

UNIVERSIDAD DE SONORA
DEPARTAMENTO DE INVESTIGACIÓN EN FÍSICA
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES



**ESTADOS ELECTRÓNICOS PARA UN ALAMBRE
CUÁNTICO SEMICONDUCTOR DOBLE**

TESIS

**PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

MANUEL MUNGUÍA RODRÍGUEZ

Hermosillo Sonora, agosto 2013

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Agradecimientos

Agradezco a mi familia por todo el apoyo brindado en mi formación profesional, vida y mi desarrollo como persona, ya que han sido la base en la que sostengo mis logros.

Quiero también agradecer a mis directores de tesis Ricardo Betancourt Riera y Raúl Riera Aroche, por las enseñanzas que me han dado y el conocimiento que me imparten ya que son grandes investigadores y maestros, también al Dr. Rodrigo Arturo Rosas Burgos y Dr. Rene Betancourt Riera por su apoyo en la revisión de este trabajo.

Finalmente agradezco al cuerpo académico del Difus por el conocimiento que obtuve mientras curse los estudios de maestría y a CONACYT por el apoyo económico brindado.

Índice

Prefacio	IV
Introducción	1
Capítulo 1: Fundamentos teóricos	10
1.1. Dinámica de los electrones	10
1.2. Aproximaciones para la solución del problema cuántico del sólido cristalino.	12
1.2.1. Aproximación de valencia	13
1.2.2. Aproximación de Born-Oppenheimer	14
1.2.3. Aproximación de Campo Medio o Aproximación Monoelectrónica	17
1.2.4. Aproximación de la Masa Efectiva	18
Capítulo 2: Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor	23
2.1. Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal circular	23
2.2. Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo	29
Capítulo 3: Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor doble	35
3.1. Estados electrónicos de un alambre cuántico doble	35
3.2. Discusión de resultados para el alambre cuántico doble	40
Conclusiones y recomendaciones	49
Bibliografía	51

Prefacio

El desarrollo reciente en las técnicas de fabricación de nanoestructuras semiconductoras, y porque en particular la fabricación de alambres o hilos cuánticos, han permitido el desarrollo de nuevos dispositivos electrónicos, dando lugar a una revolución no sólo en la electrónica, sino también en la optoelectrónica. La física del estado sólido es fundamental para el estudio de las nanoestructuras cristalinas de diferentes dimensionalidad y simetrías, por ejemplo los sistemas construidos a capas como, los pozos cuánticos, los pozos cuánticos múltiples, las superredes, etcétera. El estudio de estos tipos de sistemas ocupa gran parte de la investigación de las nanoestructuras, para entender y mejorar las propiedades ópticas y electrónicas de estos materiales. Para llevar a cabo el análisis teórico, con el fin de estudiar las propiedades físicas de sistemas de efecto de tamaño cuántico, debemos resolver la ecuación de Schrödinger, con el objetivo de obtener la función de onda y sus energías asociadas. Esto es debido a que la función de onda y las energías de un sistema determina las propiedades físicas, químicas y propiedades físicas del sistema.

El modelo de la función envolvente es adecuado para estudiar las propiedades de las quasi-partículas en las estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad cuando están sometidas a un potencial externo. Este es un método dinámico para la determinación de las bandas de energía de las partículas en la Física del Estado Sólido. Las nanoestructuras son consideradas sistemas dinámicos debido a que son sólidos que siempre están sometidos a un potencial de barrera o de confinamiento, el cual puede lograrse mediante campos magnéticos o creciendo estructuras cuyas distintas regiones sean de materiales diferentes. Utilizaremos el formalismo de la aproximación de la función envolvente y la aproximación de la masa

efectiva. En este trabajo estudiaremos los estados estacionarios de un electrón en un alambre cuántico semiconductor de doble sección transversal circular obtenido a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. Además, analizamos los dos casos límites: el alambre cuántico con sección transversal circular y el alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo. En este caso hemos asumido la aproximación para nuestros intereses físicos, de que el sistema sólo tiene una banda de conducción y se desprecian las bandas de valencia ya que no consideraremos portadores intrínsecos, la cual se desdobla en un sistema de sub-bandas debido al confinamiento. Utilizando el formalismo de la masa efectiva determinamos las funciones de onda y las energías de los estados.

Introducción

La caracterización y la manipulación de las propiedades físicas de los sistemas nanométricos, los cuales presentan en una de sus direcciones espaciales, una magnitud del orden del nanómetros (10^{-9} m), constituyen las estructuras básicas que ha dado lugar a los dispositivos que marcan en el siglo XXI la revolución tecnológica denominada Nanotecnología que continua un paso arrollador en la actualidad. Este tipo de evento mundial, fue antecedido por el desarrollo de las teorías físicas que forman los pilares de la ciencia moderna, tal como la mecánica cuántica, la ciencia de materiales y en general lo que se conoce como nanociencia.

Richard Feynman, quien en 1959 dictó una conferencia llamada “There’s plenty of room at the bottom”, y en ella predijo la existencia de una gran cantidad de nuevos descubrimientos en sistemas de dimensiones atómicas o moleculares, si éstos se pudieran fabricar con un control absoluto de su tamaño, simetría y dimensiones. Hace pocos años las ideas de Feynman se hicieron realidad y desde entonces se han podido estudiar materiales y construir dispositivos del orden de la milmillonésima parte de un metro, es decir de 1nm que constituye lo que es conocido como sistema con efecto de tamaño cuántico.

La nanociencia es aquella parte de la ciencia que se dedica al estudio de los fenómenos y la manipulación de la materia a escala nanométrica [1], mientras que la nanotecnología se trata del diseño, caracterización, producción y aplicación de estructuras, dispositivos y sistemas a través del control del tamaño y la forma en dimensiones nanométricas. Comúnmente se utiliza el término nanotecnología para referirse a ambas disciplinas [1,2].

Las propiedades naturales de la materia a escalas nanométricas, suelen ser distintas a las que presentan en escalas superiores, microscópicas o macroscópicas, es decir, muchas de las propiedades físicas dependen del tamaño de los materiales, por ejemplo, la conductividad eléctrica, la capacidad calorífica, entre otras. Esto ha generado que gran parte de la investigación científica se oriente al estudio y manipulación de los materiales confinados con el fin de aprovechar el mejoramiento en sus propiedades volumétricas y el surgimientos de otras no presentes en el estado macroscópico.

El estudio de los fenómenos que se originan a escalas nanométricas tiene una gran importancia. La nanotecnología promete incrementar la eficiencia de la industria tradicional y desarrollar nuevas aplicaciones a través de las tecnologías emergentes. Son múltiples las áreas en las que la nanotecnología tiene aplicaciones potenciales, de hecho su avance ya influye y repercute en una amplia gama de industrias como: la de cosméticos, la farmacéutica, los electrodomésticos, la del cuidado personal, la construcción, las comunicaciones, la de seguridad y defensa, la automotriz, la aeroespacial, los semiconductores, la optoelectrónica, entre otras [3,4] . En estos momentos la nanociencia y la nanotecnología aún se encuentran en una etapa temprana de investigación y desarrollo, en la que las investigaciones, y la mayoría de las inversiones, están dirigidas hacia la comprensión de los fenómenos, los procesos y la creación de nuevos materiales en su condición de nanoestructuras [5].

Existe una gran variedad de nanoestructuras en lo que a ciencia de los materiales se refiere, entre ellas están las metálicas, aplicadas en la catálisis química, purificación y desinfección de agua, en dispositivos fotovoltaicos y en la obtención de aleaciones nanoestructuradas, las cuales son materiales de una dureza comparable a la del diamante; también existen los nanotubos de carbono, que se utilizan en la obtención de materiales muy ligeros y resistentes, y en la industria química; y los semiconductores que son ampliamente utilizados en la construcción de dispositivos electrónicos debido a sus propiedades ópticas y de transporte [5].

El confinamiento cuántico de electrones se logra en las nanoestructuras, utilizando diversos métodos de manipulación y crecimiento. Además, existen varias técnicas de caracterización como la microscopia electrónica de barrido y transmisión, la dispersión

Raman, la difracción de Rayos X y otras, con la intención de aprovechar o corroborar características físicas relacionadas con el tamaño y forma del sistema.

Los primeros trabajos sobre las nanoestructuras semiconductoras fueron realizados a principios de la década del 60 del siglo pasado por Keldysh [6,7], quien estudió las superredes. Pero el auge de la investigación llegó en la década del 70 del siglo pasado con la fabricación de las primeras superredes por Esaki y Tsu [8]. Esto estuvo vinculado al desarrollo de las técnicas de crecimiento y de dopado como la Epitaxia por haces moleculares (MBE, del inglés Molecular Beam Epitaxy), la Deposición química de vapor metal-orgánico (MOCVD, del inglés Metal Organic Chemical Vapor Deposition), Epitaxia de fase líquida, (LPE, del inglés Liquid Phase Epitaxy), Dopaje modulado (del inglés Modulation Doped), Deposición de alta temperatura (HTD, del inglés High temperature deposition), técnicas de litografía de rayos electrónicos de alta resolución [4,9,10], lo cual permitió la síntesis de los pozos cuánticos simples y múltiples con un minucioso control del orden atómico de las capas y del lugar donde se disponen las impurezas [5], así como la construcción de otras estructuras como los alambres cuánticos.

Los dispositivos semiconductores que se han desarrollado ampliamente, aportando grandes avances en la tecnología electrónica, llegaron para sustituir el uso de las válvulas o tubos de vacío como diodos, tríodos, tetrodos y pentodos, entre otros. Los primeros semiconductores fueron a base de Germanio y Silicio, que se usaron para conformar lo que se conoce como dispositivos PN, los cuales se dopaban con elementos de la tabla periódica de los grupos III y V [11]. A los semiconductores tipo N se les añade átomos del grupo V de la tabla periódica, para aumentar los portadores de carga libre negativos o electrones, mientras que a los de tipo P se les añade cierto tipo de átomos del grupo III, para aumentar los portadores de carga libre positivos o huecos.

Con el paso del tiempo, debido a la necesidad de mejores dispositivos electrónicos, los científicos construyeron artificialmente nuevos semiconductores, con el fin de poder manipular las propiedades optoelectrónicas que anteriormente no se podían, como el *gap*, la estructura de bandas, las masas efectivas de los portadores carga, etcétera. Un ejemplo es el *GaAs*, que es un semiconductor que tiene las mejores cualidades del Germanio y el Silicio.

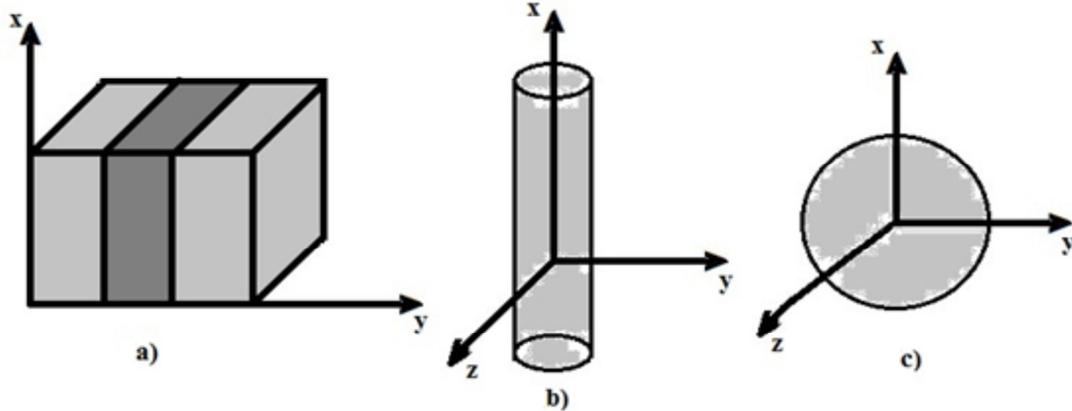


Figura I: Representación esquemática de los sistemas confinados, a) QW, b) QWW y c) QD de simetría esférica [4].

Así, con estos nuevos semiconductores, los dispositivos electrónicos mejoraron en calidad, eficiencia y potencia de funcionamiento, además de ser más pequeños, del orden de micras (10^{-6} m), pero aun con estas dimensiones el comportamiento de las partículas involucradas en los dispositivos, tal como los electrones y fonones, no muestran cambios por el efecto del tamaño, ya que la longitud de onda del electrón puede considerarse infinitamente pequeña comparada con las dimensiones de una caja donde cada uno de sus lados son del orden de las micras.

En las últimas décadas se desarrollaron los sistemas nanoestructurados que son sistemas confinados en una, dos o tres direcciones, con tamaño reducido del orden de los nanómetros. Los sistemas con una dimensión espacial confinada y dos libres se denominan cuasi-bidimensionales (Q2D), luego con dos direcciones confinadas y una libre cuasi-unidimensionales (Q1D) y con las tres dimensiones confinadas y cero libre cuasi-cerodimensionales (Q0D); el número de dimensiones confinadas del sistema afecta fuertemente las propiedades de las cuasi-partículas (electrones, huecos, excitones, fonones, etc) en los semiconductores. La geometría del sistema confinado, también afecta las propiedades físicas que presentan las partículas y cuasi-partículas, como son las propiedades ópticas dada por las reglas de transición. La clasificación de los sistemas (ver figura I) no sólo está dada por el número de direcciones confinadas, sino también por la forma o simetría de la región resultante, como son los casos del pozo cuántico (QW, del inglés Quantum Well), hilo o alambre cuántico (QWW, del inglés Quantum Well Wire) [12,13,14], y puntos cuánticos (QD, del inglés Quantum Dot).

En los pozos cuánticos el confinamiento del movimiento de las partículas se da en una dirección, de tal forma que su movimiento se hace cuasi-bidimensional teniéndose dos direcciones para el movimiento libre, para el alambre cuántico se confinan las partículas en dos direcciones, teniéndose sólo una dirección de movimiento libre, es decir, el movimiento sería cuasi-unidimensional, y en los puntos cuánticos se confinan las tres direcciones por lo que la partícula no puede moverse libremente en ninguna dirección siendo cuasi-cerodimensional [4,5,15,16,13].

Los sistemas cuasi-bidimensionales, también llamados de estructuras a capas, fueron los primeros sistemas estudiados y son construidos con heteroestructuras de diferentes materiales (principalmente de semiconductores polares). Los cuatro tipos de sistemas cuasi-bidimensionales más estudiados son: las heteroestructuras simples, SH, las heteroestructuras dobles QW, las heteroestructuras múltiples MQW (súper-pozos) y las superredes SL. Los sistemas cuasi-unidimensional más estudiados teóricamente son los de simetría rectangular y cilíndrica, mientras que en los sistemas cuasi-cerodimensionales los de simetría rectangular y esférica, debido a que en estas simetrías la ecuación de Schrödinger es separable, simplificando su solución, obteniéndose expresiones analíticas tanto de la función de onda como de la energía de los estados electrónicos y otras cuasi-partículas. Los materiales más utilizados para la producción de nanoestructuras son, en primer lugar, los semiconductores y los metales, y en segundo lugar, los compuestos dieléctricos, magnéticos y superconductores. También se han utilizado materiales orgánicos, polímeros y biomateriales [4].

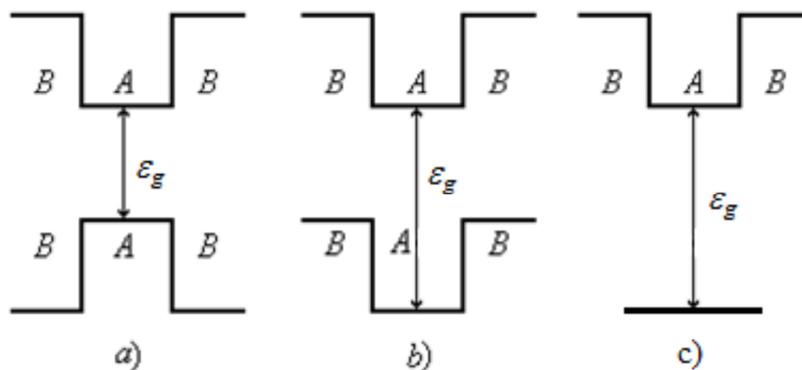


Figura II: Tipos de nanoestructuras semiconductoras. a) Tipo I; b) Tipo II; c) Tipo III [17].

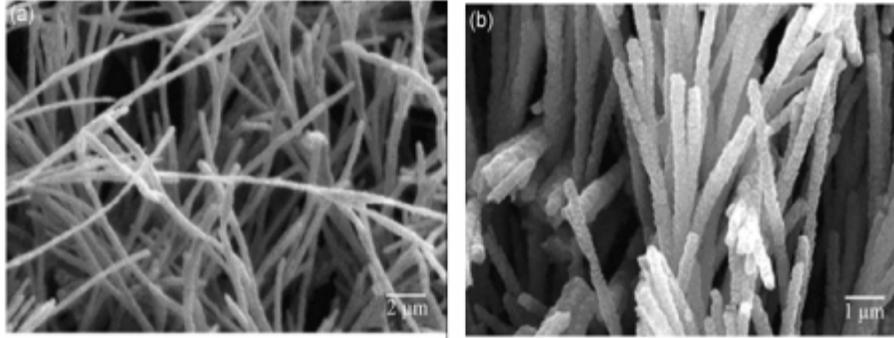


Figura III: En esta figura se aprecian alambres cuánticos experimentales *Sic-NWs* tipo β [18].

En general, las nanoestructuras son fabricadas con dos materiales semiconductores a los que podríamos identificar con las letras A y B , con *gaps* de energía \mathcal{E}_g^A y \mathcal{E}_g^B , respectivamente. En el proceso de crecimiento uno de los materiales, es depositado al lado del otro, de manera que se forma una barrera de potencial en las interfaces debido a la diferencia de *gaps* (*band-offset*). De acuerdo a la posición del *gap* se pueden distinguir varios tipos de nanoestructuras [5]. Por ejemplo, en las nanoestructuras tipo I el material crea una barrera tanto para los electrones de la banda de conducción como para los de la banda de valencia, esta barrera se encuentra dentro del material A (ver figura II a). Ejemplos de este tipo de nanoestructuras son $GaAs/GaAlAs$, $Ga_{0.4}As_{0.53}/InP$ y $GaSb/AlSb$. En las nanoestructuras tipo II, también llamadas nanoestructuras escalonadas, el material A actúa para los electrones de conducción como un pozo de potencial y para los electrones de valencia como una barrera (ver figura II b). Ejemplo de este tipo de nanoestructuras son $InP/Al_{0.53}In_{0.47}As$, donde los electrones están en su mayoría en InP y los huecos en el $Al_{0.53}In_{0.47}As$, y el $InAs/GaSb$ donde los electrones en su mayoría se concentran en $InAs$ y los huecos en $GaSb$. En las nanoestructuras tipo III las excitaciones se encuentran en las interfaces donde las partículas que interactúan están separadas espacialmente, una situación que recuerda a la de los estados límite de impurezas creados por las impurezas colocadas en las barreras de las estructuras cuánticas [4].

Un alambre cuántico es un sistema cuasiunidimensional, donde la dirección confinada es la radial. Existen muchos tipos de alambres cuánticos, metálicos (Ni , Pt , Au), semiconductores (Si , Ge , $GaAs$) y aislantes (SiO_2). Se espera que los alambres cuánticos puedan tener aplicaciones múltiples por ejemplo en optoelectrónica, como sensores, celdas

fotovoltaicas, láseres, dispositivos de almacenamiento de memoria, creación de imágenes, y muchas otras [19,20]. También, se espera la creación de transistores basados en alambres cuánticos los cuales presentan una movilidad mucho mayor de los portadores de carga que los transistores convencionales y con ellos se puede construir láseres con una mayor estabilidad térmica. En general, el diámetro de un alambre cuántico oscila entre uno y cien nanómetros y su longitud llega hasta los cien micrómetros [21].

En los primeros intentos para construir estructuras tipo alambres cuánticos, se toparon con diversas dificultades, ya que durante el procedimiento se utilizaba un dispositivo tipo pozo cuántico ya desarrollado y se separaba del sistema original, esto propiciaba que el pozo fuera contaminado por el aire exterior, propiciando que los portadores se recombinaran de manera no radiativa, además de utilizarse métodos químicos que pueden dañar el dispositivo [21,22]. Se han implementado varias técnicas para mejorar el proceso de construcción de alambres cuánticos, una de ellas fue el uso de *GaAlAs* para cubrir las paredes del pozo, así se lograba tener una banda de energía prohibida más grande, a este procedimiento se le llama decrecimiento. Con el paso del tiempo nacieron nuevos métodos que permitían tener alambres de mayor calidad tales como el método *in situ*, donde el procedimiento es realizado en ultra alto vacío, además de varios métodos complicados y sofisticados que no permiten la exposición de la nanoestructura a agentes externos que pudieran mermar la calidad [23].

Como hemos mencionado, el estudio teórico de las propiedades de las nanoestructuras se realiza mediante el uso de las leyes y principios de la mecánica cuántica. La función de onda y las energías se obtienen al resolver la ecuación de Schrödinger, la cual contiene la información del sistema mediante las interacciones presentes, para esto podemos elegir el sistema coordinado que más convenga para analizar alguna estructura cuántica y así facilitar la solución matemática de la ecuación, por ejemplo, si el sistema tiene simetría cuadrada, utilizamos las coordenadas cartesianas. En nuestro caso estudiamos un alambre cuántico doble, por lo tanto las coordenadas más adecuadas para estudiar esta estructura son las cilíndricas (ρ, θ, z) . La ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas en un campo de potencial V para electrones tiene la forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(\rho, \theta, z) + [V - E] \psi(\rho, \theta, z) = 0$$

donde μ es la masa efectiva del electrón.

Existen distintos métodos para encontrar la función de onda de un electrón en una estructura sólida, como son los métodos clásicos cuando el sólido es estacionario en equilibrio térmico: el tight-binding (electrón fuertemente ligado), el de combinación lineal de ondas planas (electrón cuasilibre) y el de ondas planas ortonormalizadas (OPW pseudopotencial), otros se basan en métodos de primeros principios [24], en todos se debe considerar la interacción de los iones del material. Por lo regular es necesario tener programas de cómputo para determinar aunque sea de manera aproximada la función de onda. Sin embargo, el método que utilizaremos es el de la Aproximación de la Masa Efectiva (*EMA*) o Aproximación de la Función Envolvente (*EFA*); el cual es un método que permite simplificar la interacción dada por los electrones y el potencial cristalino del material en cuestión redefiniendo o renormalizando la masa del electrón usando la teoría de bandas. De esta forma podemos considerar al electrón como una cuasi-partícula en el sistema físico real afectado por el potencial del cristal, esta “nueva masa” puede ser medida experimentalmente.

En la actualidad existen muchos trabajos de investigación de nanoestructuras compuestas por pozos cuánticos sencillos o múltiples, alambres cuánticos y puntos cuánticos, donde se estudian teóricamente las propiedades electrónicas y ópticas de las mismas, como por ejemplo la conductividad eléctrica, además se puede obtener la dispersión Raman. Estos estudios conducen a múltiples aplicaciones, por ejemplo, pueden proponer el desarrollo de varios tipos de dispositivos láser.

Para llevar a cabo este trabajo de tesis nos hemos basado en varios artículos de investigación del área respectiva para poder comparar nuestros resultados [4,5,11,15,13,21,22]. Así como el uso de libros que tratan temas relacionados y la teoría necesaria. [1,25]. Nuestro trabajo hemos desarrollado una metodología para estudiar estados estacionarios de un electrón sometido a un potencial externo del perfil de un alambre cuántico semiconductor doble de sección transversal cilíndrica obtenido a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. También analizaremos los casos límites que son el alambre

cuántico con sección transversal en forma de disco circular y con forma de anillo circular. Utilizando el formalismo de la aproximación de la función envolvente y la aproximación de la masa efectiva. Esto con el objetivo de llevar a cabo el análisis teórico, con el fin de estudiar las propiedades físicas de sistemas de dimensiones pequeñas, ya que la función de onda de un sistema determina las propiedades del sistema cuántico.

Así, los objetivos principales de este trabajo de tesis son:

1. Obtener los estados electrónicos para los casos límite de un alambre cuántico doble semiconductor de simetría cilíndrica, el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco circular y el alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo circular, utilizando la aproximación de la masa efectiva y considerando que el sistema ha sido crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$.
2. Obtener los estados electrónicos de un alambre cuántico doble semiconductor de simetría cilíndrica, utilizando la aproximación de la masa efectiva y considerando que el sistema ha sido crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$.
3. Analizar con detalle el comportamiento de los estados electrónicos al variar el tamaño del sistema.

Con el objetivo de facilitar la lectura y comprensión de este trabajo, hemos organizado el manuscrito de la siguiente forma: primeramente iniciamos con el prefacio, donde se brinda al lector una síntesis completa del trabajo realizado; una introducción que muestra la importancia, actualidad y motivación de la tesis, que ubica al lector sobre la temática tratada desde un punto de vista general; después en el capítulo 1 se exponen los fundamentos teóricos necesarios para la investigación realizada; en el capítulo 2 se obtienen los estados electrónicos de los casos límite del alambre cuántico semiconductor doble que son el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco cilíndrico y con forma de anillo circular; finalmente en el capítulo 3 se obtienen los estados electrónicos del alambre cuántico semiconductor doble.

Capítulo 1: Fundamentos teóricos

En este capítulo desarrollaremos el marco teórico correspondiente a este trabajo de tesis. Haremos referencia a los modelos, fundamentos físicos como leyes, conceptos, juicios, teorías y aproximaciones más importantes que se utilizan para obtener los estados electrónicos en una nanoestructura. Para ello estudiaremos la dinámica de los electrones en el sólido, la cual conduce a la aproximación de la función envolvente.

1.1. Dinámica de los electrones

En un sólido existen regiones del espectro energético de los electrones con energías permitidas y prohibidas debido a la estructura periódica de los iones que conforman la red del cristal; por ejemplo en la Figura 1.1 se muestra la estructura de bandas del *GaAs*, el cual es representativo de los materiales III-V. En los semiconductores el estado base de los electrones presentan varias bandas, las cuales pueden estar totalmente ocupadas, a las que se les denomina **bandas de valencia**, y otras totalmente o parcialmente vacías, las cuales se denominan **bandas de conducción** (si el semiconductor es dopado con impurezas donadoras entonces la banda de conducción está parcialmente llena). La zona de energía situada entre la banda de valencia y la de conducción se conoce como banda prohibida o por la palabra inglesa *gap*. En estos materiales III-V, tanto el máximo de la banda de valencia como el mínimo de la banda de conducción se encuentran en el punto Γ , por lo que son conocidos como materiales de *gap* directo. También es posible que los extremos de las bandas de conducción o de valencia puedan hallarse en los puntos L , X o en cualquier otro punto de alta simetría del cristal, éstos son conocidos como materiales de *gap* indirecto, un ejemplo de ello es el silicio: *Si*.

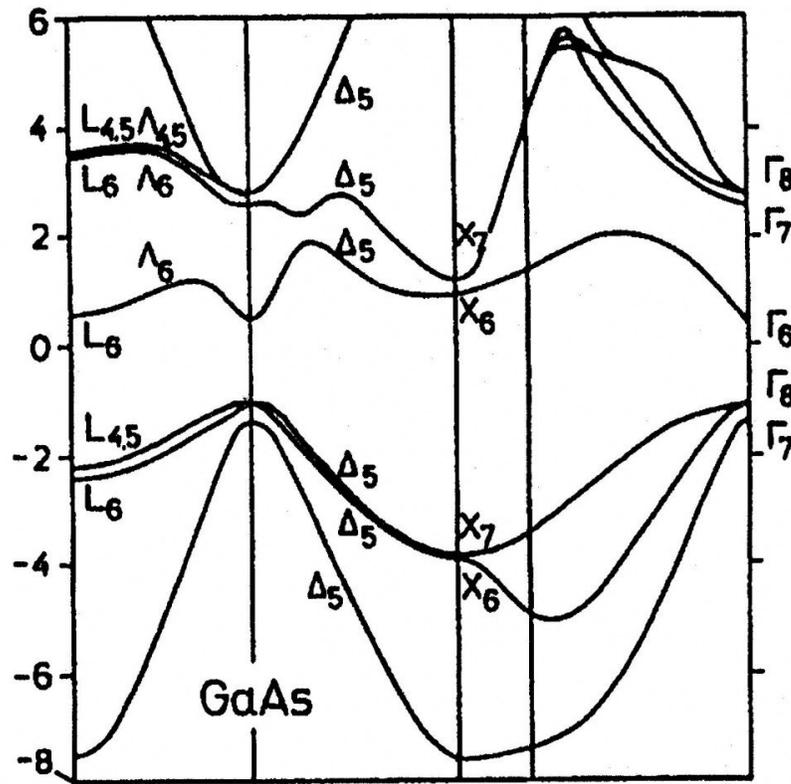


Figura 1.1 Estructura de bandas del *GaAs*

Existen varios métodos y aproximaciones para estudiar el problema dinámico de la mecánica de los electrones en un sólido cristalino. La aproximación más conocida y utilizada es la llamada **Aproximación de la masa efectiva (EMA)**, también conocida como **Aproximación de la función envolvente (EFA)**, la cual fue desarrollada por primera vez por Luttinger y Kohn [26]. Esta teoría reemplaza la interacción del potencial cristalino con los electrones por un tensor de masa efectiva, es decir renormaliza la masa del electrón. Las componentes del tensor de masa efectiva se pueden determinar experimentalmente permitiendo realizar cálculos analíticos e interpretaciones físicas, lo que en ocasiones es imposible si usáramos otros métodos con un potencial adicional externo al cristalino como: el electrón fuertemente ligado (*tight binding*), ondas planas ortonormalizadas (*seu-do-potencial*) y $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Estos métodos en general resuelven el problema de los electrones cuando solo el electrón está sometido al potencial del cristal que es el caso estático, pero en el caso de una nanoestructura donde existe un potencial de confinamiento adicional, entonces en ocasiones hay que determinar la solución desde su inicio con técnicas de cálculo

computacionales.

La característica que define el grado de confinamiento de los electrones es la longitud de onda de De-Broglie y también en el caso de semiconductores el radio efectivo de Böhr de los excitones, a_B^* . Esta magnitud es generalmente mucho mayor que la constante de la red, a_L , por lo que es comparable con el tamaño del confinamiento en cada una de sus direcciones, d . De esta comparación se pueden determinar dos regímenes de confinamiento de las cuasi-partículas:

- **Régimen de confinamiento débil:** cuando $a_B^* \ll d$, entonces los pares electrón-hueco se comportan como excitones, por ser el potencial de atracción colombiano más fuerte que el de confinamiento.
- **Régimen de confinamiento fuerte:** cuando $a_B^* \gg d$ y $d \gg a_L$ entonces los pares electrón-hueco se consideran libres y no forman excitones por ser el potencial de confinamiento mucho mayor que el de la interacción coulombiana.

En el régimen de confinamiento fuerte el electrón y el hueco pueden ser consideradas predominantemente como partículas independientes, es decir, se desprecia la interacción coulombiana entre ellas, con sólo una pequeña corrección espacial. En este régimen no es posible utilizar el modelo de barreras infinitas para describir las nanoestructuras; ya que al ser el radio de Böhr mayor que el tamaño del confinamiento la posibilidad de que una de las partículas, el electrón o el hueco, salga de la nanoestructura es muy grande (efecto túnel) y si las barreras de potencial son infinitas la posibilidad de tunelaje es nula.

1.2. Aproximaciones para la solución del problema cuántico del sólido cristalino.

En un sólido cristalino se encuentran dos grandes sistemas de partículas, los electrones y los iones que forman la red cristalina. Para encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger en el sólido cristalino es necesario determinar las interacciones que se presentan en este tipo de sistema, es decir, el hamiltoniano. En el hamiltoniano se debe de incluir la energía cinética de los electrones \hat{H}_e^k y la energía cinética de los iones \hat{H}_I^k ,

además debemos conocer la interacción entre los electrones \hat{H}_{e-e}^{int} , la interacción entre iones \hat{H}_{I-I}^{int} y la interacción entre iones y electrones \hat{H}_{I-e}^{int} .

Así el hamiltoniano toma la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_e^k + \hat{H}_I^k + \hat{H}_{e-e}^{int} + \hat{H}_{I-I}^{int} + \hat{H}_{I-e}^{int} \quad (1.1)$$

Debido a que este es un problema de un gran número de partículas de diferente naturaleza (electrones e iones), donde existen interacciones entre partículas del mismo tipo y de diferentes tipos, la solución de la ecuación de Schrödinger no se puede obtener si no se utilizan algunos modelos físicos y aproximaciones que permitan separar el hamiltoniano en dos hamiltonianos de partículas diferentes, por lo tanto se han buscado alternativas para estudiar el sistema de forma aproximada, que nos simplifique el problema sin modificar su esencia. Enseguida describiremos algunos de los métodos y aproximaciones más comunes, entre los cuales abordaremos al final para los electrones la aproximación de la masa efectiva que es de especial interés en este trabajo.

1.2.1. Aproximación de valencia

La aproximación de valencia consiste principalmente en considerar sólo las excitaciones de los electrones más externos o electrones de valencia del átomo, ya que en estos recaen la mayoría de las propiedades químicas y eléctricas [5]. Bajo estos argumentos el átomo puede considerarse compuesto por dos partes:

- 1) Los **electrones de valencia**, que son aquellos electrones correspondientes a las capas externas semi-llenas de los átomos, y que son los responsables de casi todas las propiedades del material, entre ellas las propiedades químicas, ópticas, electrónica, de transporte y estructurales características de los sólidos [27,28].
- 2) El **core**, el cual está formado por el núcleo y los electrones internos correspondientes a las capas completamente llenas, es decir, los orbitales más profundos y cercanos al núcleo. Estos electrones están fuertemente ligados a los núcleos, y se distribuyen en torno a ellos de forma similar a como lo hacen en los átomos aislados. El núcleo junto a estos electrones forman los llamados iones de la red, que suele llamarse también como **corazón iónico**.

Los electrones de valencia son susceptibles a las perturbaciones externas, ya sean campos eléctricos, magnéticos, temperatura, entre otras, y su densidad de carga varía considerablemente al estar débilmente ligados a núcleo atómico. Por el contrario, el corazón iónico se puede considerar casi insensible al entorno del átomo, pues sus electrones están fuertemente ligados al núcleo, por lo que su densidad electrónica prácticamente no varía.

1.2.2. Aproximación de Born-Oppenheimer

La segunda aproximación que se requiere para la obtención de los estados electrónicos del sólido es llamada Aproximación de Born-Oppenheimer. Esta aproximación consiste en considerar el movimiento de los electrones por separado del movimiento de los núcleos, es decir desacoplar los grados de libertad electrónicos de los vibracionales de un sólido [28]. Los electrones y los iones están sometidos a fuerzas de igual magnitud, pero al ser la masa de los electrones mucho menor que la de los iones la velocidad de los dos movimientos son muy diferentes, por lo que podemos considerar que los electrones responden inmediatamente al movimiento de los iones; mientras que los iones van evolucionando conforme a un potencial de interacción con los electrones, que se obtiene resolviendo la correspondiente ecuación electrónica para diferentes configuraciones iónicas fijas [29,30,31]. Esto significa que los electrones siempre “ven” al ion fijo en una sola posición lo que se corresponde con la aproximación de Born-Oppenheimer de orden cero en teoría de perturbaciones que es lo que se conoce como aproximación adiabática.

El operador hamiltoniano del sólido, ver ecuación (1.1), puede escribirse de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_l \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right) + \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_l V_{l-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l) \right) \quad (1.2)$$

en este caso \mathbf{R}_l es la posición del l -ésimo ión, con respecto a su posición de equilibrio, \mathbf{r}_i es la posición del i -ésimo electrón, M es la masa de los iones, y μ la masa de los electrones.

Este hamiltoniano puede ser considerado como la suma de dos hamiltonianos, un hamiltoniano para los iones y otro para los electrones, por esta razón la solución a la

ecuación se puede representar como la multiplicación de dos funciones, una que represente a la solución para los electrones y otra que represente la solución para los iones, es decir

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \phi(\mathbf{R})$$

De tal forma que $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ satisface la ecuación de Schrödinger para los electrones en una red estática con el ión l -ésimo fijo en \mathbf{R}_l y $\phi(\mathbf{R})$ es una ecuación similar para los iones. Entonces la ecuación de Schrödinger para los electrones toma la forma

$$\sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{ij} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{il} V_{l-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l) \right] \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \varepsilon_e(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (1.3)$$

Aplicando el hamiltoniano a la solución propuesta para el sólido y utilizando la ecuación (1.3), tenemos que:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} \Psi + \varepsilon_e(\mathbf{R}) \Psi + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \Psi \\ &= \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \varepsilon_e(\mathbf{R}) + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right\} \phi(\mathbf{R}) + C(\mathbf{R}) \end{aligned}$$

donde

$$C(\mathbf{R}) = -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \left\{ 2 \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{R}_l} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}_l} + \phi \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{R}_l^2} \right\}$$

Si fuera posible despreciar $C(\mathbf{R})$, se obtiene una ecuación Schrödinger para el movimiento de los iones de la siguiente forma

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \varepsilon_e(\mathbf{R}) + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right\} \phi(\mathbf{R}) = \varepsilon_l \phi(\mathbf{R})$$

cuya única diferencia es que hemos añadido a la interacción directa entre los iones, el término $\varepsilon_e(\mathbf{R})$, que es la energía de los electrones en términos de las posiciones de los iones, esta es la contribución adiabática de los electrones a la energía de la red, que cambia al seguir el movimiento de los electrones en la red.

El término $C(\mathbf{R})$ depende de la configuración electrónica del sólido, la cual en la práctica no varía de forma notable, ya que los procesos de conductividad normal en los sólidos sólo implican el reajuste de “pocos” electrones cerca de la superficie de Fermi. De manera que $C(\mathbf{R})$ puede calcularse considerando que todos los electrones se encuentran en su estado fundamental. Se puede demostrar, que el término $C(\mathbf{R})$, el cual es conocido como el término no adiabático, prácticamente no contribuye al valor energía de la del sistema en el estado Ψ .

El primer término se hace cero en el cálculo del valor esperado de la energía ya que produce integrales del siguiente tipo:

$$\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}_l} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_l} \iint \psi^* \psi d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{\partial n_e}{\partial \mathbf{R}_l}$$

donde n_e es el número total de electrones. El segundo término es pequeño debido a que los electrones están fuertemente ligados a los iones y por lo tanto el cambio de posición de los iones es pequeño, es decir, $\psi(\mathbf{R}_l, \mathbf{r}_i) = \psi(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l)$, esto genera una contribución de la siguiente forma:

$$-\int \psi^* \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{R}_l^2} d\mathbf{r} = -\int \psi^* \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{r}_i^2} d\mathbf{r} = -\frac{\mu}{M} \int \psi^* \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{r}_i^2} d\mathbf{r}$$

donde podemos ver que la ecuación anterior es μ/M veces la energía cinética de los electrones, que comparado con las energías térmicas ordinarias es una cantidad que se puede despreciar, ya que μ/M es del orden de 10^{-4} y 10^{-5} [29,32].

Los elementos del término adiabático $C(\mathbf{R})$, aquellos que se encuentran fuera de la diagonal, son los que dan lugar a las transiciones electrónicas cuando los iones se mueven, esto no es otra cosa que la interacción electrón-fonón, la cual no consideramos en este trabajo.

Así el hamiltoniano queda en forma reducida como:

$$\hat{H} = \hat{H}_e^k + \hat{H}_{e-e}^{\text{int}} + \hat{H}_{I-e}^{\text{int}}.$$

A pesar de todas las consideraciones la ecuación sigue sin ser separable, debido a que depende de todas las coordenadas de cada uno de los electrones de valencia, esto nos lleva a realizar otras aproximaciones.

1.2.3. Aproximación de Campo Medio o Aproximación Monoeléctronica

Después de utilizar la aproximación de valencia y la aproximación adiabática, se puede dar otro paso para simplificar la ecuación Schrödinger que describe el sistema físico de los electrones e iones, es decir, del sólido. Éste consiste en representar la función de onda del sólido, como funciones de onda individuales para cada electrón, lo se logra utilizando el método de Hartree-Fock [28,30].

La aproximación del Campo Medio consiste en cambiar la energía potencial de interacción entre los electrones por un campo de energía potencial de la forma $\sum_{k=0}^n \tilde{U}(r_i)$, que representa la interacción del i -ésimo electrón con cierto potencial efectivo, donde cada electrón se mueve independientemente. Se debe considerar que el movimiento del i -ésimo electrón modifica el campo medio ya que es parte del mismo [30]. De esta manera el hamiltoniano no depende de la interacción entre los electrones y es la suma de los hamiltonianos de cada electrón por separado. Con esto tenemos que la solución a la ecuación de Schrödinger es un producto de las funciones de onda monoeléctronicas, es decir, de la función de onda de cada electrón del sistema.

Por el principio de exclusión de Pauli, la función de onda tiene que cumplir la condición de ser antisimétrica, es decir, la función de onda se puede escribir como un determinante Slater [33]:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_2(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

donde N es el número total de electrones y \mathbf{r}_i representa las tres coordenadas y el espín de cada electrón. Este determinante cumple con que la función de onda sea antisimétrica

respecto a la permutación de dos partículas cualesquiera. Si se buscan variacionalmente las funciones de onda monoeléctricas de manera que se minimice el valor medio de la energía se obtienen las llamadas ecuaciones de Hartree-Fock. Estas ecuaciones se pueden resolver directamente y sirven de base para un conjunto de métodos numéricos que se agrupan bajo el nombre de química cuántica [5,34].

1.2.4. Aproximación de la Masa Efectiva

Con la aproximación de la Masa Efectiva se obtienen ecuaciones de gran utilidad para estudiar los estados que se presentan energéticamente en los límites de la banda de conducción, ya que son ecuaciones relativamente sencillas pero cualitativamente correctas, que permite un análisis bastante completo de la física del sólido [26]. Entonces tenemos que en un cristal la ecuación de Schrödinger monoeléctrica es de la forma:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu_0} + V(\mathbf{r}) \right) \psi = \mathcal{E}\psi(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

donde μ_0 es la masa del electrón libre, $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico de la red cristalina y $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador de momento. El conmutador del hamiltoniano con el operador de traslación es cero, $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, esto es debido a que el hamiltoniano es invariante ante traslaciones en la red, lo que hace de \mathbf{k} un buen número cuántico. Así podemos escoger autofunciones del hamiltoniano y del operador de traslación \hat{T}_d simultáneamente.

$$\hat{T}_d \psi_k(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{d}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}} \psi_k(\mathbf{r})$$

El teorema de Bloch permite escribir la función de onda electrónica de un cristal infinito como producto de una función periódica $u_{nk}(\mathbf{r})$ definida en la celda unidad del cristal, denominada función de Bloch, por una función envolvente $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ que cambia lentamente en la estructura.

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

Así la función de onda queda matemáticamente compuesta por un producto de una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ que es modulada por una función $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en la celda unidad, con la cual se puede describir las perturbaciones de la red sobre los electrones libres en el sólido cristalino.

Sustituyendo (1.5) en (1.4), tenemos:

$$\left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu_0} + \frac{\hbar}{2\mu_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_0} + V(\mathbf{r}) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

ahora

$$\hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu_0} + \frac{\hbar}{2\mu_0} \mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_0} + V(\mathbf{r})$$

es conocido como el hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, el cual describe la función de onda de un electrón libre en un cristal tridimensional infinito. Para un \mathbf{k} dado, el conjunto de todas las $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es completo para funciones con la periodicidad del cristal. Por lo tanto, si tomamos $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, la función de onda para cualquier \mathbf{k} puede expresarse en términos de $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$.

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n C_{n'n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$$

La ecuación (1.6) puede reescribirse como sigue:

$$\left\{ \hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}} + \frac{\hbar}{\mu_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2\mu_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

A partir de la cual se obtiene una ecuación de autovalores para la energía si multiplicamos por $u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ e integramos en el volumen de la celda unitaria, entonces

$$\sum_{n'} \left[\left\{ \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{2\mu_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right\} \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{\mu_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] c_{nn'} = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) \quad (1.7)$$

donde

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

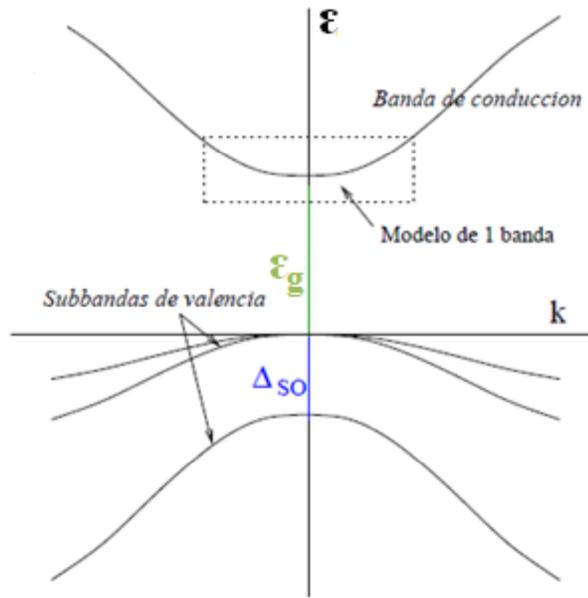


Figura. 1.2 Representación esquemática de la estructura de banda de un semiconductor de *gap* directo en las proximidades del punto Γ de la zona de Brillouin [5].

Para un semiconductor de *gap* directo, la diagonalización del hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, proporciona la distribución de los niveles energéticos en los alrededores del centro de la zona de Brillouin (punto Γ , $\mathbf{k} = 0$), como se ilustra en la figura 1.2. Dicha distribución muestra la división de las bandas de energía, etiquetadas por el número cuántico n , donde aparecen regiones de energía prohibida o *gaps*, inducidas por el potencial periódico del sistema. La banda de conducción se forma como una combinación de orbitales atómicos de tipo *s* y por tanto, al contrario que la banda de valencia, está constituida por una única subbanda (doblemente degenerada si se consideran los grados de libertad del espín), separada de la banda de valencia por una cantidad de energía ϵ_g . Cuando ϵ_g es lo suficientemente grande como, para apreciar la separación de la banda de valencia y la de conducción, el hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ puede ser aproximado a un hamiltoniano de una sola banda [5].

Sabemos que los autovalores de una cantidad física en general forman una matriz con todos los posibles resultados, para la ecuación (1.7) se obtienen elementos fuera de la diagonal que vuelven un poco complicado el análisis físico, pero cuando el valor $\mathbf{k} \cong \mathbf{k}_0$ los elementos fuera de la diagonal son pequeños:

$$\frac{\hbar}{\mu_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{nn'}$$

y entonces pueden tratarse como una perturbación del hamiltoniano $\hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}}$. Para el caso de una sola banda se usa la teoría de perturbaciones hasta segundo orden, teniendo como resultado que la ecuación de autovalores (1.7) queda como sigue:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{\mu_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{nn'} + \frac{\hbar^2}{2\mu_0}(k^2 - k_0^2) + \frac{\hbar^2}{\mu_0^2} \sum_{n'} \frac{|(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{nn'}|^2}{\mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) - \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{k}_0)}$$

esta ecuación es válida en el entorno de \mathbf{k}_0 , por lo regular \mathbf{k}_0 es un extremo de la banda, lo que implica que el término lineal, $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = 0$.

Así utilizando los ejes principales tenemos que la energía de una partícula es:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{0i})^2}{\mu_i^*} \quad (1.8)$$

aquí

$$\frac{1}{\mu_i^*} = \frac{1}{\mu_0} + \frac{2}{\mu_0^2} \sum_{n'} \frac{|\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{P}_{nn'}|^2}{\mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) - \mathcal{E}_{n'}(\mathbf{k}_0)}$$

donde μ_i^* son las llamadas masas efectivas en las direcciones de simetría y \mathbf{u}_i son los vectores de dichas direcciones. Cuando el sistema físico es isótropo las masas efectivas son iguales en cualquier dirección, con esto la ecuación (1.8) se reduce a:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{\mu^*}$$

que representa la energía de una partícula libre de masa μ^* . Este modelo muestra que la interacción de un electrón con el potencial cristalino es equivalente a un cambio de masa de la partícula.

En el caso de un electrón la energía tiene la siguiente relación de dispersión:

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2}{2\mu^*} k^2$$

donde se puede deducir que μ^* es la nueva masa del electrón, bajo la acción de un potencial constante, y está determinada por la curvatura de la relación de dispersión,

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial k^2}$$

La masa reducida en general es un tensor de segundo rango, y los valores del vector de onda \mathbf{k} son distintos para cada dirección, esto es debido a que la masa reducida en general es anisótropa. Así, la respuesta de un electrón frente a un potencial cristalino es una respuesta dinámica.

El análisis anterior se realizó utilizando un método perturbativo por lo que este modelo sólo funciona para valores cercanos a $\mathbf{k} = 0$, si consideramos valores mayores la aproximación parabólica para $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ deja de ser cierta, por lo tanto la masa efectiva deja de ser una constante. De esta forma, la aproximación de la función envolvente no es un método general. Fundamentalmente, su rango de aplicación se restringe a la vecindad de puntos de alta simetría como Γ , X y otros de la Zona de Brillouin. De cualquier manera, este modelo es relativamente sencillo comparado con otros, pero ha resultado ser de gran utilidad para el cálculo de propiedades físicas con una adecuada precisión, sus resultados han sido ampliamente comprobados y minimiza el tiempo de cómputo comparado con otros modelos, para este trabajo resulta de gran interés ya que es la aproximación utilizada para encontrar los valores de energía de nuestro sistema cuántico.

Capítulo 2: Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor

En este capítulo se estudian los estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica, para dos casos; primero un alambre con sección transversal con forma de disco y en segundo lugar el alambre cuántico con sección transversal con forma de anillo. Estos son los casos límites de un alambre cuántico doble, que se puede considerar una combinación de los sistemas que estudiamos en este capítulo. Por tanto, se obtienen la función de onda y los niveles de energía que corresponden a estos dos sistemas para el estudio de un alambre cuántico doble.

2.1. Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal circular

Consideraremos un electrón confinado en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco, de radio r_a y longitud L , donde L es lo suficientemente grande para evitar los efectos de confinamiento en esa dirección, (ver figura 2.1). Asumiremos un modelo simple de bandas parabólicas para el electrón confinado, las cuales se desdoblán en un sistema de subbandas, debido al confinamiento. Se estudiarán los estados cerca del centro de la zona de Brillouin. Por lo regular este método se utiliza para estudiar semiconductores binarios del tipo II-VI y III-V, lo cual es consistente con tratamiento previos [35,36]. Además, consideramos que el sistema está a una temperatura de $T = 0$ *kelvin*. Las nanoestructuras son sistemas dinámicos, debido

a que están sometidas a un potencial de barrera o confinamiento. La aproximación de la función envolvente o de la masa efectiva, la cual fue discutida anteriormente, fue utilizada por primera vez en sistemas cuasi-bidimensionales por Bastard [37,38].

Para obtener los estados de energía de la cuasi-partícula en una nanoestructura, en el esquema de la función envolvente, es necesario las condiciones de contorno que deben cumplir la parte de variación lenta de la función de onda en la superficie entre los dos semiconductores (intercara). En lo que sigue, asumiremos que las redes de los materiales que constituyen la nanoestructura empalman perfectamente y cristalizan con la misma estructura. Para aplicar la aproximación de la función envolvente consideraremos dos requerimientos claves

- 1) La función de onda se obtiene de resolver la ecuación de Schrödinger para cada banda.
- 2) Las partes periódicas de las funciones de Bloch son asumidas iguales en cada material que constituye la nanoestructura.

La función de onda de las cuasi-partículas para nuestro caso se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger, con el respectivo perfil de potencial y de masa efectiva,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = \mathcal{E} \varphi \quad \text{con} \quad V(r), \mu = \begin{cases} 0, & \mu_1, & r \leq r_a \\ V_0, & \mu_2, & r > r_a \end{cases} \quad (2.1)$$

donde V_0 representa la “altura” de la barrera de potencial; mientras que μ_1 y μ_2 son la masas efectivas de electrón en el interior y en el exterior del alambre respectivamente. Las condiciones de frontera son:

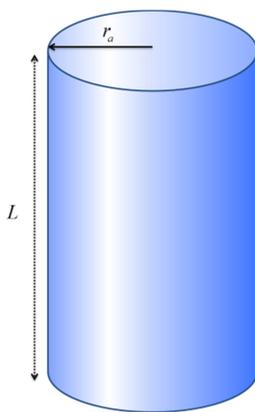


Figura 2.1 Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco, de radio r_a y longitud L . La región azul es la región donde se confina al electrón.

$$\varphi|_{r\epsilon S^-} = \varphi|_{r\epsilon S^+} \quad \text{y} \quad \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r\epsilon S^-} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r\epsilon S^+}$$

Para el caso en que la energía $\mathcal{E} < V_0$, la solución a la ecuación (2.1), por el método de separación de variables se propone como [39,40,41].

$$\varphi(r, \theta, z) = R(r)\Phi(\theta)Z(z) \quad \text{y} \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}_z + \mathcal{E}_r \quad (2.2)$$

donde (r, θ, z) es el conjunto de coordenadas cilíndricas.

Sustituyendo (2.2) en (2.1) y trabajando en coordenadas cilíndricas, tenemos que la ecuación de Schrödinger queda de la forma

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] R(r)\Phi(\theta)Z(z) = [V(r) - \mathcal{E}_z - \mathcal{E}_r] R(r)\Phi(\theta)Z(z)$$

de manera que dividiendo toda la ecuación por $R(r)\Phi(\theta)Z(z)$ obtenemos

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{rR(r)} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{1}{r^2\Phi(\theta)} \frac{d^2}{d\theta^2} \Phi(\theta) + \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2}{dz^2} Z(z) \right] = [V(r) - \mathcal{E}_z - \mathcal{E}_r]$$

De esta forma al usar el método de separación de variables obtenemos un sistema de dos ecuaciones

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0 \quad \text{donde} \quad k_z^2 = \frac{2\mu_1}{\hbar^2} \mathcal{E}_z \quad (2.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{rR(r)} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{1}{r^2\Phi(\theta)} \frac{d^2}{d\theta^2} \Phi(\theta) \right] + [V(r) - \mathcal{E}_r] = 0 \quad (2.4)$$

La solución para la ecuación (2.3) es una función oscilatoria normalizada de la siguiente forma:

$$Z(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ik_z z} \quad \text{donde} \quad \mathcal{E}_z = \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2, \quad (2.5)$$

La ecuación (2.4) la podemos separar en una parte angular y una parte radial. Entonces para la parte angular tenemos que

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \lambda_\phi \Phi = 0.$$

Considerando la simetría del sistema debe cumplirse que $\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta)$, por tanto

$$\lambda_\phi = m^2 \quad \text{donde} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

así la solución normalizada queda,

$$\Phi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \quad (2.6)$$

La parte radial de la ecuación (2.4) tiene entonces la siguiente forma

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V_0 - \frac{m^2}{r} \right] R(r) = 0 \quad \text{si} \quad r \leq r_a \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} R(r) \right] - \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 - \mathcal{E}_r) + \frac{m^2}{r} \right] R(r) = 0 \quad \text{si} \quad r > r_a \quad (2.8)$$

La solución de las ecuaciones (2.7) y (2.8) son las conocidas funciones de Bessel, la función de onda debe estar acotada en $r = 0$ y $r = \infty$, por lo tanto la solución queda de la siguiente forma:

$$R(r) = \begin{cases} A_m J_m(x), & r \leq r_a \\ B_m K_m(y), & r > r_a \end{cases} \quad (2.9)$$

donde

$$x(r) = r \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} \mathcal{E}_r} \quad \text{y} \quad y(r) = r \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]}$$

J_m y K_m son la función Bessel de orden m y la función Bessel modificada m , respectivamente.

Para determinar las constantes A y B de la ecuación (2.9) debemos aplicar la primera condición de frontera, $\varphi|_{r \in S^-} = \varphi|_{r \in S^+}$ para $r = r_a$, definiendo que $x_a = x(r_a)$ y que $y_a = y(r_a)$, encontramos que:

$$B_m = \frac{J_m(x_a)}{K_m(y_a)} A_m$$

Si aplicamos la condición de normalización se obtiene a A , que tiene la siguiente forma

$$A = \left\{ \|J_m(x_a)\|^2 + \left[\frac{J_m(x_a)}{K_m(y_a)} \right]^2 \|K_m(y_a)\|^2 \right\}^{-1/2}$$

donde $\|J_m(x_a)\|$ y $\|K_m(y_a)\|$ son las normas de la función Bessel y la función Bessel modificada, respectivamente:

$$\|J_v(\alpha)\|^2 = \int_0^{r_0} J_v^2(\alpha r) r dr = \frac{r_0^2}{2} \left\{ [J'_v(\alpha r_0)]^2 + \left[1 - \left(\frac{v}{\alpha r_0} \right)^2 \right] J_v^2(\alpha r_0) \right\},$$

$$\|K_v(\alpha)\|^2 = \int_{r_0}^{\infty} K_v^2(\alpha r) r dr = \frac{r_0^2}{2} \left\{ [K'_v(\alpha r_0)]^2 - \left[1 + \left(\frac{v}{\alpha r_0} \right)^2 \right] K_v^2(\alpha r_0) \right\}.$$

Para obtener la energía debido al confinamiento, \mathcal{E}_r , debemos aplicar la segunda condición

de frontera, $\frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r \in S^-} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r \in S^+}$ para $r = r_a$, así obtenemos la siguiente ecuación

trascendente:

$$\mu_1 y_a K'_m(y_a) J_n(x_a) = \mu_2 x_a J'_m(x_a) K_n(y_a) \quad (2.10)$$

Utilizando las ecuaciones (2.2), (2.5), (2.6), (2.9) y (2.10), finalmente tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger,

$$\varphi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} \begin{cases} A_m J_m(x), & r \leq r_a \\ B_m K_m(y), & r > r_a \end{cases}$$

la energía total del sistema se puede determinar a partir de las ecuaciones (2.2), (2.5) y (2.10):

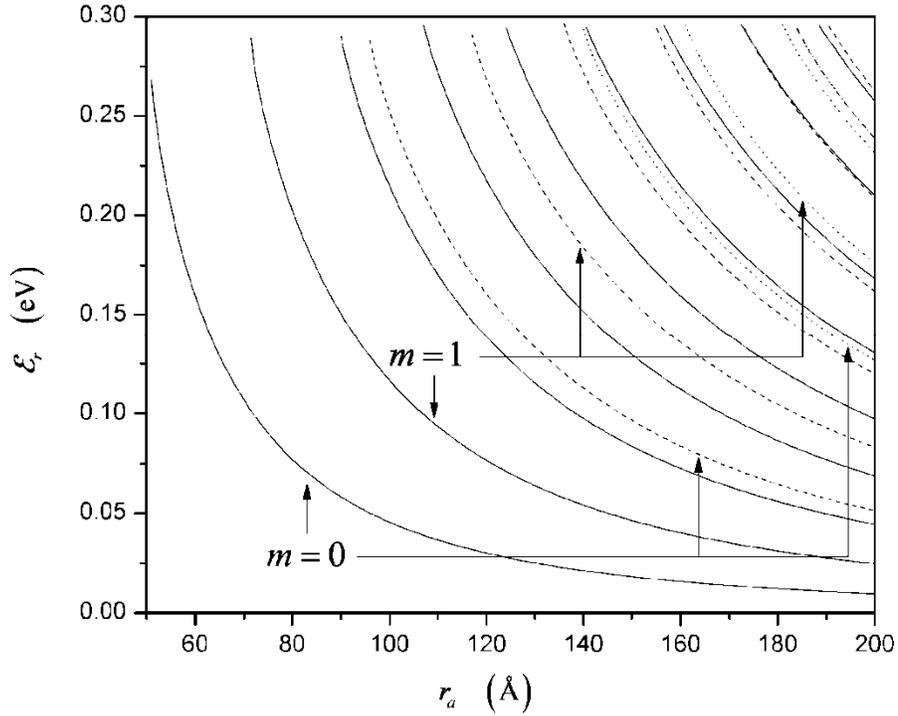


Figura 2.2 Niveles de energía de un alambre cuántico semiconductor. Las líneas continuas representa los niveles de energía para $n = 1$, las líneas de rayas los niveles de energía para $n = 2$, las líneas de puntos los niveles de energía para $n = 3$ y las líneas de rayas-puntos los niveles de energía para $n = 4$.

$$\mathcal{E}_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2$$

donde el número cuántico n denota el orden del cero de la ecuación trascendente. Los estados obtenidos son doblemente degenerados, ya que $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, excepto para $m = 0$.

Consideramos un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco, crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, con parámetros $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$ y $V_0 = 0.30 eV$, donde μ_0 es la masa libre electrón. En la figura 2.2 se muestran los niveles de energía \mathcal{E}_r , para un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con respecto al radio del alambre. De la figura se obtiene que la energía de los estados se incrementa con el aumento del número cuántico m .

y también con el aumento del número cuántico n . Además, se nota que los estados se agrupan en subbandas de energía donde el número cuántico principal es n . Como podemos observar el aumento del radio del alambre provoca que un número mayor de estados entren al alambre, los que además permite la entrada de los niveles de energía con mayor un número cuántico n .

2.2. Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo

Consideraremos un electrón confinado en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo, de radio interno r_a , radio externo r_b y longitud L , donde L es lo suficientemente grande para evitar los efectos de confinamiento en esa dirección (ver figura 2.3). La función de onda de las cuasi-partículas para este caso se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger, con el siguiente perfil de potencial y masa efectiva

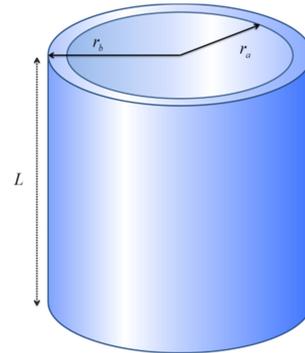
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = \mathcal{E} \varphi \quad \text{con} \quad V(r), \mu = \begin{cases} V_0, & \mu_2, & 0 \leq r < r_a \\ 0, & \mu_1, & r_a \leq r < r_b \\ V_0, & \mu_2, & r_b \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.11)$$

Bajo las mismas consideraciones que describimos en el epígrafe anterior, y considerando que la función de onda debe de estar acotada en $r = 0$ y $r = \infty$, la solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (2.11)) para este sistema tiene la forma.

$$\varphi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} R(r) \quad (2.12)$$

donde

Figura 2.3 Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo, de radio interno r_a , radio externo r_b y longitud L . La región azul es la región donde se confina el electrón.



$$R(r) = \begin{cases} A_m I_m(y), & 0 \leq r < r_a \\ A_{1m} J_m(x) + B_{1m} N_m(x), & r_a \leq r < r_b \\ B_m K_m(y), & r_b \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.13)$$

donde I_m y K_m son las funciones de Bessel modificadas de primer y segundo tipo, respectivamente, mientras que J_m y N_m son las funciones de Bessel de primer y segundo tipo respectivamente. Para determinar las constantes A_m , A_{1m} , B_{1m} y B_m además de la energía \mathcal{E}_r , aplicamos las condiciones de frontera y la condición de normalización de la parte radial de la función de onda.

Entonces en $r = r_a$ tenemos que

$$A_m I_m(y_a) = A_{1m} J_m(x_a) + B_{1m} N_m(x_a) \quad (2.14)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} A_m I_m'(y_a) = \sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2} \mathcal{E}_r} [A_{1m} J_m'(x_a) + B_{1m} N_m'(x_a)] \quad (2.15)$$

Para el caso $r = r_b$, donde $x_b = x(r_b)$ y que $y_b = y(r_b)$, tenemos que,

$$A_{1m} J_m(x_b) + B_{1m} N_m(x_b) = B_m K_m(y_b) \quad (2.16)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2} \mathcal{E}_r} [A_{1m} J_m'(x_b) + B_{1m} N_m'(x_b)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} B_m K_m'(y_b) \quad (2.17)$$

Utilizando la ecuaciones (2.14), (2.15) y (2.16); y definiendo

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2} \frac{V_0 - \mathcal{E}_r}{\mathcal{E}_r}}, \quad (2.18)$$

podemos determinar A_{1m} , B_{1m} y B_m en términos de A , con lo que se llega a que

$$A_{1m} = \frac{\bar{A}_{1m}}{C_m} A_m, \quad B_{1m} = -\frac{\bar{B}_{1m}}{C_m} A_m \quad \text{y} \quad B_m = \frac{J_m(x_b) \bar{A}_{1m} + N_m(x_b) \bar{B}_{1m}}{K_m(y_b) \bar{C}_m} A_m$$

donde

$$\begin{aligned}\bar{A}_{1m} &= I_m(y_a)N'_m(x_a) - \beta I'_m(y_a)N_m(x_a) \\ \bar{B}_{1m} &= I_m(y_a)J'_m(x_a) - \beta I'_m(y_a)J_m(x_a) \\ \bar{C}_m &= J_m(x_a)N'_m(x_a) - \beta J'_m(x_a)N_m(x_a)\end{aligned}$$

Para determinar la constante A , utilizamos la condición de normalización, $\int R(r)R^*(r)rdr = 1$, por lo que queda de la forma siguiente,

$$A = [I_1 + I_2 + I_3]^{-1/2}$$

siendo,

$$\begin{aligned}I_1 &= \int_0^{r_a} I_m^2(y)rdr, \quad I_2 = \frac{1}{C^2} \int_{r_a}^{r_b} [\bar{A}_1 J_m(x) - \bar{B}_1 N_m(x)]^2 rdr \\ \text{y } I_3 &= \left[\frac{\bar{A}_1 J_m(x_b) + \bar{B}_1 N_m(x_b)}{\bar{C}_m K_m(y_b)} \right] \int_{r_b}^{\infty} K_m^2(y)rdr\end{aligned}$$

La energía debido al confinamiento, \mathcal{E}_r , podemos determinarla utilizando la ecuación (2.17), de donde obtenemos una ecuación trascendente

$$\begin{aligned}\bar{A}_1 [K_m(y_b)J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)J_m(x_b)] = \\ \bar{B}_1 [K_m(y_b)N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)N_m(x_b)]\end{aligned}\tag{2.19}$$

donde el número cuántico n denota el orden del cero de la ecuación trascendente. Los estados obtenidos son doblemente degenerados al igual que en el caso anterior.

Finalmente, usando las ecuaciones (2.12) y (2.13), tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger la cual queda de la siguiente forma

$$\varphi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} \begin{cases} A_m I_m(y), & 0 \leq r < r_a \\ A_{1m} J_m(x) + B_{1m} N_m(x), & r_a \leq r < r_b \\ B_m K_m(y), & r_b \leq r < \infty \end{cases}$$

donde

$$\mathcal{E}_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2$$

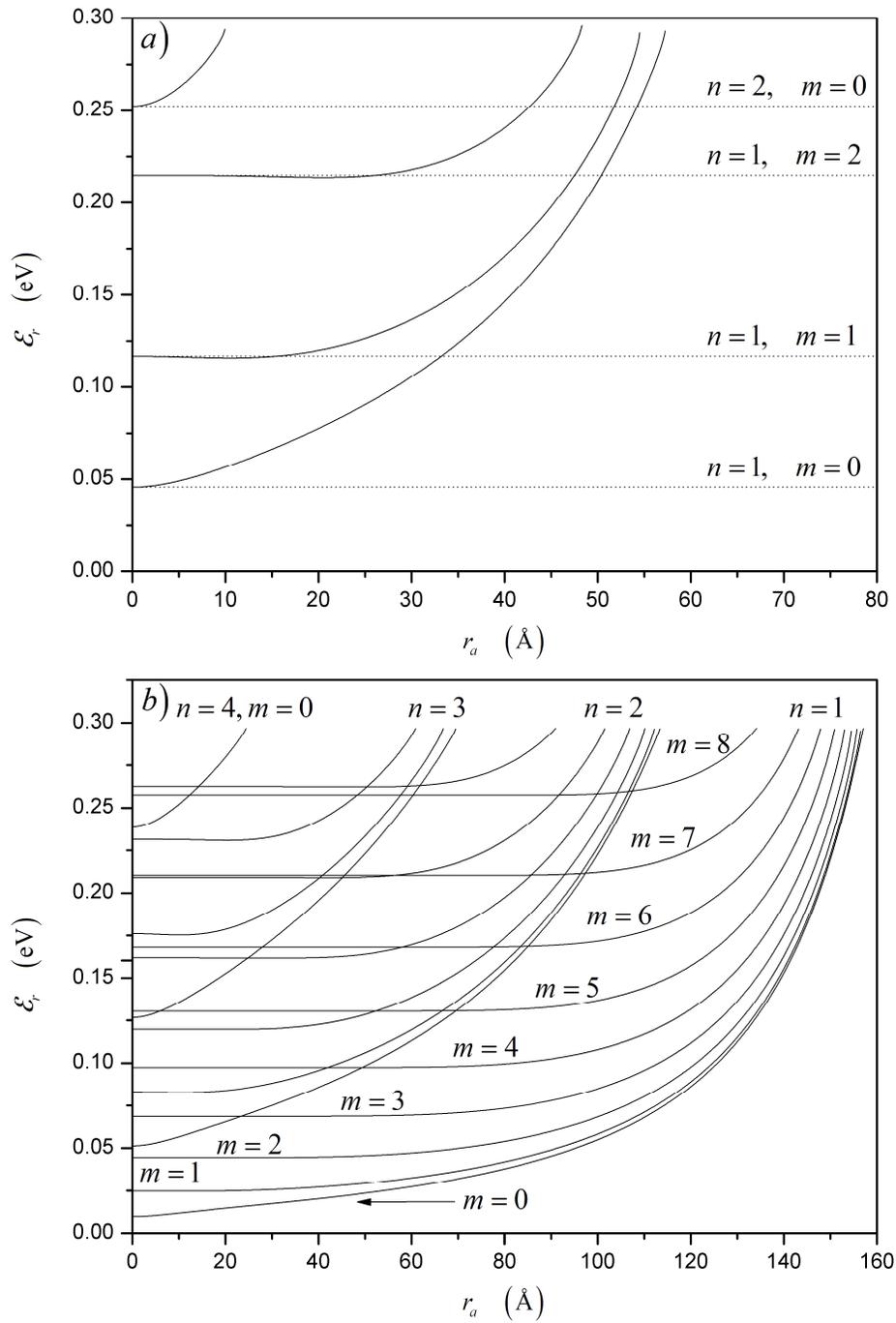


Figura 2.4 Estados electrónicos correspondientes a un QWW con sección transversal en forma de anillo, para dos casos *a*) $r_b = 100 \text{ \AA}$ y *b*) $r_b = 200 \text{ \AA}$.

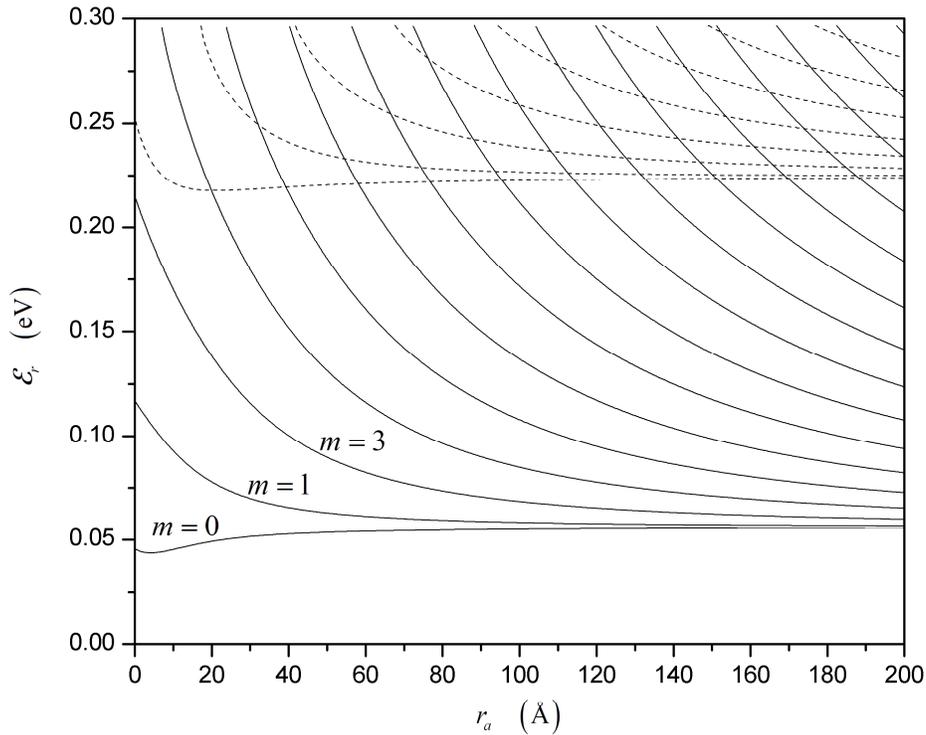


Figura 2.5 Estados electrónicos a un QWW con sección transversal en forma de anillo, donde se fija el ancho del cascarón $d = 100 \text{ \AA}$.

Consideramos un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, usando los mismos parámetros que en el caso anterior. En la figura 2.4a se muestran los estados electrónicos correspondientes a un alambre cuántico semiconductor con sección transversal en forma de anillo en función del radio interior, r_a , para dos casos a) $r_b = 100 \text{ \AA}$ y b) $r_b = 200 \text{ \AA}$. En la figura 2.4a podemos observar que cuando r_a aumenta la energía también aumenta ya que el ancho del pozo, d , es cada vez menor, aumentando el confinamiento del sistema. Debemos señalar que si el ancho del QWW es lo suficientemente pequeño termina por “sacar” los estados electrónicos de la región activa del pozo, además cada nivel de energía comienza de un nivel de un QWW con sección transversal en forma de disco, (líneas punteadas), ya que $r_a = 0 \text{ \AA}$. En la figura 2.4b se puede observar claramente que los niveles se agrupan en subbandas determinadas por n , a medida que aumenta n crece la energía de todas las subbandas por lo

que es más fácil “sacarlas” del QWW. También se observa que no hay cruces entre los niveles que conforman una misma subbanda pero si cortan los niveles pertenecientes a otras subbandas. Las energías de los niveles dentro de cada subbanda quedan determinadas por m , a medida que aumenta m crece la energía. Además, se puede observar que al aumentar m el efecto de confinamiento es menor al principio, para cada subbanda n , ya que en un principio estos niveles casi no se afectan cuando aumenta el radio interno.

En la Figura 2.5 se muestran los niveles de energía correspondientes a la parte radial para a un alambre cuántico semiconductor con sección transversal en forma de anillo en función del radio interno, r_a , manteniendo constante el ancho del QWW en $d = 100 \text{ \AA}$. Las líneas continuas corresponden a los niveles con $n = 0$, mientras que las líneas discontinuas a $n = 1$. Podemos observar que los estados se agrupan una vez más en subbandas, determinadas por el número cuántico n . Todas las subbandas tienden a un nivel mínimo cuando r_a aumenta, ya que el ancho del QWW está fijo. Es importante señalar que aun, para valores grandes de r_a ($\approx 300 \text{ \AA}$) no obtendremos los niveles de energía de un pozo cuántico como se podría esperar, esto es debido a la simetría del sistema. Notamos también que no hay cruces en los niveles pertenecientes a una misma subbanda, con n igual, pero un nivel sí puede cortar a otro nivel perteneciente a una diferente subbanda, con n diferente.

Capítulo 3: Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor doble

En este capítulo estudiamos un alambre cuántico semiconductor doble, el cual puede considerarse como un sistema compuesto por un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo (cascarón externo) y un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco (alambre interno) en el centro, (ver figura 3.1). Por tanto, resolvemos la ecuación de Schrödinger para obtener los estados electrónicos utilizando la aproximación de la función envolvente o la aproximación de la masa efectiva.

3.1. Estados electrónicos de un alambre cuántico doble

De forma similar los casos analizados en el capítulo anterior consideraremos que el electrón está confinado en un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica con radio interno r_a , radio intermedio r_b , radio externo r_c y longitud L , donde L es lo suficientemente grande para evitar los efectos de confinamiento en esa dirección (ver figura (3.1). La función de onda de las cuasi-partículas para este caso se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger, con el siguiente perfil de potencial y masa efectiva:

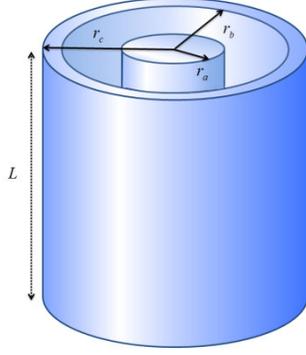


Figura 2.3 Representación de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica con radio interno r_a , radio intermedio r_b , radio externo r_c y longitud L . La región azul es la región donde se confina al electrón.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = \mathcal{E} \varphi \quad \text{con} \quad V(r), \mu = \begin{cases} 0, & \mu_1, & 0 \leq r < r_a \\ V_0, & \mu_2, & r_a \leq r < r_b \\ 0, & \mu_1, & r_b \leq r < r_c \\ V_0, & \mu_2, & r_c \leq r < \infty \end{cases} \quad (3.1)$$

Como en los casos anteriores el estado del sistema queda determinado por la solución de la ecuación de Schrödinger. Utilizando el método de separación de variables, de la misma forma que en el capítulo anterior, tenemos que la solución de la ecuación (3.1) tiene la forma

$$\varphi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} R(r) \quad (3.2)$$

donde

$$R(r) = \begin{cases} A_m J_m(x) & 0 \leq r < r_a \\ A_{2m} I_m(y) + B_{2m} K_m(y) & r_a \leq r < r_b \\ A_{3m} J_m(x) + B_{3m} N_m(x), & r_b \leq r < r_c \\ B_m K_m(y), & r_c \leq r < \infty \end{cases} \quad (3.3)$$

Las constantes A_m , A_{2m} , B_{2m} , A_{3m} , B_{3m} y B_m , además de la energía \mathcal{E}_r , se obtienen aplicando las condiciones de frontera para la función de onda, $\varphi|_{r \in S^-} = \varphi|_{r \in S^+}$ y $(1/\mu_1)[\partial\varphi/\partial r]_{r \in S^-} = (1/\mu_2)[\partial\varphi/\partial r]_{r \in S^+}$. Entonces en $r = r_a$, $r = r_b$ y $r = r_c$, tenemos que,

$$A J_m(x_a) = A_{2m} I_m(y_a) + B_{2m} K_m(y_a) \quad (3.4)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2}} \mathcal{E}_r A_m J'_m(x_a) = \sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2}} [V_0 - \mathcal{E}_r] [A_{2m} I'_m(y_a) + B_{2m} K'_m(y_a)] \quad (3.5)$$

Para $r = r_b$, se obtiene

$$A_{2m}I_m(y_b) + B_{2m}K_m(y_b) = A_{3m}J_m(x_b) + B_{3m}N_m(x_b) \quad (3.6)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_2\hbar^2}}[V_0 - \mathcal{E}_r][A_{2m}I'_m(y_b) + B_{2m}K'_m(y_b)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_1\hbar^2}}\mathcal{E}_r[A_{3m}J'_m(x_b) + B_{3m}N'_m(x_b)] \quad (3.7)$$

Para $r = r_c$, definiendo $x_c = x(r_c)$ y que $y_c = y(r_c)$, se llega a que

$$A_{3m}J_m(x_c) + B_{3m}N_m(x_c) = B_mK_m(y_c) \quad (3.8)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1\hbar^2}}\mathcal{E}_r[A_{3m}J'_m(x_c) + B_{3m}N'_m(x_c)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_2\hbar^2}}[V_0 - \mathcal{E}_r]B_mK'_m(y_c) \quad (3.9)$$

De las ecuaciones (3.4) y (3.5) podemos determinar A_{2m} y B_{2m} en términos de A_m , usando la ecuación (2.18), se obtiene que:

$$A_{2m} = \frac{J_m(x_a)K'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)K_m(y_a)}{I_m(y_a)K'_m(y_a) - I'_m(y_a)K_m(y_a)}A_m \quad (3.10)$$

$$B_{2m} = \frac{J_m(x_a)I'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)I_m(y_a)}{I'_m(y_a)K_m(y_a) - I_m(y_a)K'_m(y_a)}A_m \quad (3.11)$$

Ahora de las ecuaciones (3.6) y (3.7) podemos determinar A_{3m} y B_{3m} en términos de A_m , entonces

$$A_{3m} = A_{2m} \frac{I_m(y_b)N'_m(x) - \beta I'_m(y_b)N_m(x_b)}{J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x_b)N_m(x_b)} + B_{2m} \frac{K_m(y_b)N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)N_m(x_b)}{J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x_b)N_m(x_b)} \quad (3.12)$$

$$B_{3m} = A_{2m} \frac{I_m(y)J'_m(x_b) - \beta I'_m(y_b)J_m(x_b)}{N_m(x_b)J'_m(x_b) - N'_m(x_b)J_m(x_b)} + B_{2m} \frac{K_m(y_b)J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)J_m(x_b)}{N_m(x_b)J'_m(x_b) - N'_m(x_b)J_m(x_b)} \quad (3.13)$$

Siguiendo el mismo método, podemos determinar B_m con la ecuación (3.8) de manera relativamente sencilla:

$$B_m = A_{3m} \frac{J_m(x_c)}{K_m(y_c)} + B_{3m} \frac{N_m(x_c)}{K_m(y_c)}. \quad (3.14)$$

Con el fin simplificar la forma de las ecuaciones para las constantes obtenidas haremos las siguientes definiciones,

$$\begin{aligned} A_{21} &= J_m(x_a)K'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)K_m(y_a), \\ B_{21} &= J_m(x_a)I'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)I_m(y_a), \\ C_2 &= I_m(y_a)K'_m(y_a) - I'_m(y_a)K_m(y_a), \\ A_{31} &= I_m(y_b)N'_m(x) - \beta I'_m(y_b)N_m(x_b), \\ A_{32} &= K_m(y_b)N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)N_m(x_b), \\ B_{31} &= I_m(y)J'_m(x_b) - \beta I'_m(y_b)J_m(x_b), \\ B_{32} &= K_m(y_b)J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)J_m(x_b), \\ C_3 &= J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x)N_m(x_b), \\ B_{41} &= \frac{J_m(x_c)}{K_m(y_c)} \quad \text{y} \quad B_{42} = \frac{N_m(x_c)}{K_m(y_c)} \end{aligned}$$

de esta manera tenemos que las ecuaciones (3.10), (3.11), (3.13) y (3.14) quedan

$$A_{2m} = \frac{A_{21}}{C_2} A_{1m}, \quad B_{2m} = -\frac{B_{21}}{C_2} A_{1m}, \quad (3.15)$$

$$A_{3m} = \frac{A_{21}A_{31} - B_{21}A_{32}}{C_2 C_3} A_{1m}, \quad (3.16)$$

$$B_{3m} = -\frac{A_{21}B_{31} - B_{21}B_{32}}{C_2 C_3} A_{1m}, \quad (3.17)$$

$$B_{4m} = \frac{(A_{21}A_{31} - B_{21}A_{32})B_{41} - (A_{21}B_{31} - B_{21}B_{32})B_{42}}{C_2 C_3} A_{1m}. \quad (3.18)$$

Debemos determinar A_{1m} , esto se hace con la condición de normalización, entonces se cumple que $\int R(r)R^*(r)rdr = 1$; considerando las cuatro regiones de nuestro problema y la ecuaciones (3.15)-(3.18), se obtiene que

$$A_m = [I_1 + I_2 + I_3 + I_4]^{-\frac{1}{2}}$$

donde

$$I_1 = \int_0^{r_a} J_m^2(x) r dr, \quad I_2 = \frac{1}{C_2^2} \int_{r_a}^{r_b} [A_{21} I_m(y) - B_{21} K_m(y)]^2 r dr,$$

$$I_3 = \frac{1}{C_2^2 C_3^2} \int_{r_b}^{r_c} [(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) J_m(x) - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) N_m(x)]^2 r dr$$

$$I_4 = \frac{[(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) B_{41} - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) B_{42}]^2}{C_2^2 C_3^2} \int_{r_c}^{\infty} K_m^2(y) r dr.$$

Para el caso de la función trascendente que determina la energía asociada a la dirección radial, si usamos las ecuaciones (3.8) y (3.9), se obtiene que

$$A_{3m} A_{41} + B_{3m} A_{42} = 0 \quad (3.19)$$

donde

$$A_{41} = K_m(y_c) J'_m(x_c) - \beta K'_m(y_c) J_m(x_c)$$

$$A_{42} = K_m(y_c) N'_m(x_c) - \beta K'_m(y_c) N_m(x_c)$$

sustituyendo A_{3m} y B_{3m} , y sustituyendo las ecuaciones (3.16) y (3.17) en la ecuación (3.19), tenemos que,

$$\frac{A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}}{C_2 C_3} A_{1m} A_{41} - \frac{A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}}{C_2 C_3} A_{1m} A_{42} = 0$$

finalmente

$$(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) A_{41} - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) A_{42} = 0 \quad (3.20)$$

Por tanto, usando las ecuaciones (3.2) y (3.3), tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger la cual queda de la siguiente forma

$$\mathcal{E}_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2$$

y también

$$\Psi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} u(r) \begin{cases} A_m J_m(x) & 0 \leq r < r_a \\ A_{2m} I_m(y) + B_{2m} K_m(y) & r_a \leq r < r_b \\ A_{3m} J_m(x) + B_{3m} N_m(x), & r_b \leq r < r_c \\ B_m K_m(y), & r_c \leq r < \infty \end{cases}$$

donde la energía, \mathcal{E}_r , de los estados electrónicos del sistema se realiza a través de las soluciones dadas por la ecuación trascendente (3.20), con lo cual estudiaremos el comportamiento de los niveles de energía del alambre cuántico doble.

3.2. Discusión de resultados para el alambre cuántico doble

Considerando un alambre cuántico semiconductor doble con geometría cilíndrica crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, y usando los mismos parámetros que en el capítulo anterior se computó las energías y funciones de onda. En la figura 3.2, se muestran los niveles de energía para el alambre cuántico doble, donde r_b y r_c están fijos, mientras que r_a varía. Se puede observar que los estados quedan determinados por los números cuánticos (n, m) , de la misma manera que para el alambre interno como para el cascarón externo (ver el capítulo 2). Cada nivel de energía correspondiente al alambre doble, se encuentra localizado principalmente entre un nivel del cascarón externo (línea de puntos) y un nivel del alambre interno (línea de rayas), ya que el alambre doble es un sistema compuesto por estos dos sistemas. Debido a que cuando $r_a = 0$ se tiene un cascarón externo de radios interno r_b y externo r_c y cuando $r_a = r_b = 0$ se tiene un alambre interno de radio r_c donde la barrera desaparece completamente.

El nivel de energía $(1, 0)$ del alambre doble para valores de $r_b = 40 \text{ \AA}$ y $r_c = 100 \text{ \AA}$ es ilustrado en la figura 3.2a, donde se observa claramente el nivel localizado entre un nivel de energía del cascarón cuántico y un nivel del alambre sencillo, siendo éste el estado de menor energía del sistema. Para los niveles de energía donde $m = 1$ o $m = 2$ podemos notar cierta peculiaridad, el estado se desdobra en dos partes, para $m = 1$ alrededor de los 10 \AA y para $m = 2$ alrededor de los 22 \AA . Este desdoblamiento se debe al acoplamiento del alambre interno y el cascarón externo que componen el alambre doble para este nivel de específico

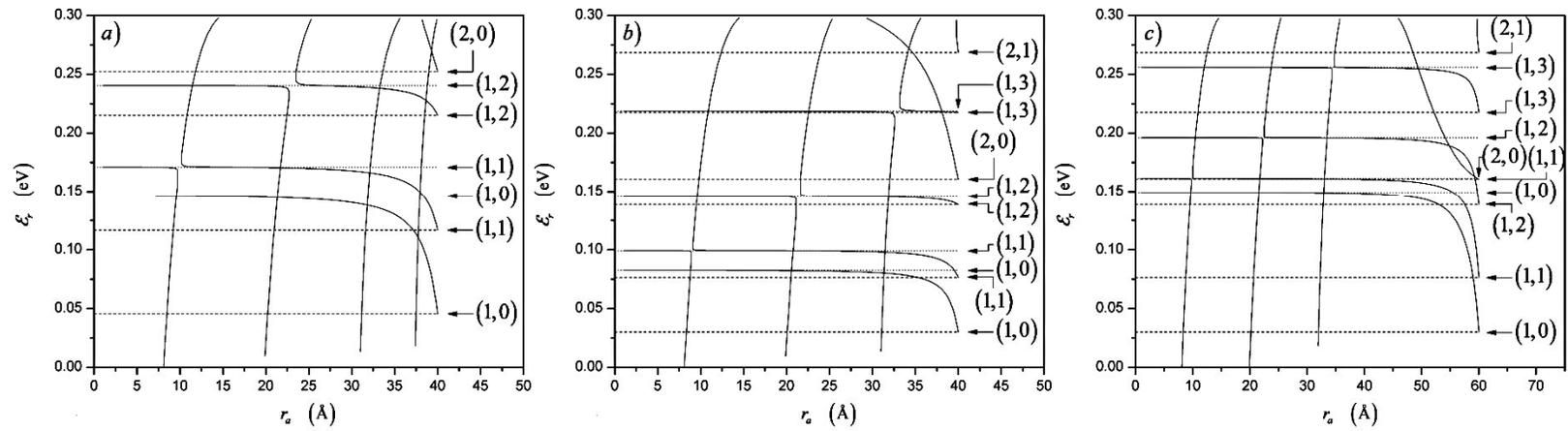


Figura 3.2: Estados electrónicos para un alambre cuántico doble (líneas continuas), donde r_a varía de 0 a r_b , mientras que: a) $r_b = 40 \text{ \AA}$ y $r_c = 100 \text{ \AA}$, b) $r_b = 40 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, c) $r_b = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$. Las líneas de puntos corresponden a un cascarón cuántico simple con radio interno r_b y radio externo r_c , mientras que las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico simple con radio r_c .

de energía. En este caso existe un estado que se encuentra dentro la barrera el cual termina por ser expulsado, ya que al aumentar r_a y estando fijo r_b el ancho de barrera ($a = r_b - r_a$) es cada vez menor aumentando el confinamiento del electrón. También, se observa que cuando $r_a \approx 35 \text{ \AA}$, aparece un nivel $(2,0)$, el cual pertenece en mayor grado al alambre interno, esto es debido a que r_a aumenta permitiendo la entrada de nuevos niveles de energía.

En la figura 3.2b se tomó $r_c = 120 \text{ \AA}$, mayor que en la figura 3.2a, con esto se tiene que el cascarón que compone el alambre doble tiene un ancho, $d = r_c - r_b = 80 \text{ \AA}$, mayor que el de la figura 3.2a, el cual era de 60 \AA . Esto genera un aumento en la cantidad de niveles dentro del sistema y que la energía de los estados que se encuentran asociados mayormente al cascaron externo, disminuyan su energía. Los niveles que pertenecen mayormente al alambre interno, aumentan su energía, al aumentar el acoplamiento entre el cascarón externo y el alambre interno. En la figura 3.2c, se tomó $r_b = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, por lo que el ancho del cascarón externo es el mismo que el de la figura 3.2a, es decir 60 \AA , y r_c el mismo que el de la figura 3.2b, siendo el radio de alambre interno mayor que los dos casos anteriores.

Se puede observar que los niveles de energía correspondientes mayormente al cascarón disminuyen su energía en comparación con estos mismos estados en la figura 3.2a, que tiene el mismo ancho para el cascarón pero r_a y r_b son mayores. Los niveles de energía del alambre interno $(2,0)$ y $(2,1)$ pueden observarse a partir de cierto valor para r_a , en el caso del nivel $(2,0)$, aproximadamente a partir de $r_a \approx 45 \text{ \AA}$. Debe señalarse que la posición de los desdoblamientos en la figura 3.2c no cambia con respecto a la posición que tenían en la figura 3.2a, mientras que la posición de estos mismos desdoblamiento en la figura 1b se desplazan ligeramente hacia valores menores de r_a esto significa que el desdoblamiento está fuertemente relacionado con el ancho del cascarón.

En la figura 3.3 se muestran las funciones de onda de un alambre cuántico doble para seis puntos distintos de r_a donde $r_b = 40 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$. Aquí estamos

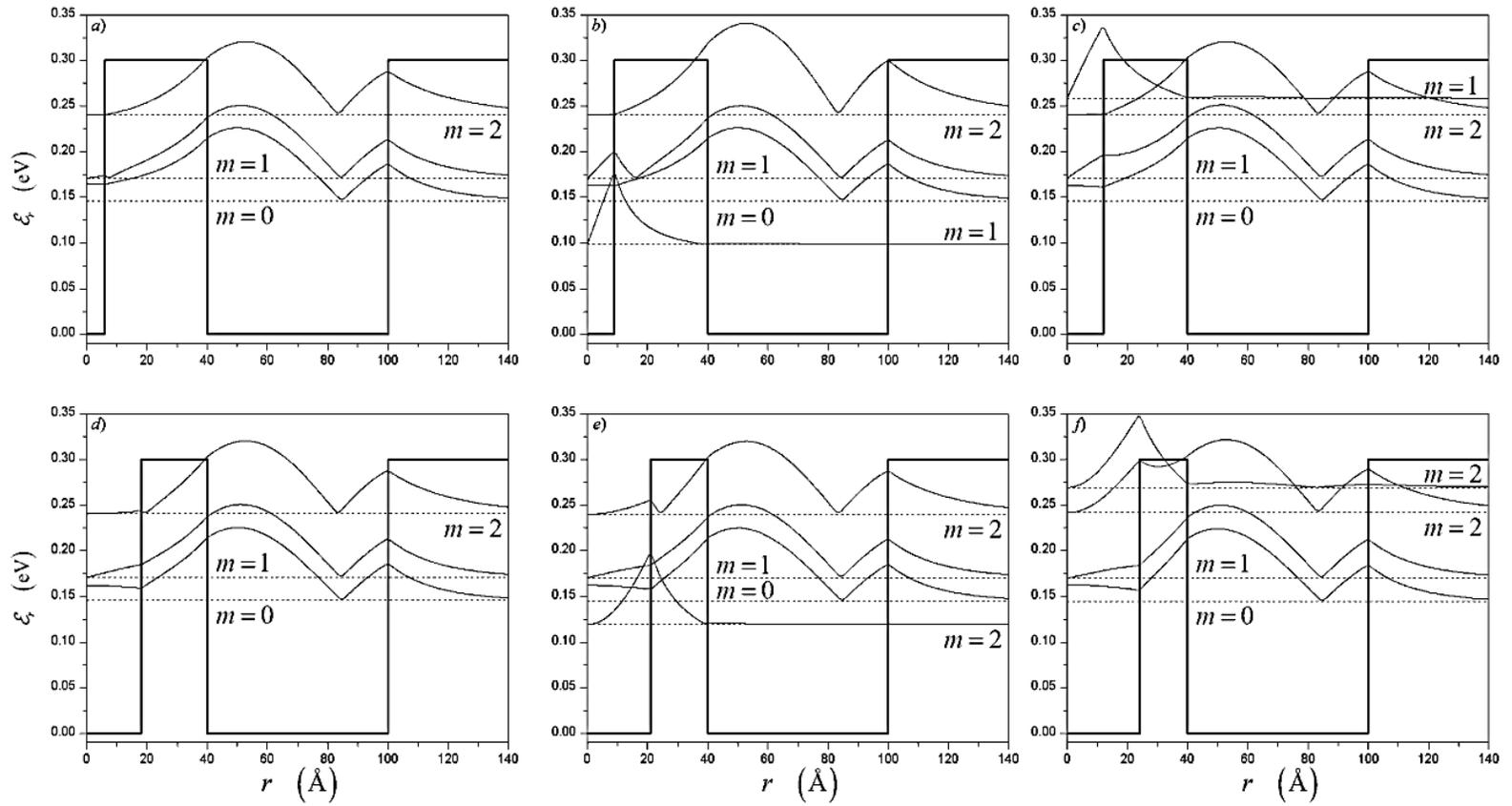


Figura 3.3: Valor absoluto de las funciones de onda (líneas continuas) y la energía (líneas de puntos) de un alambre cuántico doble para $\theta = 0$ y $z = 0$, donde $r_b = 40 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, siendo: a) $r_a = 6 \text{ \AA}$, b) $r_a = 9 \text{ \AA}$, c), d) $r_a = 18 \text{ \AA}$, e) $r_a = 21 \text{ \AA}$, f) $r_a = 24 \text{ \AA}$

analizando cómo son las funciones de onda del electrón alrededor de la zona en la cual los niveles se desdoblán, podemos ver que la razón del desdoblamiento es el acoplamiento entre el alambre interno y el cascarón externo. En la figura 3.3a donde $r_a = 6 \text{ \AA}$ podemos observar que existen tres valores de energía permitidos y sus densidades de probabilidad correspondientes, $|\phi|^2$, estos estados se localizan preferentemente dentro del cascarón, ya que el tamaño del alambre interno es muy pequeño, al acoplarse con el cascarón externo provoca el desplazamiento de los estados hacia el centro del sistema.

Cuando $r_a = 9 \text{ \AA}$ cercano al desdoblamiento que se encuentra en el estado $m = 1$, se puede observar que aparece un nivel electrónico con valores pequeños de energía el cual está mayormente dentro de la barrera -debemos señalar que este es el único de los estados que sufre modificaciones notables en la zona del desdoblamiento, (ver figura 3.2a)- de manera que si el ancho de la barrera disminuye la energía para este estado es mayor como se puede ver en la figura 3.3c donde $r_a = 12 \text{ \AA}$, esto se debe a que la energía del estado asociado a la barrera crece, al aumentar el confinamiento del electrón dentro de la barrera. El comportamiento se repite para el nivel localizado en el estado $m = 2$ del alambre cuántico doble, como se puede observar en las figura 3.3a, 3.3b y 3.3c, desplazándose el desdoblamiento hacia valores mayores de r_a .

Inicialmente en la figura 3.4 se tiene un alambre sencillo de radio r_c , ya que $r_a = r_b$, a medida que r_b aumenta aparece la barrera y se forma un alambre cuántico doble donde el ancho del cascarón externo $d = r_c - r_b$ va disminuyendo con el aumento del ancho de la barrera, ya que r_c tiene un valor fijo. En la figura 3.4a podemos ver que el nivel de energía determinados por $n = 1$ y $m = 0$ pertenece mayormente al alambre interno, siendo su estado base. Debemos notar que en el estado denotado por $n = 2$ y $m = 0$ pertenece mayormente al cascarón externo, siendo el estado de menor energía del cascarón, pero esto sólo se puede definir para valores de $r_b > 66 \text{ \AA}$, por lo que éste es el punto donde el acoplamiento del sistema comienza a romperse; podemos decir que para $0 < r_b < 66 \text{ \AA}$ existe una región de acoplamiento fuerte. Se observa que para valores de $r_b \approx 80 \text{ \AA}$ los estados correspondientes

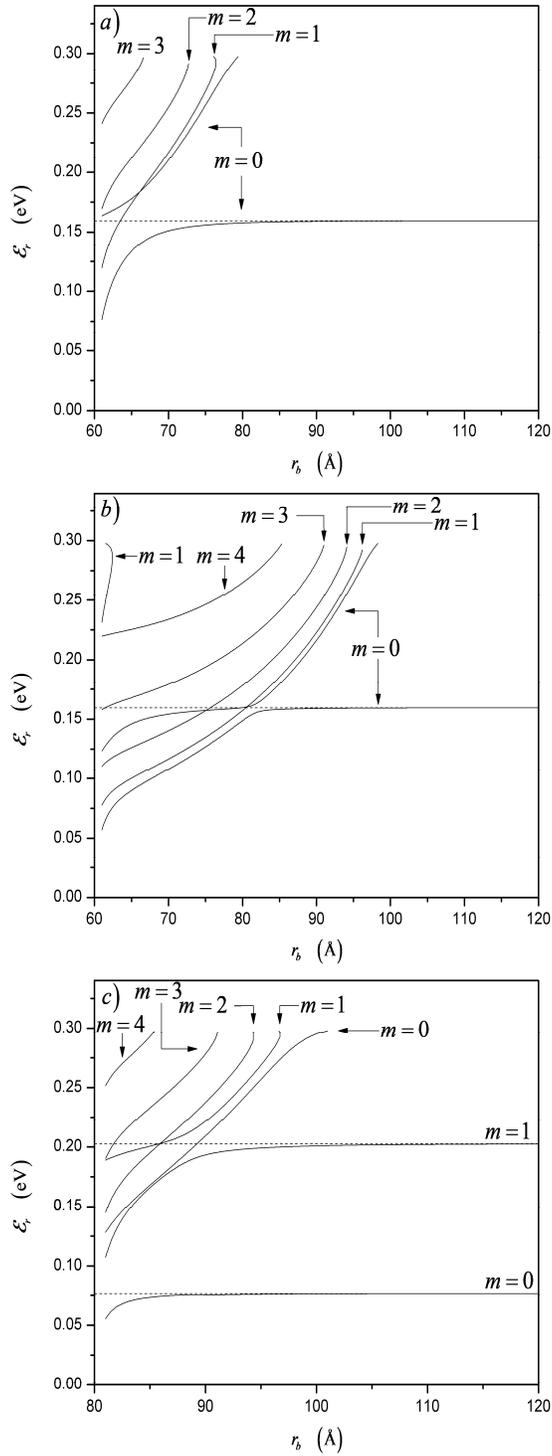


Figura 3.4: Niveles de energía del alambre cuántico doble (líneas continuas), donde r_b varía de r_a a r_c , mientras que a) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, b) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$, c) $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$. Las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico simple con radio r_a .

al cascarón “salen” del sistema, debido a que aumenta el confinamiento del electrón en el cascarón. Además vemos un nivel que pertenece al alambre interno que se iguala a la energía de un alambre cuántico simple a partir de $r_b \approx 100 \text{ \AA}$.

En la figura 3.4*b* incrementamos el valor de r_c con respecto al valor fijado en la figura 3.4*a*, tomando $r_c = 140 \text{ \AA}$, una consecuencia inmediata es el aumento en el número de niveles con respecto al primer caso de la figura 3.4*a*. De nuevo sólo tenemos un nivel del alambre interno, $n=1$ y $m=0$, lo cual es de esperarse puesto que mantuvimos el mismo valor de $r_a = 60 \text{ \AA}$, nuevamente éste es el nivel más bajo de energía. Podemos apreciar que el nivel $n=2$ y $m=0$ corta el nivel del cascarón con $n=1$ y $m=1$, aproximadamente en $r_b = 80 \text{ \AA}$ donde termina la región de acoplamiento fuerte. También, podemos apreciar una organización de los niveles en forma de subbandas para los niveles asociado principalmente con el cascarón (ver capítulo 2). Además vemos que el estado que pertenece al alambre interno se iguala a la energía de un alambre cuántico simple a partir de que $r_b \approx 100 \text{ \AA}$, al igual que en la figura anterior. Por otro lado, en la figura 3.4*c* se fija $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$, esto significa que el radio del alambre interno es mayor que en el caso de la figura 3.4*b*, mientras que el valor de r_c es el mismo. Podemos observar que el aumento del radio del alambre interno aumenta el número de estados que “cabén” dentro de él, de manera que existen dos niveles de energía para el alambre interno. Podemos observar que los estados con distinto valor de m pueden cortarse, mientras que los que tienen el mismo valor de m no. En estos estados perteneciente a alambre interno se observa que mientras mayor es la energía, mayor es el acoplamiento, debido a que es menor la “altura de la barrera” a vencer por los electrones.

En la figura 3.5, se muestran los niveles de energía generados por el desplazamiento del cascarón externo con ancho, $d = r_c - r_b$ fijo con respecto al alambre interno con radio r_a fijo esto se logra variando r_c a la misma razón que r_b , de manera que d es constante y la barrera $b = r_b - r_a$ va aumentando. En los tres casos de la figura 3.5 inicialmente la barrera no existe $b = 0$, es decir al principio tenemos un alambre sencillo de radio r_c . En la figura 3.5*a*, se puede observar que a medida que la barrera se incrementa los niveles de energía se

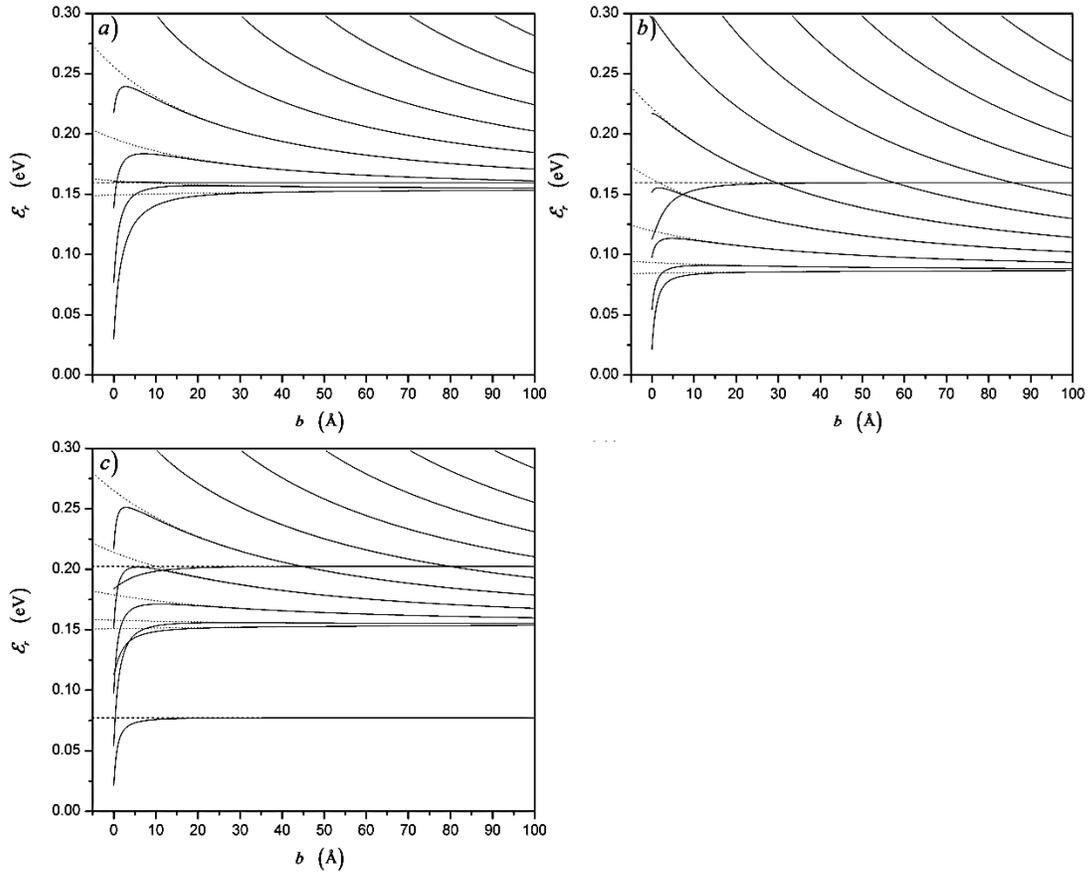


Figura 3.5: Niveles de energía de un alambre cuántico doble (líneas continuas), donde varía la barrera $b = r_b - r_a$, mientras que mantenemos fijo r_a y $d = r_c - r_b$: a) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$, b) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $d = 80 \text{ \AA}$, c) $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$. Las líneas de puntos corresponden a un cascarón cuántico simple con ancho $d = r_c - r_b$, mientras que las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico simple con radio r_a .

van ajustando a los niveles de energía que corresponde a los del cascarón externo (líneas de puntos) que se desplaza con un ancho constante y a los de un alambre interno (líneas de rayas) (ver capítulo 2). Para valores de la barrera de aproximadamente 40 \AA no se percibe diferencia entre los niveles del alambre doble y los de cascarón cuántico externo y el alambre interno para ningún nivel de energía, desacoplándose los valores de la energía para el cascarón externo y el alambre interno. Debemos señalar que en el caso de los estados ligados mayormente al cascarón externo, a mayor energía del sistema tienden todos los niveles más rápido a los niveles correspondientes del sistema desacoplado. En el caso del

alambre cuántico interno el valor de la barrera para que se desacoplen los niveles se requiere un valor del ancho aproximadamente $b = 5 \text{ \AA}$.

En la figura 3.5*b*, se ha aumentado el ancho del cascarón cuántico externo a 80 \AA , siendo el radio interno r_a , el mismo; esto produce un aumento en el número de niveles “dentro” del sistema. Podemos apreciar que los niveles de energía del alambre cuántico doble se hacen prácticamente iguales a los niveles del cascarón externo, a partir de un ancho aproximadamente de $b = 20 \text{ \AA}$, es decir, al aumentar el ancho del cascarón los niveles tienden a ajustarse más rápido. Sin embargo, si comparamos con la figura 3.5*a* el nivel de energía asociado al alambre interno requiere un valor mayor de la barrera, en este caso aproximadamente $b = 50 \text{ \AA}$. En la figura 3.5*c* se ha tomado $r_a = 80 \text{ \AA}$, pero el ancho del cascarón cuántico externo es de 60 \AA . Primeramente notamos que aparecen dos niveles del alambre sencillo (líneas de rayas), esto es de esperarse puesto que el radio es más grande que en el caso anterior. Se puede observar que el ajuste de los niveles de energía del cascarón cuántico ocurren para un radio similar al de la figura 3.5*a* en la cual el ancho del cascarón es el mismo. Por tanto, el ajuste de los niveles de energía del cascarón externo depende en mayor medida de su ancho y no del radio del alambre interno; mientras que en el caso del alambre interno esto depende tanto del ancho del cascarón como del radio del alambre cuántico interno.

Conclusiones y recomendaciones

El trabajo aquí presentado nos muestra la estructura de bandas electrónicas de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica y sus dos casos límites: el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco circular y el alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo circular; estos sistemas son simulados considerando una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. Hemos demostrado que el confinamiento desdobra las bandas en un sistema de subbandas. Además, la estructura de bandas que se muestra en las figuras nos permite comprender cómo afecta el grado de confinamiento la energía de electrón, es decir el radio del sistema. También, determinamos las condiciones donde las energías del alambre cuántico doble se desacoplan pudiendo representarse como las energías de los casos límites por separado. Finalmente, se demuestra que aun para valores grandes de r_a ($\approx 300 \text{ \AA}$) el alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo circular no reproduce los niveles de energía de un pozo cuántico como se podría esperar, esto es debido a la simetría del sistema. En este cálculo se aplicó un modelo de bandas simplificado que evidencia la física del problema y a pesar que un modelo más realista de la teoría de bandas podría obtenerse aplicando modelos como los de Luttinger-Kohn o el de Kane [42,43] los resultados obtenidos no cambiarían significativamente.

Los siguientes comentarios justifican la necesidad de continuación del trabajo realizado que se fundamenta en el conocimiento de los estados electrónicos ya calculados para el alambre cuántico doble y que forman parte de nuestras recomendaciones.

Entre los métodos más utilizados en el estudio y caracterización de las nanoestructuras semiconductoras se encuentran los métodos ópticos, donde juega un papel muy especial la Espectroscopia Raman, la cual puede utilizarse como una medida de la eficiencia cuántica en la caracterización de un dispositivo electrónico como el láser. En múltiples experimentos se ha demostrado que es una poderosa herramienta para investigar diferentes propiedades físicas en nanoestructuras semiconductoras. Por tanto, es muy importante el estudio teórico de la dispersión Raman en una nanoestructura, como trabajo de continuación al que hemos realizado, para determinar su utilidad en el diseño de fuentes de luz coherentes en diferentes regiones del espectro electromagnético.

Finalmente antes de culminar este epígrafe queremos hacer las siguientes recomendaciones que pueden tener su logro en un próximo trabajo de doctorado.

1. Calcular a través de la Regla de Oro de Fermi la probabilidad de transición de los electrones al absorber y emitir fotones de diferente frecuencia, lo cual es característico de una dispersión inelástica como la dispersión Raman. Para el este cálculo necesitamos obtener los correspondientes elementos matriciales de la radiación incidente y emitida considerando todo los estados entre el inicial y el final.
2. Calcular los elementos matriciales de la interacción electrón fonón entre los estados intermedios después de la absorción de un fotón de radiación incidente.
3. Calcular la sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido y frecuencia de la radiación emitida.
4. Calcular la eficiencia cuántica de la dispersión Raman electrónica para un laser diseñado con el alambre cuántico de sección transversal doble.

Bibliografía

1. Charles P. Poole, J.: "Encyclopedic dictionary of condensed matter physics". Elsevier: Academic Press (2004)
2. Avanzados, C.: "Diagnostico y prospectiva de la nanotecnología en Mexico". (2008)
3. Charles P. Poole, J.: "Introduction of Nanotechnology". John Wiley & Sons, 2003
4. José L. Marín, R.: "Confined Systems and Nanostructured Materials". H. S. Nalwa. s.l Academic Press, Chap. 7 Vol. 6 2001, 291-416
5. Riera, R.: Dispersión raman electrónica en un alambre cuántico en presencia de un campo magnético., Hermosillo, Sonora (25 de Mayo de 2012)
6. Keldysh, L.: "Effect of ultrasonics on the electron spectrum of crystals".
7. Keldysh, L.: "Optical characteristics of electrons with a band energy spectrum in a strong electric field".
8. Esaki, L.: "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors".
9. Barna, P.: "Quasi-Crystalline Structure Formation in Thin Films". Thin Solid Films, 193/194 (1990), 1-12.
10. Razeghi, A.: "Review of Crystal, Thin-Film, and Nanostructure Growth Technologies". In Steiner, Todd, ed., Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications. Artech House, Inc., 2004
11. Riera, R.: Estudio de la dispersión Raman en Sistemas Nanoestructurados., Hermosillo, sonora (Agosto 2004)
12. H., S.: "Scattering suppression and high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures". (1980)
13. Harrison, P.: "Quantum well, wires and dots". (2001)
14. Petroff P. M., G.: "Toward quantum well wires: fabrication and optical properties". (1982)
15. Ri. Betancourt-Riera, J.: "Electron Raman Scattering in Nanostructures". H. S. Nalwa. s.l. American Scientific Publishers, Vol. 13 2011, 427-480

16. R. Riera, R.: "Electronic States in Self-Assembled Quantum Dots: Quantum Lens".
17. Hallberg, A.: "La física de alambres moleculares, átomos artificiales y cavidades nanoscópicas". (2005)
18. B. C. Kang, S.: "Thin Solid Film". (2004)
19. Arakawa Y., V.: "Enhanced modulation bandwidth of GaAlAs double heterostructure lasers in high magnetic fields: dynamic response with quantum wire effects". (1985)
20. Chou S. T., C.: "Multiple-quantum-wire lasers grown by the strain-induced lateral-layer ordering process". (1995)
21. Máximo López López, M.: "Pozos, hilos y puntos cuánticos: estructuras semiconductoras de baja dimensión".
22. K., K.: "Optical properties of III-V semiconductor quantum wires and dots". (1990)
23. Panish M. B., T.: "Optical properties of very thin GaInAs(P)/InP quantum wells grown by gas source molecular beam epitaxy". (1986)
24. Oracio Navarro Chávez, R.: "Ideas fundamentales de la superconductividad". (2007)
25. Kittel, C.: "Introduction to Solid State Physics". (2005)
26. Luttinger, J.: "Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields". (1995)
27. A., K. .: "Theory of lattice Raman scattering in insulators". (1967)
28. Cardona, P.: "Fundamentals of Semiconductor: Physics and materials properties". (1998)
29. Foresman, A.: "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods". (1993)
30. Pavplov, P.: "Física del estado sólido". (1987)
31. Born, M.: "Dynamical Theory of Crystal Lattices". (1968)
32. Born, M.: "Zur quantentheorie der molekeln". (1927)
33. Claude Cohen-Tannoudji, B.: Quantum Mechanics volumen 1. (2005)
34. Levine, I.: "Quantum Chemistry". (2000)
35. P. M. Chamberlain, C.: "Theory of one phonon resonante raman scattering in semiconductor"

- microcristalites". (1992)
36. Trallero-Giner, F.: "Polar optical oscillations of layered semiconductor structures in the long-wavelength limit". (1993)
 37. Bastard, G.: "Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation". (1982)
 38. Bastard, G.: "Wave mechanics applied to heterostructures". (1988)
 39. Araujo, A.: "Funciones Especiales". (2006)
 40. Weber, G.: "Mathematical Methods for Physicist". (2005)
 41. Samarskii, A.: "Equations of Mathematical Physics". (1990)
 42. C. Trallero-Giner, T.: "Theory of one-phonon resonant Raman scattering in a magnetic field". (1990)
 43. F Comas, C.: "Interband-intraband electronic Raman scattering in semiconductors". (1986)