

**EFFECTO DE DE LA GEOMETRIA SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE  
DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO ENSAMBLADOS**

**HAMILTON CARRILLO NÚÑEZ**

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

**EFFECTO DE LA GEOMETRIA SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE  
DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO ENSAMBLADOS**

**Trabajo de grado como requisito para optar al titulo de Físico**

**HAMILTON CARRILLO NUÑEZ**

**Director:  
Ph.D. ILIA D. MIKHAILOV**



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

*a Dios,*

*A mi querida madre  
Olga Lucía Núñez Pinzon*

*A mi querido padre  
Roosevelt Carrillo Martínez*

*A mis hermanas  
Nicol Juliana y Malory Laritza Carrillo Núñez*

*Por todo su apoyo e incondicional ayuda*

## AGRADECIMIENTOS

El autor ofrece sus agradecimientos a las personas que de una u otra forma contribuyeron a la realización de este trabajo:

**Dr. Iliá Mikhailov**, por aceptar ser mi director y por su colaboración incondicional a pesar que le causara tantos dolores de cabeza a la hora de escribir este trabajo, pero sobre todo por compartir parte de su conocimiento y sabiduría.

**Dr. Javier Betancur, Dr. Harold Paredes y Dr. Carlos Beltrán Ríos**, gracias por brindarme un poco de su amistad y un cupo en tan prestigioso grupo.

**Msc. Jairo Marín Cadavid**, por sus consejos, chistes, amabilidad y amistad incondicional. **Msc. Francisco García**, por sus bendiciones y por presentarme en la sustentación de la propuesta.

**Eduardo Galván Moya**, por su ayuda, sus chistes, sus consejos y sobre todo por su gran amistad que no se consigue a la vuelta de la esquina. **Oscar Acevedo**, por su gran colaboración en este trabajo y compartir parte de su conocimiento durante toda mi carrera. **Carlos Gómez (Cuervo)**, por aceptar ser mi colega y brindarme su amistad incondicional. **Fredy Rodríguez**, por contar conmigo a la hora de buscar pelea y por enseñarme algunos trucos en Latex.

A los Ficomacos y ex - Ficomacos **William Gutiérrez, Juan Piña, Víctor Basto**, por aceptar ser mis colegas durante y ojala después de la realización de este proyecto.

También quiero dar las gracias a los familiares y amigos que me acompañaron durante esta etapa.

## CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN.....	11
1. MODELO GEOMETRICO.....	17
1.1 GEOMETRÍA DE PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS....	17
1.2 POTENCIAL DE CONFINAMIENTOS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS.....	21
1.3 PARAMETROS DEL LOS MATERIALES.....	21
1.4 HAMILTONIANO DEL SISTEMA.....	22
2. FUNDAMENTOS TEORICOS.....	24
2.1 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA.....	24
2.2 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA.....	25
2.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO.....	29
2.4 MÉTODO DE DIMENSION FRACTAL.....	32
2.5 DENSIDAD DE ESTADOS ELECTRÓNICOS DE $D^0$ .....	35
3. RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	46
3.1 QDs CON PERFILES SUAVES, LENTES Y ANILLOS.....	46
3.2 EFECTO DEL TAMAÑO DE LOS QDs SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$ .....	52
3.3 DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$ EN SAQDs CON DIFERENTE GEOMETRIA.....	56
3.4 CAMBIO EN LA DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$ EN EL PROCESO DE TRANSFORMACION DE LENTE-VOLCÁN-ANILLO.....	58
4. CONCLUSIONES.....	62
BIBLIOGRAFÍA.....	64

## LISTA DE FIGURAS

- Fig. 1.1** Imagen tridimensional de SAQD en forma de una lente.
- Fig. 1.2** Perfiles de puntos cuánticos auto ensamblados con forma de disco, pirámide y lente.
- Fig. 1.3** Perfiles de puntos cuánticos auto ensamblados con forma de , pirámide truncada, volcán y anillos.
- Fig. 1.4** Estructura de bandas para los puntos cuánticos de I tipo.  $V_e$  y  $V_h$  representan los potenciales de confinamiento para electrones,  $e^-$  y  $h^+$ , respectivamente.
- Fig. 2.1** Densidad de estados para un Bulk (3D), QWs (2D), QWWs (1D) y QDs (0D).
- Fig. 2.2** (a) Niveles energéticos del electrón y Banda de Donadora y sus (b) respectivas densidades de estados
- Fig. 3.1** Curvas (a) de potencial efectivo normalizada y (b) función de onda radial para QDs de tipo lente y anillo con bordes suaves.
- Fig. 3.2** Densidad de probabilidad del electrón libre en el plano de simetría en QDs de tipo (a) lentes y (b) anillos suaves.
- Fig. 3.3** Energía de enlace en función de la distancia hasta el eje para una  $D^0$  localizada en diferentes capas distanciadas de QDs tipo (a) Lentes y (b) anillos de borde suaves.
- Fig. 3.4** Densidad de estados de  $D0$  en función de la energía de enlace para QDs tipo (a) Lentes y (b) Anillos de borde suave. La inclusión muestra la parte del gráfico ampliada correspondiente a la cola ultravioleta de la curva.
- Fig. 3.5** Energía de enlace de  $D0$  en función de la distancia desde su posición hasta el eje de QDs con diferentes radios de base y perfiles de tipo (a) lente y (b) anillos de bordes suaves. Los parámetros que caracterizan el tamaño de QD y la posición de la donadora están señaladas en las figuras.

- Fig. 3.6** Densidad de estados para donadoras uzicadas en la capa con  $\xi_z = 1.6nm$ , en un anillo con bordes suaves.
- Fig. 3.7** Energía de enlace en función de la distancia desde la posición de D0 hasta el eje de simetría de anillos con bordes suaves para diferentes alturas de (a) QD y (b) capa húmeda.
- Fig. 3.8** Energía de enlace en función de  $\xi_p$  para donadoras localizadas en la capa base de SAQDs con diferentes formas.
- Fig. 3.9** Densidad de estados para donadoras en SAQDs con diferentes geometrías.
- Fig.3.10** Densidades de estados para donadoras en disco, pirámide y pirámide truncada.
- Fig.3.11** Representación geométrica de un SAQD tipo volcán.
- Fig.3.12** Energía de enlace de una donadora en función de la distancia desde su posición hasta el eje de un punto cuántico cuya morfología se modifica desde lente (  $a = 0$  ) a anillo (  $a = 35$  ) pasando por volcán
- Fig. 3.13** Variación de las curvas de densidad de estados para donadoras neutras en el proceso de la modificación de morfología de punto cuántico desde lente (  $a = 0$  ) a anillo (  $a = 35$  ) pasando por volcán.

**TÍTULO:** EFECTO DE LA GEOMETRIA SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE DONADORAS NEUTRAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO ENSAMBLADOS<sup>1</sup>

**AUTOR:** Hamilton Carrillo Núñez<sup>\*\*</sup>

**PALABRAS CLAVES:** donadora, energía de enlace, densidad de estados, punto cuántico (QDs)

**DESCRIPCIÓN:** En este trabajo se analiza la densidad de estados de donadoras neutras distribuidas aleatoria mente en una heteroestructura que consiste de puntos cuánticos depositados en una delgada capa húmeda plana. Las energías del estado base del electrón y donadoras fuera del eje confinadas en esta estructura son encontradas usando los métodos de aproximación adiabática y dimensión fractal, respectivamente. Las nuevas curvas de energías de enlace del estado base, de las donadoras localizadas en diferentes capas de la estructura, en función de la distancia de la posición al eje de los puntos cuánticos con geometría de discos, lentes, pirámides y anillos son presentadas. Se muestra que las singularidades de Van-Hove que tienen estas curvas producen picos pronunciados en la densidad de estados de las impurezas calculadas para estas estructuras. Se encontró que las curvas de densidad de estados tienen una forma estructurada con algunos picos separados en la región de altas energías del espectro debido a la contribución de donadoras localizadas en diferentes capas de la estructura.

---

\* Proyecto de grado

\*\* Universidad Industrial de Santander

**TITLE:** EFFECT OF THE GEOMETRY ON IMPURITY DENSITY STATES OF NEUTRAL DONOR IN SELF ASSEMBLE QUANTUM DOTS\*

**AUTHOR:** Hamilton Carrillo Núñez\*\*

**KEY WORDS:** donor, binding energy, density of states and quantum dot (QD).

**ABSTRACT:** We analyze the density of states of neutral donors randomly distributed inside a heteroestructuras which consists of the flat quantum dot deposited on a thin wetting layer. The ground state energies of the electron and the off-axis donor energy confined in this structure are found by using the adiabatic approximation and the fractal dimension method, respectively. The novel curves of the ground state binding energies of donors located in different layers of the structure as a functions of the distance from the donor location to the axis of the disk-like, lens-like, pyramid-like and ring-like geometry are presented. It is shown that the Van-Hove singularity that have these curves provides a pronounced peaks in the density impurity states calculated for these structures. It is found that the curves of the impurity states have a structured shapes with some separated peaks in the high-energy part of the spectrum due to the contribution arose from the donors located in different structure layers.

---

\* Proyecto de grado

\*\* Universidad Industrial de Santander

## INTRODUCCIÓN

La nanotecnología nace en la década 80's, cuando por primera vez se habla de la construcción de dispositivos opto- y micro-electrónicos a escala molecular con dimensiones de unos pocos nanómetros. En los siguientes diez años se desarrolló la habilidad para diseñar y fabricar estructuras simples a dichas escalas. De esta forma el concepto de nanotecnología es aceptado refiriéndose a dispositivos semiconductores construidos a escalas nanométricas, en donde los efectos cuánticos predominan. Según esto se podría definir la nanotecnología como el área de diseño y desarrollo de nuevos materiales en los cuales características macroscópicas como la constante dieléctrica, el coeficiente de refracción, la permitividad magnética, etc. varían bruscamente en heterojunturas, tales como superredes(SL's), pozos cuánticos(QW's), hilos cuánticos(QWW's) y puntos cuánticos(QD's) [1,2]. Gracias al desarrollo en las técnicas de crecimiento de semiconductores fue posible a comienzo de los 70's la fabricación de superredes, las cuales se obtuvieron a partir de dos semiconductores base, A y B, dispuestos uno a continuación del otro a manera de un gran emparedado, ABA..., y donde ellos no son semiconductores simples, por el contrario, generalmente se trata de compuestos binarios como el GaAs-AlAs o ternarios como InAlAs-AlGaAs. Los materiales que participan en estas estructuras poseen el mismo tipo de simetría cristalina y parámetro de red muy parecido, pero diferentes anchos de

banda prohibida, asegurando que el nuevo material tendrá diferentes propiedades electrónicas en la interfaz entre los dos materiales.

Los espesores característicos de las capas que componen las superredes llegan a ser de hasta 20 Å, la cual es menor que la longitud de onda De Broigle de los electrones, de tal manera que en estas capas ellos pierden un grado de libertad quedando confinados en un sistema bi-dimensional conocido como pozo cuántico. Debido a avances tecnológicos posteriores se ha logrado reducir aún mas las dimensiones de las heterojunturas y obtener sistemas uni-dimensionales denominados hilos cuánticos donde el movimiento de los portadores de carga está restringido en dos direcciones.

En las dos últimas décadas han sido fabricados e investigados una gran variedad de puntos cuánticos (QDs), donde el confinamiento cuántico restringe el movimiento de las partículas en todas tres direcciones. El mayor interés para las futuras aplicaciones en calidad de dispositivos micro- y opto-electrónicos lo presentan los puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs). El proceso de fabricación de estos consiste en depositar un material semiconductor sobre un sustrato de otro material semiconductor con parámetros de red diferentes [2,3]. Por ejemplo, en el caso de los dos materiales más usados, GaAs e InAs, esta diferencia llega a ser del 7%. Cuando las capas comienzan a depositarse sobre el sustrato, únicamente las primeras llegan a cristalizar en forma epitaxial, pero al llegar a un espesor crítico y en dependencia de la energía superficial del material depositado, las monocapas sufren una tensión, lo que genera un rompimiento de

la estructura. Si se continúa con el proceso de deposición, los átomos que lleguen a continuación se reorganizarán de manera espontánea y aleatoria, formándose una serie de islotes que poseen tamaño bien definidos y formas regulares. Este proceso es conocido como el método de crecimiento de Stranski-Krastanov. Los islotes se catalogan como QDs cuando sus dimensiones son del orden de la longitud de onda de Broglie de las partículas que están confinadas dentro de ellos. Dichos islotes dependiendo de las condiciones externas en que se están fabricando (temperatura, presión, etc.) pueden adoptar diferentes formas tales como: disco, lente, volcán, anillo, pirámide cónica, cuyas alturas son del orden de 2-4nm, los radios de base típicos son del orden de 40-70nm y el radio interior para el caso de los anillos del orden de 20nm [2,3].

La restricción en el movimiento de los portadores de carga dentro QD se describe a través del potencial de confinamiento que aparece debido a la discontinuidad de la banda de conducción en las junturas del QD. La forma de este potencial es típico para un pozo cuántico y esta dada por una función seccionalmente constante, que toma el valor de cero dentro y diferente de cero fuera del punto. El espectro energético de un portador de carga dentro de QD es discreto. Cuando se introduce una donadora en un QD este espectro sufre una considerable variación. Primero, debido a la presencia de la donadora todos niveles energéticos se desplazan hacia abajo a un valor que depende fuertemente de la distancia de la donadora al eje de simetría del QD. Entre mayor sea la distancia desde la posición de la donadora hasta el eje de simetría, menores serán

los desplazamientos de los niveles energéticos debido a la presencia de la donadora. Segundo, la energía de enlace de la donadora y la forma de la función de onda correspondiente al estado de base de la donadora dependen fuertemente de la posición de esta en la heterojuntura. Se puede esperar por ejemplo, que la energía de enlace de la donadora localizada en el centro del punto sobre el eje sea diferente a la correspondiente en el centro de la base.

La habilidad de introducir donadoras en redes fue uno de los mas importantes avances tecnológicos en materiales electrónicos como los semiconductores. Por eso el análisis teórico de sistemas de baja dimensión (*low-dimensional systems*) en las dos ultimas décadas ha venido incrementado su interés. Los espectros de donadoras en pozos cuánticos fueron unos de los primeros en ser estudiados a partir del trabajo de G. Bastard [4] publicado en 1981 donde él planteó un modelo simple en el marco de la aproximación de masa efectiva y utilizó el método variacional. Mas tarde este problema fue tratado utilizando otras técnicas diferentes del método variacional, tales como la teoría de perturbaciones [5], el método de series de Taylor [6] y el método de Monte Carlo [7] entre otros. Recientemente por el Grupo FICOMACO de la UIS fue elaborado un método simple denominado Dimensión Fractal (MDF) obtenido a partir del principio variacional para analizar el estado base de donadoras confinadas en las heterojunturas semiconductoras [8]. El modelo de Bastard para donadoras confinadas en pozos cuánticos fue también transferido para analizar el problema similar en otros tipos de heterojunturas, tales como superredes, hilos y puntos

cuánticos esféricos (SQD) y auto-ensamblados. En la publicación de Zhu *et al* [9] fue encontrada una solución exacta de donadoras en SQDs usando un método de expansión en series. En el caso de SAQDs no se ha encontrado aun una solución exacta y por eso se requiere el uso de métodos aproximados. Utilizando el método de Aproximación Adiabática (A.A) y MDF se logró recientemente encontrar la energía de enlace del estado base de la donadora en SAQDs [10] como función de la posición de esta.

En este trabajo fue demostrado que la energía del estado base de la donadora depende fuertemente de la posición de la impureza y, por esta razón, para los niveles energéticos de un conjunto de impurezas distribuidas dentro de SAQDs en una forma aleatoria, es conveniente describirlos por medio de una característica especial llamada densidad de los estados. La densidad de estados se define como el numero de estados, en un rango de energía, por unidad de energía y por unidad de volumen. El comportamiento de las energías de enlace en función de la posición de esta en SAQDs define completamente la densidad de los estados de la donadora. Para calcular la densidad de los estados se puede considerar la distribución de impurezas como homogénea y demostrar que en este caso la densidad de estados de las donadoras es proporcional a la distancia que existe entre la posición de esta y el eje de simetría, e inversamente proporcional a la derivada de estas curvas. De esta manera, una vez encontrada la dependencia de la energía de la donadora en función de la distancia desde su posición hasta de

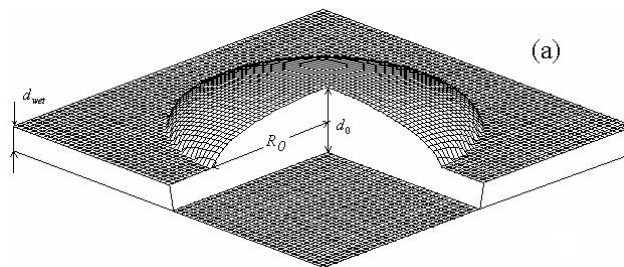
eje de simetría la densidad de los estados puede encontrarse a través de un tratamiento numérico de las curvas encontradas.

Hasta el momento se han publicado varios artículos sobre densidad de los estados electrónicos de donadoras en diferentes heterojunturas tales como QWW [11] y QDs rectangulares [12] y esféricos [13], pero hasta donde se conoce aun, no han sido analizadas las densidades de los estados de donadoras en SAQDs. Mientras tanto sería interesante aclarar ¿si existe una relación entre la forma geométrica de un punto cuántico y la forma de la curva de la densidad de los estados? En el caso de una respuesta positiva a esta pregunta pudiera abrirse una posibilidad adicional para controlar las propiedades de los SAQDs variando su morfología a través de la fabricación en diferentes condiciones. Se sabe que la forma de un punto cuántico puede variarse desde un disco o una lente hasta un volcán o un anillo variando el régimen termodinámico de su fabricación [14]. En el presente trabajo se pretende analizar el efecto de la forma geométrica de SAQD sobre la densidad de estados electrónicos de donadoras utilizando el método MDF.

## 1. MODELO GEOMETRICO

### 1.1 GEOMETRÍA DE LOS PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS

El tamaño y forma de los QDs que se crean en el proceso de fabricación dependen de varios factores tales como: discontinuidad en las constantes de red en las juntas e intensidad de la tensión en las capas cercanas proveniente de esta discontinuidad, temperatura y velocidad de crecimiento, etc. Bajo ciertas condiciones es posible lograr un control preciso de la geometría de los islotes y de sus posiciones, y de esta manera fabricar redes periódicas con puntos cuánticos. Un modelo matemático de SAQD con simetría axial que pudiera ser utilizado para describir su forma geométrica debe contener un conjunto de parámetros tales como: el radio de base,  $R_0$  (valor típico entre 20 y 70nm) el radio interno  $R_i$  (en el caso de anillos, volcanes y pirámides truncadas (valor típico entre 10 y 20nm y en otros casos  $R_i$  se considera igual a cero), la altura máxima  $d_0$  (valor típico entre 2 y 8nm) del punto cuántico y la capa húmeda  $d_w$  (valor típico entre 2 y 4nm). Un ejemplo de la imagen de un punto cuántico que tiene la forma de una lente y significado de los parámetros anteriores se puede ver en la Fig. 1. Además, definir el perfil de un punto cuántico con la simetría axial se puede a través de una función  $z = d(\rho)$  que describe la dependencia de la altura  $z$  del SAQD en función de la distancia  $\rho$  hasta eje de simetría en coordenadas cilíndricas.

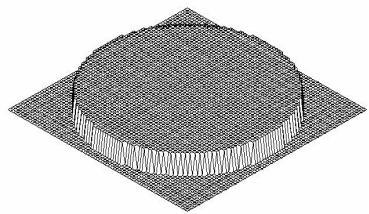


**Fig. 1.1** Imagen tridimensional de SAQD en forma de una lente.

El vector de posición  $\vec{\xi}$  de una donadora localizada dentro o fuera de SAQD en coordenadas cilíndricas se puede definir a través de solo dos componentes  $\xi_\rho$  y  $\xi_z$  en dirección radial y dirección de z respectivamente, mientras que la tercera componente (polar) siempre se puede poner igual a cero debido a la simetría axial de la heterojuntura.

La morfología real de los SAQDs es suficientemente complicada y puede ser solo aproximadamente descrita a través de las formulas sencillas para la función  $z=d(\rho)$ . Estas formulas que se utilizarán en adelante en esta tesis en todos los casos deben tener en cuenta que fuera del punto cuántico ( $\rho > R_0$ ) la altura de la capa húmeda es igual a  $d_w$ . Las morfologías reales de los SAQDs que nosotros aproximamos a través de diferentes modelos los cuales clasificamos como: disco, pirámide, pirámide truncada, lente, anillos (rectangular, suave) y volcán, y consideramos a continuación:

- Disco:

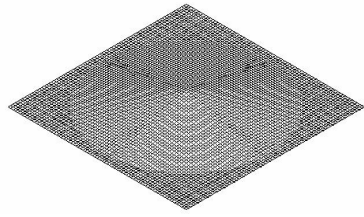


$$d(\rho) = d_0 \mathcal{G}(R_0 - \rho) + d_w \quad (1.1)$$

**Fig.1.2(a)** Modelo de Disco

Aquí y en adelante  $\mathcal{G}(x)$  es la función de paso de Heaviside.

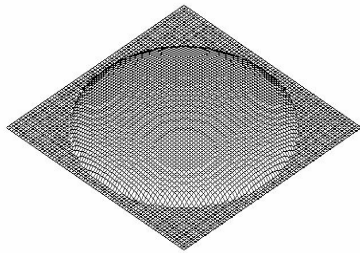
- Pirámide:



$$d(\rho) = d_0 \left[ 1 - \frac{\rho}{R_0} \right] g(R_0 - \rho) + d_w \quad (1.2)$$

**Fig. 1.2(b)** Modelo de Pirámide

- Lente:

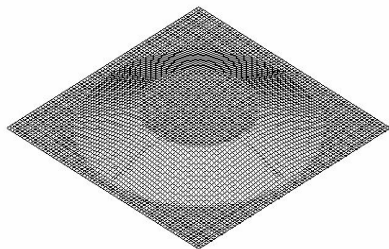


$$d(\rho) = d_0 \sqrt{1 - \left( \frac{\rho}{R_0} \right)^2} g(R_0 - \rho) + d_w \quad (1.3)$$

**Fig. 1.2(c)** Modelo de Lente

Para los siguientes tres modelos de SAQD introduciremos dos parámetros adicionales  $a = R_0 - R_i$  y  $R_p = \frac{R_0 - R_i}{2}$  para simplificar.

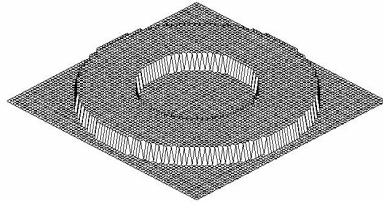
- Pirámide truncada:



$$d(\rho) = d_0 \left[ 1 - \frac{(\rho - R_i)}{a} \right] g(R_0 - \rho) g(\rho - R_i) + d_0 g(R_i - \rho) + d_w \quad (1.4)$$

**Fig. 1.3a** Modelo de Pirámide Truncada

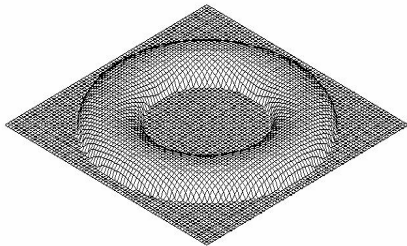
- Anillo rectangular:



$$d(\rho) = d_0 \mathcal{G}(R_0 - \rho) \mathcal{G}(\rho - R_i) + d_w \quad (1.5)$$

**Fig. 1.3b** Modelo de Anillo Rectangular

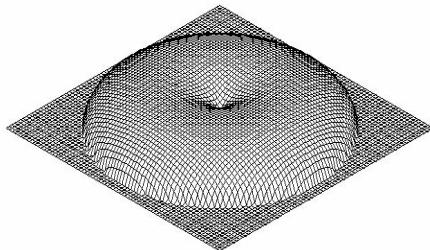
- Anillo suave:



$$d(\rho) = d_0 \sqrt{1 - \frac{4(\rho - R_p)^2}{a^2}} \mathcal{G}(R_0 - \rho) \mathcal{G}(\rho - R_i) + d_w \quad (1.6)$$

**Fig. 1.3c** Anillo suave

- Volcán:



$$d(\rho) = d_0 \sqrt{1 - \frac{4(\rho + R_i - R_0)^2}{R_0 + R_i}} \mathcal{G}(R_0 - \rho) \mathcal{G}(\rho - R_i) + d_w \quad (1.7)$$

**Fig. 1.3(d)** Modelo de Volcán

## 1.2 POTENCIAL DE CONFINAMIENTOS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS

El potencial de confinamiento  $V(\rho, z)$  que surge de la discontinuidad de la banda de conducción de los materiales que forman la heteroestructura del QD se define de la siguiente manera:

$$V(\rho, z) = V_0 [\vartheta(z - d(\rho)) + \vartheta(-z)] \quad (1.8)$$

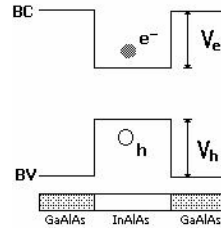
es decir,  $V(\rho, z)$  es una función constante que toma el valor de cero dentro del QD y  $V_0$  fuera de este.

## 1.3 PARÁMETROS DE MATERIALES EN PUNTOS CUÁNTICOS

Se dice que un QD es de tipo I, cuando la diferencia de energía entre los fondos de la Banda de conducción y la diferencia de energía entre los techos de la banda de valencia poseen signos opuestos en caso contrario el QD se clasifican como tipo II. Los QDs tipo I son fabricados de sistemas formados por: GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, GaSb-AlSb, GaAs-GaP, In<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As-Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As, etc. Mientras que un ejemplo de QDs tipo II es el sistema formado por InP-Al<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>P. En este trabajo se consideran SAQDs de primer tipo y como ejemplo se calculan características energéticas de heteroestructuras de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As-/Ga<sub>0.65</sub>Al<sub>0.35</sub>As para las cuales los parámetros del material son los siguientes [15]:

- La altura de la barrera para la banda de conducción es aproximadamente  $V_e \approx 258meV$  y para la banda de valencia es  $V_h \approx 172meV$ .

- La masas efectivas del electrón en el pozo y en la barrera son, respectivamente:  $m_{eW}^* = 0.076m_0$  y  $m_{eB}^* = 0.097m_0$ , donde  $m_0$  es la masa del electrón.



**Fig. 1.4** Estructura de bandas para los puntos cuánticos de I tipo.  $V_e$  y  $V_h$  representan los potenciales de confinamiento para electrones,  $e^-$  y  $h^+$ , respectivamente.

En adelante la diferencia entre los parámetros de los materiales, masa efectiva del electrón  $m_e^*$  constante dieléctrica  $\epsilon$ , en el pozo y en la barrera no se incluirán en los cálculos y se usarán aquellos del  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$  dentro del pozo, lo cual implica que la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica tanto dentro como fuera del punto son  $m_e^* = 0.076m_0$  y  $\epsilon = 12.71$ , respectivamente. De esta manera el radio de Bohr  $a_{0e}^*$  y Rydberg  $Ry_e^*$  efectivo para el electrón pueden ser calculados de la siguiente forma:  $a_{0e}^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e^* e^2} \approx 8.86nm$  y  $Ry_e^* = \frac{e^2}{2\epsilon a_{0e}^*} \approx 6.4meV$ . Según esto la altura de la barrera es en unidades de energía de Rydberg es aproximadamente  $V_{0e} \approx 40Ry_e^*$ .

## 1.4 HAMILTONIANO DEL SISTEMA

Consideremos el problema de una impureza donadora en el centro de una heteroestructura formada por  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}-\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ . En la aproximación de masa efectiva y de bandas de energía parabólicas no degeneradas, el Hamiltoniano en las unidades adimensionales es [8]:

$$\hat{H}_0(\vec{r}, \beta) = -\nabla^2 + V(\rho, z) - \frac{2\beta}{|\vec{r} - \vec{\xi}|}. \quad (1.9)$$

donde,  $V(\rho, z)$  es el potencial dado por (1.8), el radio de Bohr efectivo  $a_0^*$  se utiliza como unidad de longitud, y el Rydberg efectivo  $Ry^*$  como unidad de energía. Por ultimo, el parámetro  $\beta$ , sirve para analizar dos casos:  $\beta = 0$ , corresponde al problema de un electrón en un QD sin interacción coulombiana con un núcleo y  $\beta = 1$ , corresponde a una donadora  $D^0$  localizada en  $\vec{\xi} = (\xi_\rho, \xi_z)$  con un electrón localizado en el punto

## 2. FUNDAMENTOS TEORICOS

### 2.1 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA (EMA)

El Potencial de un cristal es muy complejo y no se puede calcular de los primeros principios, lo único que sabemos es que este potencial es periódico y tiene una simetría traslacional igual a la que tiene una red cristalina. Para describir el movimiento de un electrón en un campo producido por los iones que forman la red cristalina, hay que saber la forma de este potencial y resolver la ecuación de Schrödinger en la base del teorema de Bloch o utilizar la aproximación de masa efectiva (AME). Es mas eficiente y mas simple la segunda opción. En la AME la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula sometida en dos campos, un campo periódico de potencial cristalino,  $V_{crist}$  y otro campo externo con potencial  $V$  que varia suavemente, se busca en una forma de combinación lineal de las ondas de Bloch. Los coeficientes de esta combinación lineal forman una función envolvente  $\psi$  que satisface a una ecuación de onda que ya no contiene el potencial del campo cristalino:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (2.1)$$

donde energía se mide desde el piso de banda de conducción y  $m^*$  es masa efectiva de la partícula. Cuando no hay campo externo  $V$  la solución de (2.1) para la energía es:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.2)$$

La masa efectiva de la partícula  $m^*$  no coincide con la masa de la partícula libre  $m_0$ . Por ejemplo, para un electrón en el GaAs la masa efectiva  $m^*$  es de  $0.067 m_0$  [16].

## 2.2 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA (A.A): ELECTRÓN LIBRE EN SAQDs

La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano (1.9) no es completamente separable, pues el potencial de confinamiento (1.8) y el potencial coulombiano no lo permiten, por lo tanto no se ha encontrado una solución exacta, aun ni para el caso mas simple (en el que  $\beta=0$ ) que corresponde al de un electrón libre. Por esta razón, se debe utilizar algún método aproximado que permita separar las variables, al menos parcialmente. En calidad de tal método para los SAQDs se puede usar la aproximación adiabática (A.A) la cual aprovecha la gran diferencia entre los tamaños de la heterojuntura en las direcciones de crecimiento vertical y lateral. Para explicar la idea de esta aproximación realizamos un rescalamiento de coordenadas ( $\rho$  y  $z$ ) en la ecuación de onda correspondiente al Hamiltoniano (1.9) para el caso de electrón libre (en el que  $\beta=0$ ), según las formulas:

$$\rho = R_0 \tilde{\rho} \text{ y } z = d_0 \tilde{z} \quad (2.3)$$

donde  $R_0$  y  $d_0$  son el radio de la base y altura de SAQD, respectivamente. Este reescalamiento permite transformar la región inicial del movimiento del electrón de una forma muy anisotrópica, en un cuadrado  $0 \leq \tilde{\rho}, \tilde{z} \leq 1$ . La ecuación de Schrödinger para electrón en el SAQD en las nuevas coordenadas se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{1}{d_0^2} \nabla_{\tilde{z}}^2 f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) - \frac{1}{R_0^2} \nabla_{\tilde{\rho}}^2 f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) + \tilde{V}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = E(e^-) f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \quad (2.4)$$

donde  $f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$  y  $E(e^-)$  son la función de onda y la energía del electrón libre.

Las ecuaciones (2.4) se pueden interpretar, como si se tuviera escrita para el caso de dos partículas que interactúan por medio del potencial  $V(\rho, z)$ , donde una de ellas con masa  $d_0^2$  se desplaza en dirección  $z$ , mientras que la segunda, con masa  $R_0^2$ , se desplaza en el plano XOY y su energía cinética en este plano esta dada por el segundo termino en (2.4) en las coordenadas polares. Como el radio de base de los SAQDs es mucho mayor que sus alturas ( $R_0^2/d_0^2 \approx 100 \div 1000$ ) [14], es obvio que la ecuación (2.4) corresponde a un caso de dos partículas: una livera, que se mueve rápidamente en dirección  $z$  y una pesada, que se mueve lentamente en dirección  $\rho$ , pues la energía cinética de la primera es mucho mayor que la energía cinética de la segunda. Para resolver este tipo de problemas, en la mecánica cuántica se utiliza un procedimiento conocido como *Aproximación Adiabática*[10]; el cual consiste en presentar  $f(\rho, z)$  como el producto de dos funciones:

$$f(\rho, z) = f_z(\rho, z)f_\rho(\rho), \quad (2.5)$$

donde,  $f_z(\rho, z)$  describe el movimiento rápido de la partícula liviana en dirección  $z$ , mientras que  $f_\rho(\rho)$  describe el movimiento lento de la partícula pesada en dirección  $\rho$ . Sustituyendo (2.5) en (2.4) y teniendo en cuenta que  $R_0^2 \gg d_0^2$  y siguiendo el procedimiento típico para la AA se puede encontrar la solución aproximada de la ecuación (2.4) a través de dos pasos sucesivos. En el primer paso se analiza el movimiento rápido en la dirección  $z$ , despreciando en (2.4) el segundo término, y se encuentra el nivel energético  $E_z(\rho)$  mas bajo para este movimiento. Luego, en el segundo paso se analiza el movimiento lento en el

plano XOY, despreciando en (2.4) el primer término, y reemplazando el potencial de confinamiento por la función  $E_z(\rho)$ .

La ecuación de Schrödinger para movimiento de la partícula liviana en dirección  $z$  que se resuelve en el primer paso se escribe como:

$$-\frac{d^2 f_z(\rho, z)}{dz^2} + V(\rho, z) f_z(\rho, z) = E_z(\rho) f_z(\rho, z) \quad (2.6)$$

La función  $f_z(\rho, z)$  y energía  $E_z(\rho)$  pueden ser encontradas exactamente, debido a que (2.6) describe el problema de un pozo con ancho  $d(\rho)$  y altura  $V_0$ , en el cual  $\rho$  es tratado como un parámetro fijo. La solución al problema anterior para la función de onda  $f_z(\rho, z)$  es:

$$f_z(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{N(\rho)}} \begin{cases} \text{Cos}\left[k \frac{d(\rho)}{2}\right] \exp(\kappa z) & \text{si, } z < 0, \\ \text{Cos}\left[k \left(z - \frac{d(\rho)}{2}\right)\right] & \text{si, } 0 < z < d(\rho); 0 < \rho < R_0, \\ \text{Cos}\left[k \frac{d(\rho)}{2}\right] \exp[-\kappa(z - d(\rho))] & \text{si, } z > d(\rho), \end{cases} \quad (2.7)$$

donde:

$$k = \sqrt{E_z(\rho)}, \quad (2.8a)$$

$$\kappa = \sqrt{V_0 - E_z(\rho)}, \quad (2.8b)$$

$$N(\rho) = \frac{d(\rho)}{2} + \frac{1}{\kappa} \text{Cos}^2\left[k \frac{d(\rho)}{2}\right] + \frac{1}{2k} \text{Sen}^2\left[k \frac{d(\rho)}{2}\right]. \quad (2.9)$$

Por otro lado, la energía  $E_z(\rho)$  se encuentra a partir de la ecuación trascendente, que puede ser obtenida al coser la función de onda (2.7) en la juntura y que esta dada por:

$$k \text{Sen} \left[ k \frac{d(\rho)}{2} \right] + \kappa \text{Cos} \left[ k \frac{d(\rho)}{2} \right] = 0 \quad (2.10)$$

La ecuación de Schrödinger, que describe el movimiento en el plano XOY esta dada por:

$$-\frac{d^2 f_\rho(\rho)}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d f_\rho(\rho)}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2} f_\rho(\rho) + E_z(\rho) f_\rho(\rho) = E(e^-) f_\rho(\rho), \quad (2.11)$$

siendo  $m$  el número cuántico azimutal, mientras que la función  $E_z(\rho)$  es el potencial de confinamiento efectivo en dirección  $\rho$ , como se menciona anteriormente:

$$E_z(\rho) = \begin{cases} E_z(R_0) & \text{si } \rho > R_0 \\ v(\rho) & \text{si } \rho < R_0 \end{cases} \quad (2.12)$$

En la región  $\rho > R_0$  (fuera del QD) la solución de (2.12) se expresa en términos de las funciones modificadas de Bessel  $K_m(x)$ :

$$f_\rho(\rho) = K_m(\kappa\rho), \quad \text{donde,} \quad \kappa = \sqrt{E_z(R_0) - E(e^-)} \quad (2.13)$$

Cuando el electrón se encuentra dentro del QD ( $\rho < R_0$ ) el potencial es  $v(\rho)$  y  $f_\rho(\rho)$  solo se puede obtener a partir de una solución numérica de (2.11). Para esto se hace la sustitución:

$$f_\rho(\rho) = \rho^m u(\rho), \quad (2.14)$$

obteniendo la nueva ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \frac{(2m+1)}{\rho} \frac{du(\rho)}{d\rho} + [E(e^-) - v(\rho)] u(\rho) = 0; \quad 0 < \rho < R_0. \quad (2.15)$$

La ecuación diferencial (2.15) tiene una ventaja muy esencial comparada con la ecuación inicial (2.11), puesto que el término singular  $\frac{m^2}{\rho^2}$  presente en (2.11) desaparece y la singularidad solo se queda en el segundo término en (2.15), y esta singularidad es solo de primera orden. Esta última singularidad se eliminará al aceptar la condición de frontera en el punto inicial:

$$u'(0) = 0 \quad (2.16a)$$

La segunda condición de frontera se obtiene al coser la función  $u(\rho)$  con la solución exacta de (2.13) en la juntura  $\rho = R_0$ :

$$\frac{u'(R_0)}{u(R_0)} = -\frac{m}{R_0} + \kappa \frac{K'_m(\kappa R_0)}{K_m(\kappa R_0)} \quad (2.16b)$$

La ecuación (2.15) con dos condiciones de frontera forman un problema de Sturm-Liouville dentro de un intervalo finito  $0 < \rho < R_0$ . El método de solución de este problema se explicara en la siguiente sección.

### 2.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO APLICADO AL ELECTRÓN EN SAQDS

Utilizando las notaciones:

$$w(\rho) = \frac{(2m+1)}{\rho}; \quad \alpha(\rho) = E_m(e^-) - v(\rho) \quad (2.17)$$

rescribiremos el problema de contorno (2.15)-(2.16) en la forma simplificada:

$$\begin{aligned} u''(\rho) + w(\rho)u'(\rho) + \alpha(\rho)u(\rho) &= 0; \quad 0 < \rho < R_0; \\ u'(0) = 0; \quad \frac{u'(R_0)}{u(R_0)} &= -\frac{m}{R_0} + \kappa \frac{K'_m(\kappa R_0)}{K_m(\kappa R_0)} \end{aligned} \quad (2.18)$$

El método de barrido trigonométrico consiste en que el problema de contorno (2.18) se reduce a un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden utilizando la sustitución:

$$u(\rho) = A(\rho)\text{Cos } \theta(\rho); \quad u'(\rho) = A(\rho)\text{Sen } \theta(\rho) \quad (2.19)$$

Sustituyendo (2.19) en (2.18) y excluyendo de esta ecuación la función  $A(\rho)$  después de una serie de transformaciones algebraicas se obtiene la siguiente ecuación de primera orden para la función  $\theta(\rho)$ :

$$\theta'(\rho) = - \left[ \text{Sen}^2 \theta(\rho) + (E(e^-) - v(\rho)) \text{Cos}^2 \theta(\rho) + \frac{(2m+1)}{\rho} \text{Sen } \theta(\rho) \text{Cos } \theta(\rho) \right] \quad (2.20a)$$

con la condición inicial,

$$\theta(0) = 0 \quad (2.20b)$$

En este problema se desconoce la energía del electrón  $E(e^-)$  que se considera como un parámetro y la solución del problema de Cauchy (2.20) en el punto

$\rho = R_0$  se puede considerarse como una función de dos variables  $\theta(\rho = R_0) = \theta(R_0, E(e^-))$  que según la segunda condición de frontera de (2.18) debe satisfacer la siguiente relación:

$$\text{Tan}\theta(R_0) = -\frac{m}{R_0} + \kappa \frac{K'_m(\kappa R_0)}{K_m(\kappa R_0)} \quad (2.21)$$

la cual se puede considerarse como una ecuación trascendente respecto a la desconocida energía  $E(e^-)$  del electrón libre.

Utilizando las relaciones de recurrencia para las funciones de Bessel [17] la ecuación trascendente (2.21) puede ser transformada a una forma mas apropiada:

$$\theta(R_0) + \text{Tan}^{-1} \left[ \kappa \frac{K_{m+1}(\kappa R_0)}{K_m(\kappa R_0)} \right] = 0 \quad (2.22)$$

Una vez resuelto el problema de Cauchy (2.20) y encontrada la energía del electrón libre  $E(e^-)$  de la ecuación trascendente (2.22), la función  $A(\rho)$  puede ser calculada a través de la siguiente cuadratura:

$$A(\rho) = \text{Exp} \left\{ \int_0^\rho \left[ (1 - E_m(e^-) + v(\rho)) \text{Sen}\theta(\rho) \text{Cos}\theta(\rho) - \frac{(2m+1)}{\rho} \text{Cos}^2\theta(\rho) \right] d\rho \right\} \quad (2.23)$$

Conociendo las ecuaciones que se van a resolver, puede hacerse uso de métodos numéricos para solucionar el problema del electrón libre y a si encontrar la energía de los niveles mas bajos.

En la sección siguiente se estudia el caso de una donadora en un SAQD cuya energía de enlace, del estado base se halla utilizando el *Método de Dimensión Fractal* [8] que se muestra a continuación.

## 2.4 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL (MDF) APLICADO A $D^0$ EN SAQDs

Estudiemos ahora el caso de una donadora neutra que se encuentra en el centro de una heterojuntura. El Hamiltoniano adimensional en la aproximación de masa efectiva para el estado base de la donadora neutra es:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2}{r} \quad (2.23)$$

Debemos recordar que para este las unidades de longitud y energía son respectivamente: el radio efectivo de Bohr  $a_0^* = \epsilon \hbar / m^* e^2$  y el Rydberg efectivo  $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon$  que dependen de los parámetros del material. Por otro lado, para encontrar la función de onda del estado base  $\Psi_{D^0}(\vec{r})$  de la donadora neutra correspondiente a la energía  $E(D^0)$  se usa la siguiente función de prueba:

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\vec{r})\Phi(r) \quad (2.24)$$

donde la función envolvente  $\Phi(r)$  tiene en cuenta la interacción Coulombiana de la donadora con el electrón. Sustituyendo (2.25) en (2.23) y después de algunos cálculos pocos tediosos se encuentra que la ecuación de Schrödinger puede ser escrita como:

$$\hat{H}_{ren} \Phi(r) = -E_b \Phi(r) , \quad (2.25a)$$

$$\hat{H}_{ren} = -\frac{1}{f_0^2(\vec{r})} \nabla \cdot [f_0^2(\vec{r}) \nabla] - \frac{2}{r}. \quad (2.25b)$$

la cual corresponde a un problema de fuerza central para átomos hidrogenó ideas en un espacio anisotrópico y no homogéneo. La ecuación renormalizada de Schrödinger (2.25) puede ser escrita como un problema variacional del siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \int f_0^2(\vec{r}) \left\{ [\nabla \Phi(r)]^2 - \left( \frac{2}{r} - E_b \right) \Phi^2(r) \right\} d\vec{r}, \rightarrow \min. \quad (2.26)$$

Una vez se halla integrado sobre todos los ángulos la expresión (2.26) se puede escribir de la siguiente forma:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty J(r) \left\{ \left[ \frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 - \left( \frac{2}{r} - E_b \right) \Phi^2(r) \right\} dr, \rightarrow \min \quad (2.27)$$

La función  $J(r)$  se define como el Jacobiano del sistema y esta dado por:

$$J(r) = \int f_0^2(\vec{r}_0) \delta(|\vec{r}_0| - |\vec{r}|) d\vec{r}_0. \quad (2.28)$$

Calculando la derivada funcional  $\frac{\delta F[\Phi]}{\delta \Phi} = 0$ , se obtiene la ecuación de Euler-

Lagrange para la función envolvente  $\Phi(\vec{r})$  que minimiza el funcional (2.31):

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d\Phi(\vec{r})}{dr} \right] - \left( \frac{2}{r} - E_b \right) \Phi(\vec{r}) = 0. \quad (2.29)$$

En resumen la solución de la ecuación (2.29) define un valor aproximado de la energía de enlace  $E_b$  y una función de onda que no es exacta, pero es la mejor o mas aproximada entre todas las funciones de la forma (2.24), y describe un átomo tipo hidrógeno ideé en un espacio efectivo con dimensión variable. En el caso de una donadora en SAQDs, cuya posición es  $\vec{\xi} = (\xi_\rho, \xi_z)$ , la función de onda de esta, es de la forma:

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\vec{r})\Phi_{D^0}(\vec{r} - \vec{\xi}) \quad (2.30)$$

y por lo tanto el método de dimensión fractal es aplicable. Una vez es hallada la función de onda del electrón libre y su respectiva energía del estado base, como se menciona en la sección anterior, se puede calcular el Jacobiano de forma numérica en coordenadas cilíndricas, evaluando la integral:

$$J(r) = r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-r}^r f_z^2(|\rho + \xi_\rho|, z + \xi_z) f_\rho^2(|\rho + \xi_\rho|) dz, \quad (2.31)$$

donde la magnitud  $|\rho + \xi_\rho|$  esta dada por la expresión:

$$|\rho + \xi_\rho| = \sqrt{r^2 - z^2 + \xi_\rho^2 + 2\xi_\rho \sqrt{r^2 - z^2} \cos \varphi}. \quad (2.32)$$

La solución de la ecuación de onda (2.29) para la función envolvente  $\Phi_{D^0}(r)$  puede ser encontrada por medio del Barrido Trigonométrico, descrito en la sección anterior para el electrón libre, con condiciones iniciales que se explican a continuación. Cuando  $\rho$  toma valores muy pequeños la función

$w(r) = \frac{J'(r)}{J(r)} \rightarrow \frac{2}{r} \rightarrow \infty$  y la segunda derivada que aparece de la expresión (2.29)

es despreciable, entonces se ve fácilmente que:

$$\frac{\Phi'_{D^0}}{\Phi_{D^0}} = -1 \quad (2.33)$$

Utilizando la sustitución de las coordenadas polares de Poincare se obtiene la condición inicial  $\theta(0) = -\frac{\pi}{4}$ , mientras que si  $\rho$  toma valores muy grandes la

condición de frontera es  $\theta(R_{ext}) = -\frac{\pi}{2}$ , que a hace el papel de ecuación

trascendente para las energías de enlace  $E_b$ . Con el mismo algoritmo que se uso en el problema del electrón libre, se puede también encontrar la función de onda y energía de enlace de la donadora en el estado base, teniendo en cuenta las condiciones de frontera mencionadas anteriormente. Por ultimo, las soluciones al problema del electrón libre y donadora en SAQDs se muestran en la sección de resultados y discusiones de esta tesis.

## 2.5 DENSIDAD DE ESTADOS ELECTRÓNICOS

Para analizar varias propiedades ópticas como la rata de absorción o emisión, y como los electrones y huecos están distribuidos dentro de un sólido es necesario saber el numero de estados disponibles  $N(E)$  que existen en  $E_i < E$ . Cuando la energía aumenta y toma valores muy grandes el numero de estados disponibles será mayor a tal punto que en el caso hipotético de que la energía se infinita el numero de estados disponibles es máximo, por el contrario cuando la energía disminuye el numero de estados disponibles también lo hace, y en el caso en que

la energía tome el valor de menos infinito los estados disponibles son mínimos es decir son cero. Por ello la función  $N(E)$  debe cumplir las condiciones:

$$N(\infty) = 1; \quad N(-\infty) = 0, \quad (2.34)$$

El máximo de estados disponibles es uno, mientras que el mínimo de estos es cero, en un rango  $0 < N(E) < 1$ , esto indica que el numero de estados disponibles nunca disminuye a medida que la energía aumenta, es decir la función  $N(E)$  siempre es creciente. Las características anteriores hacen de esta un función relativamente fácil de tratar, tanto, que si se quiere hallar el numero de estados en un rango grande de energía  $E_a < E < E_b$ , simplemente se hace la diferencia:

$$N(E_a < E < E_b) = N(E_b) - N(E_a) \quad (2.35)$$

por el contrario si dicho rango es muy pequeño el numero de estados disponibles es de la forma:

$$N(E_0 < E < E_0 + dE) = N'(E) dE \quad (2.36)$$

El termino  $N'(E)$  no es mas que el numero de estados disponibles por unidad de volumen y por unidad de energía, definido como *Densidad de Estados*:

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE}. \quad (2.37)$$

El numero de estados disponibles  $N(E)$  puede definirse como:

$$N(E) \sim \sum_i \mathcal{G}(E - E_i) \quad (2.38)$$

Aquí,  $\mathcal{G}(E - E_i)$  es la función paso. Teniendo en cuenta el resultado (2.37) la densidad de estados que se obtiene a partir de esta se escribe en términos de la función Delta de Dirac:

$$g(E) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E(x_0) - E(x)) dx \quad (2.39)$$

donde el diferencial  $dx$  puede ser el elemento de, Volumen, Área o de línea dependiendo de la dimensión del espacio donde se este trabajando. Al igual que la función  $N(E)$  la densidad de estados tiene ciertas características de importancia que valen la pena mencionar. La primera de estas es su característica de ser siempre mayor que cero y cero cuando  $E = \pm\infty$ , mientras que la segunda tiene en cuenta la definición de densidad de estados para hallar el numero de estos en un rango de energía dado:

$$N(E_b) - N(E_a) = \int_{E_a}^{E_b} g(E) dE \quad (2.44)$$

Si este rango de energía esta entre infinito y menos infinito se encuentra la condición de normalización para la densidad de estados que es:

$$N(\infty) - N(-\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} g(E) dE = 1 \quad (2.45)$$

Aquí no se menciona, pero es obvio que se han utilizado las dos primeras condiciones (2.34) que debe cumplir la función  $N(E)$  para obtener el anterior resultado. En la mayoría de los casos la densidad de estados no puede hallarse de forma analítica, y entonces es necesario hacer uso de métodos numéricos para

hallarla. Por esto a manera de ejemplo se muestran a continuación tres casos en que sus densidades de estados son halladas de forma analítica haciendo uso del resultado encontrado en (2.39).

### 2.5.1 DENSIDAD DE ESTADOS EN UN SÓLIDO (BULK)

Primero se calculará los estados disponibles en el espacio de fase  $\mathbf{k}$  y usando la relación de energía momento en la aproximación de masa efectiva y bandas parabólicas se obtiene la densidad de estados en términos de la energía. En consecuencia podremos considerar estos electrones como si estuvieran libres y moviéndose independientes uno de otros, y desde el punto de vista clásico todos los valores de energía serán posibles y no habrá restricción en el número de electrones con el mismo valor de  $\mathbf{k}$ . Sin embargo, en escalas atómicas, los efectos cuánticos dominan lo que implica que las componentes de  $\vec{k}$  estén cuantizadas.

Con esta restricción, el electrón solo puede tomar ciertos valores de  $\vec{k}$  en el espacio de fase tridimensional, que fue llenado con pequeños elementos de volumen  $V_{3D} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ . Entonces la densidad de estados en un bloque (Bulk) tridimensional se define como:

$$g_{3D}(k) = \frac{2}{V_{3D}} \int_{-\infty}^{\infty} 4\pi k_0^2 \delta(E(k_0) - E(k)) dk_0 \quad (2.47)$$

El factor adicional 2 se debe a la consideración del Spin correspondiente al electrón. Usando las propiedades de la función delta de Dirac la densidad de estados en términos de  $\vec{k}$  se escribe como:

$$g_{3D}(k) = \frac{L^3 m^*}{\pi^2 \hbar^2} k \quad (2.48)$$

pero es mas importante ver como los electrones están distribuidos en una banda energética, por eso se define la densidad de estados en términos de la energía, como el numero de niveles energéticos en el intervalo  $dE$  disponibles en un volumen  $L^3$ , de la forma  $g_{3D}(E) = \frac{g_{3D}(k)}{L^3}$ , de modo que la densidad de estados electrónicos en una heterojuntura tridimensional esta dada por:

$$g_{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (2.49)$$

Se ve que la densidad de estados es proporcional a la raíz cuadrada de la energía y su principal característica es la continuidad de la función debido a que los electrones no se encuentran confinados en ninguna dirección.

## 2.5.2 DENSIDAD DE ESTADOS EN QWS

En heterojunturas bidimensionales, como pozos cuánticos el resultado es muy parecido al anterior con la diferencia de que ahora se ha perdido un grado de libertad y en cambio de encontrar los estados de  $\vec{k}$  encerrados en una esfera, el problema se reduce a encontrar la densidad de estado de  $\vec{k}$  en una superficie bidimensional limitada por dos circunferencias de radios  $k$  y  $k + dk$ .

El espacio  $k$  podría ser completamente formado si cada estado ocupara un área de  $V_{2D} = \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2$ , de esta forma la densidad de estados para este sistema se define como:

$$g_{2D}(k) = \frac{2}{V_{2D}} \int_0^{\infty} 2\pi k_0 \delta(E(k_0) - E(k)) dk_0 \quad (2.50)$$

Evaluando la integral de la misma manera que se hizo para el caso de un heterojuntura tipo bulk se encuentra que la densidad de estados en términos de la energía en un pozo cuántico es:

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (2.51)$$

Se observa que la densidad de estados para un nivel de un QW es constante por lo tanto no depende de la energía. Si se tienen en cuenta los demás niveles energéticos en el pozo cuántico, la función de densidad de estados adquiere forma de escalera descrita por:

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_i \mathcal{G}(E - E_i) \quad (2.52)$$

donde la función  $\mathcal{G}(E - E_i)$  es la función paso.

### 2.5.3 DENSIDAD DE ESTADOS EN QWWS

En una dimensión, dos grados de libertad en el espacio  $k$  ha sido eliminados, y cada estado de  $k$  ocupa un espacio determinado por  $V_{1D} = \frac{2\pi}{L}$ , luego la densidad de estados en una dimensión se define como:

$$g_{1D}(k) = \frac{2}{V_{1D}} \int_0^{\infty} \delta(E(k_0) - E(k)) dk_0 \quad (2.53)$$

Después de calcular la integral y buscar una expresión adecuada en términos de la energía, se encuentra fácilmente que la densidad de estados es:

$$g_{1D}(E) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{m^*}{\hbar^2 E} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.54)$$

Usando mas que el primer estado energético, la función de densidad de estados se transforma en:

$$g_{1D}(E) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i \frac{\mathcal{G}(E - E_i)}{(E - E_i)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.55)$$

donde una vez mas  $\mathcal{G}(E - E_i)$  es la función paso.

#### 2.5.4 DENSIDAD DE ESTADOS EN QDs

En una estructura cero dimensional, existe confinamiento en las tres direcciones y por lo tanto, todos los niveles energéticos se encuentran cuantizados, esto implica que la densidad de estados para cada nivel sean picos discretos dados por la función Delta de Dirac:

$$g_{0D} \sim \sum_i \delta(E - E_i) \quad (2.56)$$

Sin embargo, en puntos cuánticos reales, aparecen pequeñas colas simétricas sobre estos picos gracias a la interacción del electrón con las demás partículas.

En resumen, las funciones de densidad de estados halladas anteriormente se encuentran reunidas en la siguiente figura que esquematiza las formas que tiene cada una en dependencia de la energía:

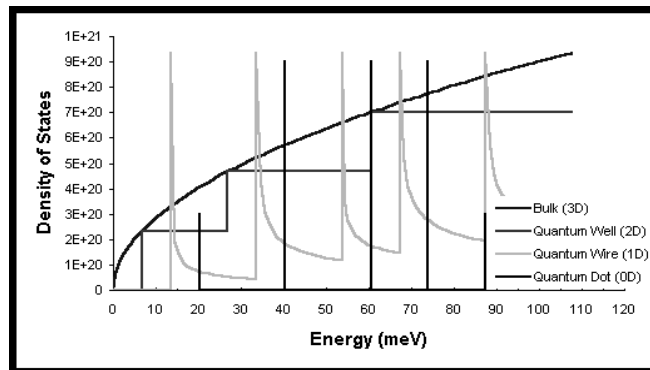


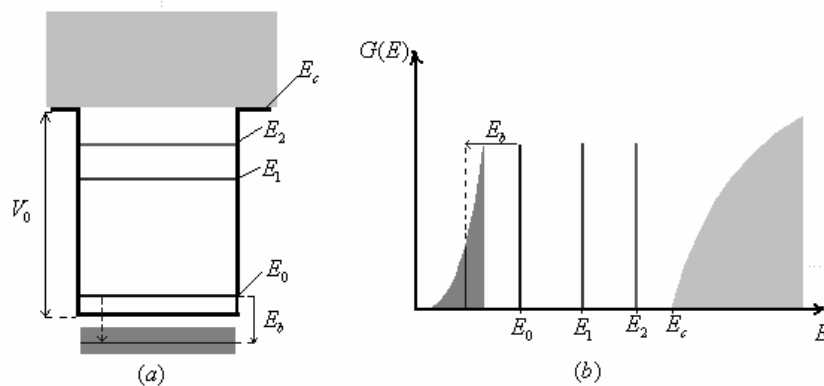
Fig. 2.1 Densidad de estados para un Bulk (3D), QWs (2D), QWWs (1D) y QDs (0D).

Como vemos la curva parabólica representa la densidad de un sólido 3D que describe la función (2.49). La curva en forma de escalera es la densidad de estados de un sistema bidimensional como un QW y se ve que para el intervalo energético entre dos niveles, es constante y al mismo tiempo es descrita por la expresión (2.52), en cambio, la curva con picos y colas representa la densidad de estados de un electrón en un QWW que esta dada por la ecuación (2.55) donde se ve que los picos aparecen en cada nivel energético y las colas que aparecen entre dos niveles son inversamente proporcionales a la raíz cuadrada de la energía, mientras que para un punto cuántico la densidad de estados son los picos totalmente discretos que aparecen por cada nivel energético.

### 2.5.5 DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$ EN SAQDS

El espectro energético del electrón libre en SAQDs es discreto y por ende la densidades de estados son picos muy agudos por cada nivel existente, mientras

que fuera de estos la densidad de estados corresponde a un sólido como se muestra en la figura 2.2.



**Fig. 2.2** (a) Niveles energéticos del electrón y Banda de Donadora y sus (b) respectivas densidades de estados

Una descripción clara de esto se ve en la figura 3.2 (a), en la que dentro del “pozo”, formado por el QD, los niveles energéticos  $E_0, E_1, E_2$  son discretos y fuera de este los niveles  $E_c$  son continuos, esto implica que (b) para los primeros de estos la densidad de estados sean picos y para los segundos la densidad sea continua de forma parabólica.

Gracias a que el potencial de confinamiento de los SAQDs depende fuertemente del perfil o forma de estos, el espectro electrónico es sensible al perfil de los QDs y a su vez esto hace que la posiciones de los picos de la densidad de estados dependa del perfil del punto. Un caso interesante adicional a este se da cuando se introduce una donadora  $D^0$  en un QDs, esta provoca desplazamiento de los niveles electrónicos hacia abajo (Ver figura 3.2). Durante este desplazamiento aparecen subniveles energéticos que conforman lo que podría llamarse un *Banda de Donadora* [4]. Como consecuencia de esto debe esperarse desplazamientos y apariciones de colas asimétricas en la densidad de estados

electrónicos cuyas formas, como se menciono anteriormente. deben ser sensibles al perfil del QD. Para estudiar con mas detalle este fenómeno consideremos una distribución homogénea de donadoras en una superred formada por solo SAQDs y tomemos como muestra de estudio el caso de un solo punto cuántico.

Para comenzar con este análisis es necesario saber cuales son los estados disponibles de una donadora en una capa plana del QD. Por ello definimos el numero de estados disponibles como:

$$N(E_b < E) = \int 2\pi\xi \vartheta(E(\xi_0) - E(\xi)) d\xi_0 \quad (2.57)$$

donde  $\xi$  describe la posición de la donadora en una dirección determinada. De la misma forma que (2.39) se puede obtener la densidad de estados de donadoras en los SAQDs:

$$g(E) = \int 2\pi\xi_0 \delta(E(\xi_0) - E(\xi)) d\xi_0 \quad (2.58)$$

evaluando la integral se obtiene una expresión para la función de la densidad de estados para donadoras en QDs [11]:

$$g(E) = 2\pi\xi(E) \left| \frac{dE(\xi)}{d\xi} \right|^{-1} \quad (2.59)$$

En nuestro caso uno de nuestros objetivos es determinar la energía de enlace de la donadora neutra en función de la posición de esta para diferentes capas del SAQD considerando que su posición en dirección  $z$ , que define la capa, se mantiene constante y solo se varia la posición en dirección de  $\rho$ , y a partir de estas curvas después de un tratamiento numérico obtener la densidad de estados,

siendo a si, la expresión (2.59) sufre un pequeña alteración, la energía  $E$  no es mas que la energía de enlace que depende de  $\xi_\rho$ , que es la posición de la donadora en dirección radial. Teniendo en cuenta estos cambios la expresión exacta para hallar la densidad de estados de una capa en puntos cuánticos auto ensamblados es:

$$g(E_b) = 2\pi\xi_\rho(E_b) \left| \frac{dE_b(\xi_\rho)}{d\xi_\rho} \right|^{-1}. \quad (2.60)$$

Este resultado es de gran importancia, pero a un así se esta perdiendo información valiosa al considerar una sola capa y descartar las demás. Para corregir esto se tendrán en cuenta todas las capas del SAQD, tomando el promedio de la densidad de estados de cada capa de la siguiente forma:

$$g(E_b) = \frac{2\pi}{N_C} \sum_{i=1}^{N_C} \xi_\rho(E_{b,i}) \left| \frac{dE_{b,i}(\xi_\rho)}{d\xi_\rho} \right|^{-1} \quad (2.61)$$

Aquí, el subíndice  $i$  indica el numero de la capa que se esta tratando, mientras que  $N_C$  muestra el numero total de capas que se esta considerando en el SAQD. La expresión (2.61) tiene la ventaja de proporcionar información de todas la capas que se consideren y sus respectivos resultados se muestran en la siguiente sección donde se hace un análisis detallado de estas curvas.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

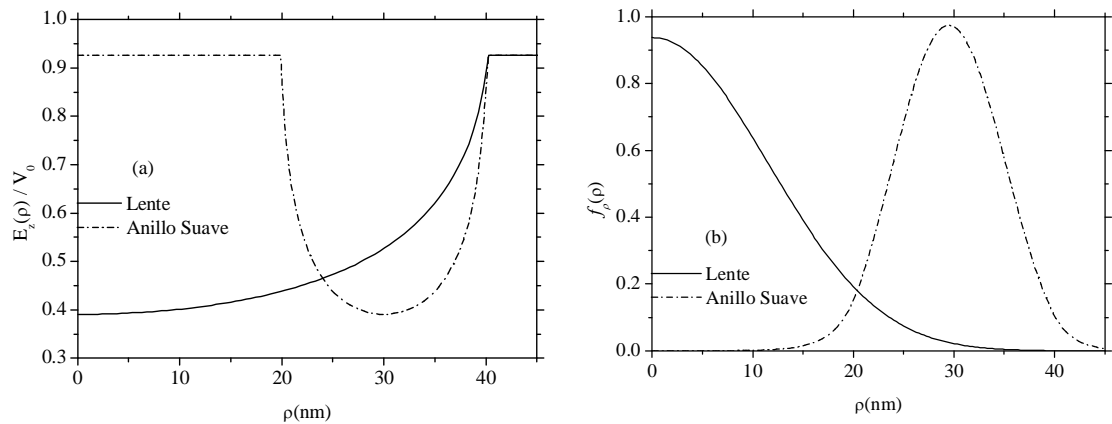
En la presente sección se presentan los resultados de cálculo obtenidos utilizando los métodos planteados en secciones anteriores. En la sección 3.1 se expone la estrategia general que se utiliza en esta tesis para analizar la densidad de estados, considerando como ejemplo, los puntos con bordes suaves, lente y anillo. En la sección 3.2 se discute el efecto tamaño sobre la densidad de estados. En la sección 3.3 se estudia el efecto de la forma y con esta fin se presenta un análisis comparativo de las densidades de estados en QDs con diferentes perfiles geométricos. Por ultimo, en la sección 3.4 se analiza el efecto de modificaciones en cadena de la morfología tales como Pirámide-Pirámide Truncada-Disco, Lente-Volcán-Anillo Suave sobre la densidad de los estados de donadoras.

#### 3.1 QDs CON PERFILES SUAVES, LENTES Y ANILLOS SUAVES

Como fue demostrado en la sección 2.2 en la A. A. la función de onda del electrón libre en el estado base se presenta en forma del producto de dos funciones, una que describe el movimiento en la dirección transversal al punto y otra en dirección radial. Como espesor del punto cuántico en la dirección de crecimiento del cristal  $d(\rho)$ , que depende de la distancia hasta el eje  $\rho$ , la energía correspondiente al primer movimiento está dada por la función  $E_z(\rho)$  que una vez encontrada después se utiliza como potencial efectivo para analizar el movimiento en la dirección radial y para encontrar la función de onda radial.

En Fig. 3.1 se muestra los resultados del cálculo para el potencial efectivo y función de onda radial correspondientes a QDs con perfiles de lentes y anillos suaves respectivamente. Se puede ver que la altura de la barrera disminuye

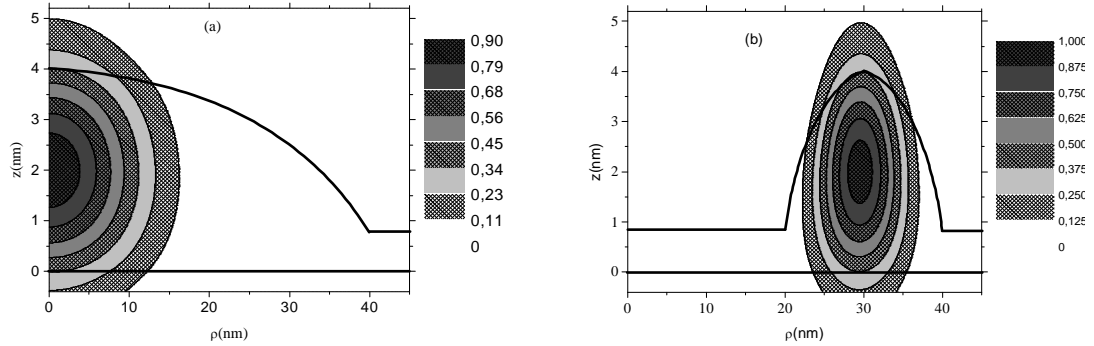
aproximadamente en un 47% debido en gran parte al confinamiento en dirección  $z$  y otra a la capa húmeda del QD que es la causante que el borde de la barrera no termine en uno.



**Fig. 3.1** Curvas (a) de potencial efectivo normalizada y (b) función de onda radial para QDs de tipo lente y anillo con bordes suaves.

A medida que la capa húmeda aumente, la altura de la barrera disminuirá cada vez mas, por el contrario si la capa húmeda disminuye el confinamiento será mayor y por lo tanto el borde superior sube y tiende a uno. Por otro lado, las funciones de onda en la Fig. 3.1 (b) son similares a reflejos especulativos de los potenciales efectivos. Se ve que para la lente la función de onda aumenta a medida que nos acercamos al centro del pozo mostrando un mayor confinamiento hacia el eje de simetría del QD, mientras que para el anillo suave sucede todo lo contrario, cerca del eje de simetría la función de onda disminuye rápidamente y lejos de este, ya a cercándose al pozo, la función de onda empieza aumentar hasta lograr su máximo en el eje central del pozo. Se puede apreciar mejor este fenómeno a través de los gráficos de las líneas de niveles para la densidad de probabilidad del electrón libre en el plano de simetría, para estos dos tipos de QDs presentados en la Fig. 3.2.

Aquí se muestran que la mayor probabilidad de encontrar el electrón libre se da, sobre el eje de simetría en la lente o en el centro de anillo.

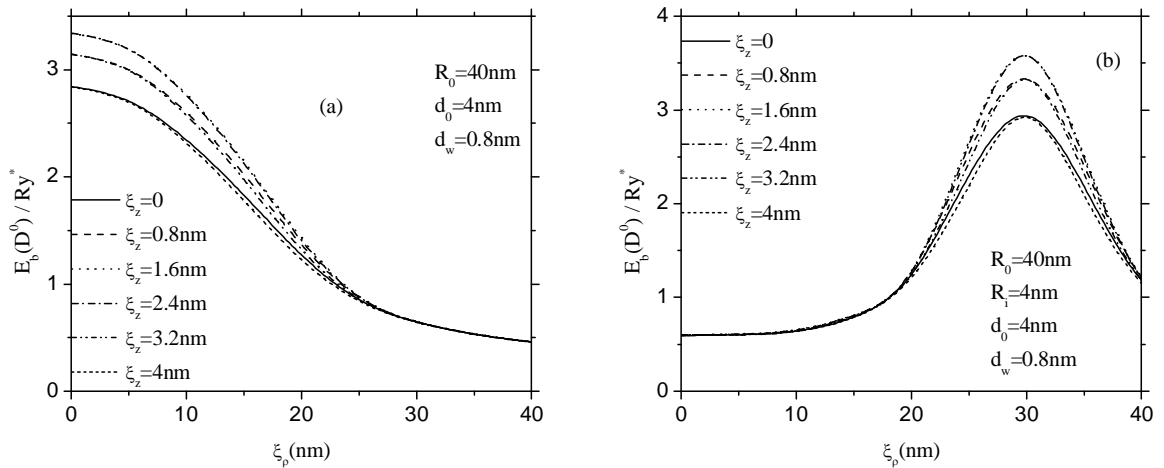


**Fig. 3.2** Densidad de probabilidad del electrón libre en el plano de simetría en QDs de tipo (a) lentes y (b) anillos suaves.

Por otro lado, los puntos donde la probabilidad de encontrar el electrón libre es mayor deben corresponder a las posiciones de las donadoras con mayor energía de enlace debido a la menor separación entre el electrón y donadora. Esta afirmación confirma los resultados presentados en Fig. 3.3, de energía de enlace de donadoras, localizados en 6 diferentes capas distanciadas en  $\xi_z$  desde la base, en función de la distancia desde su localización hasta eje de simetría. Las curvas con mayor energía de enlace corresponden a las capas donde la densidad de probabilidad de encontrar electrón libre es mas alta. Los cálculos se realizaron para una lente con  $R_0 = 40nm$ ,  $d_0 = 4nm$ ,  $d_w = 0.8nm$  y anillo con bordes suaves con  $R_0 = 40nm$ ,  $R_i = 20nm$ ,  $d_0 = 4nm$ ,  $d_w = 0.8nm$ .

Además, se puede ver que las curvas de enlace se agrupan en parejas con la característica en común de tener densidades electrónicas muy parecidas. El par de capas cuyas separaciones con la base son  $\xi_z = 1.6nm$  y  $\xi_z = 2.4nm$  presentan la mayor energía de enlace. La diferencia entre las energías de enlace en diferentes capas es mas significativa para valores pequeños de  $\xi_\rho$  en caso de

lentes y para valores de  $20\text{nm} < \xi_p < 40\text{nm}$  en caso de anillos, debido a que en estos lugares la interacción  $D^0 - e^-$  es mas fuerte que en los otros, ya que la densidad de probabilidad del electrón es mayor en las proximidades a estos. Se puede dar una explicación parecida para las otras parejas de curvas y llegar a la conclusión que las correspondientes a  $\xi_z = 0.8\text{nm}, 1.6\text{nm}$  son mayores, para los valores de  $\xi_p$  mencionados anteriormente, que las correspondientes a  $\xi_z = 0, 4\text{nm}$  simplemente por el hecho que para las primeras de estas la densidad electrónica es mayor que para las segundas y por ello la interacción  $D^0 - e^-$  es mas fuerte en las primeras.



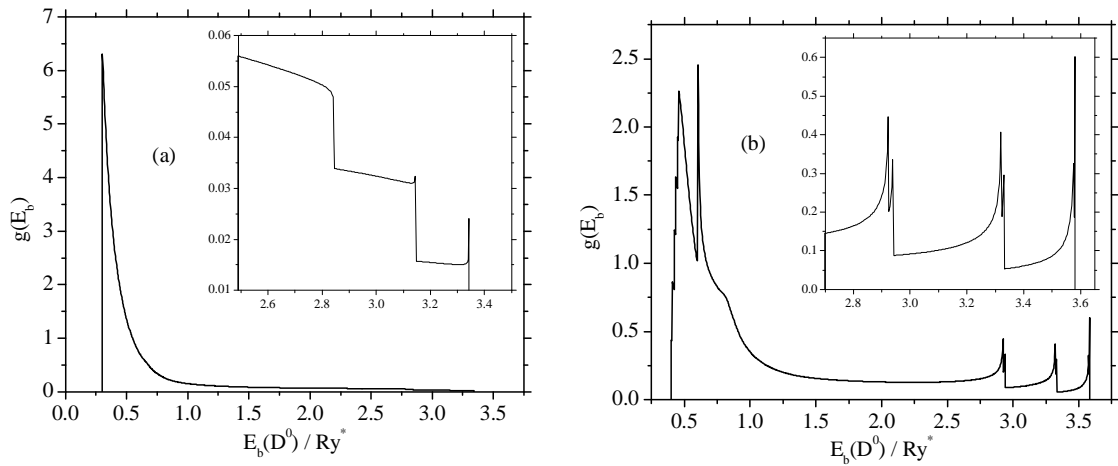
**Fig 3.3** Energía de enlace en función de la distancia hasta el eje para una  $D^0$  localizada en diferentes capas distanciadas en  $\xi_z$  desde la base de QDs tipo (a) Lentes y (b) anillos de borde suaves.

Por ultimo vemos que para posiciones lejanas de la donadora al eje de simetría del QD, la energía de enlace de las diferentes capas tienden al mismo valor en caso de lentes. En caso de los anillos sucede lo contrario, las energías de enlace tienden a un mismo valor para posiciones cercanas de la donadora al eje de simetría. Este fenómeno puede ser explicado por el hecho que para estas posiciones, en las diferentes capas, tanto en lentes como en anillos la interacción

$D^0 - e^-$  se hace débil provocando que la energía de enlace disminuya a un valor pequeño comparado con el máximo.

El comportamiento de las energías de enlace para las diferentes capas se ve reflejado también en las curvas de densidad de estados que se calculan utilizando la ecuación (2.61) y se muestran en Fig. 3.4. La curva de densidad de estados para  $D^0$  en lentes muestra un pico infrarrojo muy grande para pequeñas energías alrededor de  $0.4Ry^*$  correspondiente al mínimo que se encuentra en la curva de energía de enlace para posiciones lejanas de las donadoras, mientras que para energías grandes la cola ultra violeta de la densidad de estados es muy pequeña y del orden de  $10^{-2}$ . En el recuadro pequeño se aprecia mejor la cola ultravioleta que tiene forma de escalera, donde el peldaño mas alto corresponde a la pareja de curvas de energías mas bajas correspondientes a la primera y ultima capa, por eso aparece de primero y no posee ningún pico ya que no hay un máximo en las curvas de energía de enlace, mientras que para los otros dos parejas correspondientes a las demás capas, se alcanza a ver la existencia de picos muy pequeños al final de cada peldaño, el ultimo mas pronunciado que el segundo, esto implica la existencia del comienzo de máximos en las curva de energías, que no se aprecian muy bien, ya que son de poca duración y provocan singularidades en la ecuación (2.61) que al ser multiplicada con  $\xi_\rho = 0$  se eliminan dando como resultado un valor finito pero en este caso muy pequeño.

La mayoría de estados se dan aproximadamente en la región energética  $0.26Ry^* < E_b < 1.0Ry^*$ , para energías inferiores a este intervalo la densidad de estados es cero y para energías superiores a este intervalo la función  $g(E_b)$  decrece rápidamente hasta llegar a cero a tal punto que podrían despreciarse por ser muy pequeños comparados con el pico inicial.



**Fig. 3.4** Densidad de estados de  $D^0$  en función de la energía de enlace para QDs tipo (a) Lentes y (b) Anillos de borde suave. La inclusión muestra la parte del gráfico ampliada correspondiente a la cola ultravioleta de la curva.

En caso del anillo suave se observa una curva de densidad de estados mas interesante con mas singularidades tipo Van-Hove correspondientes a los máximos y mínimos que se pueden observar en la curva de energía de enlace. Por ejemplo, los tres picos que se encuentra en la cola ultravioleta corresponde a los máximos de las curvas de energía de enlace, para cada pareja de capas, si se observa el recuadro se ve que estos picos están conformados dos picos, por ello, en total hay 6 picos agrupados en parejas, correspondientes a las 6 capas del QD con las que se están trabajando. De la curva de energía de enlace para el anillo se espera que halla una singularidad cerca de  $0.70Ry^*$ , provocada por el mínimo que se forma para cada curva de energía cerca de este valor correspondientes a donadoras dentro del anillo cerca del eje y que se manifiesta por medio de un pico infrarrojo en la densidad de estados. Otro pico que vale la pena mencionar es aquel que se da para las energías mas pequeñas correspondientes a donadoras fuera del anillo y se ubica al lado del pico anteriormente discutido, es decir para  $\xi_\rho > 40nm$ . Para estas posiciones de la donadora las energías de cada capa no

tienden a un mismo valor, formando un clase de sierra en la parte izquierda de la densidad de estados.

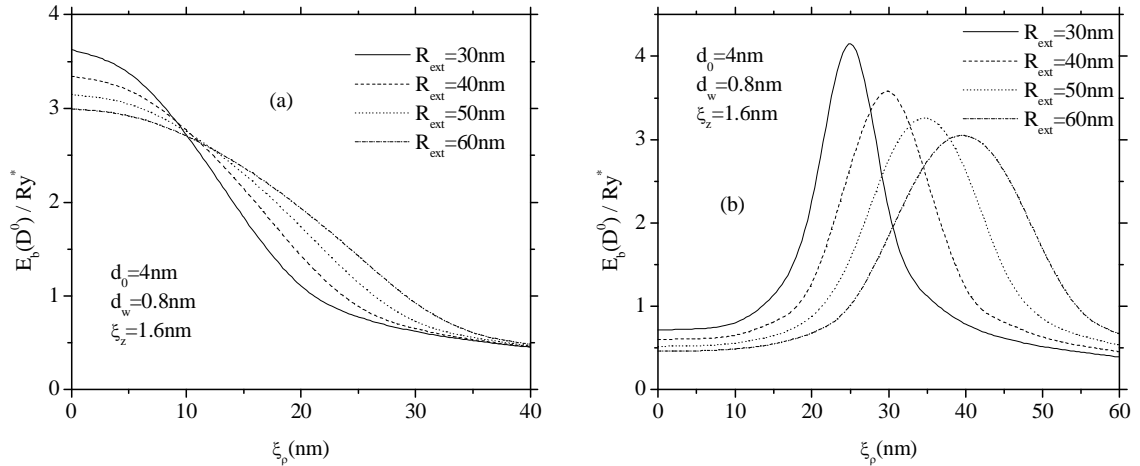
### **3.2 EFECTO DE TAMAÑOS DE QDs SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS PARA $D^0$**

Siguiendo con el estudio de los QDs tipo lente y anillo suave, en esta sección se considerará solo una capa del QD y se analizará como afectan las variaciones de las dimensiones a las curvas de densidad de estados de donadoras  $D^0$ , para esta capa. De estos resultados, se puede concluir de una vez que estas mismas variaciones de las densidades, debido al cambio de las dimensiones, se observarán en las de más capas, ya que las curvas de energía de enlace poseen el mismo comportamiento y orden en todas las capas. Según esto se puede esperar que la densidad promedio de todas las capas tenga el mismo comportamiento que una sola, de aquí el interés de solo analizar una capa. Para variar las dimensiones del QD es necesario que se varíen los siguientes parámetros que definen el modelo geométrico del punto cuántico:  $R_0$ , radio,  $d_0$ , altura y  $d_w$ , capa húmeda del QD. Los respectivos resultados correspondientes a estas variaciones serán mostrados en el orden anterior, como sigue a continuación.

#### **3.2.1 EFECTO DE VARIACIÓN DEL RADIO SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$**

Para ver el efecto que causa la variación del  $R_0$ , sobre la densidad de estados de  $D^0$ , se consideran 4 radios diferentes con los demás parámetros constantes, como lo son: altura,  $d_0 = 4nm$  y capa húmeda,  $d_w = 0.8nm$ . Los radios que se tendrán en cuenta se pueden ver en las curvas de energía de enlace,

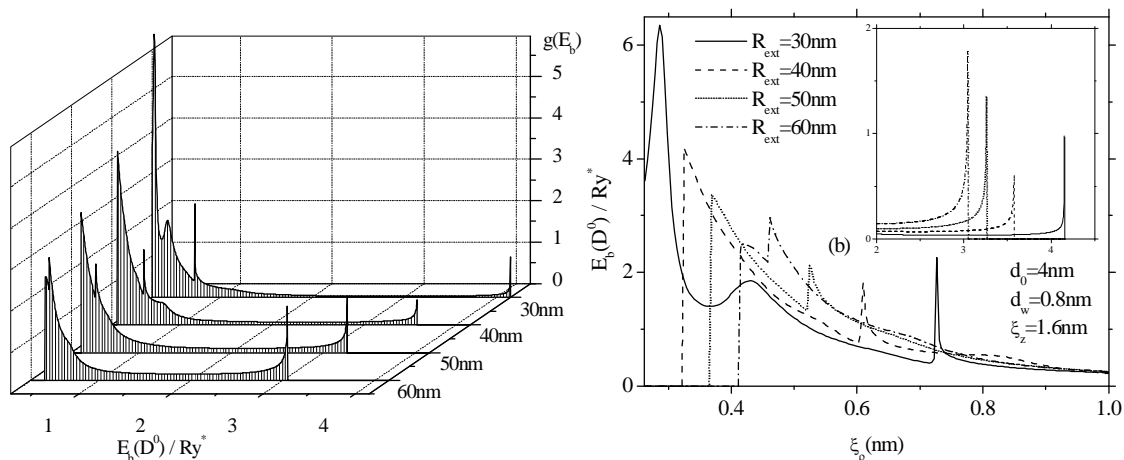
correspondientes a cada radio utilizado, de las cuales se hallarán las densidades de estados, y que se muestra la figura 3.4.



**Fig. 3.5** Energía de enlace de  $D^0$  en función de la distancia desde su posición hasta el eje de QDs con diferentes radios de base y perfiles de tipo (a) lente y (b) anillos de bordes suaves. Los parámetros que caracterizan el tamaño de QD y la posición de la donadora están señaladas en las figuras.

Como era de esperarse el orden de las curvas de energía de enlace es el mismo para cada QD. Se puede apreciar en ambas figuras que la curva con la máxima energía es la correspondiente a  $R_0 = 30\text{nm}$ , pero a la vez es la que decae más rápido y siempre se encuentra por debajo de las demás. En este mismo orden le siguen las curvas de  $R_0 = 40\text{nm}$ ,  $R_0 = 50\text{nm}$  y por último la curva con el menor máximo de energía, pero al mismo tiempo la que decae más lento correspondiente a  $R_0 = 60\text{nm}$ . Vale la pena recalcar que solo se está tratando una capa, ya que este mismo comportamiento ha de esperarse en las demás.

A partir de las energías de enlace mostradas en las Fig. 3.5, se obtiene las densidades de estados para la lente y anillo.



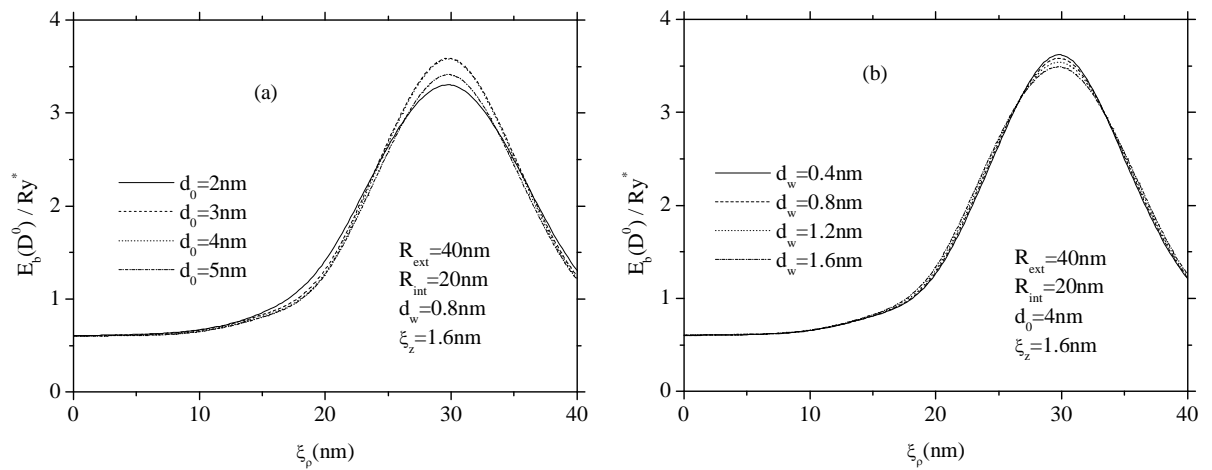
**Fig. 3.6** Densidad de estados para donadoras ubicadas en la capa con  $\xi_z = 1.6nm$ , en un anillo con bordes suaves.

Se puede esperar de la Fig. 3.5a que la densidad de estados para la  $D^0$  en la lente sea de la misma forma que la mostrada en la figura 3.4a debido al comportamiento de las curvas de energía. La diferencia radica en la intensidad de los picos infrarrojos, unos son mas intensos que otros, y si se observa las curvas de energía se puede concluir que el orden de mayor intensidad a menor es la correspondientes a las curvas de:  $R_0 = 30, 40, 50, 60nm$ .

La densidad de estados, en caso de anillos con diferentes radios es mas compleja y enriquecida, y sus resultados se muestran en la figura 3.6. Si comparamos la anterior grafica con su respectivas curvas de energía, vemos que el orden de las colas ultravioletas es el mismo que el de los máximos energéticos y sus alturas dependen de la contribución que hacen las curvas donde se encuentran estos máximos, por eso el pico ultravioleta mas grande pertenece a  $R_0 = 60nm$ . Ahora si analizamos zona infrarroja de las densidades de estados vemos que existe una evolución en los picos. Los picos extremos y los intermedios tienden a unirse y los hombritos que aparecen entre estos a desaparecer o cambiar de lugar, mostrando como resultado final el intercambio de los picos.

### 3.2.2 EFECTO DE VARIACIÓN DE ALTURAS DE PUNTO CUANTICO Y DE CAPA HUMEDA SOBRE LA DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$

Analizando solo el caso del anillo, y variando tanto la altura como la capa húmeda se obtienen las siguientes energías de enlace, mostradas en la Fig. 3.7 respectivamente.



**Fig. 3.7** Energía de enlace en función de la distancia desde la posición de  $D^0$  hasta el eje de simetría de anillos con bordes suaves para diferentes alturas de (a) QD y (b) capa húmeda.

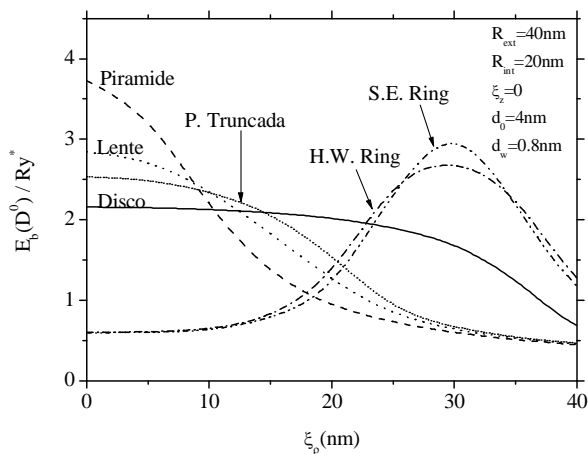
Como se menciono anteriormente el comportamiento de las energías se ve reflejado en las curvas de densidad de estados y viceversa. Por ello, de las anteriores figuras se puede concluir que las densidades de estados no tendrán mayor alteración bajo la variación de los parámetros mencionados en estas, y las densidades para estas curvas de energía son de la forma de mostrada en la figura 3.6a para el radio de  $40nm$ . El único efecto provocado, por estas variaciones, poco interesante es el corrimiento de los picos traseros que como ya se menciono corresponden a los máximos mostrados en las energías de enlace, mientras que en la lente se espera que varié la altura de los picos mas altos. Efectos parecidos

a estos son los mismos esperados en los demás QDs, en caso de anillos, para anillos y en caso de lentes para discos, pirámides, etc.

### **3.3 DENSIDADES DE ESTADOS DE $D^0$ PARA SAQDs CON DIFERENTES PERFILES**

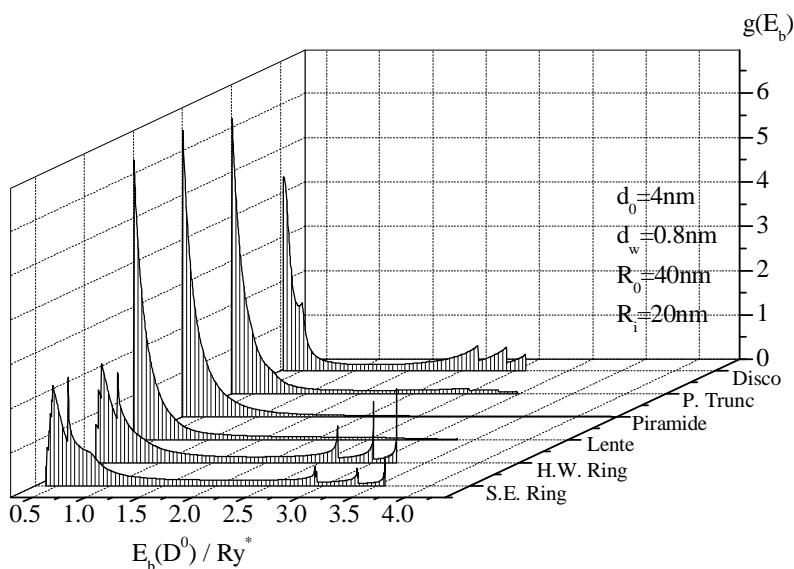
Hasta el momento solo se han estudiado dos topologías o formas diferentes de SAQDs, de las propuestas en la sección de Modelo Matemático, por eso, esta sección esta destinada a estudiar las restantes formas geométricas y comparar las densidades de estados entre ellas y ver como varían según la forma del QDs. Los SAQDs a analizar son los siguientes: Disco, Pirámide, Lente, Anillo Rectangular y Suave, los dos restantes Volcán y Pirámide truncada serán estudiados en la siguiente sección en las transiciones mencionadas al comienzo de este capítulo. Las curvas de energías de enlace para los diferente SAQDs ya fueron estudiadas y analizadas en [10], donde se hace una gran discusión de estas curvas y se muestran otros resultados interesantes. En este trabajo se recuperan estas graficas y a partir de estas solo interesa obtener las densidades de estados, por eso no se estudiará el por que de estas curvas, sino se seguirá adelante con el principal propósito de este trabajo que es hallar las densidades de estados.

Para dar comienzo con este estudio en la figura 3.8 se muestran las energía de enlace de los diferentes QDs estudiados cuando la  $D^0$  se encuentra ubicada en la base del QD, pero en las densidades de estados se tienen en cuenta las capas mostradas en la figura 3.3. Esto por que simplemente se quiere mostrar como son las energías y a partir de estas dar una idea de como pueden ser las densidades para las diferentes capas.



**Fig. 3.8** Energía de enlace en función de  $\xi_p$  para donadoras localizadas en la capa base de SAQDs con diferentes formas.

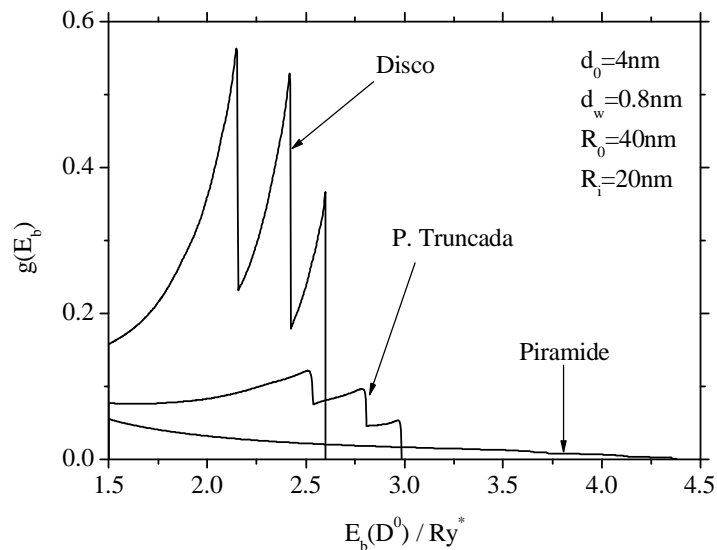
De acuerdo a las curvas de energía de enlace, las densidades de estados para los diferentes SAQDs que se encontraron a partir de estas, se muestran en las figura 3.9. Como era de esperarse las curvas de densidades para lente y pirámide son muy parecidas pero no iguales: Lo mismo sucede con las respectivas curvas de los anillos ya estudiados en las secciones anteriores.



**Fig 3.9** Densidad de estados para donadoras en SAQDs con diferentes geometrías.

La únicas curvas nuevas y diferentes a las demás son las correspondiente al disco y pirámide truncada. Si presta atención a la densidad de estados de la pirámide truncada se puede observar un comportamiento intermedio entre disco, que se manifiesta al final, y pirámide, que se ve al inicio de la curva. Esta pequeña transición de disco a pirámide se puede apreciar mejor en la figura 3.10 a continuación, en la que se muestra como es el cambio, de disco a pirámide pasando por pirámide truncada, de las colas traseras de las curvas. Como se puede ver los picos traseros de la densidad de estados mas pequeños que los del disco y mas altos que la cola final de la densidad de estados de la pirámide.

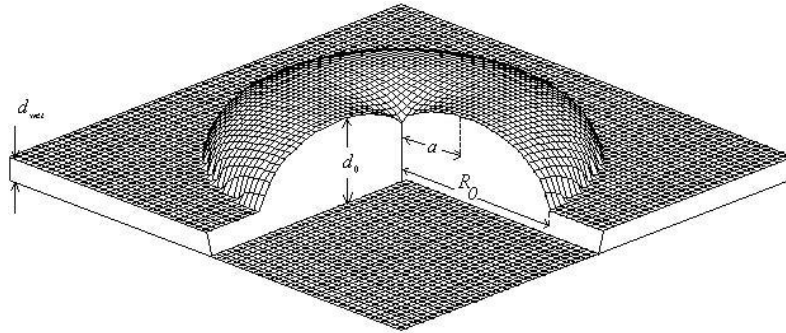
De este resultado y teniendo en cuenta los obtenidos en [12] y [13] se puede concluir que la densidad de estados es sensible a la geometría de los QDs.



**Fig. 3.10** Densidades de estados para donadoras en disco, pirámide y pirámide truncada.

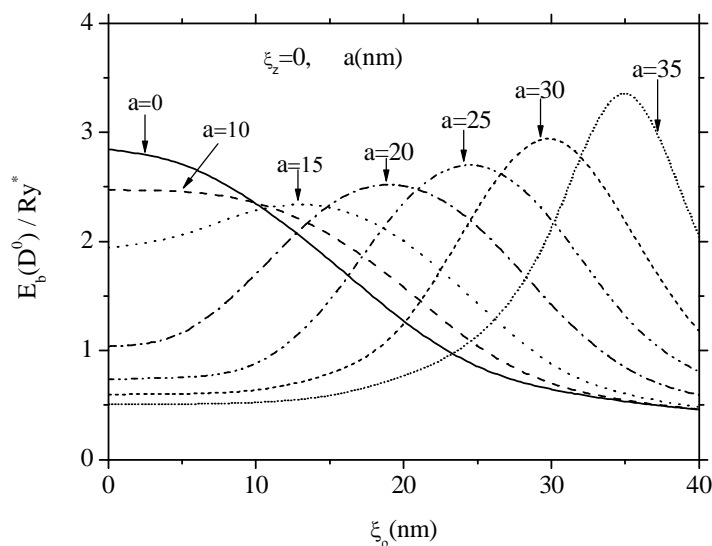
### 3.4 VARIACION LA DENSIDAD DE ESTADOS DE $D^0$ EN EL PROCESO DE MODIFICACIÓN DE MORFOLOGÍA EN SERIE LENTE-VOLCAN-ANILLO

En esta sección se estudiará el cambio de la densidad de estados a causa de la transición de lente a volcán y volcán a anillo suave. Pero antes se explicara el modelo de volcán que servirá para la explicación de nuestras curvas.



**Fig. 3.11.** Representación geométrica de un SAQD tipo volcán.

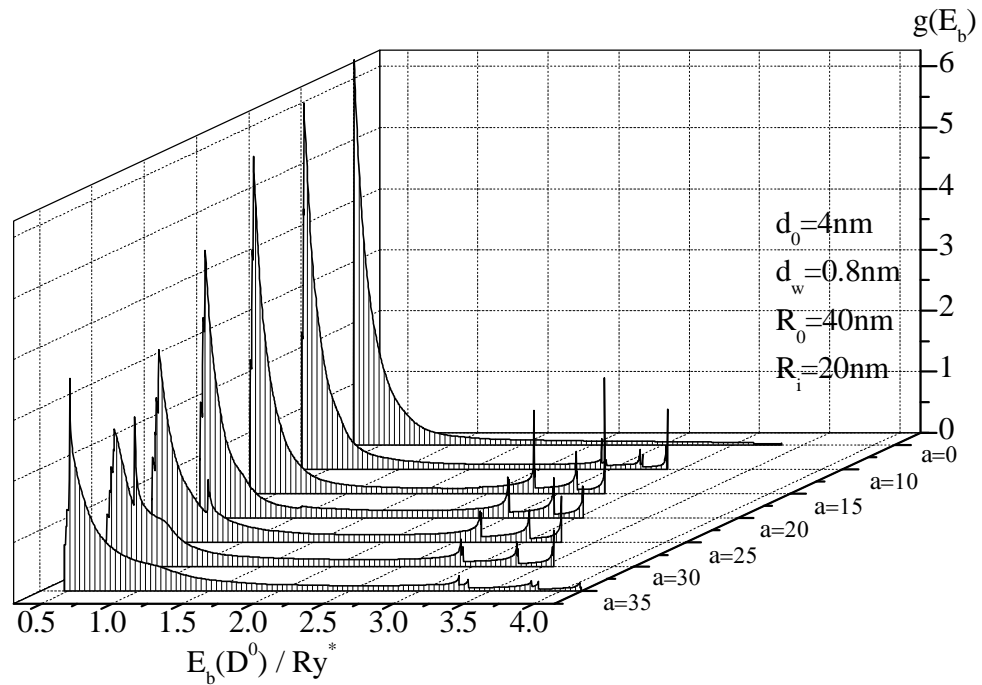
Se podría decir que el volcán es una forma de QD intermedia entre lente y anillo, que se obtiene a partir de la variación del parámetro  $a$ , radio de cráter, que se muestra en la figura 3.11, y se define como:  $a = \frac{R_0 + R_i}{2}$ , donde el radio interno se encuentra entre  $-R_0 \leq R_i \leq R_0$ . De esta definición se observa que cuando  $a = 0$ , el volcán pasa a ser una lente, mientras cuando  $a > 20nm$  pasa a ser anillos. Entonces se puede concluir que para  $0 < a \leq 20nm$  los QDs son volcanes. En la figura 3.11 se muestran las energías de enlace para distintos valores  $a$ , partiendo de cero hasta  $35nm$ . Estos valores se muestran con su respectiva curva de energía y como se esperaba se ve una transición de lente a anillo suave pasando por volcán. Las curvas de volcanes son las correspondientes a:  $a = 20, 15, 10nm$ . Si se observan al comienzo, se ve que se comportan como curvas de anillo hasta su punto máximo de hay en adelante adquieren un comportamiento parecido a las curvas de energía para una lente. Si comparamos esta figura con la figura 3.5b se observa un efecto contrario al provocado por la variación de  $R_0$ .



**Fig. 3.12.** Energía de enlace de una donadora en función de la distancia desde su posición hasta el eje de un punto cuántico cuya morfología se modifica desde lente ( $a = 0$ ) a anillo ( $a = 35$  nm) pasando por volcán

Se ve que cuando se aumenta  $R_0$  las energías tienden a engordarse y disminuir su máximo, en cambio este efecto se da al contrario cuando se aumenta  $R_i$ . El resto de curvas ya han sido estudiadas en las secciones anteriores por eso no se hace una descripción de ellas y es mas de interés ver como es el cambio de las densidades de estados, que se muestran en la figura 3.12, para estas curvas en la siguiente pagina. Falta aclarar que las energías de enlace mostradas corresponde a una sola capa que muestra el comportamiento de las demás, pero en la densidades de estados se tienen en cuneta el resto de capas señaladas al comienzo de este capitulo en la figura 3.3. El aumento de  $a$  en los anillos provoca que los picos traseros de las densidades disminuyan, que era de esperarse ya que las energía de enlace cada vez son mas agudas. Para el caso de de  $a = 0$  la densidad de estados es la misma que una lente, mientras que para el caso del volcán se observan dos resultados interesantes en sus respectivas densidades de estados. En las curvas para  $a = 20, 15, 10$  nm la densidad de estados tiene dos

comportamientos, el de lente a la izquierda y el de anillo a la derecha, es decir un pico muy grande a la izquierda y tres picos relativamente pequeños a la derecha, que posiblemente estos últimos están compuestos o formados por picos muy cercanos que se agrupan en parejas para formarlos.



**Fig. 3.13** Variación de las curvas de densidad de estados para donadoras neutras en el proceso de la modificación de morfología de punto cuántico desde lente ( $a = 0$ ) a anillo ( $a = 35$  nm) pasando por volcán.

## 4. CONCLUSIONES

En conclusión, presentamos algunos de los resultados mas importantes de esta tesis:

- Se presento un método simple para calcular la energía del estado base de un electrón y de una donadora neutra confinados en un punto cuántico auto-ensamblado. En el primer caso se utilizó el Método de Aproximación Adiabática y en el segundo el Método de Dimensión Fractal. El método se aplicó para puntos cuánticos auto-ensamblados con diferentes perfiles, tales como: Disco, Pirámide, Pirámide Truncada, Lente, Volcán, Anillos de bordes rectangular y suave.
- Se calcularon las densidades de estados para donadoras neutras, en puntos cuánticos auto-ensamblados, a partir de un tratamiento numérico de las curvas de energía de enlace en función del radio de base. Se analizaron los efectos de tamaño y de morfología de los QDs sobre las curvas de densidad de estados. Particularmente, se estudió como las modificaciones de morfología en cadena tales como Pirámide-Pirámide Truncada-Disco, Lente-Volcán-Anillo Suave pudieron afectar las curvas de la densidad de los estados de donadoras.
- Se mostró que los rasgos mas importantes de las curvas de densidades de estados de donadoras neutras, tales como la posición y altura de los picos, presencia o ausencia de los hombros, la forma de las colas infrarroja y ultravioleta, etc. son sensibles al tamaño y morfología de punto cuántico. De esta manera, se podría concluir que existe una estrecha relación entre estas características de puntos cuánticos y la densidad de estados.

- A pesar de ser un método simple de cálculo, la importancia de estos resultados se manifiesta en la aplicabilidad posible que estos pudieran tener. Supongamos que la densidad de estados, para donadoras neutras en una superred de puntos cuánticos auto-ensamblados, ha sido encontrada por un medio experimental. Entonces comparando el resultado experimental con el teórico obtenido en esta tesis se podría saber que clase de QDs conforman la heterojuntura, sin recurrir a otra técnica para poder observarlos.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wójs, *Quantum +Dots* (Springer, Berlin, 1997).
- [2] G. Timp, *Nanotechnology* (Springer-Verlag, New York, 1999).
- [3] S. Fafard, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2707 (2000).
- [4] G. Bastard, *Phys. Rev. B.* **24**, 4714 (1981).
- [5] S.T. Pérez-Merchancano and G.E. Marques, *Phys. Stat. Sol. (b)* **212**, 375 (199).
- [6] J.L. Zhu, J.H. Zhao and J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **50**, 1832 (1994)
- [7] T. Pang and S.G. Louie, *phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990).
- [8] I.D. Mikhailov, F.J. Betancur, R. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, *Phys. Stat. Sol. (b)* **234**, 590(2002); I.D. Mikhailov, F.J. Betancur, R. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, *Phys. Rev. B* **67**, 115317 (2003).
- [9] J.L. Zhu, J.J. Xiong and B.L. Gu, *Phys. Rev. B* **41**, 6001 (1990).
- [10] I.D. Mikhailov, J.H. Marín, and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 1636 (2005).
- [11] J. Sierra-Ortega, I.D. Mikhailov and F.J. Betancur, *Physica B* **348**, 66 (2004).
- [12] F. J. Ribeiro and A. Latge, *Phys. Rev.*, **B 50**, 4913 (1994).
- [13] F.J. Betancur, J. Sierra-Ortega, R.A. Escorcía, J.D. González, and I.D. Mikhailov, *Physica E* **23**, 102 (2004).
- [14] J. Stangl, V. Holy and G. Bauer, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 725 (2004).
- [15] K.I. Janssens, F.M. Peeters and V.A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **63**, 205311 (2001).
- [16] I. Vurgaftman, J.R. Meyer and L.R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5816 (2001).
- [17] G. Arfken, *Matemathical Methods for Physicists* (Academic Press, 1985).