

**ESTUDIO DE LOS NIVELES DE ENERGÍA ASOCIADOS A UN PORTADOR
EN NANO-HILO DE SILICIO CON CAMPO MAGNÉTICO AXIAL**

SHERYL KARINA AVENDAÑO PÉREZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
2008**

**ESTUDIO DE LOS NIVELES DE ENERGÍA ASOCIADOS A UN PORTADOR
EN NANO-HILO DE SILICIO CON CAMPO MAGNÉTICO AXIAL**

**TRABAJO DE GRADO COMO REQUISITO PARA OPTAR AL TÍTULO DE
FÍSICO**

SHERYL KARINA AVENDAÑO PÉREZ

Director:

PhD. CARLOS L. BELTRÁN RÍOS



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
2008**

*Dedico este trabajo primero a Dios,
A mis padres, Eva Rosa Pérez Ortiz y Eliécer Avendaño,
Sin ellos este sueño nunca hubiese sido posible.
A mis hermanos Brian y Randolph Avendaño por su apoyo
A mis sobrinos y a toda mi familia en Santa Marta*

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Carlos Leonardo Beltrán, director de este trabajo, gracias por su colaboración, su dedicación, por compartir su conocimiento y su tiempo conmigo y sobre todo por su paciencia y espera.

A Elber Rodríguez, mi compañero de grupo y seminario, gracias por siempre estar pendiente de mí y decirme las cosas a tiempo, por los regaños y los consejos que siempre recibí de ti.

A Viviana, Sasha, Carlos, amigos incondicionales que me han acompañado en esta etapa de mi vida, tanto como estudiante de Física como amiga y espero que pronto me acompañen como colegas y sigamos siendo los mimos.

A Teo, a Cesar Celis y Cesar Peralta, Lina, Alfredo, Carolina, Rafael, Sandra y a todos mis compañeros de Física que estuvieron apoyándome siempre, que me dieron una mano amiga y que fortalecieron mis ideales.

A Susana, a Mary y Rubert por estar siempre conmigo aunque no estudiáramos lo mismo, aunque no nos veamos mucho sus palabras de aliento en los momentos mas difíciles me hicieron salir adelante.

A mis compañeros de PIVU, Adriana, Javier, Román, Wilver, Joaquín, Kelly, Mayra, Claudia, Reynel, Fidel, Elkin, Rolando, Felipe y en especial a Liliana por enseñarme a ver más allá de los libros y la teoría, para poder aprender de la vida misma, sin ustedes mi visión del mundo seguiría siendo muy pequeña.

Por ultimo, pero no menos importante, a mi familia en Santa Marta que siempre espero lo mejor de mi y estuvo a mi lado, en especial a mi madre que apostó por mi y mi deseo de estudiar Física y por supuesto a Dios por sobre todas las cosas por permitirme lograra este sueño.

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
INTRODUCCIÓN	1
1.FUNDAMENTO TEÓRICO	3
1.1 Análisis	3
1.2 Modelo de Kane	5
1.3 Fuerza de un oscilador	8
2. Portador De Carga En Un Nano-Hilo Cilíndrico	9
2.1 Solución para un portador en hilo cuántico infinito con potencial de confinamiento infinito sin campo	13
2.1.1 Fuerza del Oscilador	14
2.1.2 Parámetros del Sistema	15
2.2 Solución para un portador en un hilo cuántico infinito con potencial de confinamiento infinito con campo aplicado	15
2.2.1 Fuerza del Oscilador	18
2.2.2 Parámetros del Sistema	19
3. RESULTADOS Y DISCUSIONES	20
4. CONCLUSIONES	31
BIBLIOGRAFÍA	32
ANEXOS	35

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág...
Fig. 1.1 Nano-hilo de semiconductor A, rodeado por un semiconductor B	1
Fig. 1.2 Bandas de un semiconductor	5
Fig. 2.1 Nano-hilo Cilíndrico de radio R	13
Fig. 2.2 Nano-hilo Cilíndrico de radio R bajo acción de un campo magnético aplicado	16
Fig. 3.1 Niveles de energía E_{0l} vs. R	20
Fig. 3.2 Niveles de energía E_{1l} vs. R	20
Fig. 3.3 Niveles de energía E_{2k} vs. R	21
Fig. 3.4 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. R	22
Fig. 3.5 Niveles de energía E_{0l} vs. R de la función de onda C_1 .	23
Fig. 3.6 Niveles de energía E_{1l} vs. R de la función de onda C_1 .	23
Fig. 3.7 Niveles de energía E_{2l} vs. R de la función de onda C_1 .	24
Fig. 3.8 Niveles de energía E_{0l} vs. R de la función de onda C_2	25
Fig. 3.9 Niveles de energía E_{1k} vs. R de la función de onda C_2 .	25
Fig. 3.10 Niveles de energía E_{2k} vs. R de la función de onda C_2	26
Fig. 3.11 Energía vs. radio para diferentes campos aplicados, para $m=0$ y $l=1$	27
Fig. 3.12 Energía en función del campo para un radio de 20 [Å] con $m=0$ para la primera raíz ($l=1$)	27
Fig. 3.13 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. H para $R=7$ de la función de onda C_1 .	28

Fig. 3.14 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. H para $R=7$ de la función de onda C_2 .	29
Fig. 3.15 Fuerza del Oscilador F_{011} vs. H para $R=7$ entre de la función de onda C_1 y C_2 .	29
Fig. 1 Niveles de Energía calculado en función del radio de un portador en un nano-hilo de geometría cilíndrica de InSb $E_g=0.2368$ [eV] ref. [8]	35
Fig. 2 Comportamiento de la energía de un portador en un nano-hilo de InAs con un campo magnético aplicado en forma axial para las funciones C_1 y C_2 , niveles $m=-2, -1, 0, 1, 2$, $E_g=0.2368$ ref. [8]	36
Fig. 3 La energía del Exciton E_0 y la energía de interacción de Columbio W como una función del grosor t de un nano-hilo de InAs ref. [17]	37
Fig. 4 La fuerza de oscilador F_x como una función del grosor t de un nano-hilo de InAs ref. [17]	37
Fig. 5 La fuerza de oscilador para la transición E_1HH_1 hallada en 2 modelos, así como el experimental, contra campo magnético hasta 8T, ref. [18]	38
Fig. 6 La fuerza de oscilador para un Exciton de CdTe y GaAs contra campo magnético ref. [15]	38
Fig. 7 Las fuerzas de oscilador de las transiciones de estado base al primer y al segundo estado excitado como una función de la anchura del punto cuántico para una separación lateral entre los puntos de 20 nm, ref. [19]	39

ÍNDICE DE TABLAS

	Pág...
Tabla 1.1. Funciones de Onda	6
Tabla 1.2 Representación de los elementos matriciales W_{ij}	7

RESUMEN

TITULO: ESTUDIO DE LOS NIVELES DE ENERGÍA ASOCIADOS A UN PORTADOR EN NANO-HILO DE SILICIO CON CAMPO MAGNÉTICO AXIAL¹

AUTOR: Sheryl Avendaño Pérez ²

PALABRAS CLAVES: Nano-hilo de Si, Niveles de energía, Modelo de Kane.

DESCRIPCIÓN: El estudio de estructuras de baja dimensionalidad de sistemas basados en Silicio ha tenido un aumento en los últimos años, y las perspectivas de aplicaciones tecnológicas se han ampliado debido a estas nuevas estructuras. En este trabajo se estudian los niveles de energía para un portador en un nano-hilo de Silicio con simetría cilíndrica. Los cálculos son realizados para potenciales de confinamiento infinito, con y sin aplicación de un campo magnético axial y a diferentes radios del nano-hilo, dentro de la aproximación de la masa efectiva y haciendo uso del Hamiltoniano de Kane. Con estos valores de energía se determinó la fuerza del oscilador, magnitud importante al mencionar las propiedades ópticas. Nuestros resultados son comparados para sistemas similares realizados en otro tipo de material como GaAs, InAs, entre otros.

Se concluye que el comportamiento visto en los resultados obedece a un confinamiento en un pozo cuántico y el efecto de la aplicación del campo es desdoblar los niveles de energía y hacer visible la diferencia de los dos estados a medida que el campo aumenta. Adicionalmente, se observa que el modelo de Kane, el cual se reserva para elementos de brecha directa, es aplicable para el Silicio aun siendo de brecha indirecta comúnmente, pero que para los radios usados se comporta como brecha directa según las referencias y permite al modelo se completamente aplicable.

¹ Proyecto de Grado

² Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. Carlos L. Beltrán Ríos

ABSTRACT

TITLE: STUDY OF THE LEVELS OF ENERGY ASSOCIATED WITH A CARRIER IN SILICON NANOWIRE WITH MAGNETIC AXIAL FIELD

AUTHOR: Sheryl Avendaño Pérez¹

KEY WORDS: Si Nanowire, levels of energy, model of Kane.²

DESCRIPTION: The study of structures of full dimensionality of systems based on Silicon has had an increase in the last years, and the perspectives of technological applications have been extended due to these new structures. In this work the levels of energy are studied for a carrier in a silicon nanowire by cylindrical symmetry. The calculations are realized for potentials of infinite confinement, with and without application of a magnetic axial field and to different radius of the nanowire, inside the approximation of the effective mass and using the Kane's Hamiltonian. With these values of energy the force of the oscillator decided, important magnitude on having mentioned the optical properties. Our results are compared for similar systems realized in another type of material as GaAs, InAs, between others.

One concludes that the behaviour in the results obeys a confinement in a quantum well and the effect of the application of the field is to unfold the levels of energy and to make visible the difference of both states as the field increases. Additionally, it is observed that the model of Kane, who saves himself for elements of direct gap, is applicable for the Silicon even being of indirect gap commonly, but as for the radius used as direct gap according to the references and allows the model completely applicable.

¹ Proyecto de Grado

² Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. Carlos L. Beltrán Ríos

INTRODUCCIÓN

La sociedad avanza rápidamente a un mundo cada vez más saturado de información y con apremiante necesidad de aumentar la capacidad de sus herramientas electrónicas, al mismo tiempo de disminuir sus costos y su tamaño. En muchos casos esta limitación hace difícil cubrir ciertas necesidades, como una recolección de datos más precisa, simplemente por el hecho de no poder procesar, almacenar o manejar estos mismos.

En un futuro, como ha venido sucediendo hasta la actualidad, los elementos electrónicos serán más pequeños en tamaño, hasta el punto en que se vean afectados por las leyes cuánticas. Estos elementos de baja dimensionalidad, del orden de nanómetros y que se relacionan con el progreso de la microelectrónica y la optoelectrónica son conocidos como pozos cuánticos, hilos cuánticos y puntos cuánticos. Un hilo cuántico o nano-hilo es un dispositivo de baja dimensión con forma alargada, que se compone de un semiconductor A y puede estar rodeado por un semiconductor B, ver Figura 1:

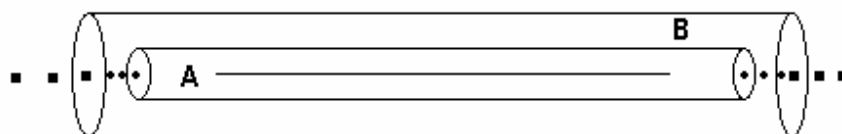


Fig. 1.1 Nano-hilo de semiconductor A, rodeado por un semiconductor B

Los semiconductores usados en estos nano-hilos pueden ser de diferentes grupos periódicos, especialmente grupos III y V ^[3,8] sin embargo en la actualidad se han venido estudiando nano-hilos hechos de semiconductores del grupo IV, en concreto el Silicio ^[1,5,9], debido a la gran utilidad que ha tenido éste elemento en la microelectrónica y a su abundancia en la naturaleza, también se ha estudiado su

comportamiento con campos magnéticos^[3,15] donde se han observado los efectos del campo magnético sobre valores como el factor de Lande g y la fuerza del oscilador. Se han planteado diferentes aplicaciones, desde modelos para poder ser utilizados como interconexiones entre diferentes componentes, o también funcionar directamente como zona activa de un dispositivo^[4,11,12], hasta su posible uso en aplicaciones para la computación cuántica^[7].

También se ha estudiado, en un nano-hilo de Si con geometría cilíndrica, la estructura de bandas de energía haciendo uso de un modelo de perturbación, los resultados obtenidos muestran, que para cierto rango de radios, el nano-hilo de Si posee un comportamiento de brecha directa, cuando naturalmente es de brecha indirecta^[1]. En trabajos recientes también se han estudiado los niveles de energía asociados a puntos cuánticos de InSb^[3], utilizando para ello el modelo de Kane, y su comportamiento ante campos externos.

En el grupo FICOMACO se ha estudiado los sistemas de baja dimensionalidad en sistemas semiconductores de GaAs, InAs^[21,22], sin embargo en este trabajo se quiere orientar hacia el Si debido a la gran utilidad que ha tenido y a las nuevas propuestas que han surgido alrededor de él^[6,12], esto además requiere el conocimiento y el manejo de nuevos elementos asociados a la investigación para la solución numérica de los modelos que se plantean.

Para nuestro trabajo estudiamos los niveles de energía asociados a portadores de carga en un nano-hilo de Si de longitud infinita, radio R y un campo magnético aplicado en la dirección axial para ello usaremos el modelo de Kane^[13], tomando un rango de radios para el cual el nano-hilo de silicio tiene un comportamiento de brecha directa^[1], por medio de este modelos podemos hallar los niveles de energía. Con estos valores de energía se procederá a determinar la fuerza del oscilador, magnitud importante al mencionar las propiedades ópticas, debido a su relación con las frecuencias de resonancia transversal y longitudinal, y la dispersión espacial.^[10,15,16]

1.FUNDAMENTO TEÓRICO

1.1 Análisis

Para analizar nuestro problema con detalle debemos hacer un análisis del comportamiento de un electrón de masa m_0 en un semiconductor, la ecuación de Schrödinger para portadores es:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

Donde el potencial cristalino $V(\mathbf{r})$ es periódico, con el mismo periodo que la red cristalina. El tercer término de esta ecuación es la interacción spin-órbita, siendo $\boldsymbol{\sigma}$ un vector cuyas tres componentes son las matrices de Pauli. Si llamamos \mathbf{T} cualquier traslación sobre la red cristalina entonces el potencial, así como su gradiente, satisfacen la condición de periodicidad, es decir, se verifica que $V(\mathbf{T} + \mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$. Esto significa que se deben buscar soluciones de Bloch a la ecuación de Schrödinger de la forma:

$$\psi_{kn}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) C_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (1.2)$$

Siendo C_n invariante bajo traslaciones de la red, n es el índice de la banda y \mathbf{k} es el momento cristalino, restringido a la primera zona de Brillouin. Sustituyendo (1.2) en la ecuación de Schrödinger (1.1) obtenemos que:

$$[\hat{H} + \hat{W}(\mathbf{k})]C_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k})C_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (1.3)$$

Por conveniencia hemos definido los siguientes operadores

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \quad (1.4.1)$$

$$\hat{W}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \boldsymbol{\mu} \quad (1.4.2)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \quad (1.4.3)$$

Notemos que H es el Hamiltoniano correspondiente a la ecuación de Schrödinger (1.1), cuyas autofunciones las denotaremos por $\psi_{n0}(\mathbf{r})$ o equivalentemente $C_n(\mathbf{r}, 0)$. Por tanto podremos escribir la siguiente ecuación de autovalores:

$$\hat{H}C_n(\mathbf{r}, 0) = E_n(0)C_n(\mathbf{r}, 0) \quad (1.5)$$

Por otra parte, es claro que el operador $\hat{W}(\mathbf{k})$ se anula para $\mathbf{k}=0$ y además es invariante bajo traslaciones sobre la red. Desarrollando las funciones $C_{n0}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ en términos de $C_n(\mathbf{r}, 0)$ podremos escribir

$$C_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \sum_m A_m(\mathbf{k}, n)C_n(\mathbf{r}, 0) \quad (1.6)$$

Introduciendo este desarrollo en la ecuación (1.3), multiplicando por la conjugada $C_m^*(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ e integrando en todo el volumen de la celda unidad se tiene fácilmente

$$\sum_m \left[\left(E_n(0) - E_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \boldsymbol{\mu}_{nm} \right] A_m(\mathbf{k}, n) = 0 \quad (1.7)$$

Donde

$$\boldsymbol{\mu}_{nm} = \int_{\Omega} C_0^*(\mathbf{r},0)\boldsymbol{\mu}C_0(\mathbf{r},0)d^3r \quad (1.8)$$

Ω hace referencia al volumen de la celda unidad. Para valores pequeños de \mathbf{k} tenemos que $A_n(\mathbf{k},n) \approx 1$ ($n=m$) y $A_m(\mathbf{k},n) = \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\mu}_{nm}}{m_0[E_n(0)-E_m(0)]}$ ($n \neq m$). Utilizando la ecuación (1.7) tenemos la corrección de segundo orden para la relación de dispersión

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\boldsymbol{\mu}_{nm} \cdot \mathbf{k}|^2}{E_n(0) - E_m(0)} \quad (1.9)$$

2.2 Modelo de Kane

Luego del análisis anterior podemos entender en que consiste el método de Kane, hay que recordar que la ecuación (1.9) es sólo válida para términos cuadráticos en el momento \mathbf{k} . Sin embargo, cuando estamos estudiando semiconductores de intervalo prohibido estrecho, alguno de los términos $[E_n(0) - E_m(0)]$ puede no ser grande, y por estar en el denominador puede hacerse necesario ir a mayores órdenes en el desarrollo en \mathbf{k} . Esto podría llevarse a cabo mediante el cálculo perturbativo, pero no cabe duda de que resulta demasiado tedioso. Por eso suele utilizarse otra aproximación debida a Kane.

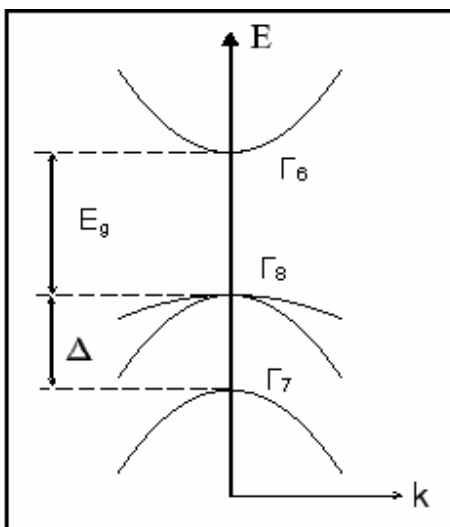


Fig. 1.2 Bandas de un semiconductor

Entonces, definimos a $|S \uparrow\rangle$, $|X \uparrow\rangle$, $|Y \uparrow\rangle$, $|Z \uparrow\rangle$, $|S \downarrow\rangle$, $|X \downarrow\rangle$, $|Y \downarrow\rangle$ y $|Z \downarrow\rangle$ como las ocho funciones de onda de Bloch de los extremos de las cuatro bandas (una de conducción tipo s y tres de valencia tipo p), donde la flecha indica el spin, resulta que el término de interacción spin-órbita no es diagonal en esta base, por lo que interesa buscar una combinación lineal que lo diagonalice. Esto se puede hacer si

encontramos una serie de funciones que diagonalice los operadores momento angular total $\hat{J} = \hat{L} + \hat{\sigma}$ y su proyección J_z . Para bandas s el momento angular sólo puede valer $J=1/2$, (simetría Γ_6), pero para bandas p puede valer $1/2$ ó $3/2$.

El diagrama de energías cerca de $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ aparece esquematizado en la Fig. 1.2, donde se indica la separación de energías entre los extremos Γ_7 y Γ_8 mediante el símbolo Δ y E_g la energía de separación de las bandas de conducción y la de valencia. Las nuevas funciones que vamos a escoger aparecen a continuación en la Tabla 1.1, junto con los autovalores de \mathbf{J} y J_z y las energías, tomando como cero el punto Γ_6

C_i	J	m_j	Ψ_{Jm_j}	$E_i(\mathbf{k} = 0)$
C_1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$i S \uparrow\rangle$	0
C_2	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$i S \downarrow\rangle$	0
C_3	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$	$-E_g$
C_4	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow\rangle$	$-E_g$
C_5	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$	$-E_g$
C_6	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow\rangle$	$-E_g$
C_7	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow\rangle$	$-E_g - \Delta$
C_8	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY) \uparrow\rangle$	$-E_g - \Delta$

Tabla 1.1. Funciones de Onda

En esta base podemos calcular los elementos de matriz del operador $\hat{W}(\mathbf{k})$ dado en (1.4) como $\hat{W}_{ij}(\mathbf{k}) = \langle C_i | \hat{W}(\mathbf{k}) | C_j \rangle$, sin tomar en cuenta el vector $\boldsymbol{\mu}$, al despreciar las interacciones spin-spin. En resumen, el resultado se muestra en la tabla 1.2

	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7	C_8
C_1	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_-$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_-$
C_2	0	$-E_g$	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_-$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_-$	$\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$
C_3	$-\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_-$	0	$-E_g$	0	0	0	0	0
C_4	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_-$	0	$-E_g - \Delta$	0	0	0	0
C_5	$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	0	0	0	0	0	0
C_6	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	0	0	0	$-E_g$	0	0
C_7	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_-$	0	0	0	0	$-E_g$	0
C_8	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	0	0	0	0	0	$-E_g - \Delta$

Tabla 1.2 Representación de los elementos matriciales W_{ij}

$$\text{Donde } k_{\pm} = (k_x \pm ik_y) \text{ y } P = -\frac{i\hbar}{m_0} \langle S | \rho_x | X \rangle = -\frac{i\hbar}{m_0} \langle S | \rho_y | Y \rangle = -\frac{i\hbar}{m_0} \langle S | \rho_z | Z \rangle$$

Las energías $E(\mathbf{k})$ son los autovalores de ésta matriz Hermítica 8×8 (Tabla 1.2). Las cuales se obtienen al resolver la ecuación $H_{8 \times 8} C_i = E C_i$

1.3 Fuerza del Oscilador

En nuestro trabajo también nos interesa determinar esta magnitud, teniendo en cuenta que la interacción electrón-fotón, tiene como estrategia calcular la energía absorbida de la onda plana de luz en dos caminos, usando la regla de oro de Fermi y el electromagnetismo clásico.

Las transiciones ópticas se obtienen calculando los elementos matriciales del operador de transición de dipolo eléctrico $\mathbf{P} = -e\mathbf{R}$, usando las funciones propias y las energías correspondientes.

La fuerza de oscilador es una cantidad sin dimensiones que representa la intensidad de una transición de un estado inicial i a un estado final j en relación con la intensidad sumada de todas las transiciones posibles de aquel estado inicial. Por lo que es relacionado con la probabilidad de transición cuántica mecánica (para una transición)^[16]. La fuerza del oscilador se define:

$$f_{ji} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2 \quad (1.13)$$

Donde $\hbar\omega_{ji} = \epsilon_j - \epsilon_i$, que son niveles de energía en $\mathbf{k}=0$ para distintos estados, \mathbf{e} vector en la dirección de la polarización del campo eléctrico que se produce en una transición, \mathbf{p} el operador momento lineal y m_0 la masa del electrón libre.

2. PORTADOR DE CARGA EN UN NANO-HILO CILÍNDRICO

Los sistemas que se analizan en este trabajo son nano-hilos de radio R, longitud

infinita con un potencial de confinamiento $v = \begin{cases} 0 & \rho < R \\ \infty & \rho \geq R \end{cases}$.

Para lo cual usamos el modelo de Kane y las ecuaciones extraídas del Hamiltoniano de Kane que vimos anteriormente, lo que nos permite escribir que

$H_{8 \times 8} C_i = E C_i$ queda de la forma:

$$-E C_1 - \frac{P k_-}{\sqrt{2}} C_3 + \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z C_4 + \frac{P k_+}{\sqrt{6}} C_5 + \frac{P k_z}{\sqrt{3}} C_7 + \frac{P k_+}{\sqrt{3}} C_8 = 0 \quad (2.1)$$

$$-E C_2 - \frac{P k_-}{\sqrt{6}} C_4 + \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z C_5 + \frac{P k_+}{\sqrt{2}} C_6 + \frac{P k_-}{\sqrt{3}} C_7 - \frac{P k_z}{\sqrt{3}} C_8 = 0 \quad (2.2)$$

$$-\frac{P k_+}{\sqrt{2}} C_1 - (E + E_g) C_3 = 0 \quad (2.3)$$

$$\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z C_1 - \frac{P k_+}{\sqrt{6}} C_2 - (E + E_g) C_4 = 0 \quad (2.4)$$

$$\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z C_2 + \frac{P k_-}{\sqrt{6}} C_1 - (E + E_g) C_5 = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{P k_-}{\sqrt{2}} C_2 - (E + E_g) C_6 = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{P k_z}{\sqrt{3}} C_1 + \frac{P k_+}{\sqrt{3}} C_2 - (E + E_g + \Delta) C_7 = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{P k_-}{\sqrt{3}} C_1 - \frac{P k_z}{\sqrt{3}} C_2 - (E + E_g + \Delta) C_8 = 0 \quad (2.8)$$

Donde $C_{1,\dots,8}$ son funciones de onda según las bandas de la Fig. 1.2, así:

$C_{1,2}$ son las funciones de la banda de conducción Γ_6 , $C_{3,6}$ (huecos pesados) y $C_{4,5}$ (huecos ligeros) son las funciones de la banda de Valencia Γ_8 , $C_{7,8}$ las funciones de la banda de Interacción spin-orbita Γ_7 . P es un factor del hamiltoniano, el cual es igual a:

$$P = -\frac{i\hbar}{m} \langle S | p_x | X \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \langle S | p_y | Y \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \langle S | p_z | Z \rangle$$

Donde, $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ son funciones de Bloch de los extremos de las Bandas, E_g la energía de separación de las bandas de conducción y la de valencia, donde hay un cuadruplete (Γ_8) debido a un momento angular total $J=3/2$ y la de spin-orbita con un doblete (Γ_7) con $J=1/2$. Δ es la energía que hay entre ellas.

De las ecuaciones (2.3) a (2.8) Podemos despejar $C_{3,4,\dots,8}$ en términos de $C_{1,2}$ y reemplazando en (2.1) y (2.2) separando los términos con C_1 y C_2 , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} JC_1 + IC_2 &= 0 \\ LC_1 + MC_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

Siendo

$$J = -E + P^2 \left[\frac{k_z^2}{3} \left(\frac{2}{E_1} + \frac{1}{E_2} \right) + \frac{k_+ k_-}{3} \left(\frac{1}{2E_1} + \frac{1}{E_2} \right) + \frac{k_- k_+}{2E_1} \right] \quad (2.10)$$

$$I = \frac{P^2}{3} \left(\frac{1}{E_2} - \frac{1}{E_1} \right) [k_+, k_z] \quad (2.11)$$

$$L = \frac{P^2}{3} \left(\frac{1}{E_1} - \frac{1}{E_2} \right) [k_z, k_-] \quad (2.12)$$

$$M = -E + P^2 \left[\frac{k_z^2}{3} \left(\frac{2}{E_1} + \frac{1}{E_2} \right) + \frac{k_- k_+}{3} \left(\frac{1}{E_2} + \frac{1}{2E_1} \right) + \frac{k_+ k_-}{2E_1} \right] \quad (2.13)$$

Donde:

$$E_1 = E + E_g$$

$$E_2 = E_1 + \Delta$$

El sistema de ecuaciones (2.9) se resuelve para un portador en hilo cuántico. Analizando las ecuaciones (2.10) a (2.13), y teniendo en cuenta la relación $\rho = \hbar k$ y $[p_i, p_j] = 0$ $[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ $[k_+, k_-] = 0$ $[k_z, k_{\pm}] = 0$ $[x, k_{\pm}] = i$

Nos reduce:

$$J = M = -E - P^2 \left[\frac{\nabla^2}{3} \left(\frac{2}{E_1} + \frac{1}{E_2} \right) \right] \quad (2.14)$$

$$I = L = 0 \quad (2.15)$$

$$\text{Donde } \nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

Lo cual al reemplazar en (2.9) se obtiene:

$$\nabla^2 C_{1,2} + g(E) C_{1,2} = 0 \quad (2.16)$$

Con

$$g(E) = \frac{3E(E + E_g)(E + E_g + \Delta)}{P^2(3(E + E_g) + \Delta)} \quad (2.17)$$

Si consideramos ahora un portado bajo la acción de un campo magnético aplicado en la dirección axial del hilo ($\mathbf{H} = H \hat{\mathbf{k}}$) y con vector potencial magnético

$\mathbf{A} = \left(-\frac{Hy}{2}, \frac{Hx}{2}, 0 \right)$ definiendo en este caso $k_{\pm} \rightarrow k_{\pm} \pm i\lambda r_{\pm}$, $r_{\pm} = x \pm iy$, y llamando:

$$\lambda = \frac{eH}{2\hbar} \quad (2.18)$$

Encontramos ahora que:

$$[k_+, k_-] = 0 \quad [k_z, k_{\pm}] = 0 \quad [r_+, k_{\pm}] = 0 \quad \text{ò} \quad 2i \quad [r_-, k_{\pm}] = 2i \quad \text{ò} \quad 0$$

$$[k_+, k_-] \rightarrow [k_+ + i\lambda r_+, k_- - i\lambda r_-] = -4\lambda$$

$$[k_z, k_{\pm}] \rightarrow [k_z, k_{\pm}] \pm i\lambda [k_z, r_{\pm}] = 0$$

Podemos reducir J, L, I, M de las ecuaciones de 2.10 a 2.13 en:

$$J = -E + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E_1} + \frac{1}{E_2} \right) \left(-\nabla^2 + \frac{2\lambda L_z}{\hbar} + \lambda^2 \rho^2 \right) + \frac{2P^2 \lambda}{3} \left(\frac{1}{E_1} - \frac{1}{E_2} \right) \quad (2.19)$$

$$I = L = 0. \quad (2.20)$$

$$M = -E + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E_1} + \frac{1}{E_2} \right) \left(-\nabla^2 + \frac{2\lambda L_z}{\hbar} + \lambda^2 \rho^2 \right) - \frac{2P^2 \lambda}{3} \left(\frac{1}{E_1} - \frac{1}{E_2} \right) \quad (2.21)$$

Donde la ecuación que debe resolverse cuando se aplica el campo es:

$$\left\{ \begin{array}{l} -E + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right) \left(-\nabla^2 + \frac{2\lambda L_z}{\hbar} + \lambda^2 \rho^2 \right) \pm \\ \frac{2P^2 \lambda}{3} \left(\frac{1}{E+E_g} - \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right) \end{array} \right\} c_{1,2} = 0 \quad (2.22)$$

Donde el signo positivo es para C_1 y el signo negativo para C_2

En nuestro trabajo la ecuaciones a resolver son (2.17) para el caso 1 (sin campo magnético aplicado al nano-hilo) y 2.22 para el caso 2 (con campo magnético aplicado al nano-hilo), donde se observa que el efecto del campo magnético es el desdoblamiento de la las funciones C_1 y C_2 .

Otra variable importante que se analizó fue la fuerza del oscilador (1.14) que es una cantidad sin dimensiones para expresar la intensidad de una transición de un estado j (final) a uno i (inicial).

$$f_{ji} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2$$

Las transiciones ocurren cuando el campo eléctrico esta polarizado en ρ , para las otras direcciones no se producen transiciones bajo nuestros parámetros, debido a

que el factor $|\langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2$ para las direcciones ϕ y z es cero, con esto tenemos que

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho}$$

2.1 SOLUCIÓN PARA UN PORTADOR EN HILO CUÁNTICO INFINITO CON POTENCIAL DE CONFINAMIENTO INFINITO SIN CAMPO

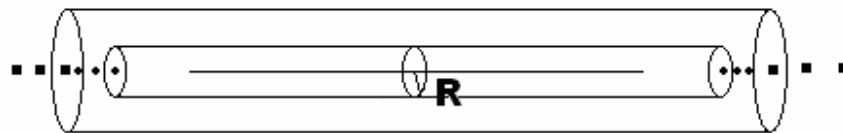


Fig. 2.1 Nano-hilo Cilíndrico de radio R

En este caso tenemos un nano-hilo de longitud infinita de Si rodeado de una capa de aire, analizando la ecuación (2.16) bajo el potencial de confinamiento

$$V = \begin{cases} 0 & \rho < R \\ \infty & \rho \geq R \end{cases}, \text{ la solución tiene la forma}$$

$$C_{1,2} = Ae^{i(m\phi + k_z z)} R(\rho) \quad (2.23)$$

Donde nos concentraremos en encontrar una solución para $R(\rho)$:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) + \left(g(E) - \frac{m^2}{\rho^2} - k_z^2 \right) R(\rho) = 0$$

Esto es la forma de la Ecuación diferencial de Bessel en coordenadas cilíndricas. Reescribiendo y resolviendo

$$R_{1,2}(\rho) = J_m(\xi(E)\rho) \quad (2.24)$$

$$\xi^2(E) = g(E) - k_z^2 \quad (2.25)$$

En este caso las condiciones de frontera determinan que $R(\rho)$ debe ser 0 en $\rho=R$, es decir que

$J_m(\xi(E)R) = 0$ por lo cual $Z_{ml} = \xi(E)R$ es el l -ésimo cero de la m -ésima función de Bessel, así:

$$\sqrt{g(E_{ml}) - k_z^2} = \frac{Z_{ml}}{R} \quad (2.26)$$

La ecuación (2.26) constituye la ecuación trascendental a partir de la cual hallamos los valores de energía.

La función de onda normalizada para este caso es:

$$C_{1,2}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{\pi R} J_{m+1}(Z_{ml})} e^{i(m\varphi + k_z z)} J_m\left(\frac{Z_{ml}}{R} \rho\right) \quad (2.27)$$

2.1.1 Fuerza del Oscilador

Con la ecuación (2.27) y la energías E_{ml} podemos hallar la fuerza del oscilador, las transiciones, ocurren en la dirección ρ , con esto tenemos que $\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho}$

$$f_{ji} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle k_z m_l | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | k_z' m_l' \rangle \right|^2$$

$$\text{con } \langle k_z m_l | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | k_z m_l' \rangle = -i\hbar \frac{2}{R^2 J_{m+1}(z_{ml}) J_{m+1}(z_{ml'})} \int J_m\left(\frac{z_{ml}}{R} \rho\right) \frac{\partial}{\partial \rho} J_m\left(\frac{z_{ml'}}{R} \rho\right) \rho d\rho$$

$$\text{asi } f_{m_l m_l'} = \frac{8}{m\hbar\omega_{ji} R^4 |J_{m+1}(z_{ml})|^2 |J_{m+1}(z_{ml'})|^2} M_{m_l m_l'}^2 \quad (2.28)$$

$$\text{y } M_{m_l m_l'} = -i\hbar \int_0^R J_m\left(\frac{z_{ml}}{R} \rho\right) \frac{\partial}{\partial \rho} J_m\left(\frac{z_{ml'}}{R} \rho\right) \rho d\rho \quad (2.28.1)$$

2.1.2 Parámetros del Sistema

Para nuestro sistema tomamos un $k_z^2 = 0$, un valor del radio del hilo entre 7 y 20

[Å]; $E_g = 1,77$ [eV] $\Delta = 0,044$ [eV], $E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} P^2 = \frac{2}{m} P_0^2 = 20$ [eV] , donde

$iP_0 = \langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle$; para P en [eV*Å] entonces $P^2 = 3.81 * E_p$ según las referencias [1], [2], [8], [14]

Los valores (niveles) de energía se encuentran hallando las raíces de la función

$$\sqrt{\frac{3E_{ml}(E_{ml} + 1,77)(E_{ml} + 1,814)}{76.2(3(E_{ml} + 1,77) + 0,044)}} - \frac{z_{ml}}{R} = 0$$

2.2 SOLUCIÓN PARA UN PORTADOR EN UN HILO CUÁNTICO INFINITO CON POTENCIAL DE CONFINAMIENTO INFINITO CON CAMPO APLICADO

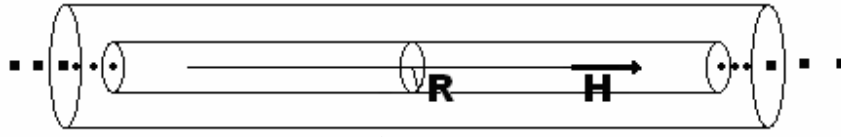


Fig. 2.2 Nano-hilo Cilíndrico de radio R bajo acción de un campo magnético aplicado

En este caso tenemos un nano-hilo de longitud infinita de Si rodeado de una capa de aire, al cual se le aplica un campo magnético axial ver figura 1.3, haciendo uso la ecuación (2.22)

$$\left\{ -Ec_{1,2} + G(E) \left(-\nabla^2 + \frac{2\lambda L_z}{\hbar} + \lambda^2 \rho^2 \right) \pm M(E) \right\} c_{1,2} = 0 \quad (2.29)$$

Con

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}; \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\text{Donde } G(E) = \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right) = \frac{P^2}{3} \frac{3E + 3E_g + 2\Delta}{(E + E_g)(E + E_g + \Delta)} \quad (2.29.1)$$

$$M(E) = \frac{2P^2\lambda}{3} \left(\frac{1}{E + E_g} - \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right) = \frac{2P^2\lambda}{3} \frac{\Delta}{(E + E_g)(E + E_g + \Delta)} \quad (2.29.2)$$

La solución de la ecuación (2.29) es de la forma:

$$C_1(\rho, \varphi, z) = Ae^{i(m\varphi + k_z z)} R_1(\rho) \quad (2.30)$$

$$C_2(\rho, \varphi, z) = Ae^{i(m\varphi + k_z z)} R_2(\rho) \quad (2.31)$$

Por lo cual la ecuación para la parte radial es:

$$\left(\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R - \rho^2 \lambda^2 R - \left(2\lambda m + k_z^2 - \frac{E}{G(E)} \pm F(E) \right) R = 0 \quad (2.32)$$

$$\text{Donde } F(E) = \frac{M(E)}{G(E)} = \frac{\frac{2P^2\lambda}{3} \left(\frac{1}{E+E_g} - \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right)}{\frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right)} = \frac{2\lambda\Delta}{(3E+3E_g+2\Delta)}$$

A esta forma de ecuación diferencial, se le puede hallar una solución por funciones Hipergeometricas, tratando de llegar a la forma confluyente $xy''+(\alpha-x)y'-\beta y=0$

Si redefinimos $R(\rho)$ de la forma

$$R_{1,2}(\gamma) = \gamma^{|m|/2} e^{-\gamma/2} \chi_{1,2}(\gamma) \quad (2.33)$$

Siendo $\gamma = \lambda\rho^2$, obtenemos:

$$\gamma \frac{\partial^2 \chi_{1,2}}{\partial \gamma^2} + (1+|m|-\gamma) \frac{\partial \chi_{1,2}}{\partial \gamma} - \left(\frac{m}{2} + \frac{k_z^2}{4\lambda} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} - \frac{E}{4\lambda G(E)} \pm \frac{F(E)}{4\lambda} \right) \chi_{1,2} = 0 \quad (2.34)$$

Esta es la ecuación diferencial hipergeometrica confluyente (Ecuación de Kummer) cuya solución es la ecuación hipergeometrica confluyente $M_{1,2}(\beta_{1,2}, \alpha, \gamma)$ donde

$$\beta_{1,2} = \frac{m}{2} + \frac{k_z^2}{4\lambda} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} - \frac{3E(E+E_g)(E+E_g+\Delta)}{4(3E+3E_g+2\Delta)\lambda P^2} \pm \frac{\Delta}{2(3E+3E_g+2\Delta)} \quad (2.34.1)$$

$$\alpha = 1+|m| \quad (2.34.2)$$

$$\gamma = \lambda\rho^2 \quad (2.34.3)$$

Por condiciones de frontera tenemos que la función se anula, en $\rho=R$

$$R(R) = \left(\lambda^{1/2} R \right)^{|m|} e^{-\lambda R^2/2} M(\beta, \alpha, \lambda R^2) = 0, \text{ es decir}$$

$$M(\beta, \alpha, \lambda R^2) = 0 \quad (2.3.35)$$

Con esto podemos hallar los valores (niveles) de la Energía. La solución final o ecuación de estado seria:

$$C_1(\rho, \varphi, z) = A_1 e^{i(m\varphi + k_z z)} (\lambda \rho^2)^{|m|/2} e^{-\lambda \rho^2/2} M(\beta_1, \alpha, \lambda \rho^2) \quad (2.36)$$

$$C_2(\rho, \varphi, z) = A_2 e^{i(m\varphi + k_z z)} (\lambda \rho^2)^{|m|/2} e^{-\lambda \rho^2/2} M(\beta_2, \alpha, \lambda \rho^2) \quad (2.37)$$

Siendo

$$A_{1,2} = \left(\int_0^R (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-\lambda \rho^2} [M(\beta_{1,2}, \alpha, \lambda \rho^2)]^2 \rho d\rho \right)^{-1/2}$$

2.2.1 Fuerza del Oscilador

Las transiciones en este caso también ocurren cuando el campo eléctrico esta polarizado en ρ , con esto tenemos que $\mathbf{e} \cdot \mathbf{p} = -i \frac{\partial}{\partial \rho}$ y la fuerza de oscilador será

$$f_{ji} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle mk | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | m' \rho \rangle \right|^2$$

$$\text{con } \langle mk | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | mp \rangle = -i\hbar A^2 \int (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-\lambda \rho^2} M(\beta_{1k}, \alpha, \lambda \rho^2) * C \rho d\rho$$

$$\text{y } C(\rho) = [m\lambda M(\beta_{1\rho}, \alpha, \lambda \rho^2) - \lambda \rho M(\beta_{1\rho}, \alpha, \lambda \rho^2) + M'(\beta_{1\rho}, \alpha, \lambda \rho^2)]$$

$$\text{donde } A = \left(\int_0^R (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-\lambda \rho^2} [M(\beta_1, \alpha, \lambda \rho^2)]^2 \rho d\rho \right)^{-1/2}$$

$$\text{obteniendo } f_{mm'} = \frac{2(A_k A_\rho)^2}{m\hbar\omega_{ji}} F_{mm'}^2 \quad (2.38)$$

$$\text{con } F_{mm'} = -i\hbar \int_0^R (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-m\lambda \rho^2} M(\beta_1, \alpha, \lambda \rho^2) * C(\rho) \rho d\rho \quad (2.38.1)$$

Con C_2 se realizan los mismos pasos y el resultado es:

$$f_{ji} = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle j | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 = \frac{2}{m\hbar\omega_{ji}} \left| \langle k_z m l | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | k_z' m' l' \rangle \right|^2$$

$$\langle k_z m l | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \rho} | k_z m l' \rangle = -i\hbar 2\pi A_l A_{l'} \int (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-\lambda \rho^2} M(\beta_{2l}, \alpha, \lambda \rho^2) * C(\rho) \rho \partial \rho$$

$$C = \left[\frac{m}{\rho} M(\beta_{2l'}, \alpha, \lambda \rho^2) - \lambda \rho M(\beta_{2l'}, \alpha, \lambda \rho^2) + \frac{\partial}{\partial \rho} M(\beta_{2l'}, \alpha, \lambda \rho^2) \right]$$

$$A_l = \left(2\pi \int_0^R (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-\lambda \rho^2} [M(\beta_{2l}, \alpha, \lambda \rho^2)]^2 \rho \partial \rho \right)^{-1/2}$$

$$f_{mm'} = \frac{2(A_l A_{l'})^2}{m\hbar\omega_{ji}} F_{mm'}^2 \quad (2.39)$$

$$F_{mm'} = -i\hbar \int_0^R (\lambda \rho^2)^{|m|} e^{-m\lambda \rho^2} M(\beta_2, \alpha, \lambda \rho^2) * C(\rho) \rho \partial \rho \quad (2.39.1)$$

2.2.2 Parámetros del Sistema

Para nuestro sistema tomamos un $k_z^2 = 0$, tomando la ecuación como independiente de z , un valor de R entre 7 y 20 [Å]; $E_g = 1,77$ [eV] $\Delta = 0,044$ [eV], $E_p = 20$ [eV] donde; para P en [eV*Å] entonces $P^2 = 3.81 * E_p$ $H = 2 T$ $4\lambda P^2 = \hbar \omega_0 E_p$, ω_0 es la frecuencia de ciclotrón del electrón libre, según las referencias [1], [8], [2], [14], [20]

Los valores de energía se encuentran hallando las Raíces de la función:

$$M \left(m + 0.5 - \frac{3E_{ml}(E_{ml} + 1.77)(E_{ml} + 1.77 + 0.044)}{(3(E_{ml} + 1.77) + 2 * 0.044)4,642 * 10^{-3}} \pm \frac{0.044}{2(3(E_{ml} + 1.77) + 2 * 0.044)}, 1 + |m|, 1.523 * 10^{-7} R^2 \right) = 0$$

3. RESULTADOS Y DISCUSIONES

Caso 1. Portadora en un Nano-hilo Niveles de Energía vs. Radio

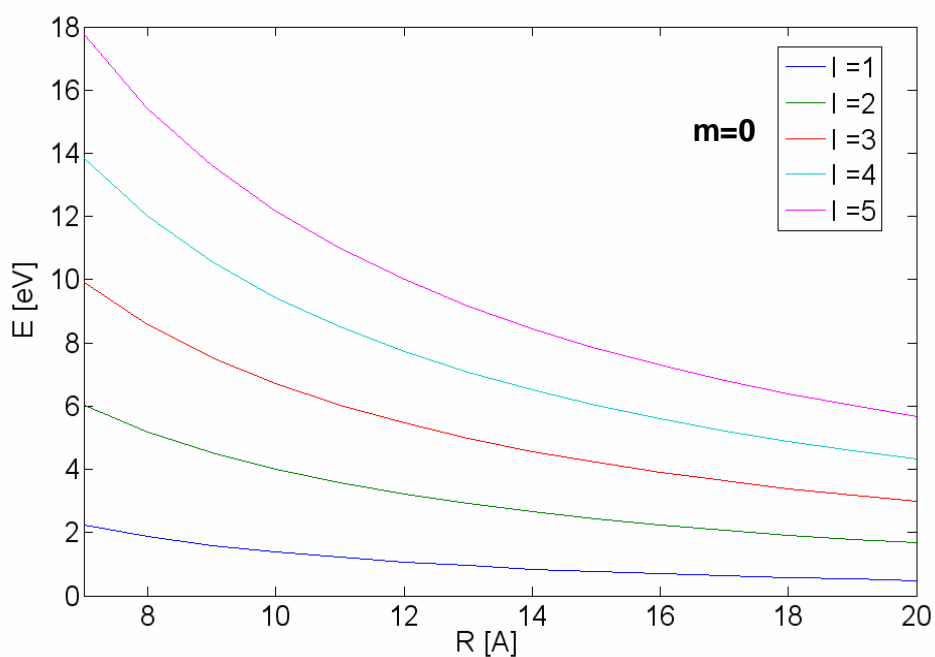


Fig. 3.1 Niveles de energía E_{0l} vs. R

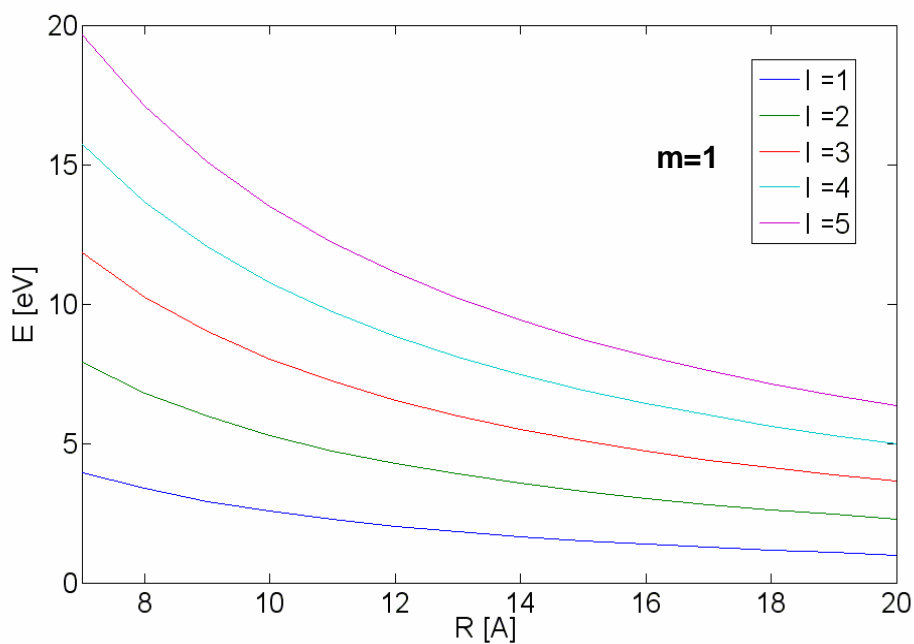


Fig. 3.2 Niveles de energía E_{1l} vs. R

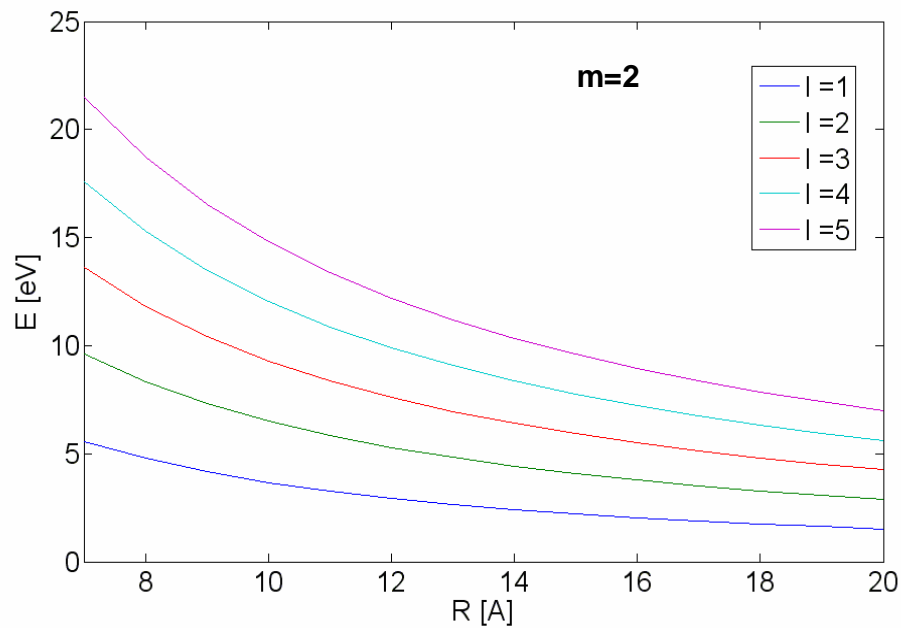


Fig. 3.3 Niveles de energía E_{2k} vs. R

Para el cálculo de los niveles de Energía de un portador en un nano-hilo de Silicio en función del radio se usó la ecuación (2.26), determinando 5 valores de energía, para valores de m de 0, 1, 2. En la Fig. 3.1 podemos ver que al aumentar el radio la energía disminuye, comportamiento que se extiende sobre todas las l -ésimas raíces calculadas, haciendo que los estados estén más cerca en cuanto mayor es el radio, las Fig. 3.2 y 3.3 siguen este mismo comportamiento. El comportamiento de la energía es semejante al reportado para una superred de nano-hilos de InAs/GaAs y en un nano-hilo de InSb ^[8,17]

En la gráfica 3.4 se muestra la Fuerza del Oscilador vs. Radio para $m=0$, desde $l=1$ hasta $l=2$.

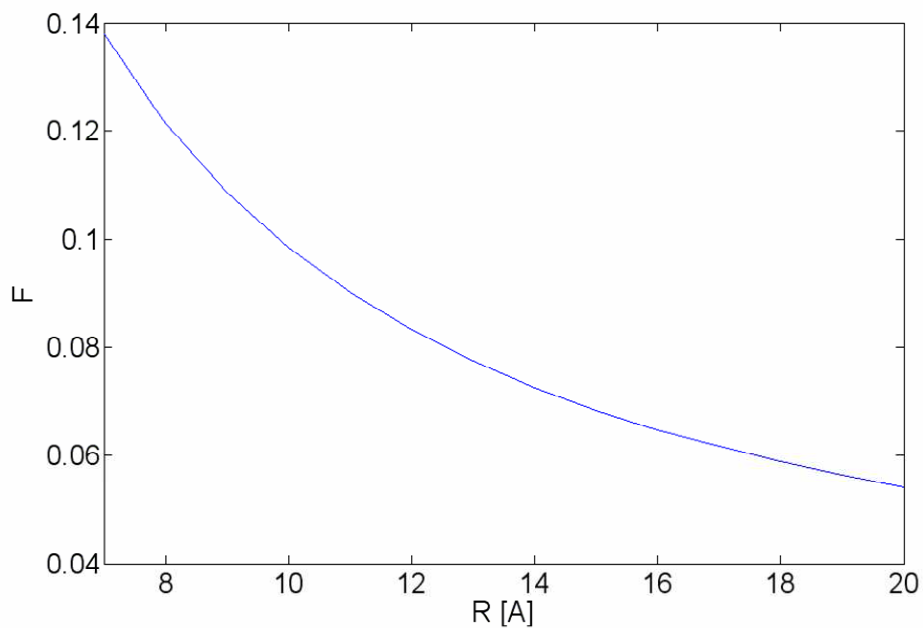


Fig. 3.4 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. R

Para el cálculo de la Fuerza del oscilador de un portador en un nano-hilo de Silicio, se usaron valores de $m = 0$, para la transición del estado $m=0$ $l=1$ al $m=0$ $l=2$. En la graficas 3.4 podemos ver que al aumentar el radio la Fuerza del oscilador disminuye, comportamiento que se esperaba debido a que a mayor radio los niveles de energía se encuentran más cerca unos de otros. El comportamiento de la Fuerza del oscilador es semejante al reportado para una superred de nano-hilos de InAs/GaAs y en un punto cuántico de (In, Ga)As/GaAs^[17,19].

Las graficas 3.5, 3.6 y 3.7 nos muestran Niveles de Energía vs. Radio para un portador en un nano-hilo bajo acción de un campo magnético axial $H= 2$ [T] para la función C_1

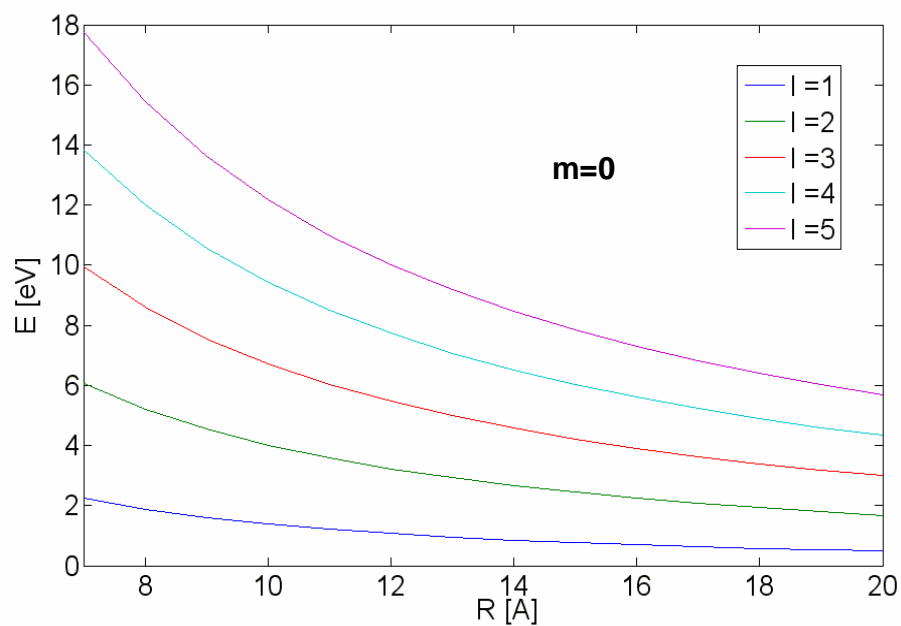


Fig. 3.5 Niveles de energía E_{0l} vs. R de la función de onda C_1 .

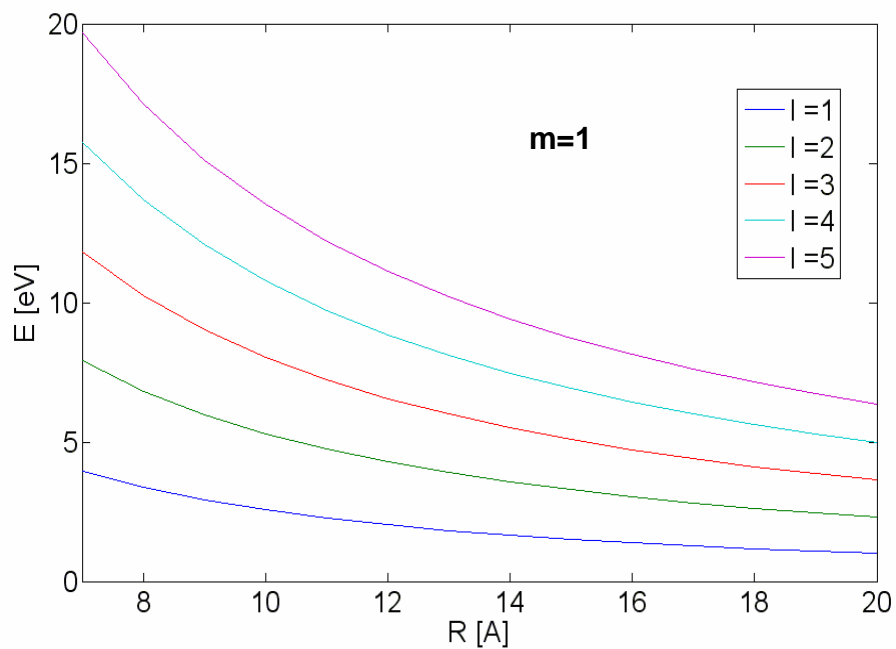


Fig. 3.6 Niveles de energía E_{1l} vs. R de la función de onda C_1 .

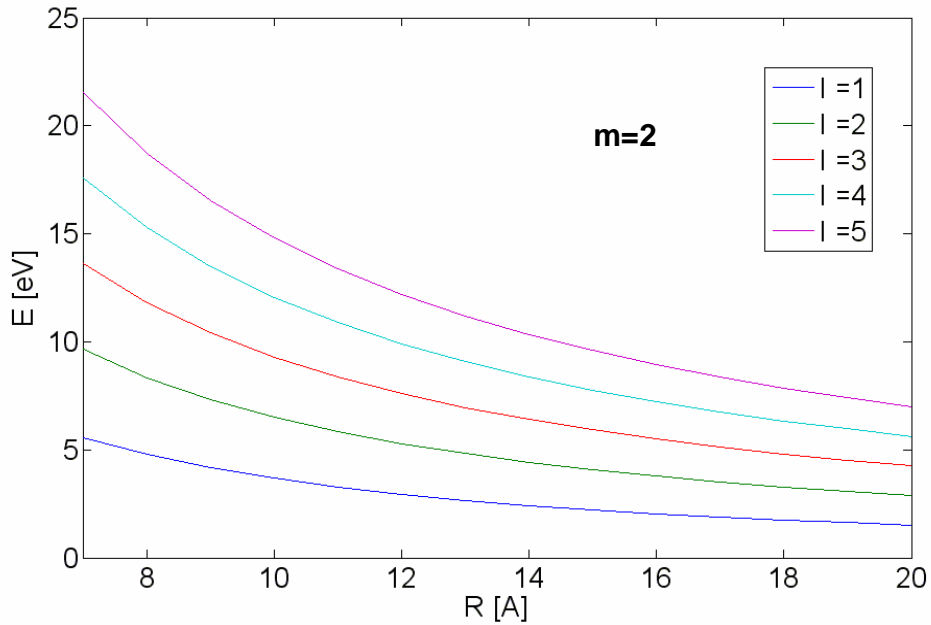


Fig. 3.7 Niveles de energía E_{2l} vs. R de la función de onda C_1 .

Para el cálculo de los niveles de Energía de un portador en un nano-hilo de Silicio al cual se le aplica un campo magnético axial se usó la ecuación (2.33), determinándose 5 valores de energía para valores de m de 0,1,2 para la función C_1 . En la Fig. 3.5 podemos ver que al aumentar el radio la energía disminuye, comportamiento que se extiende sobre todas las l -ésimas raíces calculadas, las Fig. 3.6 y 3.7 siguen este mismo comportamiento, que era de esperarse al tratarse de un pozo.

Las graficas 3.8, 3.9 y 3.10 nos muestran Niveles de Energía vs. Radio para un portador en un Nano-hilo bajo acción de un campo magnético axial $H= 2[T]$ para la función C_2

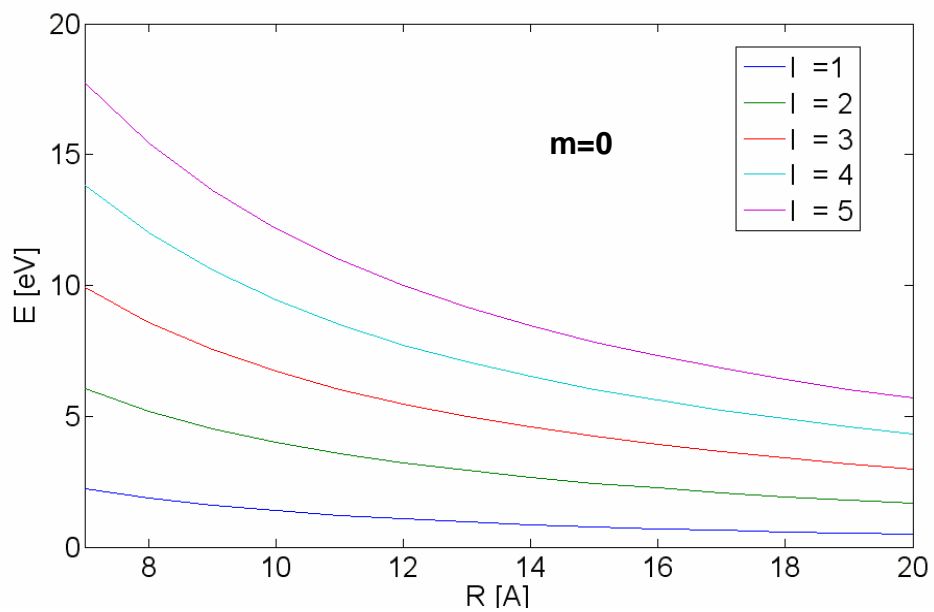


Fig. 3.8 Niveles de energía E_{0l} vs. R de la función de onda C_2 .

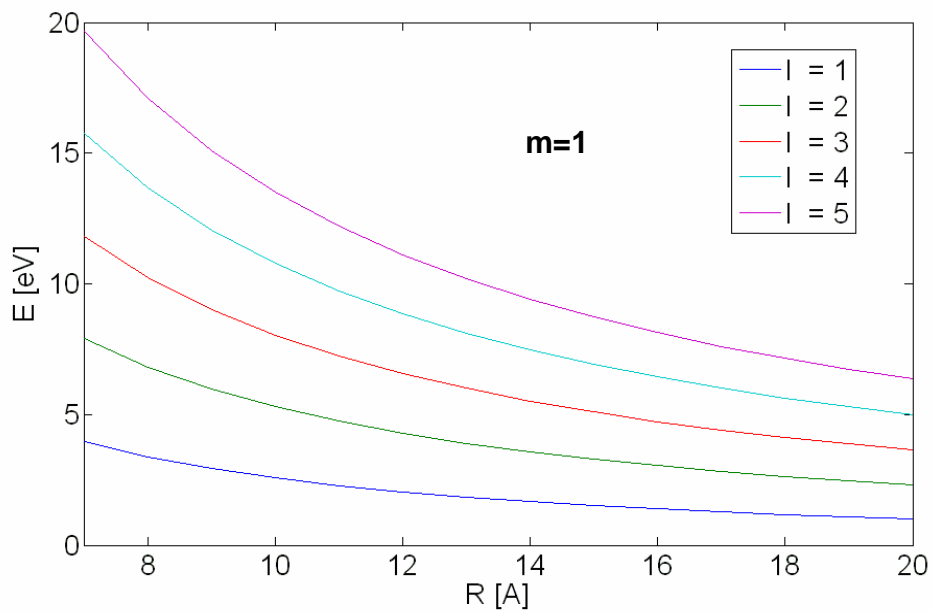


Fig. 3.9 Niveles de energía E_{1k} vs. R de la función de onda C_2 .

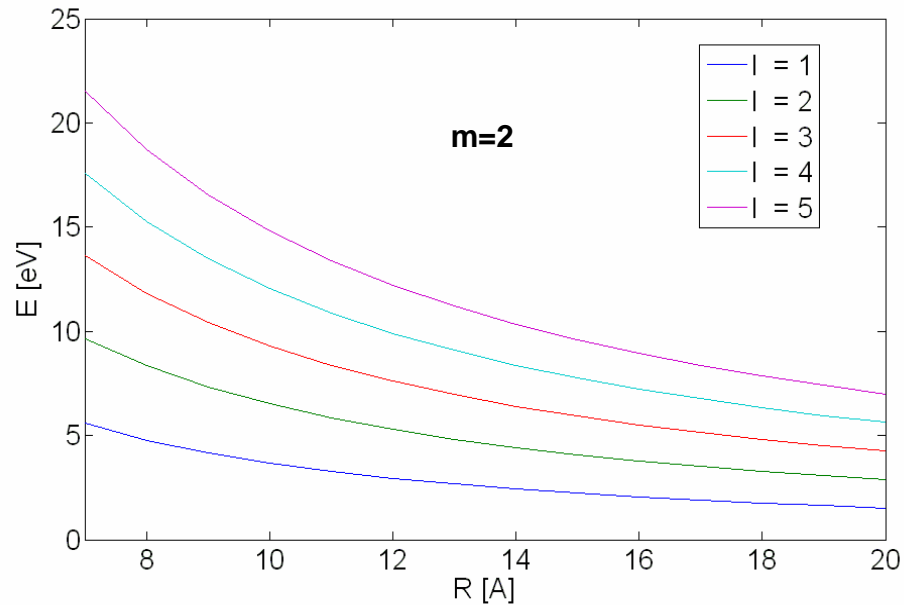


Fig. 3.10 Niveles de energía E_{2k} vs. R de la función de onda C_2 .

Para el cálculo de los niveles de Energía de un portador en un nano-hilo de Silicio al cual se le aplica un campo magnético axial se usó la ecuación (2.33), determinándose 5 valores de energía para valores de m de 0,1,2 pero esta vez para la función C_2 . En la Fig. 3.8 podemos ver que al aumentar el radio la energía disminuye, comportamiento que se extiende sobre todas las l -ésimas raíces calculadas, las Fig. 3.9 y 3.10 siguen este mismo comportamiento, que era de esperarse al tratarse de un pozo. Comparando los valores hallados para C_1 y C_2 realizamos las siguientes graficas:

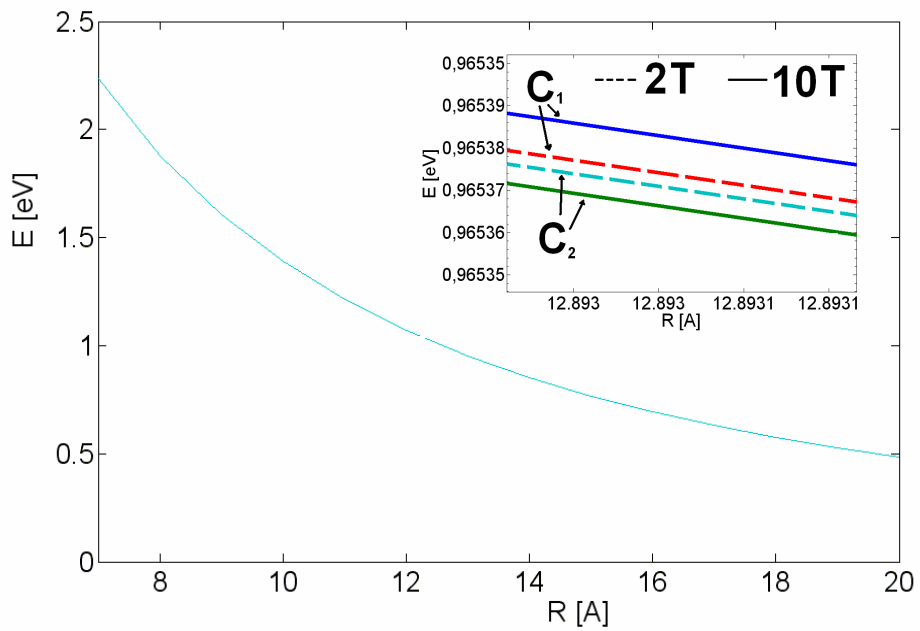


Fig. 3.11 Energía vs. radio para diferentes campos aplicados, para $m=0$ y $l=1$

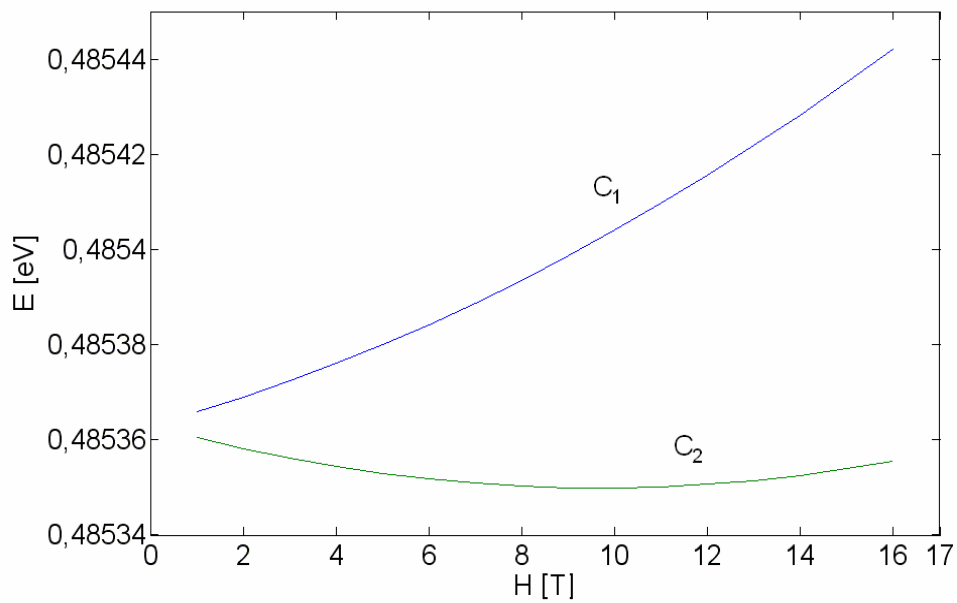


Fig. 3.12 Energía en función del campo para un radio de 20 [A] con $m=0$ para la primera raíz ($l=1$)

En la Fig. 3.11 se observa la dependencia de los niveles de energía en función del radio del nano-hilo, halladas para los estados dados por las funciones $C_{1,2}$ de la banda de conducción, y campos magnéticos aplicados de 2 [T] y 10 [T] vemos la misma dependencia con respecto al radio bajo campo magnético que sin él, es decir entre mas pequeño el radio mayor el nivel de energía, vemos que la energía correspondiente a C_2 se encuentra por debajo de la correspondiente a C_1 para los campos aplicado en ambos casos rompiendo la degenerancia correspondiente al espín. A un mayor valor de campo aplicado las dos las energías se separan mas, notándose que los valores de energía aumentan con el campo. En la Fig. 3.12 vemos la energía en función del campo, con $m=0$ y $l=1$, vemos que la separación se hace evidente en cuanto mayor sea el campo aplicado, cosa que es natural puesto que tiene el mismo valor en $H=0$. Podemos ver que el comportamiento de la energía es semejante al reportado para un nano-hilo de InAs^[8].

En las graficas 3.13, 3.14, 3.15 se muestra la Fuerza del Oscilador vs. Campo para $m=0$, desde $l=1$ hasta $l=2$

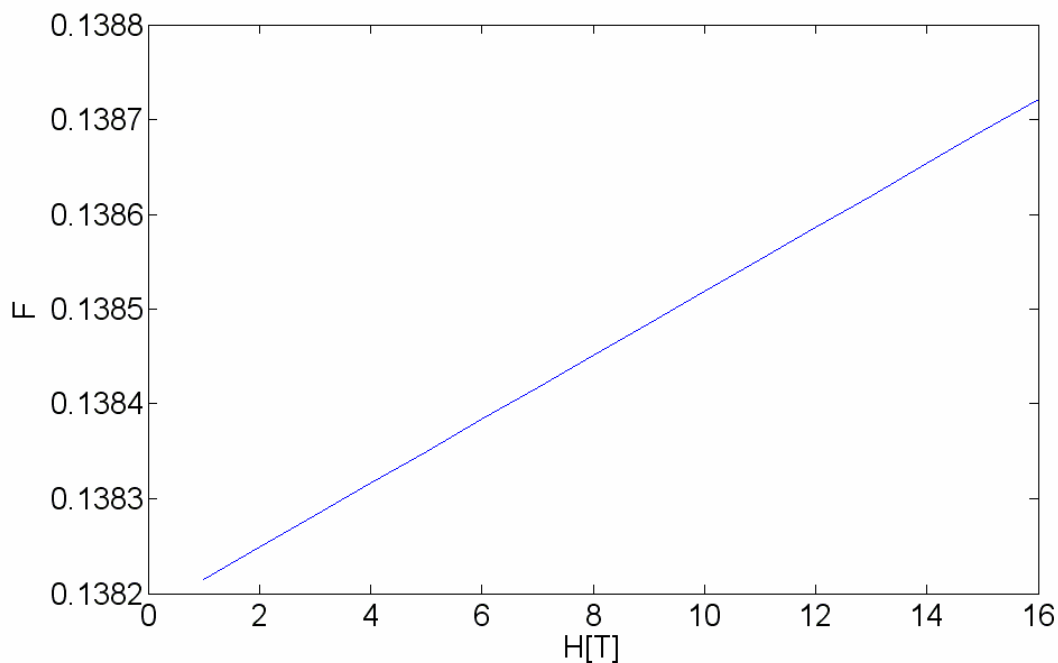


Fig. 3.13 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. H para $R=7$ de la función de onda C_1 .

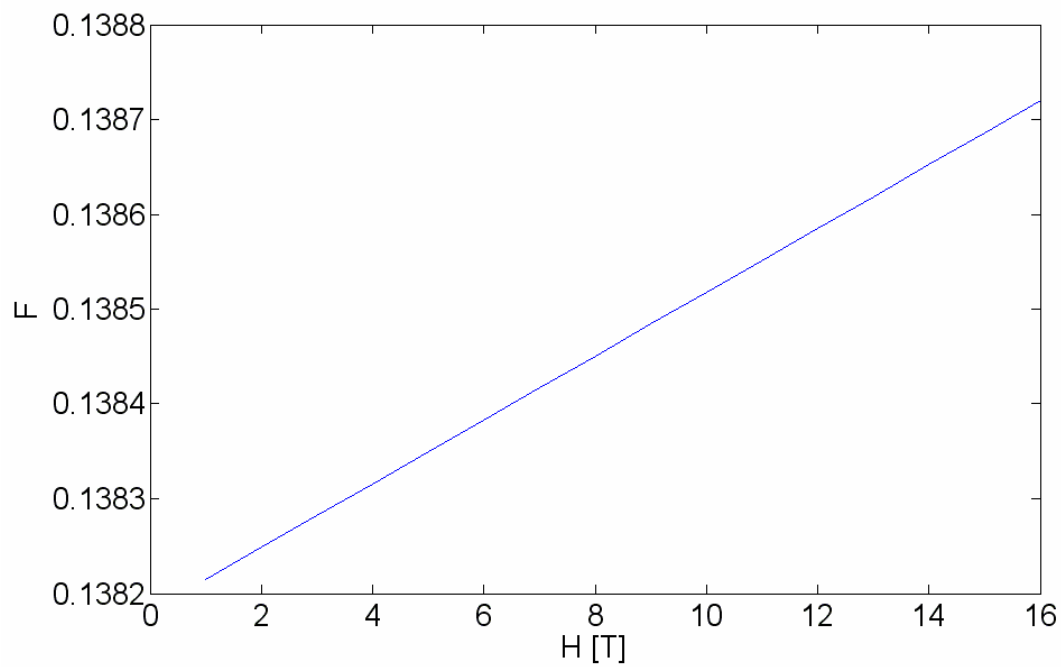


Fig. 3.14 Fuerza del Oscilador F_{012} vs. H para $R=7$ de la función de onda C_2 .

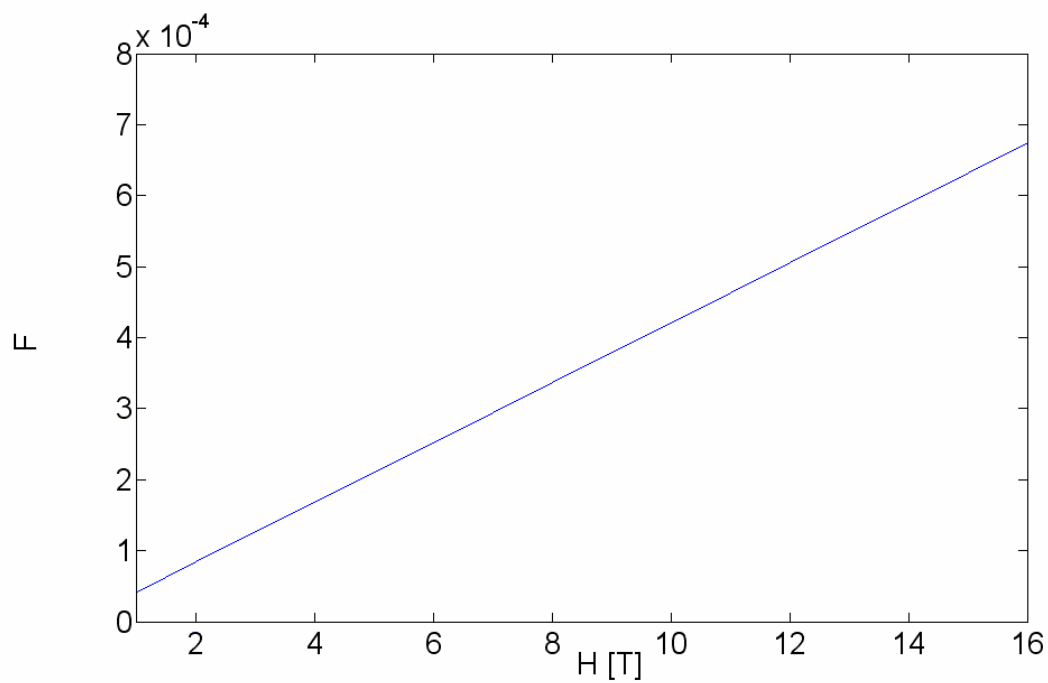


Fig. 3.15 Fuerza del Oscilador F_{011} vs. H para $R=7$ entre de la función de onda C_1 y C_2 .

Para el cálculo de la Fuerza del oscilador de un portador en un nano-hilo de Silicio bajo la acción de un campo magnético axial, se usaron valor de $m = 0$, para la transición del estado $m=0 \ l=1$ al $m=0 \ l=2$ tanto para C_1 como para C_2 .

En las graficas 3.13, 3.14, podemos ver que al aumentar el valor del campo magnético la Fuerza del oscilador aumenta, podemos ver que este comportamiento es semejante al reportado para un Exciton de CdTe y GaAs y para un pozo cuántico de GaALAs/GaAs ^[15,18].

La figura 3.15 representa la fuerza del oscilador en función del campo para una transición de $m=0 \ l=1$ de C_1 hasta $m=0 \ l=1$ de C_2 el presenta el mismo comportamiento, a mayor campo mayor es la fuerza del oscilador, comportamiento que se esperaba debido a que a mayor campo los niveles de energía de las funciones C_1 y C_2 se encuentran más separados.

4. CONCLUSIONES

Podemos concluir que el comportamiento visto en estas graficas obedece a un confinamiento en un pozo cuántico, y que el efecto de la aplicación del campo es el esperado, desdoblar las funciones C_1 y C_2 haciendo visible la diferencia de los dos estados a medida que el campo aumenta. Podemos ver que al comparar con graficas de InAs^[8], las diferencias se hacen presentes debido a los parámetros de cada material pero el comportamiento es similar, es decir a mayor campo magnético mayor separación entre los niveles de energía hallados para las funciones C_1 y C_2 . En conclusión el modelo de Kane, el cual se reserva para elementos de brecha directa, es aplicable para el Silicio aun siendo de brecha indirecta comúnmente, pero que en radios menores de 2 nanómetros se comporta como brecha directa^[1] y permite al modelo sea completamente aplicable.

Con respecto a la Fuerza del oscilador, vemos también que el comportamiento visto en las graficas corresponde a lo esperado, al aumentar los valores de radio en un portador en nano-hilo disminuyen los valores para la fuerza de oscilador, debido a que a mayor radio los niveles de energía están mas cerca y tanto la intensidad de la primera transición y el total de posibles transiciones para el estado base disminuye con respecto al radio. Para los nano-hilos bajo efecto del campo magnético axial, la grafica nos muestra que mayor campo magnético, los valores para la fuerza del oscilador aumentan, esta grafica corresponde al reportado para un Exciton de CdTe y GaAs y para un pozo cuántico de GaALAs/GaAs ^[15,18].

BIBLIOGRAFÍA

[1] D. B. Migas and V. E. Borisenko "Structural, electronic, and optical properties of [001] oriented SiGe nanowires" *Physical Review B* 76, 035440 _2007.

[2] A.M. Babayev "Energy spectrum of carriers in Kane type quantum wells" *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 35, Issue 1, October 2006, Pages 203-206

[3] T. Darnhofer and U. Rössler, "Effects of band structure and spin in quantum dots," *Physical Review B*, vol. 47, no. 23, pp. 16020-16023, 1993.

[4] Keun Hwi Cho, Young Chai Jung, Seung Hun Son, Sung Woo Hwang, Doyeol Ahny, Jonathan P. Bird, "Magneto-Transport in a Silicon-on-Insulator Nanowire Transistor" *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 47, November 2005, pp. S526_S529

[5] K.H. Choa, S.H. Sona, S.H. Honga, B.C. Kima, S.W. Hwanga, D. Ahnb, B.-G. Parkc, B. Naserd, J.-F. Lind, J.P. Birdd, D.K. Ferryd "Single-electron tunneling in silicon-on-insulator nano-wire transistors" *Superlattices and Microstructures* 34 (2003) 245–251

[6] Bozhi Tian, Xiaolin Zheng, Thomas J. Kempa, Ying Fang, Nanfang Yu, Guihua Yu, Jinlin Huang & Charles M. Lieber "Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources" *Vol 449* 18 October 2007

[7] Susan K. Watson, Charles M. Marcus, Charles M. Lieber, Leonid I. Glazman, and David DiVincenzo “Nanotube and Nanowire Based Quantum Computation” *NSF Nanoscale Science and Engineering Grantees Conference, Dec 16-18, 2003 Grant #0210736*

[8] S. Çakmak, A. M. Babayev, E. Artunç, A. Kökçe and S. Çakmaktepe “g-Factor of carriers in Kane-type semiconductor wire” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, Volume 18, Issue 4, June 2003, Pages 365-371*

[9] I. Barke, T.K. Ruğheimer, Fan Zheng, F.J. Himpsel “Atomically precise self-assembly of one-dimensional structures on silicon” *Department of Physics, UW-Madison, 1150 University Avenue, Madison, WI 53706, United States*

[10] X.B. Zenga, X.B. Liaoa, B. Wangb, S.T. Daib, Y.Y. Xua, X.B. Xianga, Z.H. Hua, H.W. Diaoa, G.L. Konga “Optical properties of boron-doped Si nanowires” *Journal of Crystal Growth 265 (2004) 94–98*

[11] Yajie Dong, Guihua Yu, Michael C. McAlpine, Wei Lu, and Charles M. Lieber “Si/a-Si Core/Shell Nanowires as Nonvolatile Crossbar Switches”

[12] Rurali Ricardo “Estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y de transporte de nanohilos con métodos de primeros principios” *RYC-2007-01369*

[13] John H. Davies “The Physics Low-Dimensional Semiconductor an Introduction” *Cambridge University Press, 1998, pag 377*

[14] Springer “Fundamentals of semiconductor Physics and Materials Properties” pag. 66

[15] Neumannand a. Nothe, “Magnetic-Field-Induced Enhancement of Exciton Oscillator Strength in CdTe and GaAs” *Europhysics letters Europhys. Lett., 4 (3), pp. 351-355 (1987)*

[16] Lambert Karel van Vugt "Optical Properties of Semiconducting Nanowires"
Lambert Karel van Vugt *PhD thesis 2007* Utrecht: Universiteit Utrecht, Pag 19-21

[17] Y. M. Niquet Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée, "Electronic and optical properties of InAs/GaAs nanowire superlattices" *Physical review b* 74, 155304 (2006)

[18] P. Vicente, A.V. Kavokin, A. Raymond, S.G. Lyapiv, K. Zekentes, D. Dur And W. Knap "Oscillator strength of the E_1HH_1 excitonic transition as a function of magnetic field in modulation doped GaALAs/GaAs quantum well" *Journal De Physique Iv Colloque C.5, supplement au Journal de Physique* 11, Volume 3, octobre 1993

[19] V. G. Stolerua and E. Toweb "Oscillator strength for intraband transitions in (In, Ga)As/GaAs quantum dots" *Applied Physics Letters* Volume 83, Number 24

[20] Dragica Vasileska, "Computational Electronics Empirical Pseudopotential Method" Associate Professor Arizona State University

[21] Fernando Andres Quinonez Granados; Director Ilia Davidovich Mikhailov Tesis de grado para optar por el titulo de Físico "Efecto del campo magnético sobre el espectro de un electrón en puntos cuánticos auto-ensamblados". Universidad Industrial de Santander

[22] William Amado Angulo; Directores Carlos Leonardo Beltran Rios, Harold Paredes Gutierrez Tesis de grado para optar por el titulo de Físico "Efectos de campos eléctricos medianos sobre el nivel mas bajo de una D^0 en dos pozos Cuánticos acoplados". Universidad Industrial de Santander

ANEXOS

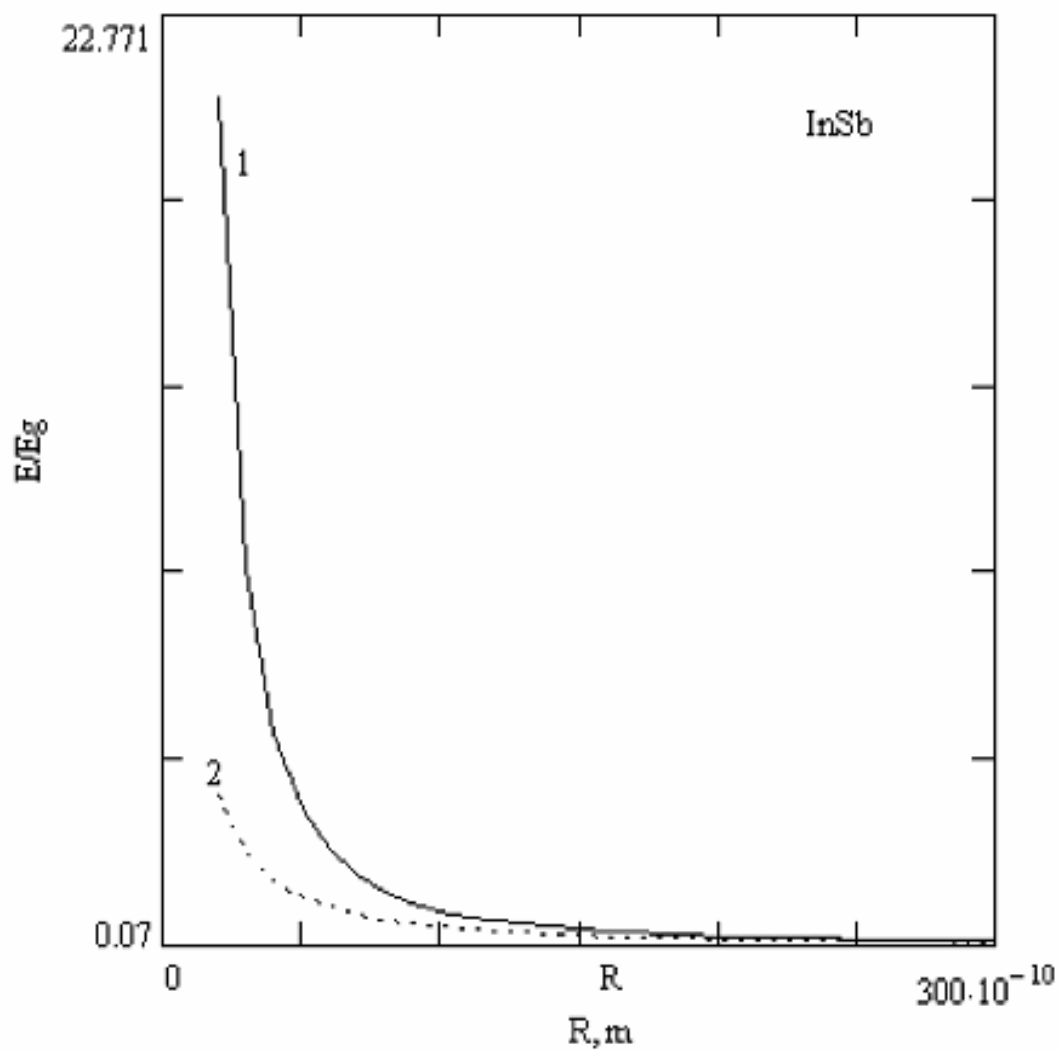


Fig. 1 Niveles de Energía calculado en función del radio de un portador en un nano-hilo de geometría cilíndrica de InSb $E_g=0.2368$ [eV] ref. [8]

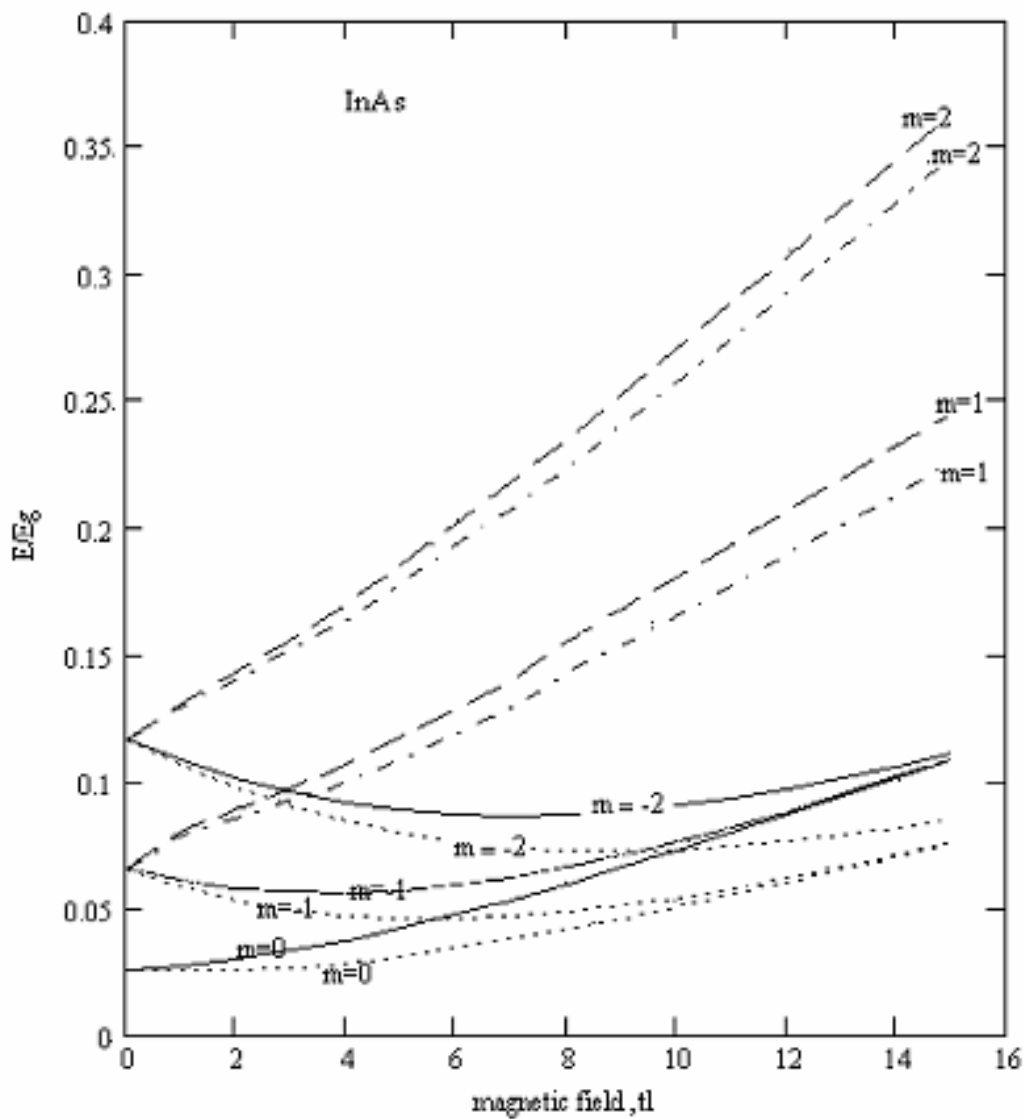


Fig. 2 Comportamiento de la energía de un portador en un nano-hilo de InAs con un campo magnético aplicado en forma axial para las funciones C_1 y C_2 , niveles $m=-2,-1, 0, 1, 2$, $E_g=0.2368$ ref. [8]

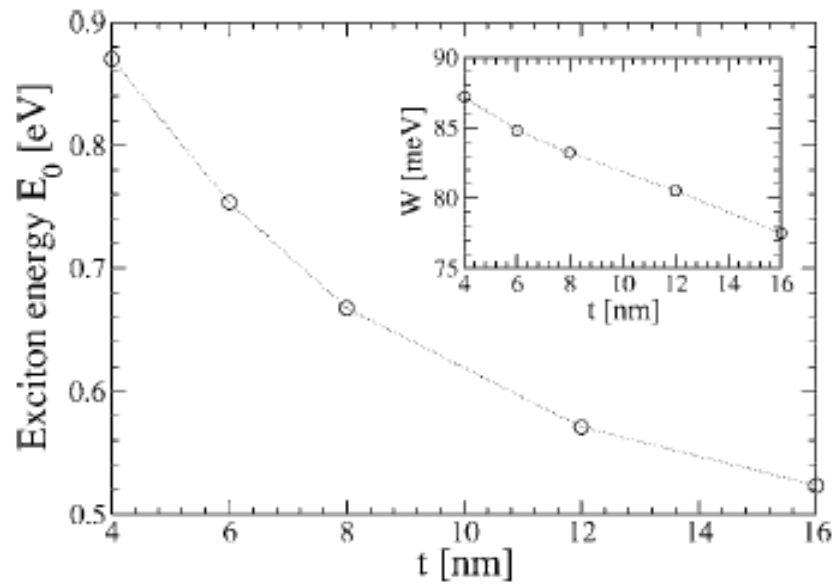


Fig. 3 La energía del Exciton E_0 y la energía de interacción de Columbio W como una función del grosor t de un nano-hilo de InAs ref. [17]

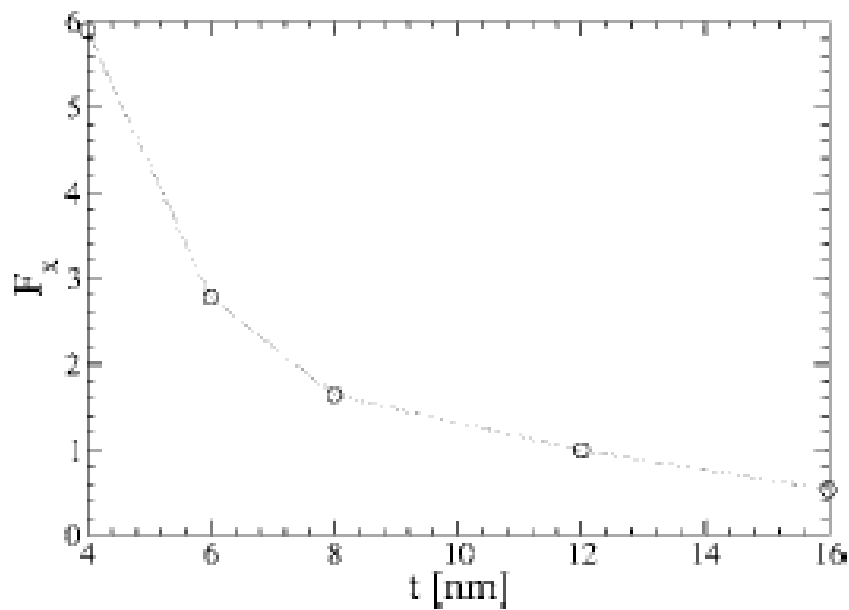


Fig. 4 La fuerza de oscilador F_x como una función del grosor t de un nano-hilo de InAs ref. [17]

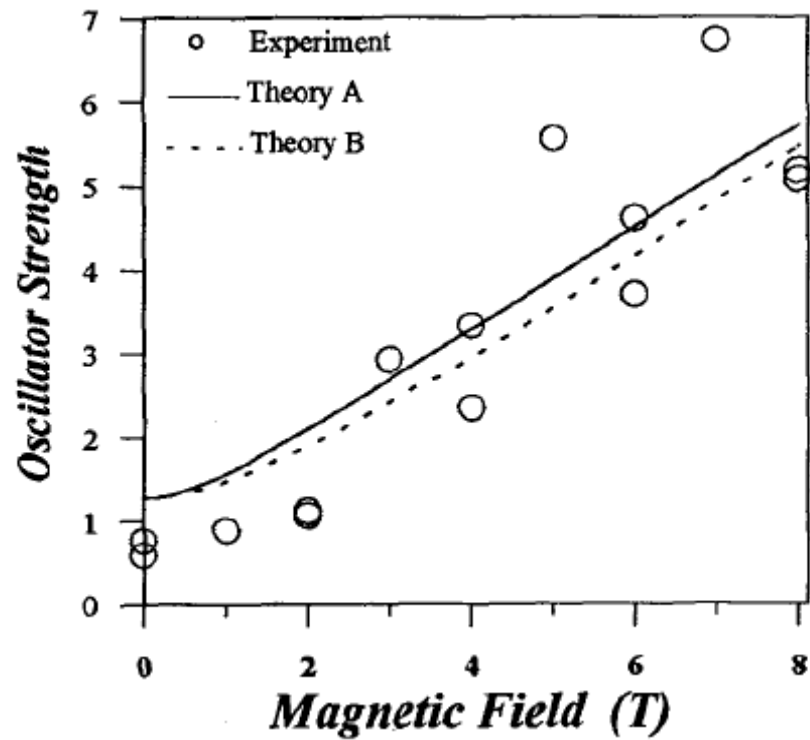


Fig. 5 La fuerza de oscilador para la transición E_1HH_1 hallada en 2 modelos, así como el experimental, contra campo magnético hasta 8T, ref. [18]

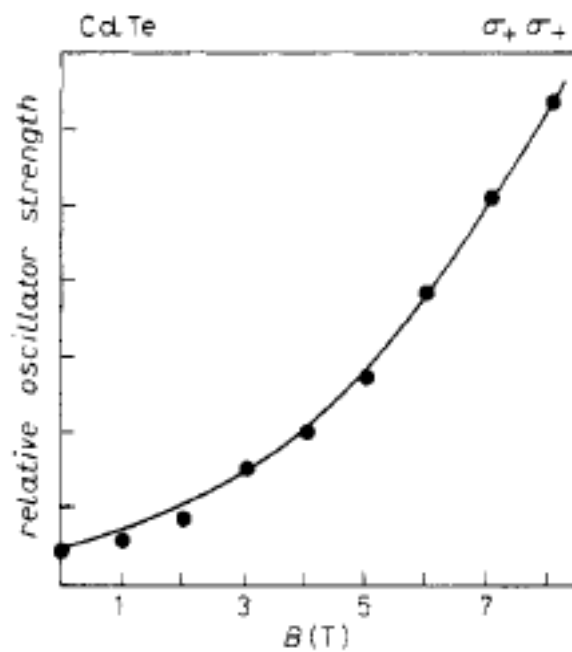


Fig. 6 La fuerza de oscilador para un Exciton de CdTe y GaAs contra campo magnético ref. [15]

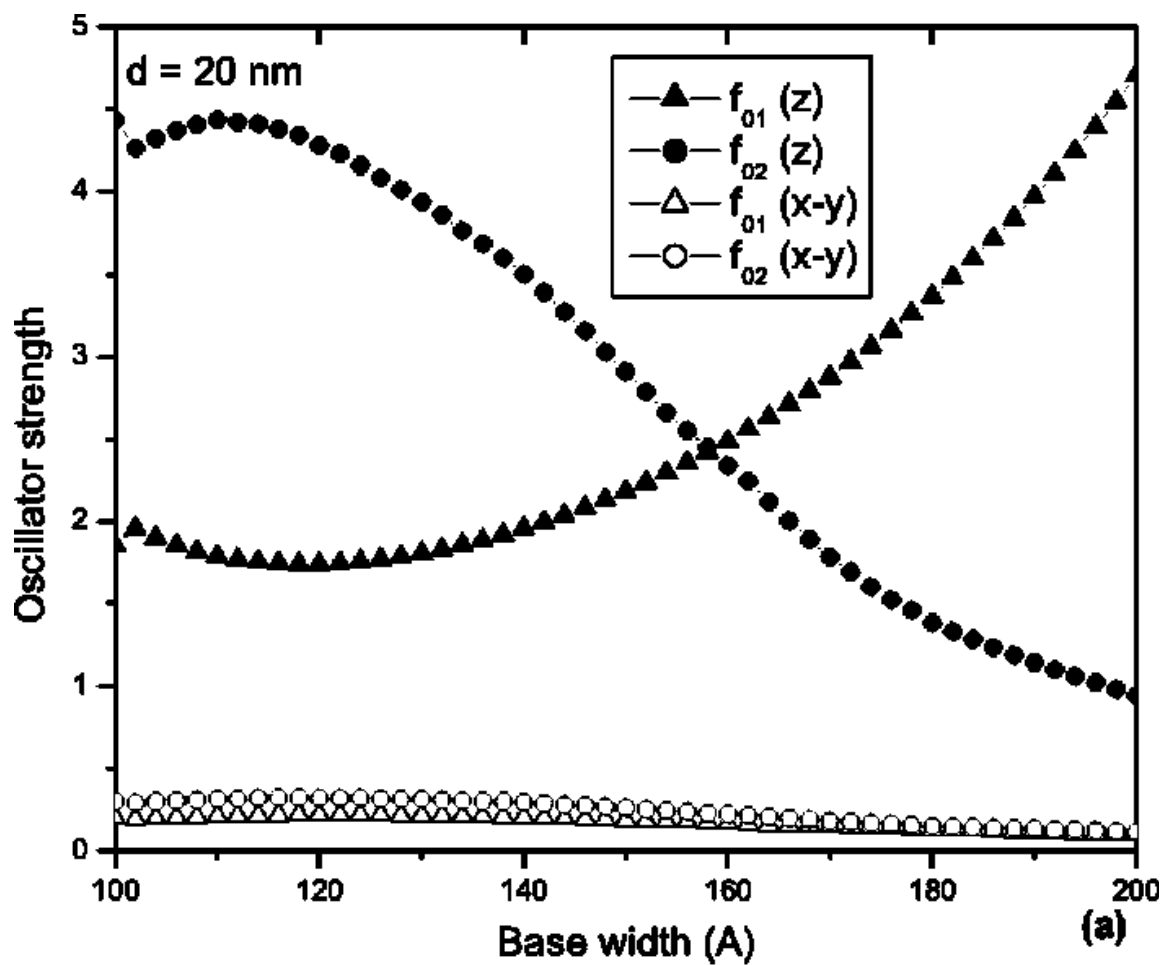


Fig. 7 Las fuerzas de oscilador de las transiciones de estado base al primer y al segundo estado excitado como una función de la anchura del punto cuántico para una separación lateral entre los puntos de 20 nm, ref. [19]