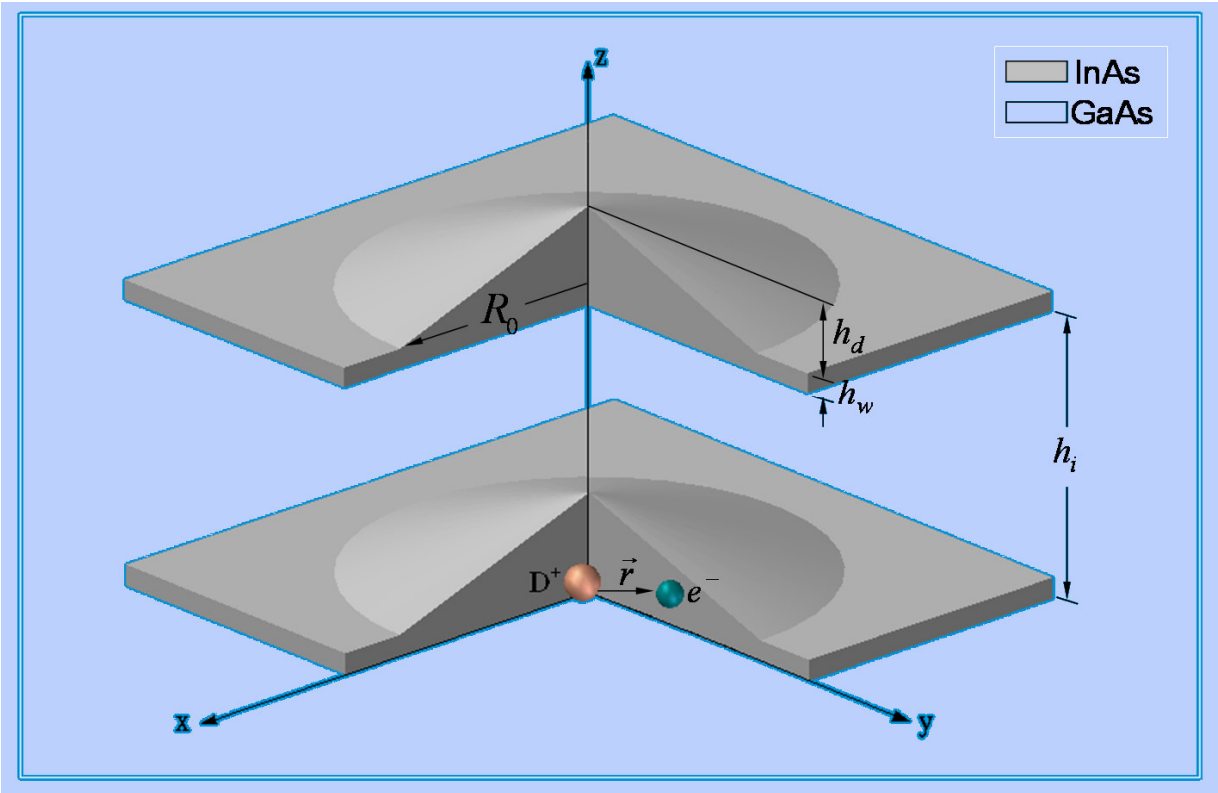

Fig. 2 Sistema de dos puntos cuánticos auto-ensamblados acoplados verticalmente con forma de pirámide, en el cual se localiza el D^0 dentro del SAQD inferior.

Como ya se ha definido la función $h(\rho)$ que describe analíticamente el perfil del punto cuántico en la sección 1.2, se tomará como punto de partida para escribir el potencial de confinamiento del sistema mostrado en la Figura 2 dado por:

$$V(\rho,z)=\begin{cases} 0 & si \quad \begin{cases} \dfrac{h_i-h(\rho)}{2}<z<\dfrac{h_i+h(\rho)}{2} \\ \dfrac{-h_i+h(\rho)}{2}<z>-\dfrac{h_i-h(\rho)}{2} \end{cases} \\ V_0 & En \quad OtrasPartes \end{cases} \tag{1.3}$$

De acuerdo a este potencial, si se realiza un corte en la dirección vertical (eje z), se llega a un sistema de doble pozo simétrico unidimensional con un alto de barrera V_0 , un ancho de pozo $h(\rho)$ y distancia de separación h_i, como se muestra en la figura 3:

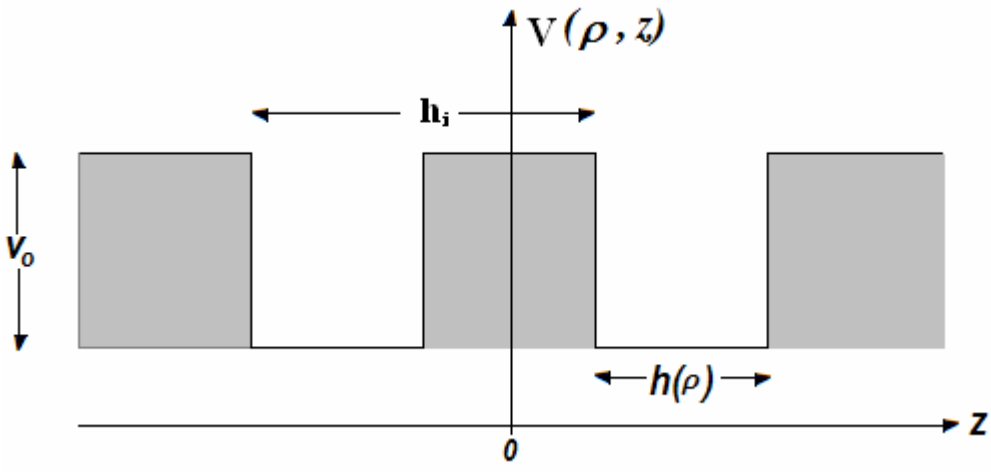

Fig. 3 Corte del potencial $V(\rho, z)$ a lo largo del eje z .

Este sistema de doble pozo, se ha utilizado en otros trabajos [25-27] como objeto de investigación, debido a que experimentalmente se modela como un dispositivo de varios usos, entre ellos como detector o modulador.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA (AME)

Esta aproximación ha sido ampliamente usada en el análisis de sistemas de baja dimensionalidad y fue empleada por primera vez en el trabajo de Bastar para el estudio de una donadora en un pozo cuántico [18].

El problema radica en la inclusión de la impureza en el cristal, la cual rompe con la simetría traslacional de la red cristalina y hace que el electrón además de sentir el potencial cristalino, sea atraído por un potencial que no tiene simetría alguna, esto conlleva a la aparición de estados que no pueden describirse mediante las funciones de Bloch. Para el estudio de los estados situados energéticamente cerca de los extremos de las bandas de conducción tiene particular importancia la aproximación de la masa efectiva (EMA) [19], debido a su simplicidad matemática y a que permite obtener expresiones analíticas cualitativamente correctas. En esta aproximación, la función de onda de los estados electrónicos es igual al producto de la función de Bloch 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:

$$\psi_{n,k_0,\alpha}(r) = u_{n,k_0}(r)\phi_\alpha(r) \tag{2.1}$$

A ϕ se le llama función envolvente y satisface una ecuación tipo Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) - E\right]\phi(r) = 0 \tag{2.2}$$

Donde $V(r)$ es el potencial no periódico y m^* es la masa efectiva. Así esta aproximación propone tener en cuenta el potencial cristalino en una masa renormalizada o masa efectiva, es decir, el electrón en un material semiconductor bajo la aproximación de masa efectiva se puede analizar como una partícula ficticia de masa m^*, bajo un potencial externo $V(r)$.
Esta masa efectiva es constante *sólo* para el modelo de banda parabólica, ya que en general depende de la energía misma del portador, y por lo tanto, queda determinada por la estructura de bandas del material [20].

2.2 PARAMETROS EFECTIVOS

Los parámetros Radio de Bohr $a_0^* = \frac{\varepsilon\hbar}{m^* e^2}$ y Rydberg $Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} = \frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)\varepsilon a_0^*}$ representan unidades de longitud y energía respectivamente, siendo m^* la masa efectiva y ε la constante dieléctrica. Se realizarán los cálculos para el electrón y la donadora dentro del sistema de SAQD de $GaAs/InAs$, donde los puntos de $InAs$ están embebidos en una matriz de $GaAs$. 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. Para este sistema los valores de a_0^* y Ry^* son iguales a $35,04nm$ y $1,35meV$, respectivamente, el salto entre las bandas de conducción del electrón es $V_0 \approx 40-47R_y^*$ [29]. La ventaja de la utilización de estos parámetros

es liberar el Hamiltoniano de todo tipo de constantes, lo cual resulta conveniente en la programación.

2.3 HAMILTONIANO DEL SISTEMA

De acuerdo al modelo propuesto en la sección 1.3, se formula el Hamiltoniano del sistema bajo la aproximación de masa efectiva como:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(\rho, z) + V_i(\rho, z, \tau) \tag{2.3}$$

Siendo $V(\rho, z)$ el potencial de confinamiento dado por la ecuación (1.3), el cual esta directamente relacionado con la geometría de los puntos designada por la función $h(\rho)$. En el término $V_i(\rho, z, \tau)$, se ha introducido un parámetro (τ) para considerar dos casos especiales, $\tau = 0$ para el electrón libre y $\tau = 1$ interacción columbiana entre el electrón y el ión, dicho término es de la forma:

$$v_i(\rho, z, \tau) = -\frac{e^2\tau}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \tag{2.3b}$$

Donde z_i es la posición del ión en coordenadas cilíndricas. Utilizando $p = i\hbar\nabla$, el Hamiltoniano (2.3) puede escribirse de la siguiente manera:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + v(\rho, z) - \frac{e^2\tau}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}$$

El operador nabla puede expresarse en coordenadas cilíndricas, de acuerdo a la geometría de los puntos cuánticos que se están estudiando, de manera que el Hamiltoniano resultante en unidades adimensionales es:

$$H = -\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + V(\rho, z) - \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} \tag{2.4}$$

2.4 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA (A.A)

A partir de la ecuación (2.4) se puede formular la ecuación de Schröndinger para el electrón, tomando a $\tau = 0$, obteniéndose:

$$\left\{-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + v(\rho, z)\right\}\psi(\rho, \varphi, z) = E\psi(\rho, \varphi, z) \tag{2.5}$$

Esta ecuación no es completamente separable, debido a que el potencial de confinamiento depende implícitamente de las variables ρ y z, esto conlleva a que su solución no se realice de manera exacta. Por consiguiente debe usarse un método aproximado para encontrar la función

de onda y el espectro energético del sistema. Los datos experimentales reportados en la literatura [24] sobre las dimensiones del SAQD, muestran que el radio base R_0 esta entre 40nm-80nm y tiene una altura h_d entre 4nm-8nm, concluyéndose que sus dimensiones transversales son mucho mayores que su altura (aproximadamente unas diez veces mayor). Esta condición experimental será aprovechada para hacer uso de la aproximación adiabática (A.A). Para poder explicar como es utilizada esta aproximación se realizará un rescalamiento de las coordenadas ρ y z en la ecuación de Schrödinger para el electrón libre, tomando las siguientes fórmulas:

$$\rho = R_0\tilde{\rho} \text{ y } z = h_d\tilde{z} \tag{2.6}$$

Estas variables varían en un rango de cero a uno ($0 < \tilde{\rho} < 1$ y $0 < \tilde{z} < 1$). Obteniéndose para las nuevas variables una ecuación de Schrödinger para el SAQD de la siguiente forma:

$$-\frac{1}{R_0^2}\nabla_{\tilde{\rho}\varphi}{}^2\psi(\tilde{\rho},\varphi,\tilde{z}) - \frac{1}{h_d{}^2}\frac{\partial^2\psi(\tilde{\rho},\varphi,\tilde{z})}{\partial\tilde{z}^2} + \left[v(\tilde{\rho},\tilde{z}) - E\right]\psi(\tilde{\rho},\varphi,\tilde{z}) = 0$$

Esta ecuación se analiza utilizando la proporción existente entre las dimensiones del SAQD ($h_d = 0.1R_0$), observándose que el segundo término bajo esta proporción crece muy rápido y por lo tanto dará una contribución a la energía del sistema mucho más relevante.

De esta manera la aproximación adiabática propone la función de onda $\psi(\rho,\varphi,z)$, como el producto de dos funciones de onda, $f_z(z,\rho)$ que describe el movimiento rápido en la dirección transversal de confinamiento fuerte y $\phi(\rho,\varphi)$ que corresponde al movimiento lento en el plano.

$$\psi(\rho,\varphi,z) = f_z(z,\rho)\phi(\rho,\varphi) \tag{2.7}$$

Esta aproximación se puede comprender como un desacoplamiento del movimiento del electrón, es decir, un análisis del movimiento del electrón en z, con un congelamiento de su movimiento en el plano.
Siguiendo el esquema de esta aproximación, como primer paso se analiza el movimiento del electrón en la dirección de confinamiento fuerte (eje z), para un valor de ρ dado, como ya se ha visto en la Figura 1.3 este problema no es más que un sistema de doble pozo simétrico unidimensional, con una altura de la barrera V_0, ancho de pozo de $h(\rho)$ y distancia entre puntos h_i.

La función $f_z(z,\rho)$ y energía $E_z(\rho)$ para este sistema se pueden calcular de forma exacta usando una ecuación de onda que tiene la siguiente forma:

$$-\frac{\partial^2 f_z(z,\rho)}{\partial z^2} + v(\rho,z)f_z(z,\rho) = E_z(\rho)f_z(z,\rho) \tag{2.8}$$

El electrón en su estado fundamental, en este sistema de doble pozo, tiene igual probabilidad de encontrarse en cualquiera de los dos pozos, dando así lugar a una función de onda simétrica, f_S, para el estado de energía más bajo y anti-simétrica, f_A, para el siguiente nivel de energía, tal como se muestra en la Figura 2.1.

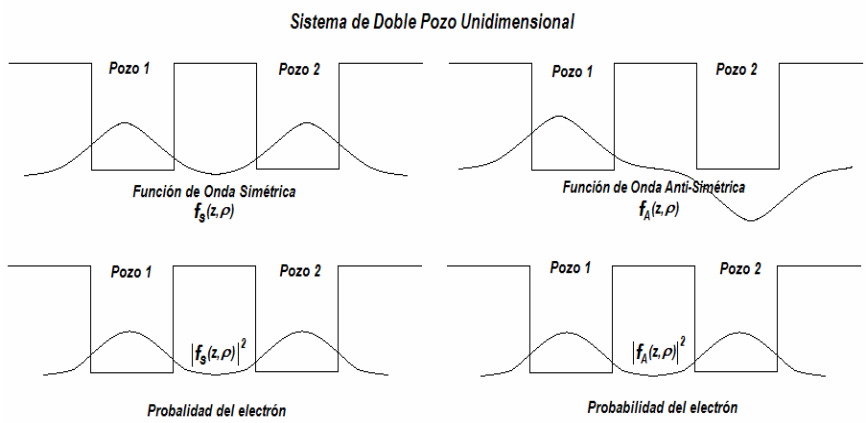

Fig. 4 Sistema de doble pozo simétrico unidimensional

Las ecuaciones de onda para estas funciones están dadas por:

$$
\begin{aligned}
-\frac{\partial^2 f_S(z,\rho)}{\partial z^2} + v(\rho,z) f_S(z,\rho) &= E_S(\rho) f_S(z,\rho) \\
-\frac{\partial^2 f_A(z,\rho)}{\partial z^2} + v(\rho,z) f_A(z,\rho) &= E_A(\rho) f_A(z,\rho)
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

La solución a este sistema de doble pozo, para las funciones de onda simétrica y anti-simétrica se puede escribir de la siguiente forma:

$$
f_S = \begin{cases}
De^{-\beta(z-z_2)} & z > z_2 \\
A\sin\left[\alpha(z-z_1)\right] + B\cos\left[\alpha(z-z_1)\right] & z_1 < z < z_2 \\
C\cosh(\beta z) & -z_1 < z < z_1 \\
-A\sin\left[\alpha(z+z_1)\right] + B\cos\left[\alpha(z+z_1)\right] & -z_2 < z < -z_1 \\
De^{\beta(z+z_2)} & z < -z_2
\end{cases}
\tag{2.8a}
$$

y,

$$
f_A = \begin{cases}
De^{-\beta(z-z_2)} & z > z_2 \\
A\sin\alpha(z-z_1) + B\cos\alpha(z-z_1) & z_1 < z < z_2 \\
C\sinh\beta z & -z_1 < z < z_1 \\
A\sin\alpha(z+z_1) - B\cos\alpha(z+z_1) & -z_2 < z < -z_1 \\
-De^{\beta(z+z_2)} & z < -z_2
\end{cases}
\tag{2.8b}
$$

Donde:

$$\beta = \sqrt{V_0 - E}\,, \tag{2.8c}$$

$$\alpha = \sqrt{E}\,. \tag{2.8d}$$

Las energías asociadas a estas dos funciones de onda se calculan hallando la ecuación trascendente para cada una de las ecuaciones (2.8a) y (2.8b). Estas ecuaciones trascendentes se solucionan numéricamente mediante el método de bisección.

Para mayor facilidad en los cálculos matemáticos y computacionales, se ha decidido confinar el electrón en el punto cuántico inferior, con este fin se tomará a la función de onda $f_z(z,\rho)$, como una combinación lineal de las funciones simétrica y anti-simétrica, de esta manera la función de onda del electrón dentro del primer punto cuántico será de la siguiente manera:

$$f_z\left(z,\rho\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[f_S\left(z,\rho\right) + f_A\left(z,\rho\right)\right] \tag{2.9}$$

Y la energía asociada al movimiento del electrón en el eje z para un ρ dado es de la forma:

$$E_z = \frac{1}{2}\left[E_s(\rho) + E_A(\rho)\right] \tag{2.10}$$

Siguiendo el proceso de A.A, analizaremos a continuación el movimiento del electrón en el plano XOY. Como primer paso se formula el funcional de $\phi(\rho,\varphi)$ para el Hamiltoniano del sistema ecuación (2.4) y se plantea el siguiente funcional:

$$F[\phi(\rho,\varphi)] = \langle f_z(z,\rho)\phi(\rho,\phi)\big|H - E\big|f_z(z,\rho)\phi(\rho,\phi)\rangle \tag{2.11}$$

$$F[\phi(\rho,\varphi)] = \left\langle f_z\phi\right| -\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + v(\rho,z) - \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} - E\left|f_z\phi\right\rangle$$

Este funcional puede escribirse de la siguiente manera:

$$F[\phi] = F1[\phi] + F2[\phi] + F3[\phi] \tag{2.12}$$

Siendo $F1[\phi]$ la parte relacionada con z:

$$F1[\phi] = \left\langle f_z\phi\right| -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + v(\rho,z)\left|f_z\phi\right\rangle \tag{2.13}$$

Haciendo uso de las ecuaciones 2.7, la expresión 2.13 se transforma en:

$$F1[\phi] = \langle \frac{E_S}{2} f_S^2\phi^2 + \frac{E_A}{2} f_A^2\phi^2\rangle \tag{2.14c}$$

Esta ecuación se puede expresar en forma de integral, la cual tiene la siguiente forma:

$$F1[\phi] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho\phi^2(\rho,\varphi)d\rho\left[\frac{E_S}{2}\int_{-\infty}^{\infty} f_S^2 dz + \frac{E_A}{2}\int_{-\infty}^{\infty} f_A^2 dz\right] \tag{214d}$$

Como las funciones $f_S(z,\rho)$ y $f_A(z,\rho)$ están normalizadas, se obtiene una expresión final de la siguiente forma:

$$I1[\phi] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho\phi^2(\rho,\varphi)[\frac{E_S + E_A}{2}]d\rho \tag{2.15}$$

Ahora el funcional $F2[\phi]$, es de la siguiente forma:

$$F2[\phi] = \left\langle f_z\phi \right| -\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \left| f_z\phi \right\rangle \tag{2.16}$$

Utilizando la propiedad $-\phi\nabla^2_{\rho,\varphi}\phi = (\nabla_{\rho,\varphi}\phi)^2$, este funcional puede ser escrito de la siguiente forma:

$$F2[\phi] = \langle(\nabla_{\rho,\varphi}\phi)^2\rangle \tag{2.16d}$$

Expresión que puede ser escrita en forma de integral, de la siguiente manera:

$$I2[\phi] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho[\nabla_{\rho,\varphi}\phi(\rho,\varphi)]^2 d\rho \tag{2.17}$$

Como tercera parte se considerará el potencial de interacción ión-electrón y la energía del sistema. Este funcional es de la forma:

$$F3[\phi] = \left\langle f_z\phi \right| -\frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} - E \left| f_z\phi \right\rangle \tag{2.18}$$

Aplicando la ecuación 2.9, este funcional expresado como una integral, tiene la siguiente forma:

$$I3[\phi] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho\phi^2 d\rho \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{[f_S(z,\rho) + f_A(z,\rho)^2]\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz - E\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho\phi^2 d\rho \tag{2.18a}$$

Definiendo a:

$$I(\rho) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{[f_S(z,\rho) + f_A(z,\rho)]^2\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz \tag{2.18b}$$

Siendo $I(\rho)$ un promedio del movimiento del electrón en z para un ρ dado, cuya solución se presenta de forma numérica.

Definiendo a $F(\rho,z) = \left[f_A^2(\rho,z) + f_S^2(\rho,z) + 2f_A(\rho,z)f_S(\rho,z) \right]$ obtenemos:

$$I(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\rho,z)\tau}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz$$

Realizando el cambio de variable $z = z_i + x$; $dz = dx$ y considerando dos integrales, una para x positiva y otra, con x negativa, se obtiene:

$$I(\rho) \approx \int_0^\infty \frac{F(\rho, z_i + x) + F(\rho, z_i - x)\tau}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx$$

Esta integral no tiene singularidad para valores de ρ finitos y tiene singularidad solo cuando $\rho = 0$, debido a que la función subintegral tiene una singularidad tipo $\frac{1}{x}$:

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

Para encontrar la dependencia de ρ en una forma explicita se utiliza la sustitución $x = t\rho$:

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

La función subintegral no tiene singularidad, debido a que se desplazo al límite superior de la integral. Como esta función subintegral es finita, existe una cuota superior M para la que se cumple:

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

Para pequeños valores de ρ, el numerador se puede desarrollar por serie de Taylor

$$M Z_{\max}(\rho) = C + A\rho .$$

Finalmente se obtiene:

$$I(\rho) \approx A + \frac{C}{\rho};$$

Los coeficientes incógnitos A, C se encuentran por las condiciones de continuidad de la función y su derivada en el punto $\rho = \varepsilon$:

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

Resolviendo estas ecuaciones para A y C se encuentra:

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

Se ha dejado en la serie solo 2 términos para hacer continua la función y la primera derivada. Claro, que se pueden tomar más términos y por continuidad de la función subintegral se tendrán más derivadas, pero no se necesitan para la ecuación de onda de segundo orden que se obtendrá mas adelante, en donde solo es suficiente tener continua hasta primera derivada y el algoritmo de barrido es estable.

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

De esta manera la solución de la integral 2.18b se reduce a:

$$I(\rho) \approx \begin{cases} I_0(\rho); & \varepsilon < \rho < R_0 \\ A + \dfrac{C}{\rho}; & \rho < \varepsilon \end{cases} \qquad I_0(\rho) \approx \int_0^\infty \frac{F(\rho, z_i + x) + F(\rho, z_i - x)\tau}{\sqrt{\rho^2 + x^2}} dx \tag{2.19}$$

Tomando valores ε de tal manera que sea lo suficientemente pequeño.

Así la expresión final de la integral $I3[\phi]$ es:

$$I3[\phi] = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho\phi^2 [I(\rho) - E] d\rho \tag{2.20}$$

Escribiendo el funcional del sistema en forma de integral:

$$S = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho\phi^2(\rho,\varphi)[\frac{E_S + E_A}{2} + \nabla^2_{\rho,\varphi} + I(\rho) - E] d\rho \tag{2.21}$$

La función dentro de la integral es una densidad Lagrangiana para el sistema y la integral (2.21) es la acción. Se busca la minimización de S, es decir $\delta S = 0$. La ecuación que hace mínima esta integral es la ecuación de Euler-Lagrange, dada por:

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial \rho}\frac{\partial L}{\partial \phi'_\rho} - \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial L}{\partial \phi'_\varphi} = 0 \tag{2.22}$$

Aplicando la expresión (2.22) sobre la ecuación (2.21) obtenemos una ecuación de la forma:

$$-\frac{\partial^2\phi(\rho,\phi)}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial\phi(\rho,\varphi)}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\phi(\rho,\varphi)}{\partial\varphi^2} + \left(I(\rho) + \frac{E_S + E_A}{2} - E\right)\phi(\rho,\varphi) = 0 \tag{2.23}$$

Tomando a:

$$\hat{V}(\rho) = \begin{cases} \dfrac{E_S + E_A}{2} - I(\rho) & 0 < \rho < R_0 \\ V_0 - I(\rho) & \rho > R_0 \end{cases} \tag{2.24}$$

Siendo $\hat{V}(\rho)$ el potencial efectivo en la dirección ρ, este potencial se ha definido de esta forma, debido a la manera como se le ha dado solución numérica a la integral $I(\rho)$.
Así la ecuación (2.23) queda de la forma:

$$-\frac{\partial^2\phi(\rho,\varphi)}{\partial\rho^2} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial\phi(\rho,\varphi)}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\phi(\rho,\varphi)}{\partial\varphi^2} + \left(\hat{v}(\rho) - E\right)\phi(\rho,\varphi) = 0 \tag{2.25}$$

Aprovechando que el sistema tiene simetría axial la función de onda $\phi(\rho,\phi)$ puede escribirse como:

$$\phi(\rho,\varphi) = R_{n_\rho m}(\rho)e^{im\varphi} \tag{2.26}$$

Siendo n_ρ el número cuántico radial y m el momento angular orbital. Reemplazando esta última ecuación en (2.25) se obtiene:

$$\frac{\partial^2 R_{n_\rho m}(\rho)}{\partial \rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R_{n_\rho m}(\rho)}{\partial \rho}-\left[\left(\hat{v}(\rho)-E_{n_\rho m}(\tau)\right)+\frac{m^2}{\rho^2}\right]R_{n_\rho m}(\rho)=0 \tag{2.27}$$

De acuerdo a como se ha definido el potencial efectivo $\hat{v}(\rho)$, si el electrón se encuentra en la región $\rho > R_0$ la solución a (2.27) toma la forma de la ecuación de Bessel Modificada:

$$R(\rho)=A' I_{n_\rho m}(\gamma\rho)+B' K_{n_\rho m}(\gamma\rho) \tag{2.27a}$$

Siendo $\gamma=\sqrt{\hat{v}(\rho)-E}$. Para valores grandes de ρ, la función $I_{n_\rho m}(\gamma\rho)\to\infty$, por lo tanto se toma a la constante A cero, mientras que la función $K_{n_\rho m}(\gamma\rho)\to 0$. Para esta parte del sistema se necesita que la función de onda tienda a cero, por lo tanto se toma como solución:

$$R(\rho)=B' K_{n_\rho m}(\gamma\rho) \tag{2.27b}$$

Si el electrón se encuentra en la región $0<\rho<R_0$, la energía E y la función de onda $R(\rho)$ sólo se pueden obtener a partir de una solución numéricamente de (2.27). Con este propósito se hace la siguiente sustitución:

$$R_{n_\rho m}(\rho)=\rho^m u(\rho) \tag{2.28}$$

Obteniéndose una nueva expresión para la ecuación (2.27):

$$\frac{\partial^2 u(\rho)}{\partial \rho^2}+\frac{(2m+1)}{\rho}\frac{\partial u(\rho)}{\partial \rho}-\left[\left(\hat{v}(\rho)-E\right)\right]u(\rho)=0 \;\; ; \; 0<\rho<R_0 \tag{2.29}$$

Esta es la ecuación de Schrödinger para el movimiento lento del electrón sobre el plano, para valores de $0<\rho<R_0$, esta expresión no contiene la singularidad de ρ^2, pero presenta singularidad en $\rho=0$. Así si analizamos esta ecuación para cuando $\rho\to 0$, importan solo dos términos, el termino de la primera derivada y el segundo es el proveniente del potencial efectivo, el cual está asociado por medio de la integral dada por la expresión 2.19, este es de la forma $I(\rho)=\frac{C}{\rho}$, por lo cual solo son importantes los siguientes términos.

$$\frac{(2m+1)}{\rho}\frac{\partial u(\rho)}{\partial \rho}+\left[\frac{C}{\rho}\right]u(\rho)=0 \;\; ; m=0,1,2,..., \tag{2.29.a}$$

De esta expresión se puede obtener la condición inicial para la ecuación (2.29).

$$\frac{u'(0)}{u(0)}=-\left[\frac{C}{2m+1}\right] \tag{2.29b}$$

La segunda condición de frontera se obtiene al utilizar condiciones de continuidad de la función $u(\rho)$ con la solución exacta (2.27b) en la juntura $\rho=R_0$:

$$\frac{u'(R_0)}{u(R_0)} = \gamma \frac{K'_{n_\rho m}(\gamma R_0)}{K_{n_\rho m}(\gamma R_0)} - \frac{m}{R_0} \tag{2.29.c}$$

La ecuación (2.29) con estas dos condiciones de frontera forma el problema de Sturm-Liouville dentro del intervalo finito $0 < \rho < R_0$. El método que se utilizará para solucionar este problema se conoce como Barrido Trigonométrico, el cual se explicará en la siguiente sección.

2.5 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO APLICADO AL SISTEMA

El análisis del movimiento del electrón en el plano, ha generado una ecuación de Schröndinger de la forma:

$$u''(\rho) + w(\rho)u'(\rho) + \alpha(\rho)u(\rho) = 0$$
$$\frac{u'(0)}{u(0)} = -\left[\frac{C}{2m+1}\right]; \quad \frac{u'(R_0)}{u(R_0)} = \gamma \frac{K'_{nm}(\gamma R_0)}{K_{nm}(\gamma R_0)} - \frac{m}{R_0} \; ; \; 0 < \rho < R_0 \tag{2.30}$$

Siendo $w(\rho) = \dfrac{2m+1}{\rho}$ y $\alpha(\rho) = -\left[\hat{v}(\rho) - E\right]$.

El método de barrido trigonométrico consiste en reducir el problema de contorno (2.30), a un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden utilizando la sustitución:

$$u(\rho) = A(\rho)Cos\theta(\rho) \; ; \; u'(\rho) = ASin\theta(\rho) \tag{2.31}$$

Aplicando esta sustitución a la ecuación (2.30) y después de una serie de cálculos algebraicos, se obtiene la siguiente ecuación diferencial de primer orden para la función $\theta(\rho)$:

$$\theta'(\rho) = -\left\{ Sin^2\theta(\rho) + \frac{2m+1}{\rho} Cos^2\theta(\rho) + [E - \hat{v}(\rho)]Cos\theta(\rho)Sin\theta(\rho) \right\} \tag{2.32}$$

Con la condición inicial,

$$\theta(0) = -\left[\frac{C}{2m+1}\right] \tag{2.32a}$$

Si se analiza este sistema en el punto $\rho = R_0$, por continuidad se encuentra la siguiente condición de frontera:

$$\tan\theta(R_{ext}) = \gamma \frac{K'_{n_\rho m}(\gamma R_0)}{K_{n_\rho m}(\gamma R_0)} - \frac{m}{R_0} \tag{2.32b}$$

La cual puede considerarse como una ecuación trascendente respecto a la energía $E_{n_\rho m}(\tau)$.

La ecuación (2.32) constituye el problema de Cauchy con condiciones iniciales, el cual se puede resolver numéricamente para cada parámetro $E_{n_\rho m}(\tau)$. Una vez calculada la energía se encontrará la función $A(\rho)$ que tiene la forma:

$$A(\rho) = Exp\left\{\int_0^\rho Cos\theta Sin\theta(1 - E_{n_\rho m}(\tau) + \hat{v}(\rho)) - \frac{2m+1}{\rho} Sin^2\theta(\rho) d\rho\right\} \tag{2.33}$$

Finalmente, una vez encontrada la energía $E_{n_\rho m}(\tau)$, para los estados n_ρ y m se pueden calcular las funciones de onda asociadas a los diferentes estados, las cuales están dadas por:

$$\psi_{n_\rho m}(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_s(z,\rho) + f_A(z,\rho)\right) e^{im\phi} R_{n_\rho m}(\rho) \tag{2.34}$$

El lenguaje de programación que se ha utilizado, para encontrar la energía del sistema y las respectivas funciones de onda es FORTRAN.

3. RESULTADOS Y DISCUSIONES

En esta sección se presentan los resultados obtenidos, bajo los métodos planteados en las secciones anteriores. En la sección 3.1 se presenta una comparación de la energía de enlace del estado base en función del radio del SAQD, con el fin de realizar un chequeo al software elaborado. En la sección 3.2 se analizará el efecto de las variaciones en la forma y el tamaño de los SAQD, sobre la energía de enlace de la donadora D^0 para el estado 1s y 1p, con este propósito se presenta un análisis comparativo de la energía de enlace de los SAQD con diferentes perfiles geométricos. En la sección 3.3 se estudiará el efecto de la variación de la posición de la impureza sobre la energía enlace.

3.1 CHEQUEO DEL SOFTWARE ELABORADO

Para poder describir como se afecta el espectro energético con la variación de las dimensiones del punto y la posición de la impureza, se calcula la energía de enlace o energía de correlación de la donadora para los diferentes estados, la cual está definida de la siguiente manera:

$$Ecorr(n_\rho, m, R_0, h_d) = E(n_\rho, m, R_0, h_d, \tau = 0) - E(n_\rho, m, R_0, h_d, \tau = 1) \quad (3.1)$$

Siendo $E(n_\rho, m, R_0, h_d, \tau = 0)$ la energía del electrón libre y $E(n_\rho, m, R_0, h_d, \tau = 1)$ la energía de interacción ión-electrón para el estado (n_ρ, m), definiéndose a n_ρ y m el número cuántico radial y azimutal respectivamente.

Con el propósito de controlar la precisión del procedimiento numérico utilizado, se realiza una comparación de resultados con los obtenidos por I. D. Mikhailov [13], para puntos cuánticos con diferentes geometrías, donde la impureza se encuentra localizada sobre el eje z, en la mitad del punto. Para simular este sistema en nuestro modelo, se toma el mismo valor de altura de punto $h_d = 0.4a_0^*$, considerando la capa húmeda lo suficientemente pequeña $h_w = 0.05a_0^*$ y la distancia entre puntos $h_i = 4a_0^*$ suficientemente grande con el fin de disminuir los efectos de capa húmeda y del punto cuántico superior respectivamente, como se muestra esquemáticamente en la figura 5:

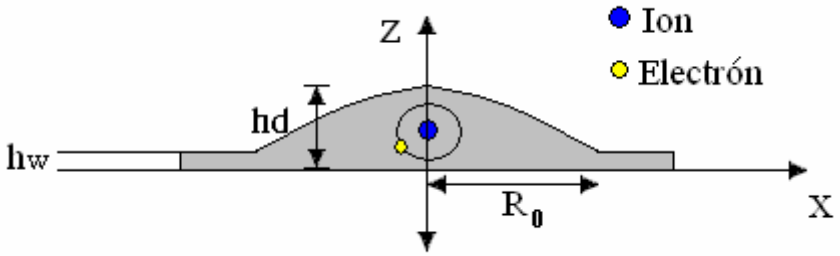

Fig. 5 Impureza centrada en el SAQD inferior

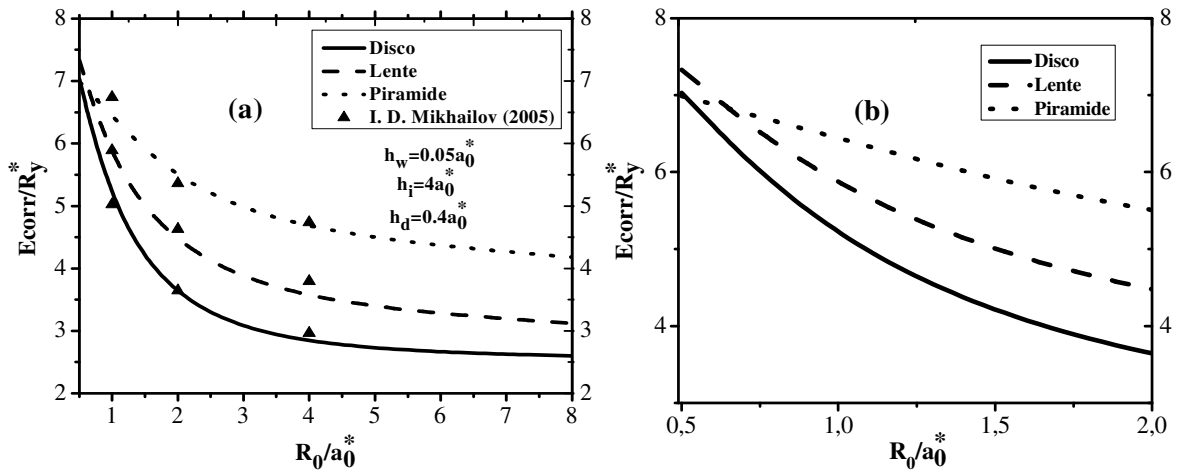

Fig. 6 Energía de enlace de la donadora en función del radio del SAQD con forma de disco, lente y pirámide (a), (b) acercamiento de las curvas de energía para radios pequeños.

La grafica de comparación de la energía de correlación en función del radio que se presenta en la figura 6 (a) muestra que para valores de radio menores a $R_0 = 1a_0^*$, la energía de enlace toma valores muy cercanos para cada una de las morfologías, permitiendo ver que a medida que hay una disminución del radio, el volumen encerrado por las tres geometrías tiende ha ser el mismo, aunque se puede apreciar que para estos valores de radio ver figura 6 (b) la energía de enlace para la pirámide está por debajo de la lente y el disco, lo que indica que la función de onda del electrón tiende a desbordarse mas rápidamente para el caso de puntos con forma de pirámide. Es de esperar, que si se analiza la energía de enlace más detalladamente para radios más pequeños se observe un desbordamiento de la función de onda en la lente y luego en el disco.

En la figura 6 (a) se muestra un decrecimiento de la energía de enlace a medida que el radio del punto cuántico aumenta, esta tendencia a disminuir se presenta por que el aumento del radio del punto permite que la distancia ión-electrón se incremente, lo que conlleva a que la partícula se mueva más libremente en esta dirección. Este comportamiento en la energía se generaliza para las tres geometrías estudiadas, mostrándose que los SAQD con geometría de pirámide presentan los valores más altos de energía, seguido de la lente y por ultimo el disco. El propósito de mostrar está variación es demostrar que este sistema tridimensional se puede llevar a un sistema bidimensional, cuyo valor de energía de enlace debe ser el mismo que el del átomo de hidrogeno bidimensional ($4R_y^*$). Este valor de energía se ha demostrado en la teoría de escalamiento dimensional [25], la cual predice que la energía de enlace del átomo de hidrogeno en un espacio de D dimensiones obedece la siguiente ecuación:

$$Ecorr = \frac{R_y^*}{\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2} \tag{3.2}$$

En donde $n = 1, 2, 3...$ es el número cuántico principal dado por la relación: $n = n_\rho + m + 1$. Los valores de energía de enlace para el estado base en el caso tridimensional, bidimensional y unidimensional son:

$$Ecorr = \begin{cases} 1R_y^*; & D=3 \\ 4R_y^*; & D=2 \\ \infty; & D=1 \end{cases} \tag{3.3}$$

Los valores de energía obtenidos para las diferentes geometrías se encuentran por debajo de los valores reportados en [13], esta diferencia se presenta debido a que el portador de carga dentro del sistema en estudio, siente además del potencial de interacción ión-electrón, el potencial de confinamiento del SAQD, la capa húmeda del SAQD y aunque se ha separado una distancia considerable del punto cuántico superior, este aun produce un pequeño efecto.

3.2 EFECTO FORMA Y TAMAÑO DEL SAQD SOBRE LA ENERGÍA DE ENLACE DE LA D^0

El espectro energético para el sistema que se está estudiando, se describe a través de los números cuánticos n_ρ y m, respectivamente, corresponden al número cuántico radial y al número cuántico azimutal, lo que permite hacer una clasificación para los estados del sistema como se muestra en la tabla 1:

	$m=0$	$m=1$	$m=2$
$n_\rho=0$	$1s$	$1p$	$1d$
$n_\rho=1$	$2s$	$2p$	$2d$
$n_\rho=2$	$3s$	$3p$	$3d$

Tabla 1 Nomenclatura para los estados del sistema

Para mostrar el efecto del tamaño del SAQD sobre la energía de enlace del sistema, se realiza primero una variación del radio R_0 del SAQD, considerando constantes la altura $h_d = 0.4a_0^*$, la capa húmeda $h_w = 0.05a_0^*$ así como la distancia entre puntos $h_i = 4a_0^*$. Luego se varía la altura del punto h_d y permanecen fijos su radio $R_0 = 4a_0^*$, capa húmeda $h_w = 0.05a_0^*$ y distancia entre puntos $h_i = 0.8a_0^*$.

En la figura 7 se presenta la energía de enlace de la D^0 en función del radio del punto cuántico, para los estados 1s y 1p, los cuales siguen la nomenclatura presentada en la tabla1.

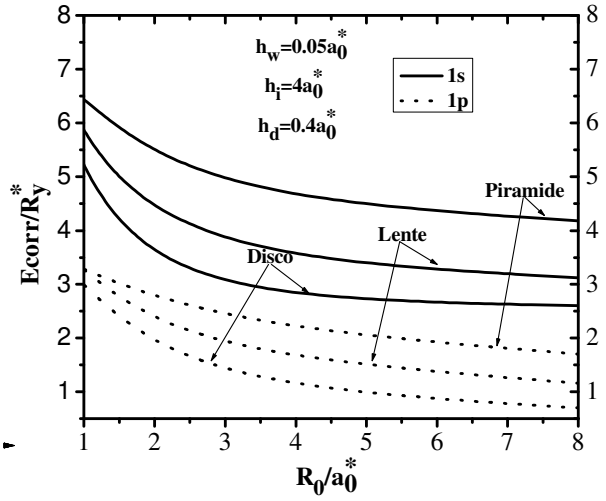

Fig. 7 Energía de enlace en función del radio del SAQD para estados 1s y 1p.

Como era de esperarse la energía de enlace en función del radio, tiende a disminuir a medida que el radio del SAQD aumenta, este comportamiento se extiende de manera análoga sobre el estado 1p, el cual debe tender a un valor aproximado de $0.44R_y^*$ según la ecuación 3.2. Se observa en la figura 7 que la energía de enlace del sistema para el estado 1p está por encima del valor esperado, para cuando el sistema tiene una morfología de lente y pirámide, mientras que para el disco la energía tiende a un valor muy próximo a $0.44R_y^*$, este comportamiento se presenta debido a que los SAQD con forma de disco realizan el menor confinamiento sobre el portador de carga.

En la figura 8 se presenta la energía del electrón en función de la altura del SAQD, en este caso se ha considerado al electrón libre en el sistema de puntos cuánticos auto-ensamblados acoplados verticalmente, tomando constantes los siguientes parámetros: distancia entre puntos $h_i = 0.9a_0^*$, capa húmeda $h_w = 0.09a_0^*$ y radio $\mathrm{R}_0 = 4a_0^*$.

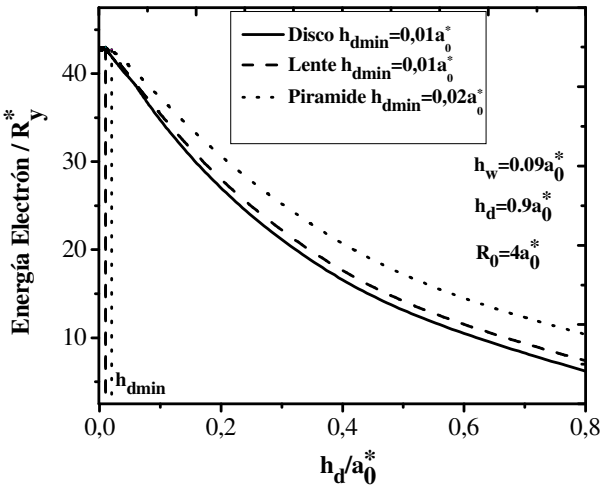

Fig. 8 Energía del electrón en función de la altura del SAQD

La figura 8, nos permite calcular la altura mínima para la cual el electrón permanece dentro del SAQD y es valida la aproximación adiabática. De acuerdo a los valores de altura mínima reportados en esta figura, la pirámide debido a su mayor confinamiento sobre el portador presenta un valor más alto de altura mínima, mientras que la lente y el disco toman un mismo valor de altura mínima, este resultado se presenta debido que el volumen encerrado es casi el mismo cuando la altura del punto se hace pequeña ver figura 9.

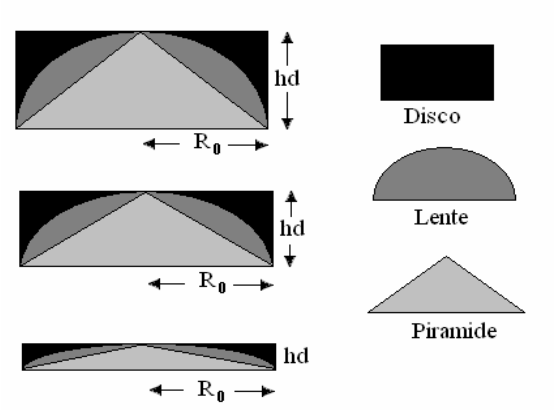

Fig. 9 Disminución de altura de SAQD con forma de disco, lente y pirámide.

A partir de los valores dados de las alturas mínimas se construye la figura 10, en esta se presenta la energía de enlace en función de la altura del punto, con un radio de $R_0 = 4a_0^*$, tomando constante la distancia entre puntos $h_i = 0.9a_0^*$ y capa húmeda $h_w = 0.09a_0^*$

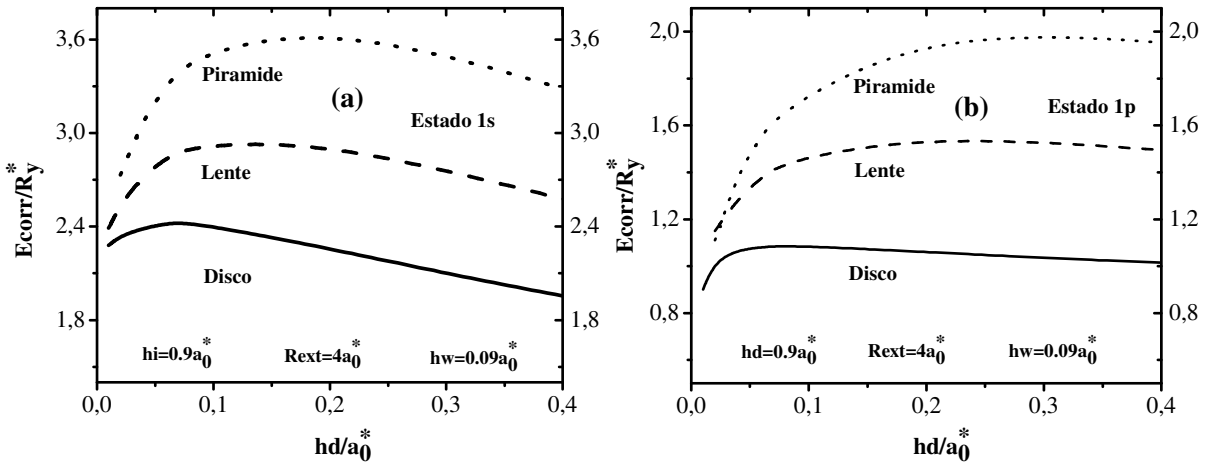

Fig. 10 Energía de enlace en función de la altura del SAQD
para los estados 1s (a) y 1p (b)

En la figura 10 (a) se observa un crecimiento de la energía de enlace del estado $1s$ a medida que se reduce la altura del SAQD, este comportamiento ocurre debido a que al reducir la altura, el confinamiento sobre el electrón se hace mas grande y los niveles energéticos se suben, esta conducta se presenta hasta que se llega a un valor critico de altura a partir del cual la energía correspondiente al electrón llega al borde del pozo de potencial finito, produciéndose un desbordamiento de la función de onda del electrón, debido al fuerte confinamiento. Esto se debe a que con valores muy pequeños de h_d, la distancia entre el electrón y la impureza

aumenta, haciendo que la energía de enlace disminuya. En la figura 10 (b) se evidencia que para el estado $1p$ la energía de enlace decrece más rápidamente para valores de altura mas altos, como ejemplo se visualiza para el estado $1s$, en el caso de la pirámide un desbordamiento aproximadamente para $h_d = 1.5a_0^*$ y en el estado $1p$ se presenta para $h_d = 2.5a_0^*$, esto evidencia que el efecto de la disminución de la altura es mas fuerte para el estado $1p$ y por lo tanto se espera que se presente el mismo fenómeno para los demás estados.

Como se ha mostrado en las figuras 7 y 10 la energía de enlace depende del radio y de la altura del punto cuántico, partiendo de esta dependencia se realizo la figura 11 en la que se muestra la variación de la energía de enlace en función de la altura del punto, para dos radios $\mathrm{R}_0 = 2a_0^*$ y $\mathrm{R}_0 = 4a_0^*$, con una distancia entre puntos de $h_i = 0.9a_0^*$ y capa húmeda $h_w = 0.09a_0^*$.

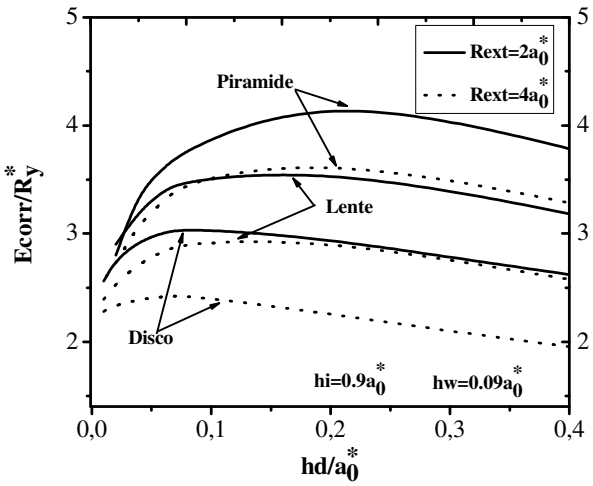

Fig. 11 Energía de enlace en función de la altura del SAQD con diferentes radios.

La energía de enlace en función de la distancia presenta el mismo comportamiento que en la figura 10, pero ocurre que al disminuir el radio del SAQD los niveles de energía suben y por lo tanto los valores de energía de enlace para un radio de $\mathrm{R}_0 = 2a_0^*$ son mayores que un radio de $\mathrm{R}_0 = 4a_0^*$. Se puede apreciar que los valores de energía de enlace en el caso de SAQD con forma de pirámide siempre están por encima de los reportados para la lente y el disco, evidenciándose el fuerte confinamiento que esta morfología produce sobre el portador.

3.3 ENERGÍA DE ENLACE EN FUNCIÓN DE LA POSICIÓN DE LA DONADORA

En esta sección se muestra como se afecta la energía de enlace del sistema, si el ión se desplaza sobre el eje z. Con este fin se ha elaborado la figura 13, en la que se muestra la energía de enlace para los estados $1s$ y $1p$ en función de la posición del ión, para su realización se han tomado los siguientes parámetros: altura de punto $h_d = 0.2a_0^*$, capa húmeda $h_w = 0.1a_0^*$, radio $\mathrm{R}_0 = 4a_0^*$ y distancia entre puntos $h_i = 0.7a_0^*$.

Ubicados el ión y el electrón dentro del punto cuántico inferior, se realiza un desplazamiento del ión hacia fuera del SAQD, ver figura 12, a medida que este se acerca a la barrera de potencial la distancia de separación ión-electrón aumenta, produciendo una disminución en la energía de enlace, tal como se observa en la figura 13.

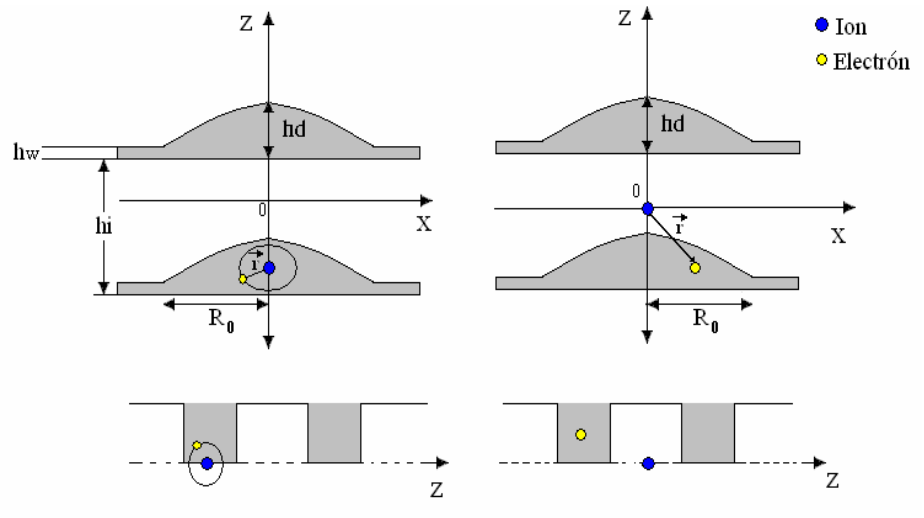

Fig. 12 Posición del ión en el eje z.

Cuando el ión se ubica en el punto medio de separación entre los SAQD, se presenta una competencia entre la atracción que ejerce el ión sobre el electrón y el confinamiento producido por la barrera, esta ultima posee una energía de $47R_y^*$, mientras que la energía para el átomo de hidrogeno tridimensional es de $1R_y^*$, es de esperar que de acuerdo a los valores ofrecidos de energía por los dos potenciales, que el electrón permanezca dentro del punto cuántico inferior, de esta manera aumenta la distancia de separación ión-electrón, teniendo como consecuencia una disminución de la energía de enlace, como se muestra en la figura 13.

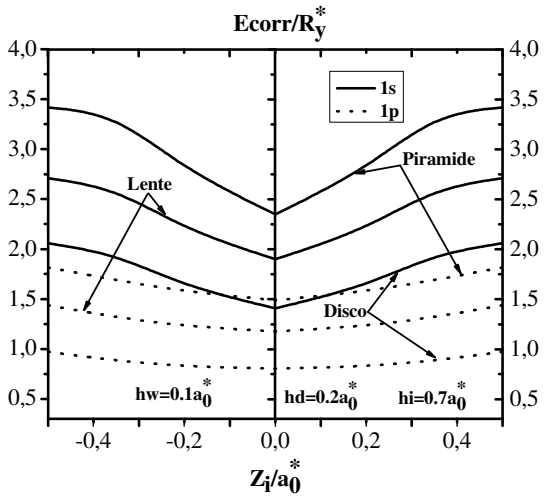

Fig. 13 Energía de enlace en función de la posición de la impureza para SAQD con diferentes perfiles geométricos.

Ubicado el ión en el punto medio de separación entre los SAQD, se lleva hasta el punto cuántico superior, evidenciándose en esta figura que la energía de enlace tiende a aumentar a medida que este entra en el SAQD, esta inversión en la energía se presenta por que el electrón tiene mayor probabilidad de encontrarse dentro del punto cuántico superior, así si el ión se acerca, la distancia de separación disminuye, produciendo un aumento de la energía de enlace. Este comportamiento es común para puntos cuánticos con geometría de disco, lente y pirámide, pero cada morfología de acuerdo al confinamiento que ejerce sobre el portador presenta diferentes valores de energía de enlace para una determinada posición de impureza.

Se evidencia en esta figura que la energía de enlace para el estado $1p$ presenta el mismo comportamiento respecto la variación de la posición de la impureza, solo que para este estado las curvas de energía son mas suaves.

4. CONCLUSIONES

1. Mediante el uso de la aproximación adiabática fue posible tener en cuenta el efecto del espesor de los puntos cuánticos sobre el espectro energético y mostrar que la altura realmente tiene una gran incidencia sobre el espectro energético y por tal razón los puntos NO SE PUEDEN considerar bidimensionales.

2. La aproximación adiabática permite tener en cuenta el efecto que tiene la capa húmeda sobre el espectro energético.

3. Se mostró que el espectro energético de la donadora en puntos cuánticos auto-ensamblados es fuertemente dependiente de los factores geométricos que caracterizan el sistema: Radio, altura, espesor de la capa húmeda.

4. Se mostró que el espectro energético del D^0 es fuertemente dependiente de la morfología de los SAQD, donde los mayores valores de la energía de enlace se obtienen en los puntos con formas mas agudas

5. Como una extensión al presente trabajo, se puede tener en cuenta los efectos de tunelamiento del electrón entre los puntos cuánticos auto-ensamblados y además se puede determinar el efecto del campo magnético sobre el espectro energético y la manera como se distribuye la carga dentro de los puntos.

APÉNDICE

Algoritmo de Programación

1. Se aprovecha la diferencia entre el tamaño lateral y el horizontal del SAQD para separar el movimiento del electrón en uno rápido en la dirección de crecimiento y otro lento en la dirección radial. $\psi(\rho,\varphi,z) = f_z(z,\rho)\phi(\rho,\varphi)$

2. Para desarrollar la parte correspondiente al movimiento rápido del electrón, se realiza una malla en ρ con paso $\delta\rho$ y para cada punto de la malla se encuentra la energía y la función de onda para el doble pozo finito obteniéndose los datos de $E_z(\rho_i)$ y $f_z(z,\rho_i)$.

3. Por medio de la interpolación se construye la función de la energía del movimiento rápido, junto con su respectiva función de onda para todo valor de ρ.

4. El electrón se confina en el punto cuántico inferior por medio de Ec. (2.9) con la energía asociada correspondiente Ec. (2.10)

5. Se descongela el movimiento en la dirección lateral incluyendo los resultados de la parte rápida a través de un potencial promedio Ec.(2.24) y Ec.(2.19)

6. La ecuación de Schrödinger para el movimiento lento se resuelve mediante el método de barrido trigonométrico.

REFERENCIAS

[1] T. Appenzeller, Science **254**, 1300 (1991)

[2] Chang, L. L., Esaki, L., Tsu, R., Appl. Phys. Lett. 24, 8227 (1994).

[3] Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. H., Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974)

[4] P. Harrison: *Quantum Wells, Wires and Dots,* Wiley-Interscience (2005)

[5] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, Reviews of Modern Physics, **54**, N° 2, 437 (1982)

[6] D. R. Bowler, J. Phys.: Condens Matter **16**, R721-R754 (2004)

[7] 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).

[8] Stranski, I. N., von Krastanow, L., Akad. Wiss. Let. Mainz Math. Natur K1 IIb 146, 797 (1939).

[9] Kirstaedter, N., Ledentsov, N. N., Grundmann, M., Bimberg, D., Ustinov, V. M., Ruvimov, S. S., Maximov, M. V., Kop'ev, P. S., Alferov, Zh. I., Richter, U., Werner, P, Gösele, U., Heydenreich, J., *Low threshold, large T_0 injection laser emission from (InGa)As quantum dots*, Electronics Lett. **30**, 1416 (1994).

[10] Shoji, H., Mukai, K., Ohtsuka, N., Sugawara, M., Uchida, T., Ishikawa, H., Lett. **7**, 1385 (1995).

[11] Song, J., Ulloa, S. E., Phys. Rev. B **63**, 125302 (2001).

[12] Szafran, B., Adamowski, J., Bednarek, S., J. Phys. Condensed Matter **14**, 73 (2002).

[13] Mikhailov, I .D., Marín, J .H., García, F., Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 1636 (2005).

[14] Marek Korkusinski and Pawel Hawrylak, Phys. Rev, B **63**, 195311 (2001)

[15] L. R. C. Fonseca and J. L. Jiménez, Phys. Rev, B **58**, 15 (1998)

[16] Lixin He, Gabriel Bester, and Alex Zunger, Phys. Rev, B **72**, 081311 (2005);
Lixin He, Gabriel Bester, and Alex Zunger, Phys. Rev, B **72**, 195307 (2005)

[17] V. A. Mishournyi, I. C. Hernández del Castillo, A. Yu. Gorbatchev and A. Lastras Martínez, *Tecnologías epitaxiales de crecimiento de cristales semiconductores* Avance y Perspectiva vol. 21

[18] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981).

[19] Luttinger, J.M., Kohn, W. Phys. Rev. 97, 869 (1955).

[20] Kittel, C., *Introduction to solid state physics*, 7th Ed., Wiley, NY (1996).

[21] D. Loos and D. P. Di Vincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998)

[22] M. Bayer, P. Hawrylak, K. Hinzer, S. Fafarad, M. Korkusinski, Z. R. Wasilewski, O. Stern, and A. Forchell, Science **291**, 451 (2001).

[23] M. Grundmann, O. Stier and D. Bimberg, Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).

[24] A. Lorke, R. J. Layrin, A. O. Govorok, J. P. Kotthous, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, P. R. Lett 84, 2223 (2000)

[25] D. R. Herschbach, J. A. Very and O. Goscinski, " Dimensional Scaling in Chemical Physics ", (Kluwer Academia Publishers)

[26] S. Tsujino, M. Rufenacht, P. Miranda, S.J. Allen, P. Tamborenea, W. Schoenfeld, G. Herold, G.Lupke, T. Lundstrom, P. Petroff, H. Metiu and D. Moses, Quantum control of electron transfer, *Phys. Status. Solidi (B)* **221** (2000), pp. 391–396.

[27] M. Rufenacht, S. Tsujino, Y. Ohno and H. Sakaki, Delayed luminescence induced by intersubband optical excitation in a charge transfer double quantum well structure, *Applied Physics Letters* **70** (1997) (9), pp. 1128–1130.

[28] M. Rufenacht, S. Tsujino and H. Sakaki, Transient negative photoconductance in a charge transfer double quantum well under intersubband excitation, *Physica B* **249–251** (1998), pp. 723–726.

[29] M. Grundmann, O. Stier and D. Bimberg, Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).