EFECTOS DE UN HAZ LASER DE ALTA INTENSIDAD SOBRE LA ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA DONADORA D^0 EN UN POZO CUÁNTICO EMBEBIDO DENTRO DE UN HILO CUÁNTICO DE $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$

ARMANDO CRISTIAN CAMILO CASTELLANOS JEREZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2010

EFECTOS DE UN HAZ LASER DE ALTA INTENSIDAD SOBRE LA ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA DONADORA D^0 EN UN POZO CUÁNTICO EMBEBIDO DENTRO DE UN HILO CUÁNTICO DE $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$

ARMANDO CRISTIAN CAMILO CASTELLANOS JEREZ

Trabajo de grado como requisito para optar al título de Físico

Director

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2010

Dedico este trabajo a:

Mi madre LUCILA JEREZ CASTELLANOS

a mis hermanos, hermanas y todos mis familiares

quienes me apoyaron todo el tiempo.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a todas las personas que de alguna manera contribuyeron de alguna manera su apoyo a finalizar con éxito este proyecto, a mi mamá Lucila Jerez, hermanos, hermanas, a mi tía Rosmira y demás familiares.

A la escuela de física de la UIS, por todo sus aportes conmigo en estos cinco años que compartí con ellos.

Al profesor Ilia Davidovich Milkhailov, por su enorme colaboración y tutorías incondicionales para el desarrollo del proyecto, además de sus valiosos consejos y recomendaciones.

A mi tutor, el profesor Carlos Leonardo Beltrán por su ayuda, recomendaciones, y por confiar en mí, este proyecto investigativo.

A los profesores William Gutiérrez y Rafael Torres, quienes con su profesionalismo y calidad humana, son un ejemplo a seguir.

NOTACIÓN

En el presente trabajo se realizó la adimensionalidad de las unidades efectivas para facilitar el desarrollo de la programación, las unidades de longitud que se utilizó fue el nanómetro (nm) y la unidad de energía el mili electronvoltio (meV).

A continuación se muestra una lista de las notaciones más importantes y recurrentes del presente trabajo:

AME	Aproximación de masa efectiva
AA	Aproximación adiabática
m^*	Masa efectiva del electrón
D_0	Impureza donadora neutra
$\vec{p}$	Momentum lineal
a_0^*	Radio de Bohr efectivo
Ry^*	Rydberg efectivo
$\vec{A}$	Vector potencial magnético
V_{Conf}	Potencial de confinamiento geométrico
E_b	Energía de Enlace
EM	Electromagnético(a)

TABLA DE CONTENIDO

Introducción ……..……..……..……13

1. Antecedentes……16

2. Generalidades ……..……..……..……..19

2.1 Confinamiento cuántico en nanoestructuras semiconductoras ……....19

2.2 Impurezas ……..……..…23

2.3 Aproximación de masa efectiva……..……..25

3. Fundamentos teóricos ……...30

3.1 Aproximación Adiabática (AA) ……..……30

3.2 Método Barrido Trigonométrico ……..……..31

3.3 Vestimento del potencial de confinamiento geométrico……...32

4. Modelo teórico …..……..……...37

4.1 Ecuación de Schrödinger para el sistema ……...……39

4.2 Aplicación de los barridos trigonométricos para el sistema ión-electrón ……....41

4.2.1 Barrido en dirección ρ para el ión de la impureza donadora D^0 ……..……..…41

4.2.2 Barrido en dirección z para el ión de la impureza donadora D^0 ……..……44

4.2.3 Barrido en dirección ρ para el electrón ……..…45

4.2.4 Barrido en dirección z para el electrón ……..…46

5. Análisis de resultados ……..…47

5.1 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del parámetro α_0 ……..…47

5.2 Energía de enlace de una impureza D^0 en función de su posición dentro del pozo ..……..……..…49

5.3 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del radio del hilo……51

5.4 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del parámetro α_0 para distintas concentraciones de aluminio ……..……..……..……..…53

Conclusiones ……..……...……...55

Referencias ……...……..…57

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Densidad de estados ……..……20

Figura 2 Energía de gap vs constante de red para algunos semiconductores…….……..22

Figura 3 Modelo de una impureza donadora neutra..……..…....24

Figura 4 Estructura de bandas del GaAs …….….25

Figura 5 Vestimiento del potencial de confinamiento para α_0 =25 $\mathring{A}$ y α_0 =50 $\mathring{A}$ …… ……....35

Figura 6 Vestimiento del potencial de confinamiento para α_0 =100 $\mathring{A}$ y α_0 =150 $\mathring{A}$ …… ……...36

Figura 7 Modelo de impureza donadora dentro del pozo embebido en un hilo cuántico…….....37

Figura 8 Pozo cuántico embebido en un hilo cuántico……..……...……38

Figura 9a E_b vs α_0 para distintos radios del hilo cuántico para L=10nm…….…… …….....47

Figura 9b E_b vs α_0 para distintos radios del hilo para L=20nm.….……..…..48

Figura 10 E_b vs z_i para distintos α_0 …….....50

Figura 11a E_b vs R para distintos α_0 para L=10nm …….....…..51

Figura 11b E_b vs R para distintos α_0 para L=20nm…….....52

Figura 12 E_b vs R para distintos α_0 , para distintas concentraciones de Al…....……..53

TÍTULO: EFECTOS DE UN HAZ LASER DE ALTA INTENSIDAD SOBRE LA ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA DONADORA D^0 EN UN POZO CUÁNTICO EMBEBIDO DENTRO DE UN HILO CUÁNTICO DE $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ *.

AUTOR: Castellanos Jerez, Armando Cristian Camilo**

PALABRAS CLAVES: Impureza donadora, energía de enlace, hilo cuántico.

RESUMEN: En este trabajo obtenemos los valores de la energía de enlace de una impureza donadora neutra (D^0), localizada en el centro de un pozo cuántico (QW) de GaAl embebido en un hilo cuántico (QWW) de (GaAl)As de longitud infinita y en presencia de un haz laser de alta intensidad y frecuencia. El trabajo se desarrollo en el marco de la aproximación de masa efectiva (AME) y la aproximación adiabática (AA), como algo adicional a trabajos realizados recientemente, se tiene en cuenta el vestimiento del pozo de potencial y el vestimiento del potencial coulombiano; los cálculos de las energías en la dirección radial y axial de cada partícula se realizaron utilizando un doble método de barrido trigonométrico, la ayuda de un método numérico y se desarrollo un programa computacional para la determinación de los respectivos cálculos. Mediante esta técnica se obtuvieron los valores de la energía de enlace en función del radio del hilo, de la posición de la impureza en el pozo y del parámetro que contiene la intensidad del haz laser, además de esto se calcula la energía de enlace en función de este parámetro para diferentes concentraciones de aluminio en la hetero-estructura, la concentración de aluminio nos determina la altura del pozo de potencial. Se encontró un nuevo comportamiento que le ocurre a la energía de enlace, dependiendo de la altura de las barreras del pozo cuántico.

* Trabajo de grado

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

TITLE: EFECCTS OF AN INTENSE LASER FIELD ON THE BINDING ENERGY OF A DONOR IMPURITY D^0 IN A QUATUM WELL EMBEDDED IN A QUANTUM WELL WIRE OF $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$.*

AUTHORS: Castellanos Jerez, Armando Cristian Camilo**

KEY WORDS: Donor impurity, binding energy, quantum wire.

Abstract: In this work we get values from the binding energy of a neuter donor impurity (D^0), located in the centre of a GaAS quantum well (QW) embedded in (GaAl)As cylindrical quantum well wire (QWW) of infinite length, under the action of an intense, high-frequency laser field. This work development effective mass's frame (AME) and the adiabatic approximation (AA), as a supplement to recent work, takes into account dresses the confinement potential well and dresses of the Coulomb potential by making use of a nonperturbative theory, the numerical calculations of the values of energy in a radial and axial address for all particles used to develop a double trigonometric sweep the help of a numerical method an developed a computer program for determining the respective calculations. By means of this technique obtained the values from binding energy as a function of the wire radius, impurity position inside the quantum well and the parameter that contains the laser fields intensity, also this is the binding energy calculated based in this parameter for different aluminum concentration in the hetero-structure and of intensity of the laser field. We found a new behavior that happens to the binding energy, depending on the height of the barriers of the quantum well.

* Senior thesis Project.

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

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas se ha visto gran interés por el estudio de estructuras de semiconductoras de baja dimensionalidad: pozos (QWs), hilos (QWWs), puntos cuánticos (QDs) y superredes (SLs) de pozos en nanohilos [1,2]. Especialmente se han estudiado teórica y experimentalmente los cambios en las propiedades físicas de dichas estructuras semiconductoras bajo la influencia de perturbaciones externas tales como los campos eléctricos, magnéticos, de láseres y presiones [1], con la finalidad de manipular los diferentes estados electrónicos, de las mismas, para la creación de dispositivos electrónicos a escala nanométrica los cuales presentan propiedades muy importantes en la física, la ingeniería, la óptica y la electrónica. Además de esto en las últimas décadas se ha despertado el interés en las estructuras basadas en las combinaciones de elementos de los grupos III y V de la tabla periódica, como el Al, Ga, In del grupo III y As, Sb, N del grupo V; formando heteroestructuras del tipo $GaAs$, InP, $GaSb$, $InAs$, entre otros; motivados por muchas aplicaciones en la microelectrónica, por sus propiedades optoelectrónicas [3], entre ellas la de fotoluminiscencia asociada a impurezas y excitones [2,4], con el fin de obtener una nueva generación en dispositivos destinado al desarrollo de computadoras más veloces, detectores más sensibles, celdas fotovoltaicas de mayor eficiencia, nuevos sistemas de comunicación, etc.

Al trabajar con estructuras de baja dimensionalidad, o cuando al menos una de las tres dimensiones de una estructura semiconductora es comparable a la longitud de onda de De Broglie para el movimiento de los electrones en su interior, las propiedades físicas del semiconductor muestran efectos cuánticos, como la cuantización de la resistividad entre otros, que pueden ser estudiados para posteriormente modificar sus propiedades [2].

El interés que se despertó, en cuanto al estudio y fabricación de estos dispositivos, fue debido a la posibilidad de controlar la dinámica de los electrones en superficies muy finas o interfaces entre capas atómicas; y que J. Bardeen y su grupo concibió, e inicio su desarrollo, a través de la rápida aplicación del transistor, este entre muchos otros logros alcanzados a sabiendas que se tiene un control estricto de la composición química, la estructura y la geometría de estos dispositivos [5], para la fabricación de tales dispositivos y heteroestructuras a escala nanométrica, con propiedades ópticas y de conducción muy diferentes a la de los semiconductores en bloque [6], se han desarrollado técnicas como la Epitaxia por Haces Moleculares MBE, la litografía por haces de electrones, entre otras.

Una de las propiedades de estas heteroestructuras semiconductoras dista de otros materiales o compuestos naturales, están determinadas, en su mayoría, por la naturaleza de sus estados electrónicos, fonónicos, excitónicos y de impurezas de estos sistemas nanométricos.

Uno de los parámetros más importantes en los sistemas de los semiconductores y que aparece en la estructura de bandas, es la brecha de energía prohibida, de modo tal que cuando un electrón de la banda de valencia supera dicha brecha, debido a que obtiene una energía suficiente, es promovido a la banda de conducción y puede moverse por el material [2]. Los QWs poseen la estructura en forma de emparedado, en el cual una capa de un semiconductor A (por ejemplo, GaAs) está totalmente rodeada de otro semiconductor B (por ejemplo, (GaAs)Al), cuya brecha de energía es mayor que la del semiconductor A. Por este motivo, en las junturas entre los dos tipos de semiconductores, existen saltos de energía, tanto en el piso de la banda de conducción como en el techo de la banda de valencia, que da lugar al confinamiento de los portadores de carga en las correspondientes bandas; gracias a las propiedades de estos materiales, es posible encontrar muchas aplicaciones que involucran sistemas de confinamiento cuántico en dispositivos electrónicos tales como los transistores de alta movilidad, el diodo emisor de luz y los láseres semiconductores [7].

Teniendo construida la barrera de potencial en nuestro arreglo de semiconductores, dopamos su estructura cristalina introduciendo una impureza, en nuestro caso una de tipo donadora. Debido a la dimensión del confinamiento geométrico que experimentan los portadores de carga, nuestro sistema puede ser modelado utilizando la mecánica cuántica para una partícula tipo hidrogenoide, para calcular la energía de enlace de esta impureza.

1

ANTECEDENTES

A nivel general, el primero en realizar cálculos sobre la energía de enlace de una impureza tipo hidrogenoide, fue G. Bastard, a inicios de la década de los 80 [8]; sobre un arreglo de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, con la impureza centrada en un pozo cuántico de barrera infinita, se han realizado diversos trabajos para diferentes tipos de confinamiento teniendo en cuenta parámetros tales como la concentración de aluminio, la masa reducida y en algunos casos la posición de la impureza [10], y comparando estos resultados teóricos con la parte experimental; Bryant [11] analizó la energía de enlace para una impureza dentro de esta configuración de materiales con geometría cilíndrica. Este tipo de semiconductor ha sido uno de los más investigados y publicaciones tiene, debido a sus interesantes propiedades al formar la heteroestructura.

Zhen – Yan Deng et. Al trabajaron en el CCAST la misma configuración de semiconductor, para impurezas donadoras y aceptoras dentro de un punto cuántico esférico, en el análisis de los efectos de la variación espacial por apantallamiento dieléctrico[12], en el cual concluyeron que cuando esta variación es considerable, la energía de enlace de la impureza se incrementa notablemente. M. Shanti y A. Jhon Peter quienes actualmente han publicado estudios de este semiconductor con impurezas, en presencia de un haz laser intenso [13], Qu Fanyao et. Al [27] en 1996 calcularon la energía de enlace de una impureza donadora dentro de un hilo cuántico de longitud infinita en presencia de un haz laser de alta intensidad y E. Nisculescu et. Al [28] en 2008 realizaron un estudio, calculando la densidad de estados de energía de una impureza donadora dentro de un pozo cuántico bajo efectos de un haz laser intenso, teniendo encuentra el

vestimiento del pozo de potencial y el vestimiento del potencial coulombiano; todos ellos encontraron que la energía de enlace de una impureza donadora en un pozo cuántico y un hilo cuántico, se incrementa al disminuir el radio y decrece al aumentar el valor de la amplitud del haz laser.

Bajo la perturbación de un campo eléctrico externo en una impureza donadora confinada en un hilo cuántico, N. Porras Montenegro [14] calculo la energía de enlace de la impureza donadora, en los cuales observaron la dependencia de la energía al aumentar el valor del campo eléctrico y la deformación del pozo cuantico, entre muchas otras publicaciones que él, como cabeza del grupo de Física Teórica del Estado Solido de la Universidad del Valle ha realizado en revistas de Colombia, Brasil, Europa y Estados Unidos.

Localmente, el Grupo de Física Computacional en Materia Condensada (FICOMACO), perteneciente a la Universidad Industrial de Santander, ha realizado diversos trabajos de análisis de energías de enlace de impurezas y excitones, utilizando el método de dimensión fractal desarrollado dentro del grupo, y el método de barrido trigonométrico, dentro de la aproximación de masa efectiva (AME) en estructuras de baja dimensionalidad. Galván [15] estudió un sistemas de pocas partículas en nanohilos y superredes de nanohilos, allí analizó la energía del estado base en función de la posición de la impureza donadora en la heteroestructura, Gómez [16] estudió el comportamiento de una impureza en discos cuánticos embebidos en hilos cuánticos de longitud infinita donde se observó el incremento de la energía de enlace al disminuir las dimensiones y la diferencia de su valor para el confinamiento finito e infinito.

Adicionalmente el profesor Ilia Milkhailov integrante de nuestro grupo ha realizado publicaciones internacionales, referentes a los estados electrónicos de impurezas donadoras en diferentes heteroestructuras como hilos [17] y puntos cuánticos esféricos [18].

Para estos cálculos de los estados electrónicos de impurezas dentro de esta configuración de heteroestructura y en otros semiconductores ya mencionados,

se han utilizando métodos variacionales, métodos perturbativos y el método de Montecarlo, entre otros métodos.

2

GENERALIDADES

2.1 Confinamiento cuántico en nanoestructuras semiconductoras

Al analizar estructuras de dimensiones comparables con la longitud de onda de De Broglie, en al menos una de sus dimensiones, los efectos cuánticos en estas estructuras empiezan a ser notables; en semiconductores, considerando la masa efectiva de los portadores, los efectos cuánticos podrían observarse para espesores del orden de 10 a 1000 veces la constante de red de estos materiales [19].

Una forma para construir sistemas de confinamiento cuántico, es crear pozos cuánticos; que podemos construirlos al combinar dos semiconductores de gap directo diferente; si el ancho del pozo es lo suficientemente pequeña, podemos conseguir un confinamiento cuántico por tamaño, y es posible realizar cálculos de los estados electrónicos de distintas partículas confinadas dentro del pozo, a través de la ecuación de Schrödinger unidimensional. Cuando el pozo de potencial es de más de una dimensión, como las estructuras cuánticas tipo hilos o puntos, si se maneja simetría esférica o cilíndrica, es posible resolver este problema mediante el uso de la ecuación de Schrödinger, aunque en algunos casos con un poco de complicaciones.

Dependiendo del grado de confinamiento que experimenten los portadores, podemos conseguir tres tipos de estructuras estudiadas ampliamente. Si el

confinamiento es solo en una dirección, tendremos una estructura bidimensional, llamada pozo cuántico; confinando en dos direcciones obtenemos una estructura unidimensional, hilo cuántico y si el confinamiento es en las tres dimensiones, tenemos un punto cuántico. Debido al grado de confinamiento, existen grandes diferencias en la densidad de estados (Fig. 1). Visto desde la parte tecnológica y demostrado por diversos estudios de sus propiedades ópticas y de transporte, de tales sistemas, se ha comprobado que su eficiencia cuántica y ganancia espectral son superiores a las estructuras comunes de calidad comparable [19].

Densidad de estados en función de la energía para heteroestructuras de distintas dimensiones. (a) Estructura tridimensional cuántica, (b) pozo cuántico, (c) hilo cuántico y (d) punto cuántico.

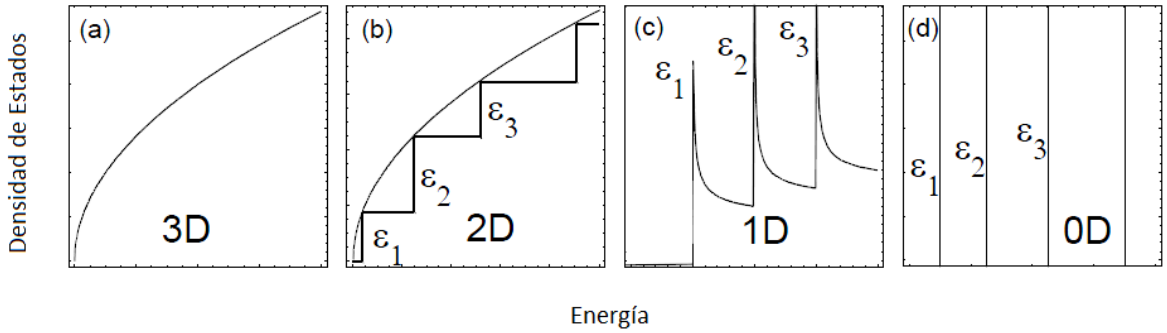


Figura 1 [20].

Teniendo un espectro cuasi-discreto de energías de los portadores para el caso de los hilos y los puntos, se espera que la anchura de la línea de transmisión óptica sea pequeña; al comparar esto con su parte experimental se tiene que la anchura total a media altura (FWHM) es menor de 100μeV [19], lo que nos garantiza las predicciones teóricas.

Estos sistemas nanométricos se han podido fabricar gracias al desarrollo acelerado de técnicas para el crecimiento de este tipo de estructuras en semiconductores [20], obtenidas mediante deposición sucesiva de capas finísimas alternadas de dos semiconductores. Gracias a procesos tecnológicos como la

Epitaxia por Haces Moleculares (Molecular Beam Epitaxy MBE), la deposición química de vapores metal-orgánicos (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition MOCVD), pulverización catódica, la litografía por haces de electrones [3] entre otras técnicas, ha sido posible la fabricación de heteroestructuras más complejas y de mayor calidad, reduciendo al mínimo las tensiones y defectos no deseados.

El crecimiento de estas estructuras semiconductoras que nos interesan, inicialmente se desarrollo a gran escala a través de la técnica de la litografía por haces de electrones; con la cual se desarrollaron dispositivos basados en nanoestructuras como los hilos y los puntos cuánticos, fabricados de forma fácil y con considerable calidad; y a medida que pasaba el tiempo se depuró esta técnica perfeccionando los respectivos procesos de fabricación; pero esta técnica es en cierto grado débil, al ser vulnerable al ataque químico posterior al proceso de grabado, lo cual le afecta, deteriorando notablemente las propiedades ópticas de la estructura. Además de esto resultaba costoso construir una gran densidad de puntos cuánticos uniformes con las técnicas litográficas [20].

Por otra parte MBE es una técnica de evaporación en ultra-alto vacio (UHV), en la que se evaporan los compuestos deseados en células (células de Knudsen) de evaporación en forma de haces moleculares en dirección a un substrato con una superficie plana, sobre la que se incorporan epitaxialmente a temperaturas adecuadas. Los flujos moleculares pueden ser interrumpidos rápidamente mediante dispositivos de cierre, con lo que se obtiene un excelente control de la cantidad de las especies depositadas y así podemos obtener heteroestructuras con cambios de composición a nivel de la monocapa atómica; para el caso de crecimiento de semiconductores, los substratos suelen ser monocristales pulidos, cortados en direcciones cristalográficas adecuadas [3,19].

Fue una inquietud en sus inicios cómo elegir los elementos o compuestos para construir las heteroestructuras, que hoy en día es relativamente fácil crearlas con distintas combinaciones entre los grupos III/V y II/VI, por las técnicas ya mencionadas, especialmente el crecimiento Epitaxial. En el sistema heteroepitaxial existe un desajuste entre el parámetro de red entre la capa epitaxial y el

substrato; para los sistemas como el (GaAs)In es del 7,2%, mientras que para él (GaAs)Al es del 0,1%; en la industria tecnológica para muchas aplicaciones se busca que este parámetro sea nulo o en su defecto mínimo.

En este trabajo manejamos la configuración (GaAs)Al debido a lo anteriormente mencionado, a sus propiedades y aplicaciones; de la *figura 2* nos podemos dar cuenta del mínimo en el gap y que la constante de red para nuestra configuración es casi la misma, para el GaAs de 0,56535 nm con una incertidumbre de $1X10^{-5}$ nm, mientras que para el AlAs se tiene un valor de 0,56622 nm; dejándonos un excelente ajuste en el acoplamiento del átomo aluminio[3], siendo una excelente elección trabajar con este semiconductor.

Esquema general para confrontar la constante de red de algunos semiconductores y su energía de Gap

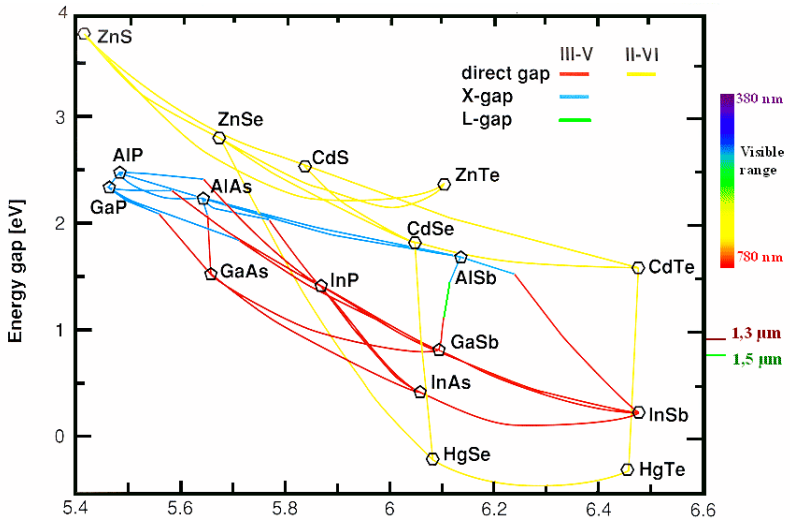


Figura 2. [26].

Ya elegida la configuración de materiales que vamos a utilizar para crear el sistema de confinamiento cuántico, podemos introducir una impureza en el material confinado, garantizamos portadores de carga en un estado semi-libre. Como el portador de carga no se encuentra totalmente libre por que el núcleo de la impureza, queda descompensado electrónicamente y atrae a la partícula

donada; teniendo en cuenta esta interacción podemos calcular la energía de enlace del electrón con el ión dentro del pozo cuántico.

2.2 Impurezas

En la física del estado sólido, es muy común encontrarnos con el término “estados de impurezas”, que se refiere a estados electrónicos localizados que pueden tener lugar en un cristal debido a:

- La presencia en el cristal de uno o varios átomos diferentes (impurezas substitucionales o intersticiales).
- La ausencia de uno o más átomos del cristal (vacancias).
- El desplazamiento de uno o más átomos del cristal de sus posiciones de equilibrio (intersticios, dislocaciones).
- El agotamiento del medio cristalino en su frontera con otros medios (superficies).

Para todos estos casos se rompe la simetría traslacional del cristal con la aparición de un potencial adicional debido al tipo de impureza, para el presente trabajo utilizaremos un tipo de impureza substitucional [5], que se conoce como átomos de tipo hidrogenoide; la cual se puede modelar como un sistema dos partículas de carga eléctrica opuesta, que se encuentra dentro de un semiconductor, en el sitio de la red cristalina que normalmente ocuparía otro átomo del mismo semiconductor; este átomo forma enlaces con los átomos vecinos más cercanos, dejando un electrón con interacción coulombiana débil con el núcleo.

Modelo de una impureza donadora neutra

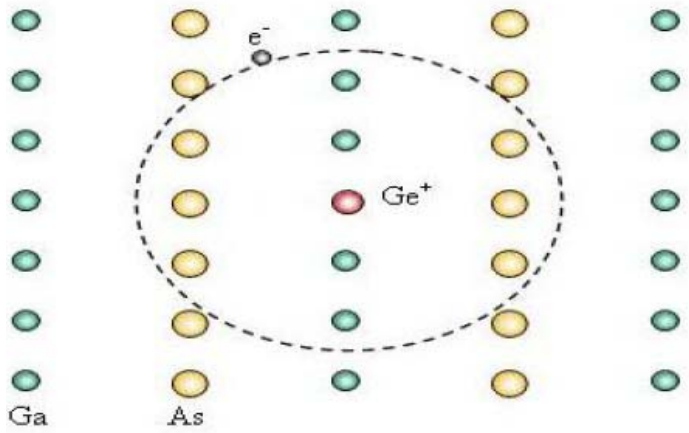


Figura 3 [15].

Un ejemplo de esto es la impureza donadora neutra, la cual usaremos en el presente trabajo, que se compone de la pareja electrón-ión; si a la red cristalina de nuestro semiconductor de GaAs le introducimos un átomo del grupo IV como el silicio o el germanio, que remplace un átomo de Ga (*ver fig. 3*), este se enlaza químicamente con los demás átomos con tres de sus cuatro electrones de valencia, dejando un electrón casi libre en la banda de conducción; por eso a temperaturas ordinarias, es posible ionizarlo mediante agitación térmica de la red. El átomo de impureza queda fuertemente unido a cuatro átomos vecinos por medio de enlaces covalentes, quedando inmóvil y se convierte en un ión positivo. Cuando una impureza es puesta dentro de una heteroestructura, esta se encuentra sometida a un potencial de confinamiento, que trae adicionalmente unos efectos interesantes, debido a que dependiendo de las dimensiones del

confinamiento geométrico que experimenta la impureza y la posición a la que se encuentre, tiene una función de onda y energía de enlace diferente.

2.3 Aproximación de masa efectiva

Debido a los efectos que produce una impureza dentro de una red cristalina, explicados anteriormente, y en especial, el rompimiento de la simetría traslacional; al ocurrir esto, el problema del electrón en el cristal presenta complicaciones, debido a que además del potencial cristalino, el electrón siente un potencial asimétrico de atracción, imposibilitando la solución exacta del la ecuación de Schrödinger para este sistema [21].

Esta aproximación se utiliza con frecuencia para resolver este tipo de problemas, en la cual aprovechando que la banda de energía es de forma parabólica en los semiconductores y por esto el portador se comporta como un portador libre con masa efectiva.

Estructura de bandas del GaAs

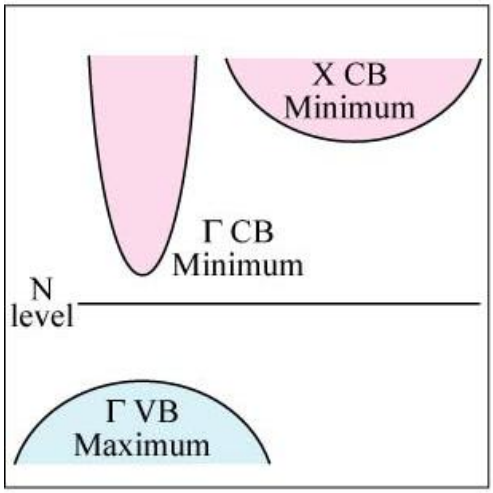


Figura 4 [5].

El semiconductor de GaAs se vale de esta aproximación ya que la estructura de bandas, es aproximadamente parabólica en el fondo de la banda, su masa efectiva es aproximadamente isotrópica e independiente de la energía como se observa en la *Figura 4*; lo único que cambia en esta aproximación, es el valor de la masa del electrón en el vacío, por una masa efectiva. Para la configuración de $Ga_{1-x}Al_xAs$, su Gap es directo en el punto Γ, para x< 0,45 y su masa efectiva del electrón en el punto Γ es:

$$m_e^* = (0,067 + 0,083x)m_0 \tag{2.1}$$

donde m_0 es la masa del electrón en el vacío.

El valor de su Gap es

$$E_\Gamma(Ga_{1-x}Al_xAs) = E_\Gamma(GaAs) + 1,247x \quad [eV] \tag{2.2}$$

La distribución espacial de los perfiles de las bandas de conducción y de valencia, dan lugar a los potenciales de confinamiento; esto se puede modelar en el siguiente hamiltoniano:

$$\widehat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \chi(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} + V(z) \right]\psi = E\psi \tag{2.3}$$

Donde *m* es la masa del electrón libre, $\chi(r)$ es el potencial cristalino periódico, que para toda la red cristalina se basa en la siguiente ley:

$$\chi(\vec{r}) = \chi(\vec{r} + \sum_i n_i \vec{a_i}) \tag{2.4}$$

Donde $\vec{r}$ es un punto arbitrario en la red, n_i es un número entero y $\vec{a_i}$ con *i=1,2 y 3*, son los tres vectores bases de la red de Bravais, $-\frac{e^2}{r}$ es el potencial de Coulomb y $V(z)$ es el potencial de confinamiento; para la ecuación (*2.3).* Al

realizar la aproximación de la masa efectiva, obtenemos un hamiltoniano simplificado quedando de la siguiente forma:

$$\widehat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + V(z) \right]\psi = E\psi \tag{2.5}$$

donde del término m^*, se le conoce como masa efectiva del electrón, en cual está la información de la red; para cada material es diferente y solo se puede obtener su valor de manera experimental.

Para poder plantear la transformación

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \chi(\vec{r}) \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 \tag{2.6}$$

Tomamos de la ecuación (*2.3)* el siguiente término

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \chi(\vec{r}) \right]\widehat{\Psi} = \widehat{E}_c\widehat{\Psi} \tag{2.7}$$

Donde $\widehat{\Psi}$ es la función de Bloch y $\widehat{E}_c$ nos indica la energía asociada al electrón libre en la banda de conducción. Aplicando $\widehat{\Psi} = u_{\alpha,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}}$, podemos observar que satisface la ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\frac{\hbar^2}{m}\left(\vec{k}\vec{\nabla}\right) + \chi(\vec{r}) \right]u_{\alpha,\vec{k}} = \left[E_\alpha(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]u_{\alpha,\vec{k}} \tag{2.8}$$

Donde α indica el número de la banda de energía y $\vec{k}$ el vector de onda. Al observar la estructura de bandas del GaAs, se puede notar fácilmente que para $\vec{k} = 0$, la transición electrónica se da al máximo de la banda de valencia, al mínimo de la banda de conducción, llamando a este comportamiento, transición de gap directo.

De lo anterior si $\vec{k} \to 0$ podemos transformar la relación (*2.8)* en

$$\left[H_B + \chi(\vec{k})\right] u_{\alpha,0} = \in_B u_{\alpha,0} \tag{2.9}$$

donde
$$H_B = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \chi(\vec{r}) \tag{2.10}$$

y
$$\chi(\vec{k}) = -i\frac{\hbar^2}{m}\left(\vec{k}.\vec{\nabla}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to 0 \quad \text{cuando} \quad \vec{k} \to 0 \tag{2.11}$$

Como $\chi(\vec{k})$ se hace pequeño comparado con los otros términos del hamiltoniano, se puede tomar como un potencial perturbativo y se puede aplicar el método de perturbación a (*2.9)*, y con esto obtenernos el valor de la energía en el mínimo de la banda de conducción,

$$\widehat{E}_c = E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2}\int_{V_0} \frac{\left|u^*{}_{\alpha,0}\vec{k}.\vec{P}u_{\alpha,0}\right|^2}{E_c(\vec{0}) - E_v(\vec{0})}\, dV_0 \tag{2.12}$$

Donde $k.P = -i\hbar k_j.P_j$ y $E_c(\vec{0}) - E_v(\vec{0}) = E_g$, y E_g es el gap del material con esto reescribimos la ecuación **(***2.10)* de la siguiente forma

$$\widehat{E}_c = E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m*} \tag{2.13}$$

Donde
$$\frac{1}{m*} = \left[\frac{1}{m} + 2\int_{V_0} \frac{\left|u^*{}_{v,0}P_j u_{v,0}\right|^2}{E_g}\, dV_0\right] \tag{2.14}$$

$\frac{1}{m*}$ es el llamado tensor de masa efectiva y como su expresión lo indica contiene información de la red, expresada en la componente del momentum y el gap del material.

A partir de la ecuación (*2.13)* y reemplazando en la ecuación (*2.9)*

$$\left[H_B + \chi(\vec{k})\right]\psi = \left[E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m*}\right]\psi \tag{2.15}$$

Haciendo la siguiente transformación $\vec{k} = -i\vec{\nabla}$, podremos transformar la ecuación (*2.3)* y operar de la siguiente manera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \chi(\vec{r}) \rightarrow H_c + \chi(\vec{k}) \rightarrow E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m*} \tag{2.16}$$

Para finalmente reescribir el hamiltoniano de la ecuación (*2.3)* de la forma

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + V(z)\right]\psi \tag{2.17}$$

La expresión anterior es válida para usarse para impurezas confinadas en pozos cuánticos y otras heteroestructuras tales como hilos y puntos cuánticos.

3

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3 .1 Aproximación Adiabática (AA)

La ecuación principal del presente trabajo es:

$$-\Delta\psi(\rho,z)+V(\rho,z)\psi(\rho,z)=E\psi(\rho,z) \tag{3.1}$$

Pero tiene a una solución analítica, debido a que no se pueden separar la componente axial de la radial, y debido a que la donadora en presencia del haz laser se puede modelar como dos iones separados equidistantemente de un electrón, no se puede aplicar el método de dimensión fractal, o cualquier otro método trabajado en el grupo, por esta razón la solución del problema es numérica. Pero gracias al método de la aproximación adiabática se pueden separar los dos movimientos que pueden presentarse dentro del sistema, un movimiento rápido (radial) del otro relativamente lento (axial). Este método consiste en considerar un radio pequeño comparado con su ancho, teniendo mayor confinamiento en dirección radial y por lo tanto una contribución de energía más significativa.

La función de onda de nuestro sistema $\psi(\rho,z)$ por lo tanto se puede separar en:

$$\psi(\rho,z)=f_{\rho}(\rho,z)\ f_{z}(z) \tag{3.2}$$

Teniendo presente este método la ecuación (3.1) la podemos dividir en dos ecuaciones sencillas, de acuerdo a la dependencia de sus coordenadas, para posteriormente resolver por medio del método de barrido trigonométrico.

$$-f_{\rho}^{''}(\rho,z)-\frac{1}{\rho}f_{\rho}^{'}(\rho,z)+V_{\rho}(\rho,z)f_{\rho}(\rho,z)=E_{\rho}(z)f_{\rho}(\rho,z) \tag{3.3}$$

$$-f_{z}^{''}(z)+E(z)f_{z}(z)=E_{D_0}f_{z}(z) \tag{3.4}$$

3 .2 Método Barrido Trigonométrico (BT)

Este es un método numérico de alta precisión que nos permite resolver de forma sencilla ecuaciones de la forma:

$$-\frac{1}{f(r)}\frac{d}{dr}\left[f(r)\frac{d}{dr}\phi(r)\right]+V\phi(r)=E\phi(r) \tag{3.5}$$

Para este método realizamos un cambio de coordenadas de nuestro sistema a las coordenadas de Poincaré, con el objetivo de disminuir en un orden la ecuación diferencial, realizando el siguiente cambio de variable,

$$\phi(r)=A(r)\cos\theta(r) \quad \text{y} \quad \phi'(r)=A(r)sen\theta(r) \tag{3.6}$$

$A(r)$ nos representa la amplitud de las curvas de Poincaré y $\theta(r)$ su fase; si sustituimos (3.6) en (3.5) y bajo unos pocos paso algebraicos llegamos a una ecuación diferencial de primer orden

$$\theta'(r)=-(sen^2\theta(r)+h(r)sen\theta(r)\cos\theta(r)+(E-V(r))\cos^2\theta(r)) \tag{3.7}$$

Donde $h(r)=\frac{f'(r)}{f(r)}$, resolviendo la ecuación (3.7) numéricamente, por cualquier método, por ejemplo el Rungge–Kutta, se puede obtener el valor de energía E que

estamos buscando; mas adelante utilizaremos paso a paso el método de BT para calcular los valores de energía de nuestro sistema y se podrá observar mejor la aplicación de este método.

3 .3 Vestimiento del potencial de confinamiento geométrico

Cuando un QW está en presencia de una radiación monocromática, el campo de radiación EM linealmente polarizado a lo largo de la dirección axial *z*, los estados electrónicos correspondientes al potencial de confinamiento y el campo EM, pueden ser estudiados incluyendo el potencial correspondiente al campo EM externo en la parte cinética del operador Hamiltoniano. Esta operación es semiclásica, combinando una descripción cuántica del movimiento de la partícula con una descripción clásica del campo de radiación, lo cual nos produce una ecuación semiclásica dependiente del tiempo:

$$\left\{ \frac{\left[\vec{p} + e\vec{A}\right]^2}{2m^*} + V_{conf}(z) \right\} \psi(z,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(z,t)}{t} \tag{3.8}$$

Donde $\vec{p} = i\hbar\nabla$ es el operador momentum y $\vec{A} = \vec{A}(z,t)$ es el potencial vectorial para el campo EM, para campos que no varían significativamente en la región físicamente importante del espacio, se puede aplicar la aproximación de dipolo $\vec{A}(z,t) \approx \vec{A}(t)$, ya que la longitud de onda del haz laser es mucho mayor que el ancho del pozo. En el gauge de Coulomb, el campo EM está relacionado con el potencial vectorial a través de $\vec{F} = \partial\vec{A}/\partial t$.

Para cualquier oscilación de $\vec{A}(t)$ se le puede realizar la transformación Kramer-Hennenberger (KH) unitaria de traslación a la ecuación (*3.8)* para transferir la dependencia del tiempo de lo cinético al término del potencial en el operador Hamiltoniano en el lado izquierdo de esa ecuación.

Haciendo $\varphi(z,t) = U^{\dagger}\psi(z,t)$ y $\tilde{H} = U^{\dagger} H\, U$, donde

$$U = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{e}{m^*}\int \vec{A}.\vec{p}dt + \frac{e^2}{2m^*}\int \vec{A}^2 dt \right)\right] \tag{3.9}$$

es el operador para la transformación KH y H el hamiltoniano de la ecuación *3.8* se convierte en:

$$\left\{ \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m^*} + V_{conf}\left[z + \alpha(t)\right]\right\}\varphi(z,t) = i\hbar\frac{\partial\varphi(z,t)}{t} \tag{3.10}$$

donde $\alpha(t) = \frac{e}{m^*}\int \vec{A}(t').dt'$, por facilidad asumimos un campo EM monocromático armónico, dependiente del tiempo, i.e. $\vec{A}(t) = A_0\cos(\omega t)\hat{z}$, donde $A_0 = {F_0}/{\omega}$ siendo F_0 la fuerza del campo. Para este campo, uno tiene $\alpha(t) = \alpha_0 \sin(\omega t)$, con $\alpha_0 \equiv {eF_0}/{m^*\omega^2}$.

En la ecuación (*3.10)* se tiene en cuenta el hecho que el movimiento del electrón en presencia del campo EM puede estar descrito alternativamente por un enfoque acelerado que oscila en fase con el campo, por ejemplo el enfoque de Kramer, en el cual los electrones interactúan con el potencial oscilatorio:

$$V_{conf}\left[z + \alpha(t)\right] = V_0.\Theta\left[\left|z + \alpha_0 sen(\omega t)\right| - l\right] \tag{3.11}$$

V_0 lo determina la concentración de aluminio y nos da la altura del pozo rectangular, acompañado de la función paso, que cuando α_0=0 significa la ausencia de cualquier campo EM o haz laser y nos da la un pozo rectangular de ancho L. Como $V_{conf}\left[z + \alpha(t)\right]$ es un potencial periódico lo podemos expandir en una serie de Fourier-Floquet, válido para altas frecuencias donde el término de orden cero es el dominante y corresponde al tiempo promedio [22].

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T V_{conf}\left[z+\alpha(t)\right]dt \tag{3.12}$$

para los intervalos $-l-\alpha_0 \le z \le -l+\alpha_0$ y $l-\alpha_0 \le z \le l+\alpha_0$, donde $l = L/2$, la integral se puede resolver analíticamente, hacemos primero un cambio de variable $u = \omega t$ con $du = \omega.dt$; reescribimos (*3.11)*

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{2\pi}\int_0^{2\pi} V_0.\Theta\left[\left|z+\alpha_0 senu\right|-l\right]du \tag{3.13}$$

Nuevamente realizamos un cambio de variable $y = \alpha_0 senu$ con $dy = \alpha_0 \cos u.du$

Con $\cos u = \sqrt{1-\frac{y^2}{\alpha_0}} = \frac{1}{\alpha_0}\sqrt{\alpha_0{}^2 - y^2}$ y $senu = \frac{y}{\alpha_0}$ quedándonos después de este cambio de variable la integral de esta forma:

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{\pi}\int_{-\alpha_0}^{\alpha_0} \frac{\Theta\left[\left|z+y\right|-l\right]dy}{\sqrt{\alpha_0{}^2 - y^2}} \tag{3.14}$$

Y realizando un último cambio de variable $\tilde{z} = z + y$, despejando nos queda $y = \tilde{z} - z$ y así la integral nos queda más fácil de resolver

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{\pi}\int_{z-\alpha_0}^{z+\alpha_0} \frac{\Theta\left[\left|\tilde{z}\right|-l\right]d\tilde{z}}{\sqrt{\alpha_0{}^2 - \left(\tilde{z}-z\right)^2}} \tag{3.15}$$

Cuando $\left|\tilde{z}\right| \ge l$ se puede notar que $\langle V(z,\alpha_0)\rangle = V_0$, lo cual significa que para los puntos $\left|z\right| \ge l+\alpha_0$ no se altera el pozo de potencial original. Desdoblando el valor absoluto $\left|\tilde{z}\right|$ en su parte positiva (3.15) nos queda transformado en dos integrales:

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{\pi}\left[\Theta\left(\alpha_0 - z - l\right)\int_{z-\alpha_0}^{-l} \frac{d\tilde{z}}{\sqrt{\alpha_0{}^2 - \left(\tilde{z}-z\right)^2}} + \Theta\left(\alpha_0 + z - l\right)\int_{l}^{z+\alpha_0} \frac{d\tilde{z}}{\sqrt{\alpha_0{}^2 - \left(\tilde{z}-z\right)^2}}\right] \tag{3.16}$$

La integral anterior de la forma $\int dx \big/ \sqrt{a^2 - x^2} = arc\sin\left(x \big/ a\right)$, con esto la solución de la integral es:

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{\pi}\left\{\Theta(\alpha_0 - z - l)\left[\frac{\pi}{2} - arc\sin\left(l + z \big/ \alpha_0\right)\right] + \Theta(\alpha_0 + z - l)\left[\frac{\pi}{2} + arc\sin\left(z - l \big/ \alpha_0\right)\right]\right\} \qquad (3.17)$$

Mediante la identidad $arc\sin x + arc\cos x = \pi / 2$, finalmente obtenemos una ecuación del pozo de potencial, para cualquier intensidad del haz laser y posición en *z*, de la siguiente forma

$$\langle V(z,\alpha_0)\rangle = \frac{V_0}{\pi}\left\{\Theta(\alpha_0 - z - l)\left[arc\cos\left(l + z \big/ \alpha_0\right)\right] + \Theta(\alpha_0 + z - l)\left[arc\cos\left(l - z \big/ \alpha_0\right)\right]\right\} \qquad (3.18)$$

De la ec. (3.18) podemos observar un caso particular, que de acuerdo a la función de Heaviside, si se analiza en el centro del pozo la partícula, es decir para z=0, para cualquier valor de α_0, si $\alpha_0 \le l$ el valor de este potencial es cero y para $\alpha_0 \ge l$ su valor es $2(V_0/\pi)arc\cos\left(l \big/ \alpha_0\right)$; de acuerdo con [22] que se refiere al potencial de confinamiento con geometría rectangular en ausencia de impurezas, se puede observar el vestimiento del potencial de confinamiento en las siguientes graficas

Pozo en ausencia de laser de ancho 100 Å (línea punteada negra), Izquierda: pozo vestido con α_0 =25 Å (línea negra), Derecha: Vestido con α_0 =50 Å (línea negra)

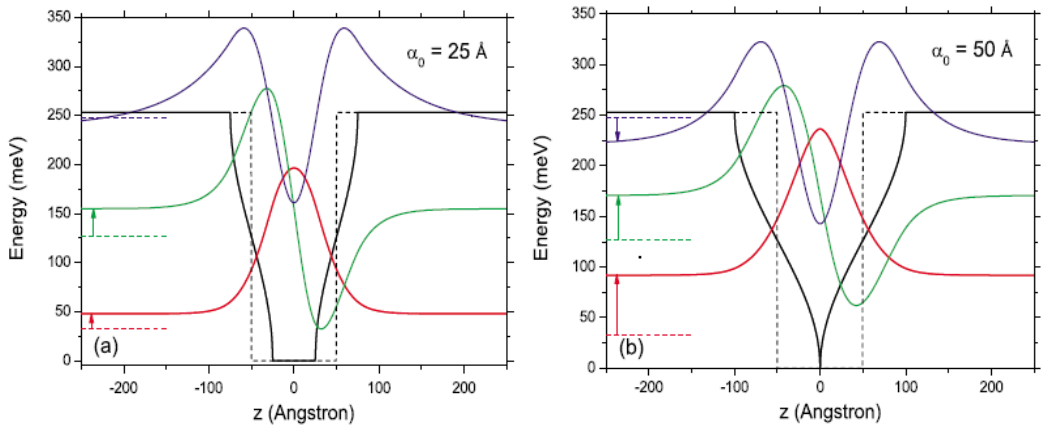


Figura 5. [22].

A medida que aumenta el término α_0 en comparación con el ancho del pozo original, el efecto de este vestido de potencial es contraer la parte inferior del pozo y engrosar su parte superior.

Pozo en ausencia de laser de ancho 100 $\mathring{A}$ (línea punteada negra), Izquierda: pozo vestido con α_0 =100 $\mathring{A}$ (línea negra, derecha: Vestido con α_0 =150 $\mathring{A}$ (línea negra)

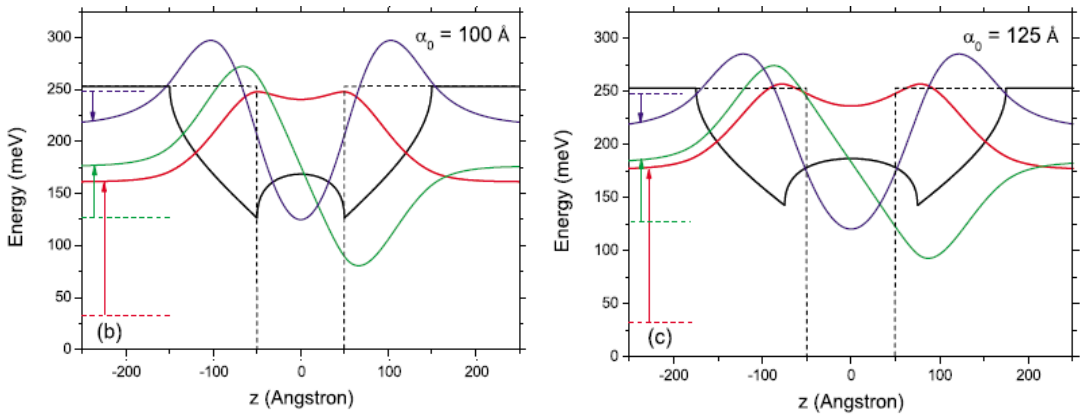


Figura 6. [22].

Algo interesante ocurre cuando el término α_0 es igual o superior a la mitad del ancho del pozo y es su desdoblamiento de un pozo de confinamiento a dos pozos como se puede ver en la *figura 6*, podemos adicionalmente observar que la línea que nos describe la función de onda para el estado base, de color roja, en el centro del pozo no se comporta con un máximo, como en las graficas de la *figura 5* sino por el contrario se presenta un mínimo; otro aspecto que hay que resaltar es que bajo estas condiciones el pozo no solo se desdobla sino que su nivel de energía sube y podemos encontrar en la curva de color rojo que nos determina la función de onda para el estado base sube a más de 150 meV y el ancho del pozo de potencial en la parte superior, se ensancha de manera considerable.

4

MODELO TEÓRICO

Se considera una impureza donadora neutra D^0 centrada en un QW de GaAs, de longitud L; embebido en un QWW infinito de (GaAl)As, de radio R (fig. 7); en presencia del un haz laser de alta intensidad y alta frecuencia, polarizado en dirección *Z*, se realizan los cálculos en el marco de aproximación adiabática y de masa efectiva.

Modelo de la impureza donadora dentro del hilo cuántico

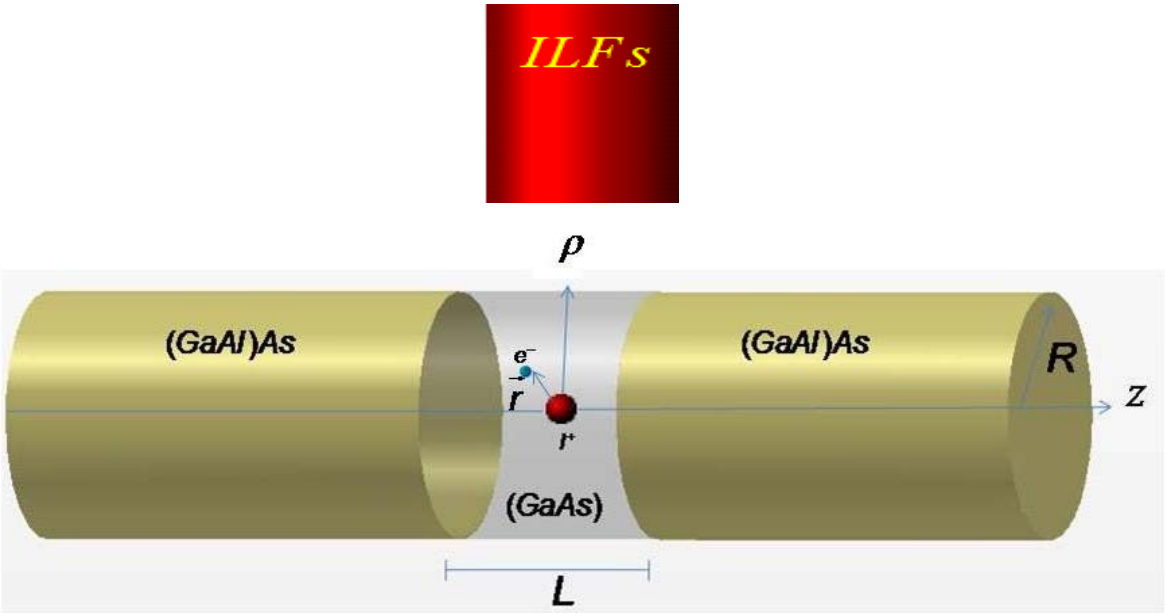


Figura 7.

Cuando se organiza un arreglo de dos junturas de la forma $GaAs\ /Ga_{1-x}Al_xAs$, se crea un pozo de potencial cuya altura de la barrera depende de las concentraciones de aluminio, y es de Gap directo hasta una concentración de aluminio x<0.45; formando un potencial de confinamiento para los electrones en función de x, dado por $V_e = 0,65*\left(1,115x + 0,37x^2\right)$.

Pozo cuántico embebido en un hilo cuántico

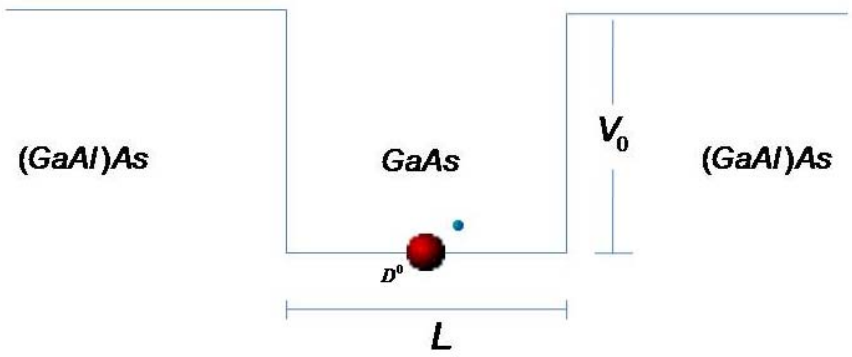


Figura 8.

En este trabajo se analizó el espectro energético de la impureza donadora neutra, para su estado base; por simplicidad se utilizó la aproximación dipolar no relativista de la impureza en presencia del haz laser intenso. Para su solución planteamos el siguiente hamiltoniano:

$$\widehat{H}\psi(\vec{r}) = E_0\psi(\vec{r}) \tag{4.1}$$

donde

$$\widehat{H} = \frac{p^2}{2m^*} + V_0(\rho, z, \alpha_0) + V_{conf}(\rho, z, \alpha_0) \tag{4.2}$$

$V_0(\rho, z, \alpha_0)$ es el potencial coulombiano en término de sus coordenadas y "vestido" por el parámetro α_0, producto de la interacción del haz laser y $V_{conf}(\rho, \alpha_0)$ el potencial de confinamiento geométrico en nuestra heteroestructura también "vestido".

Con la masa efectiva para el electrón m^* ($m^* = (0,06650 \pm 0,00005) m_0$ [23]) y la constante dieléctrica ε ($\varepsilon = 12,58$ [24,25]) para el semiconductor de $GaAs$, que es aproximadamente el mismo valor en su barrera, podemos reescribir nuestro hamiltoniano en unidades adimensionales, haciendo uso del Rydberg efectivo $Ry^* = \frac{e^2}{2a_0^*\varepsilon}$, y el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \frac{\varepsilon h^2}{m^* e^2}$.

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 - \left(\frac{1}{\left|\vec{r} + \vec{\alpha_0}\right|} + \frac{1}{\left|\vec{r} - \vec{\alpha_0}\right|} \right) \tag{4.3}$$

Donde $\widehat{H}_0$ es el hamiltoniano para el electrón libre dentro del pozo, pero en presencia del haz laser.

$$\widehat{H}_0 = -\nabla^2 + V_{conf}(\rho, z, \alpha_0) \tag{4.4}$$

4.1 Ecuación de Schrödinger para el sistema

La ecuación de Schrödinger para el sistema presentado, está en función de coordenadas cilíndricas ρ y z

$$\widehat{H}_{\rho,z}\psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z) \tag{4.5}$$

Donde $\psi(\rho, z)$ es una función de prueba, que mediante el método de aproximación adiabática, se puede separar de la forma $\psi(\rho, z) = f_\rho(\rho, z) f_z(z)$, congelando el movimiento en la dirección de mayor confinamiento (radial) y posteriormente en la otra dirección (z), para esto aplicamos el Hamiltoniano a esta función

$$-\Delta\psi(\rho, z) + V(\rho, z)\psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z) \tag{4.6}$$

y congelamos el movimiento en dirección *z*, tomamos la ecuación de Schrödinger aplicada a $f_\rho(\rho,z)$ de la siguiente forma

$$-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}f_\rho(\rho,z)+V(\rho,z)f_\rho(\rho,z)=E_\rho(z)f_\rho(\rho,z) \tag{4.7}$$

Donde $V(\rho,z)=V_c(\rho)-\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-\alpha_0)^2}}+\frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z+\alpha_0)^2}}\right)$, el primer término de esta expresión es el potencial de confinamiento en ρ y el segundo término el potencial de Coulomb, el cual para nuestro modelo sólo se tiene en cuenta en el hamiltoniano para el ión más no para el electrón, pues manejamos los dos independientes. $V_c(\rho)$ tiene valor nulo dentro del hilo e infinito fuera de él, ya que se encuentra aislado. Matemáticamente está definido como:

$$V_c(\rho)=\begin{cases}0 & \rho<R\\ \infty & \rho\geq R\end{cases} \tag{4.8}$$

Esta ecuación diferencial (4.7) se resuelve mediante la técnica del barrido trigonométrico para hallar los valores de la energía $E_\rho(z)$ para cada posición de la impureza en el pozo cuántico. Posteriormente descongelamos el movimiento en z y congelamos en ρ, para hallar el valor total de energía de la impureza donadora, para ello es necesario solucionar una segunda ecuación de Schrödinger, aplicando el operador hamiltoniano sobre $f_z(z)$. Entonces para el cálculo de la energía del ión de la impureza tenemos:

$$-\Delta f_z(z)+(E_\rho(z)+V_{conf}(\rho,z))f_z(z)=E_{D^0}f_z(z) \tag{4.9a}$$

y para la energía del electrón:

$$-\Delta f_z(z)+(E_\rho(z)+V_{conf}(\rho,z))f_z(z)=E_{e^-}f_z(z) \tag{4.9b}$$

Donde $E(z)=E_\rho(z)+V_{conf}(\rho,z)$

La ecuación (4.9b) es una ecuación diferencial dependiente de z (movimiento relativamente lento), que también podemos solucionar numéricamente usando la técnica del barrido trigonométrico. Estas ecuaciones son para las dos partículas que conforman la impureza donadora, el ión y el electrón respectivamente.

$$-f_z''(z)+E(z)f_z(z)=E_{D^0}(z)f_z(z) \tag{4.10a}$$

$$-f_z''(z)+E(z)f_z(z)=E_{e^-}(z)f_z(z) \tag{4.10b}$$

Donde $E_{D^0}(z)$ es el valor de energía del ión de la donadora y $E_{e^-}(z)$ el valor de la energía del electrón, la resta de estos dos valores de energía, previamente calculados, nos permite hallar el valor de la energía de enlace $E_b(z)=E_{e^-}(z)-E_{D^0}(z)$ para cualquier posición z dentro del pozo cuántico.

4.2 Aplicación del método de barrido trigonométrico (BT) para el ión y electrón

4.2.1 Barrido trigonométrico en dirección ρ para el ión de la D^0

Para poder resolver las respectivas ecuaciones diferenciales tanto en dirección radial como axial, para así obtener los valores de energía que necesitamos para la solución completa de nuestro problema, primero aplicamos el método de BT a la ecuación 4.7 en la cual la ecuación diferencial de segundo orden la cual reduce a otra ecuación diferencial de primer orden, por medio del cambio de coordenadas cartesianas, a las coordenadas polares de Poincaré:

$$-f_\rho''(\rho,z)-\frac{1}{\rho}f_\rho'(\rho,z)+V_\rho(\rho,z)f_\rho(\rho,z)=E_\rho(z)f_\rho(\rho,z) \tag{4.11}$$

Agrupamos $V_\rho(\rho,z) = -\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z-\alpha_0)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2+(z+\alpha_0)^2}}\right)$ en factor común con $E_\rho(z)$ en una nueva variable $w(\rho,z) = E_\rho(z) - V_\rho(\rho,z)$ con lo que (4.11) se nos transforma en:

$$f_\rho''(\rho,z) + \frac{1}{\rho} f_\rho'(\rho,z) + w(\rho,z) f_\rho(\rho,z) = 0 \qquad (4.12)$$

Para poder realizar esta ecuación diferencial es necesario identificar las condiciones de contorno asociadas al problema de Cauchy, podemos ver claramente que para $0 < \rho < R$ se debe analizar qué pasa con la función evaluada en R y su derivada evaluada en 0.

Por simplicidad en el presente desarrollo del BT cuando se escriba θ se entenderá que es $\theta = \theta(\rho)$; tomando las condiciones de frontera $\theta(0) = 0$ y $\theta(R) = -\pi/2$, para que f_ρ sea máxima en el centro del radio del hilo y de valor mínimo su derivada evaluada en R.

Empezamos el método de BT valiéndonos de un cambio de variables en forma de las funciones trigonométricas

$$f_\rho(\rho,z) = A\cos\theta \text{ y } f_\rho'(\rho,z) = A\sin\theta \qquad (4.13)$$

derivamos estas dos funciones una vez y así obtenemos las siguientes relaciones

$$u' = \frac{f_\rho''}{f_\rho} - \left(\frac{f_\rho'}{f_\rho}\right)^2 \; ; \; \frac{f_\rho''}{f_\rho} = u' + u^2 \quad \text{donde} \quad u = \frac{f_\rho'}{f_\rho} = \tan\theta(\rho) \text{ y } u' = \frac{\theta'}{\cos^2\theta} \qquad (4.14)$$

Si dividimos la ecuación (4.12) por f_ρ obtenemos una relación de ecuaciones muy conveniente

$$\frac{f_\rho''}{f_\rho}+\frac{1}{\rho}\frac{f_\rho'}{f_\rho}+w=0 \tag{4.15}$$

Si reemplazamos esta última relación en términos de u y de u' obtenemos:

$$u'+u^2+\frac{1}{\rho}u+w=0 \tag{4.16}$$

Ahora reemplazamos las dos últimas relaciones de (4.14) en (4.16) para obtener la ecuación diferencial que se resuelve en el programa computacional

$$\theta'=-\left[sen^2\theta+\frac{1}{\rho}sen\theta\cos\theta+w\cos^2\theta\right] \tag{4.17}$$

Esta ecuación se puede resolver numéricamente y en nuestro caso utilizamos el método de Rungge-Kutta, con la cual al solucionarse podemos obtener los valores de energía en dirección radial $E_\rho(z)$, que necesitaremos más adelante para calcular la energía total de la impureza y que nos será muy útil para encontrar el potencial efectivo.

Lo siguiente es derivar la primera ecuación de (4.13) e igualar con la segunda ecuación, es decir:

$$f_\rho'(\rho,z)=A\sin\theta=A'\cos\theta-Asen\theta.\theta' \tag{4.18}$$

Introducimos (4.17) en (4.18) y despejamos la igualdad para que quede de la forma

$$\frac{A'}{A}=(sen\theta\cos\theta-\frac{1}{\rho}sen^2\theta-wsen\theta\cos\theta) \tag{4.19}$$

Despejamos A integrando a ambos lados de la igualdad para posteriormente obtener

$$A(\rho)=\exp(\int_0^\rho(sen\theta\cos\theta-\frac{1}{\rho}sen^2\theta-wsen\theta\cos\theta)d\rho) \tag{4.20}$$

Esta última ecuación nos sirve para encontrar la función de onda radial, que corresponde a una parte de la función de onda total.

4.2.2 Barrido trigonométrico en dirección z para el ión de la D^0

Ahora descongelamos el movimiento en z y de la misma manera que se hizo en ρ ahora hacemos el BT en z para la ecuación diferencial (4.9), la cual reescribimos así

$$-f_z''(z)+E(z)f_z(z)=E_{D^0}(z)f_z(z) \tag{4.21}$$

Donde $E(z)=E_\rho(z)+V_{Conf}(z,\alpha_0)$, siendo $V_{Conf}(z,\alpha_0)=\langle V(z,\alpha_0)\rangle$ el cual obtenemos de la ecuación (3.13) para el potencial del pozo cuántico vestido por el haz laser.

Dividiendo la ecuación (4.21) en $f_z(z)$ se obtiene

$$\frac{f_z''}{f_z}+(E_{D^0}(z)-E(z))=0 \tag{4.22}$$

Aplicando el método de BT, también por simplicidad se entenderá $\theta(z)$ cuando se observe solo θ en este BT, teniendo en cuenta las mismas relaciones (4.14) y mediante unos pocos pasos se llega a

$$\frac{\theta'}{\cos^2\theta}+\tan^2\theta+(E_{D^0}(z)-E(z))=0 \tag{4.23}$$

$$\theta'=-\left[sen^2\theta+(E_{D^0}(z)-E(z))\cos^2\theta\right] \tag{4.24}$$

De igual forma que el procedimiento realizado para la dirección en ρ, solucionamos numéricamente mediante Rungge- Kutta esta ecuación y obteniendo el valor de la energía de la impureza donadora $E_{D^0}(z)$. Las

condiciones de contorno en dirección axial son dadas por la ecuación de la función de onda de una partícula cargada en un pozo rectangular finito, en el centro del pozo $\theta(0)=0$, y en el extremo $\theta(L)=-\tan^{-1}\sqrt{V-E_{D^0}}$

Con estas condiciones de contorno y análogamente al cálculo de $A(\rho)$, se encuentra $A(z)$ que determina la amplitud de la función de onda en la dirección *z*,

$$A(z)=\exp(\int_0^l (1-(E_{D^0}(z)-E(z))\frac{sen2\theta}{2})dz) \tag{4.25}$$

Esta ecuación se puede determinar numéricamente en programas computacionales que resuelvan la integral para cada valor en z.

4.2.3 Barrido en dirección ρ para el electrón

De la misma manera que se realizó el BT para el ión lo realizamos para el electrón, para la respectiva ecuación de Schrödinger (4.7), pero ahora tomando $V(\rho,z)=V_c(\rho)$ debido a que dentro del pozo según nuestro modelo, el electrón se encuentra libre de interacciones con otras partículas, por lo tanto se aplica un BT a la ecuación (4.7) obteniéndose una ecuación muy similar a la (4.17) donde solo hay un pequeño cambio en el parámetro w, quedándonos como $w(\rho,z)=E_\rho(z)$ y se mantienen las mismas condiciones de frontera.

4.2.4 Barrido en dirección z para el electrón

Teniendo el resultado del BT anterior, usamos $E_{\rho}(z)$, en la ecuación de Schrödinger (4.10b) , manteniendo las mismas condiciones que para el ión de la donadora, y aplicamos un nuevo BT sobre:

$$\theta' = -\left[sen^2\theta + (E_{e^-}(z) - E(z))\cos^2\theta \right] \tag{4.26}$$

Esta ecuación es muy parecida a la ecuación (4.24), solo cambia el valor de $E(z)$ que es el valor obtenido en el BT anterior mas el valor esperado del potencial de confinamiento, es decir: $E(z) = E_{\rho}(z) + \left\langle V_{Conf}(z,\alpha_0) \right\rangle$ este BT nos arroja el valor de $E_{e^-}(z)$, y con esto ya podemos calcular el valor $E_b(z)$.

5

ANÁLISIS DE RESULTADOS

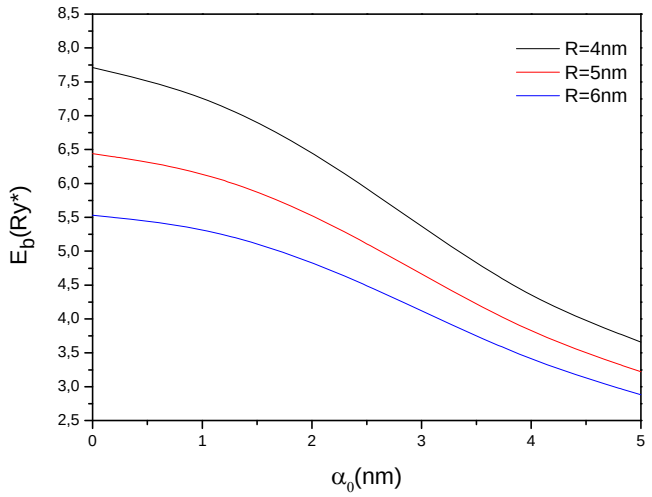
Los resultados obtenidos en este trabajo se calcularon teniendo en cuenta los valores del radio de Bohr efectivo $a_0^* = 9{,}87\text{nm}$ y Rydberg efectivo $R_y^* = 5{,}72 meV$, los valores en las graficas de energía están dados en R_y^* y de posición, dimensión y del término α_0, están dados en nm.

5.1 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del parámetro α_0

Para concentración de Al=0.3, altura de la barrera de potencial 39,83 Ry*

Energía de enlace de en función de α_0 a) L=10nm y b) L=20nm.

a)



b)

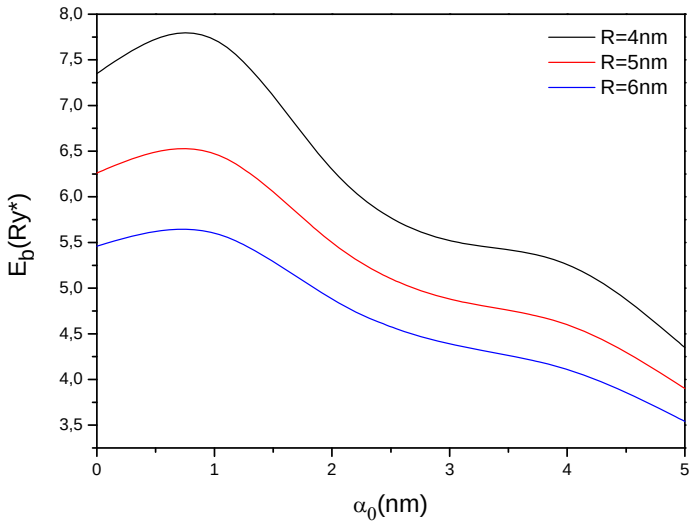


Figura 9.

En la figura 9a se puede observar la energía de enlace en función del parámetro proporcional a la intensidad del haz laser, para distintos radios, de la que se puede extraer que a mayor confinamiento, mayor es la energía de enlace de la impureza donadora D^0, lo cual se encuentra en concordancia con múltiples artículos de configuraciones parecidas [10,11,12,27], que a medida que aumenta la intensidad del haz laser representado por α_0, la energía de enlace E_b disminuye; podemos observar que el mayor confinamiento que se presenta para R=4nm en nuestra grafica, esto hace que el electrón se encuentre más ligado al ion de la donadora, aumentando por consiguiente la energía de enlace, por otra parte, el efecto que encontramos por parte del haz laser es alejar el electrón del ión, a medida que su intensidad se incrementa, manejamos valores de hasta la mitad del ancho del pozo cuántico.

En cuanto a la figura 9b en la cual se comparan los mismos parámetros, pero con un ancho del pozo del doble, vemos que existe un cambio en el comportamiento de las curvas, la primer ondulación que se presenta, es característica de los hilos cuánticos en presencia del haz laser que hasta $\alpha_0 \approx 1\text{nm}$ se comporta la energía

de enlace de manera creciente al aumentar el parámetro α_0, después de este valor empieza a decrecer el valor de E_b a medida que aumenta la intensidad del haz laser [37]; la segunda ondulación en las curvas marcado aproximadamente cuando $\alpha_0 = 3\text{nm}$ para cualquier radio, es muy posible que sea debido a que en estas dimensiones de confinamiento radial se tiene muy marcada la AA, a mayor ancho del pozo, y se obtiene mayor contribución radial de la energía a valor total de la energía de enlace, todo esto sumado al vestimiento del potencial de confinamiento geométrico, como se observa en los resultados obtenidos por Qu Fanyao et. Al en la figura 2, que muestra la energía de enlace en función del parámetro α_0 [27], donde se puede observar un máximo entre $\alpha_0 = 0\text{nm}$ y $\alpha_0 \approx 1\text{nm}$, debido principalmente al confinamiento radial, además si observamos la curva de color azul en la figura 9b del presente trabajo que representa un menor confinamiento radial que las otras dos curvas, y lo comparamos con el obtenido en la figura 2 de [27], podemos entender mejor el por qué de la segunda ondulación de las curvas, es debido a que entre mayor se encuentre confinada la impureza radialmente y a determinado valor para el parámetro α_0, se empieza a marcar de forma más notoria la segunda ondulación; esto no tiene una discusión final de significado físico, pero podemos inferir que es debido al efecto que produce el haz laser sobre el pozo de potencial sobre la energía de enlace en $\alpha_0 \approx 3\text{nm}$, aumentado su valor a medida que aumenta la deformación del pozo cuántico, hasta que llega a un límite $\alpha_0 \approx 4\text{nm}$, en el cual, el efecto que produce sobre la energía de enlace, el vestimiento del potencial coulombiano, separando el electrón del ión de la donadora, hace que el valor de la energía de enlace empiece a partir de ahí, a decaer notablemente.

5.2 Energía de enlace de una impureza D^0 en función su posición dentro del pozo.

Para concentración de Al=0.3 L=10nm R=4nm, altura de la barrera 39.83 Ry*

Energía de enlace de una D^0 en función de su posición, la impureza en un pozo cuántico, embebido en un hilo cuántico, para diferentes α_0

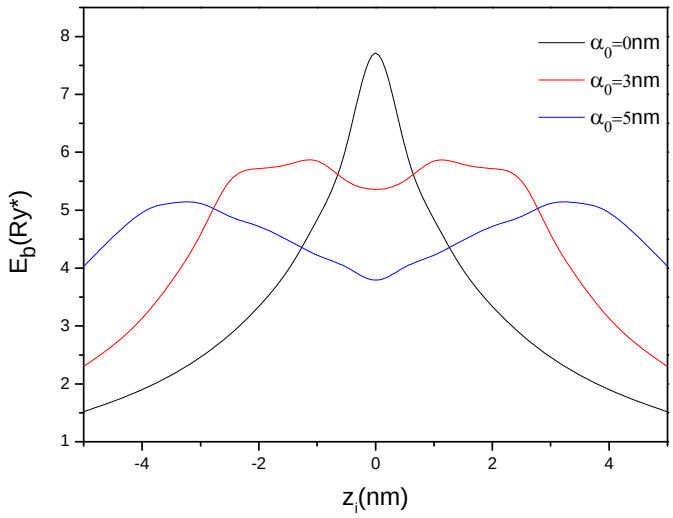


Figura 10.

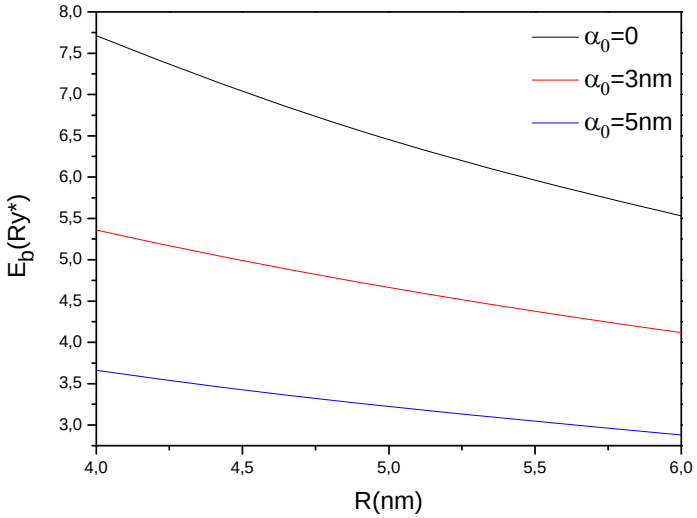
De la figura 10 la línea negra, podemos observar lo visto en muchos artículos, que cuando la impureza se encuentra en ausencia de perturbaciones externas y centrada su energía de enlace E_b es máxima, podemos observar que a medida que aumenta el parámetro α_0 la energía de enlace disminuye cuando su posición es centrada, debido a los efectos que produce las el vestimiento del potencial coulombiano en la energía de enlace, esto es debido a que la radiación EM ayuda a separar el electrón del ión de la donadora, esto también concuerda con algunos artículos internacionales, entre ellos uno publicado recientemente [22], en que miran el comportamiento de la energía de enlace de una impureza donadora dentro de un pozo cuántico, también en función de su posición, la forma del comportamiento de la energía E_b en presencia del haz laser en ese artículo es parecido, debido a que no hay contribución radial.

5.3 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del radio del hilo.

Para concentración de Al=0.3 y la impureza centrada en el pozo.

Energía de enlace en función del radio del hilo, para diferentes α_0. a) L=10nm y b) L=20 nm.

a)



b)

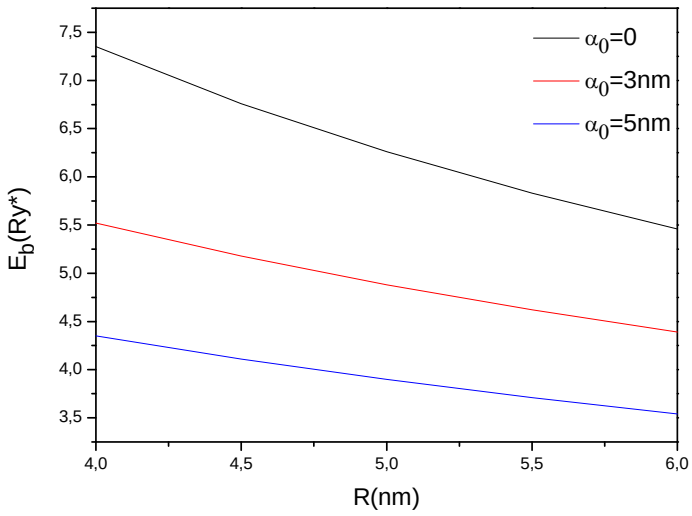


Figura 11.

En la presente grafica podemos observar otro comportamiento característico de la energía de enlace de la impureza D^0 en presencia del haz laser, sin importar el ancho del pozo cuántico. Se observa que la energía E_b a menor radio, su valor aumenta, y es debido a que hay mayor confinamiento radial para la donadora, esto es independiente de si está o no en presencia del haz laser, pues para los tres valores de α_0 la energía de enlace decrece cuanto mayor sea el radio; y a medida que aumenta el parámetro α_0, la energía de enlace disminuye para cualquier radio.

5.4 Energía de enlace de una impureza D^0 en función del parámetro α_0 para distintas concentraciones de aluminio.

Para concentración de Al=0.3 L=10nm, R=4nm

Energía de enlace en función de α_0, para distintas concentraciones de Al.

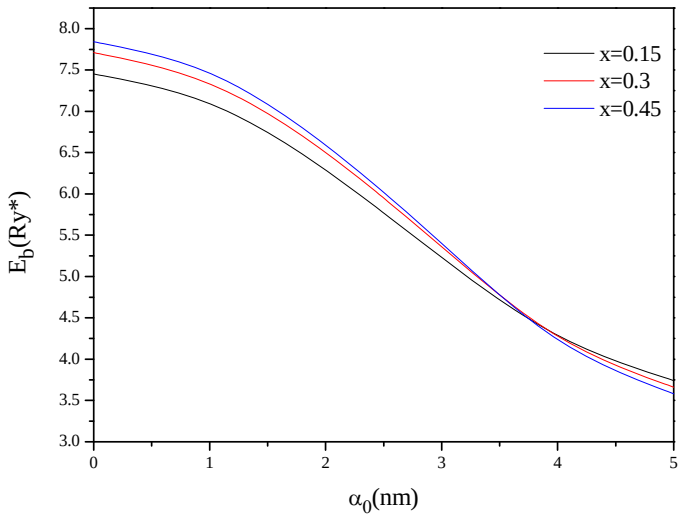


Figura 12.

En esta grafica podemos observar que a mayor confinamiento debido a la altura de la barrera, mayor es la energía de enlace de la impureza donadora. Esto se mantiene hasta que α_0 es aproximadamente 3,7 nm, para lo cual la curva que representa la mayor concentración de aluminio está por encima de la curva de menor concentración, como se puede ver en la *figura 12,* esto es principalmente debido a que entre mayor sea la altura de la barrera de potencial, mas difícil de deformar es, y el sistema electrón-ión no sentirán los mismo efectos de la deformación del pozo de potencial para una barrera de distinta altura. Además se puede apreciar que Independientemente de la concentración de Al en el rango

permitido, la energía de enlace disminuye a medida que aumenta la intensidad del haz laser.

CONCLUSIONES

Usando la aproximación adiabática, se realizaron todos los cálculos usando un doble barrido trigonométrico tanto para el electrón como para el ión de la impureza donadora neutra, para así finalmente hallar la energía de enlace de la impureza donadora.

En las graficas se puede apreciar fácilmente, que a medida que aumenta el confinamiento en el sistema, tanto radial como que aporta el pozo cuántico, aumenta el valor de la energía de enlace. Radialmente podemos notar esto en la grafica 11, sin importar si se encuentra o no en presencia del haz laser, lo cual concuerda muy bien con los resultados obtenidos en algunos artículos internacionales.

En cuanto al efecto que produce el haz laser sobre la energía de enlace, podemos decir que este afecta a la donadora, separando progresivamente el electrón del ión, a medida que aumenta la intensidad del laser; un efecto muy interesante visto en pozos cuánticos y que se repite en algunos artículos recientes, muestra que cuando se descentra la impureza dentro del pozo en dirección z, en ausencia del haz laser, se presenta un máximo pronunciado cuando se está centrada y disminuye a medida que se descentraliza, algo diferente ocurre cuando se está en presencia del haz laser, donde en su centro no es un máximo, y es de menor energía en el centro a medida que aumenta la intensidad del haz laser, como se ve en la grafica 19, las dos máximos que presentan las curvas son debido a que para determinada posición dentro del pozo, el efecto del vestimiento de pozo de potencial es mayor al efecto del vestimiento del potencial coulombiano sobre el valor de la energía de enlace.

Los valores de energía se encuentran en un rango muy aceptable, si se les compara con resultados de artículos con títulos cercanos a la presente configuración, donde su particularidad de valores esta en el tipo de confinamiento. Un ejemplo de esto, es que al aumentar el ancho del pozo y el radio del pozo en algunas graficas que se obtuvieron, disminuía el confinamiento y por ende disminuía la energía de enlace de la donadora.

En el presente trabajo se presenta un doble confinamiento de la impureza, uno longitudinal (en dirección z) y el otro transversal (en dirección radial), dando como resultado la solución de un problema doble y con un resultado como el visto en la grafica 9b en el cual se observa los dos efectos del confinamiento con el del vestimiento laser del pozo.

REFERENCIAS

[1] E. Tangarife, M. de Dios –Leyva y C. A. Duque, Revista Colombiana de Física, Vol 38, No. 2 (2006).

[2] P. Aristizabal, R. León, W. Ospina, C.A. Duque Revista EIA, Issn 1794- 1237 número 7, p. 121-126 (2007).

[3] J. Perea, C. William Sanches y N. Porras Montenegro. Revista Colombiana de Física, Vol. 41, No. 1 (2009).

[4] S. Torres, Scentia et Technica Año XIV, Universidad Tecnológica de Pereira, No. 39 (2008).

[5] P. Yu and M. Cardona: Fundamentals of Semiconductors, Berlin, Springer-Verlag (1996).

[6] M. Bayer, Nature 418, 597(2002); R.C. Ashori, Nature 379, 413(1996); G. Yusa y H. Sakaki, Appl. Phys. Let. 70, 345 (1997).

[7] J. H. Marin, Revista Colombiana de Fisica, Vol 37 No. 1 (2005).

[8] G. Bastard, Phys. Rev. B 24-8 (1981).

[9] W. Henneberger. Phys. Rev. Let. 21-12, 12 (1968).

[10] F. Ugan, U.Yesilgul, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sari e I. Sökmen, Phys. Lett. A 347, 2980-2984 (2010).

[11] Bryant, G. W., Phys. Rev. B 29, 6632 (1984).

[12] Zhen- Yan Deng, Phys. Rev. B 50, 8 (1994).

[13] M. Santhi y A. Jhon Peter, Eur. Phys. J. B 71, 225-231 (2009).

[14] P. Villamil, N. Porras Montenegro y J. C. Granada, Phys. Rev. B 59 (03), 1608 (1999).

[15] E. Galván Moya, Tesis de Maestría en Física, UIS (2009).

[16] C. Gómez, F. Rodríguez Prada, H. Paredes and C. Beltrán, Revista latinoamericana de metalúrgica y materiales; S1 (2), 479-481 (2009).

[17] J. Sierra-Ortega, I. D. Milkhailov y F. J. Betancur, Phys. Rev. B 348, 66 (2004).

[18] F. J. Betancur, J. Sierra-Ortega, R. A. Escorcia, J. D. Gonzáles, I. D. Milkhailov, Physica E 23, 102 (2004).

[19] D. Fuster Signes, ICMUV, CNM, pág. 5-36 (2003).

[20] J. H. Davis, The Physics of Low Dimensional Semiconductors – An Introduction., Cambrigde University Press , p 80-93. (1998)

[21] V. Bohórquez Guevara, Tesis pregrado Física, Universidad del Valle, (2006).

[22] F. M. S. Lima, M. A. Amarato,O. A. C. Nunes, A. L. A. Fonseca, B. G. Enders y E. F. da Silva . Jurnal of Applied Physics 105, 12311 (2009).

[23] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B 31, 2 (1985).

[24] J. S. Blakemore, J. Appl. Phys. 53, R123 (1982).

[25] L. E. Oliveira, R. Pérez-Alvarez, Phys. Rev. B 40 (15), 10461 (1989).

[26] Página web: www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semitech_en

/kap_2/backbone/r2_3_1.html

[27] Qu Fanyao, A. L. A. Fonseca and O. A. C. Nunes, Phys. Rev. B 54, 23 (1996).

[28] E. C. Nisculescu, L. M. Burileanu, A. Radu, Superlattices and Microestures (44), 173-182, (2008).