



Universidad  
del Cauca

TRANSICIONES ÓPTICAS EN PUNTOS CUÁNTICOS

GUSTAVO GALINDEZ RAMIREZ

UNIVERSIDAD DEL CAUCA

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE LA EDUCACIÓN

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

INGENIERÍA FÍSICA

POPAYÁN

2009

TRANSICIONES ÓPTICAS EN PUNTOS CUÁNTICOS

GUSTAVO GALINDEZ RAMIREZ

Trabajo de grado en la modalidad de trabajo de investigación presentado como requisito parcial para optar al título de Ingeniero Físico

Director,

SERVIO TULIO PÉREZ MERCHANCANO. Ph.D

UNIVERSIDAD DEL CAUCA

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE EDUCACIÓN

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

INGENIERÍA FÍSICA

POPAYÁN

2009

Nota de aceptación

---

---

---

---

Servio T. Pérez M. Ph.D.  
Director de trabajo de grado.

---

Harold Paredes G. Ph.D.  
Jurado.

---

Pablo Javier Salazar V. Ing.  
Jurado.

Fecha de sustentación:  
Popayán, 29 de julio del 2009.

## CONTENIDO

RESUMEN .....	1
CAPITULO 1 .....	3
INTRODUCCIÓN .....	3
CAPITULO 2 .....	9
SEMICONDUCTORES Y HETEROESTRUCTURAS .....	9
2.1. Introducción .....	9
2.2 Ondas Mecánicas .....	9
2.3. Estructura Cristalina .....	13
2.4. Masa Efectiva .....	14
2.5 Teoría de Bandas .....	17
2.5.1. Introducción .....	17
2.5.2. Modelo del electrón cuasi libre .....	18
2.5.3. Origen del gap de energía .....	19
2.5.4. Magnitud del gap de energía .....	21
2.5.5. Funciones de Bloch .....	22
2.5.6. Modelo de Kronig-Penney .....	23
2.6. Heteroestructuras .....	26
2.6.1. Impurezas hidrogenoides para materiales en bloque .....	26
2.6.2 Impurezas en heteroestructuras .....	27
CAPITULO 3 .....	28
SOLUCIONES A LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER .....	28
3.1 Pozo de Potencial Infinito, unidimensional y tridimensional .....	28
3.1.1 El pozo infinito unidimensional (coordenadas esféricas) .....	28
3.1.2 El pozo infinito tridimensional (coordenadas esféricas) .....	35
3.1.2.1 La ecuación Angular: .....	37
3.1.2.2 La ecuación Radial: .....	39
3.2 Pozo de Potencial Finito, unidimensional y tridimensional .....	41
3.2.1 El pozo finito unidimensional .....	41
3.2.2 El pozo finito tridimensional (coordenadas esféricas) .....	44
3.3 Densidad de Estados .....	47
3.3.1 Gas de electrones libres de Fermi .....	47
3.3.2 Niveles de energía en una dimensión .....	49
3.3.3 Gas de electrones libres en tres dimensiones .....	51
3.4 Operadores .....	55
CAPITULO 4 .....	58
SOLUCIONES NUMÉRICAS .....	58
4.1 Integración Numérica .....	58
4.2 Maximización y Minimización de Funciones .....	58
4.2.1 Función $f$ min .....	59
4.3 Método Variacional de Ritz .....	60
CAPITULO 5 .....	64
PUNTOS QUÁNTICOS .....	64
5.1 Antecedentes .....	64

5.2 Fundamento Teórico .....	65
5.3 Puntos Cuánticos Dopados .....	70
5.3.1 Aleación GaAs/AlAs .....	70
5.4 Tecnología basada en puntos Cuánticos.....	72
5.5 Tecnología para el crecimiento de Puntos Cuánticos .....	73
5.5.1 Epitaxia de haz molecular (MBE).....	73
5.5.2 Deposición de vapor químico metal orgánico (MOCVD).....	74
CAPITULO 6 .....	77
PUNTOS CUÁNTICOS E IMPUREZAS POCO PROFUNDAS .....	77
6.1 Introducción.....	77
6.2 Impurezas poco profundas Aceptoras y Donadoras .....	77
6.3 Formalismo de la aproximación de la Masa Efectiva .....	78
6.4 Energía de enlace en Heteroestructuras Semiconductoras .....	79
6.4.1 Energía de enlace impurezas hidrogenoides en Qd's de GaAs-(Ga, Al) As. 79	
6.4.1.1 Confinamiento infinito.....	82
6.4.1.2 Confinamiento finito.....	83
6.5 Resultados Teóricos .....	86
6.6 Energía de enlace en Heteroestructuras Semiconductoras con Presión Hidrostática.....	91
6.6.1 El Gap de energía en el punto $\Gamma$ .....	92
6.6.2 Masa Efectiva afectada por Presión Hidrostática.....	92
6.6.3 Constante Dieléctrica del material en función de la Presión Hidrostática. ...	93
6.6.4 Altura de la Barrera de Potencial .....	94
6.6.5 Ancho de la Barrera.....	95
6.6.6. Resultados y Discusiones.....	96
CAPITULO 7 .....	102
PROPIEDADES ÓPTICAS EN PUNTOS CUÁNTICOS .....	102
7.1 Transiciones ópticas entre bandas.....	102
7.2 Absorción Óptica .....	107
7.3 Fotoluminiscencia.....	112
7.4 Espectros de absorción y fotoluminiscencia afectados por presión hidrostática. 115	
CONCLUSIONES .....	119
BIBLIOGRAFÍA .....	123
ANEXO.....	125

## **RESUMEN**

El estudio de propiedades ópticas en puntos cuánticos en presencia de impurezas y perturbaciones externas controlables como campos externos y presión hidrostática es un tema de estudio muy actual en el campo de la nanociencia y la nanotecnología, debido a que poseen una enorme potencialidad de aplicación en la producción de dispositivos ópticos de alto desempeño. En este trabajo se investigaran las transiciones ópticas en puntos cuánticos o átomos artificiales en presencia de impurezas hidrogenoides y efectos de presión hidrostática mediante un estudio mecánico cuántico detallado del comportamiento de dichas impurezas y de los portadores, se hará un extensivo de los fundamentos del estado sólido y en particular de las nanoestructuras semiconductoras con el fin de determinar tanto el comportamiento de las energías de enlace como la población o desocupación de niveles, en función de la concentración de aluminio y el cambio en la posición de la impureza. Se tendrá en cuenta cuando la impureza se mueve del centro al borde del punto cuántico esférico o cuando el ancho del pozo cuántico se disminuye. Dicho pozo aparece cuando se fabrican heteroestructuras de GaAs-(Ga,Al)As, conduciendo a cambios relevantes en el comportamiento de varias de sus propiedades físicas haciéndolas diferentes a aquellas que presentan los materiales en bloque, esto hace que los sistemas de baja dimensionalidad sean considerados sistemas exóticos muy apreciados para el desarrollo de tecnología de alto procesamiento. Para analizar estos sucesos físicos, se ha tenido en cuenta también métodos numéricos, tales como el método variacional donde se ha considerado un parámetro que aproxima los auto valores de energía al problema de solución exacta, también se utilizo el modelo de la masa efectiva. De manera específica se han calculado las energías del estado fundamental, y las energías de enlace en función del radio del punto, la posición de la impureza a diferentes valores de presión hidrostática. Así mismo se obtuvieron los espectros de absorción óptica y fotoluminiscencia para transiciones desde el primer nivel de valencia a la banda de impurezas donadoras y desde el primer nivel de conducción a la banda de impurezas

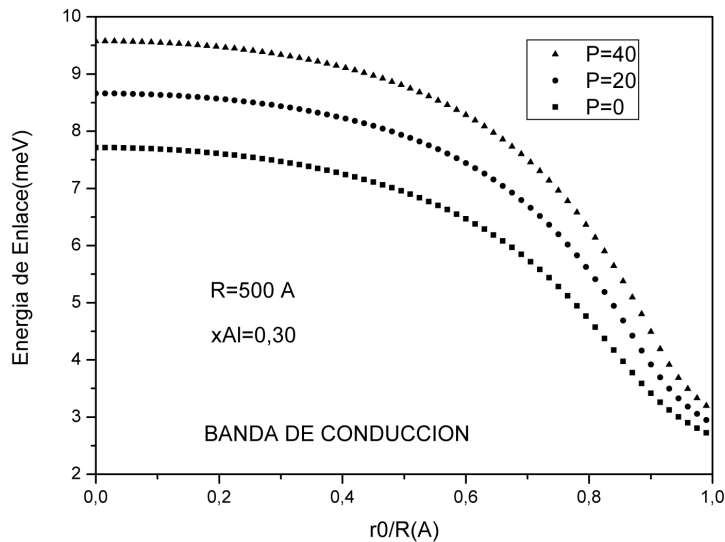
aceptadoras respectivamente para distintos radios de puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As, con potencial de confinamiento finito e infinito. Se ha considerado la distribución de impurezas en el punto homogéneo y la interacción entre estas despreciable. Se encontró que las energías en el estado fundamental, y las energías de enlace tienen una fuerte dependencia con la dimensionalidad de la heteroestructura lo que conlleva grandes cambios en las propiedades ópticas del modelo aquí considerado. Cabe resaltar que los espectros de absorción y fotoluminiscencia cambian apreciablemente también cuando la temperatura del sistema se modifica mostrando que dichos fenómenos físicos son sensibles con la escogencia del potencial químico o cuasi nivel de Fermi.

## **CAPITULO 1**

### **INTRODUCCIÓN**

En la década de los setenta Esaki y Tsu propusieron la construcción de estructuras semiconductoras que no se encontraban en la naturaleza llamadas súper redes, las cuales serian importantes para dispositivos basados en sistemas artificiales de semiconductores. Esto colocó de manifiesto el efecto cuántico del tamaño y mostró teóricamente las novedosas propiedades físicas de estos nuevos materiales [1,2]. El desarrollo de dispositivos electrónicos semiconductores basados en heteroestructuras de baja dimensionalidad, tales como súper redes, pozos, hilos y puntos cuánticos, se ha visto fuertemente influenciado por el estudio de propiedades ópticas, las cuales modelan las características estructurales del material. Las propiedades de absorción y fotoluminiscencia de materiales como arseniuro de galio pueden ser monitoreadas durante su construcción haciendo uso de avanzadas técnicas experimentales, las cuales permiten una gran reducción del tamaño de estos sistemas logrando dimensiones del pozo cuántico comparables con la longitud de onda de Broglie de los electrones[3]. Las capas de material semiconductor son lo suficientemente estrechas del orden de nanómetros, capaces de confinar el movimiento del electrón con ello se consigue que tales mecanismos presenten propiedades físicas muy exóticas e importantes para la aplicación tecnológica actual o futura. El confinamiento electrónico de un punto cuántico cero dimensional y la gran dependencia de la masa efectiva con la presión hidrostática, influyen significativamente en el cambio del coeficiente de presión relativo a impurezas donadoras y aceptadoras, mostrando en estos sistemas un efecto muy marcado en el incremento de la energía de enlace y en los efectos de absorción y fotoluminiscencia cuando se comparan con estructuras con mayor grado de libertad, tales como materiales en bloque, pozos e hilos cuánticos.



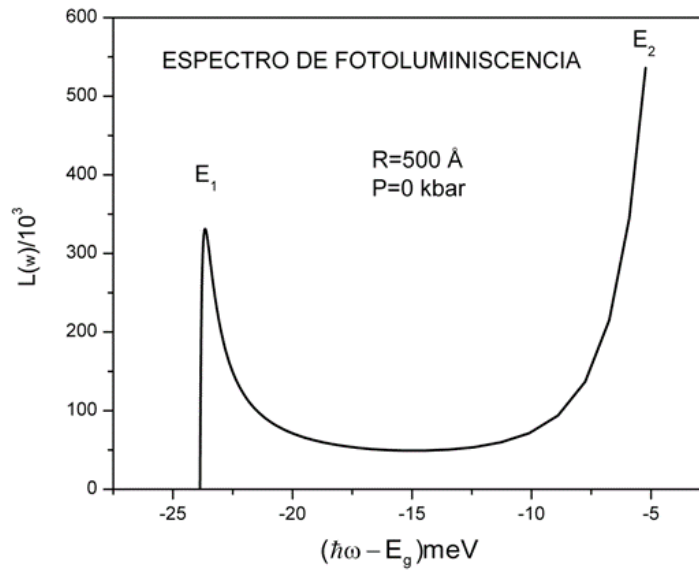


**Fig.1.1.** Se grafica la energía de enlace (meV) en función de la posición de la impureza donadora en un punto cuántico de GaAs-(Al,Ga)As, con variación de la presión hidrostática en unidades de kbar.

Estas variaciones en la energía de enlace se presentan debido a que la presión hidrostática modifica las constantes de red, el tamaño del punto, la altura de la barrera, la masa efectiva y la constante dieléctrica.

Bastard en 1981, fue el primero en tratar el problema de impurezas hidrogenoides en pozos cuánticos de GaAs-(Al, Ga)As, el considero un QW de barrera infinita y estudió los estados de impurezas hidrogenoides usando un procedimiento variacional, la energía de enlace fue hallada variando la posición de la impureza en el pozo en función del ancho del mismo. Este comportamiento conduce a la formación de bandas de impureza localizadas al interior del pozo cuántico, las cuales son responsables de que el espectro de absorción óptica asociado con transiciones electrónicas desde la banda de valencia hasta la banda de impurezas [4]. El trabajo pionero de Bastard en propiedades de impurezas en QW's fue seguido por otros investigadores como Oliveira et al, que realizo el estudio del espectro de absorción óptica [5] y fotoluminiscencia [6] asociados con impurezas hidrogenoides en QW's de GaAs-(Ga,Al)As con potencial de confinamiento finito e infinito dentro de la aproximación de la masa efectiva y

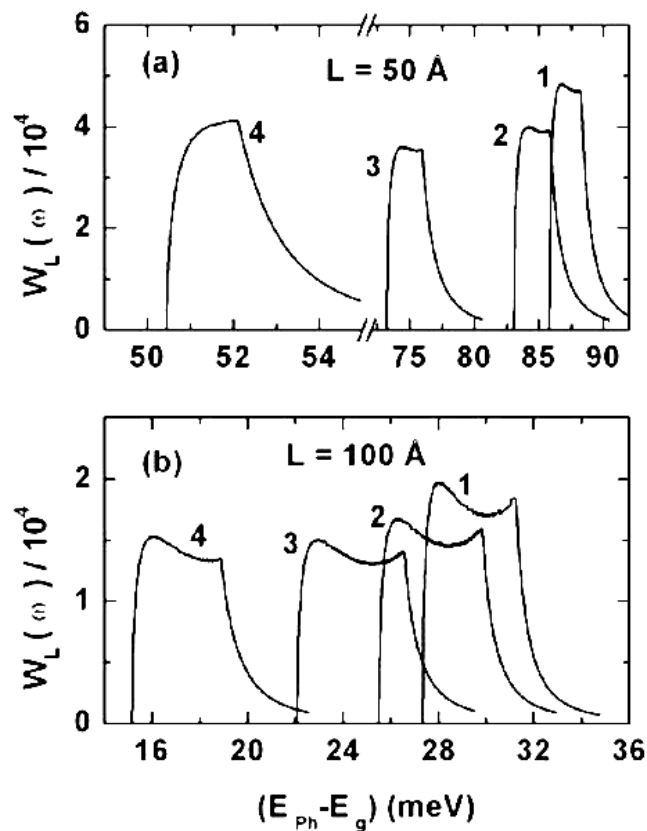
considerando una distribución homogénea de impurezas dentro del pozo. En 1991 Porras-Montenegro y colaboradores reportaron el cálculo del espectro de absorción óptica asociado con impurezas hidrogenoides en QWW's cilíndricos GaAs-(Ga,As)Al dentro de la aproximación de la masa efectiva y considerando una distribución homogénea de impurezas con potencial de confinamiento finito e infinito [7]. Al igual que en pozos cuánticos la principal característica observada fue la presencia de dos picos asociados con transiciones que involucran impurezas que están en el centro y en el borde del hilo cuántico, Latge et al en 1992 realizaron el estudio del espectro de fotoluminiscencia teórico relacionado con aceptadores en un hilo cuántico cilíndrico de GaAs-(Ga,As)Al con potencial de confinamiento finito e infinito, dentro de la aproximación de la masa efectiva y considerando una distribución homogénea de impurezas[8]. Se calculó este espectro para una temperatura de  $T=5$  k y diferentes cuasi niveles de Fermi, y se puede apreciar la dependencia del espectro de fotoluminiscencia con la escogencia de así como un aumento en la probabilidad de transición de este. La cuasi energía de Fermi está relacionada con parámetros experimentales tales como la potencia del láser y la temperatura etc. En este mismo año N. Porras-Montenegro y S. T. Pérez-Merchancano calcularon las energías de enlace para impurezas hidrogenoides aceptadoras y donadoras en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As, encontrando la fuerte dependencia de la energía de enlace en función del tamaño del punto cuántico y la dimensionalidad del sistema [11]. Posteriormente a finales de la década del noventa H. Paredes y J. Silva Valencia calcularon los espectros de absorción óptica y fotoluminiscencia en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As, considerando confinamiento finito e infinito para diferentes radios del punto cuántico en este estudio se puede ver la presencia de dos picos  $E_1$  y  $E_2$ , los cuales corresponden a transiciones que involucran impurezas que están situadas en centro y en el borde del punto cuántico respectivamente [3].



**Fig.1.2** Espectro de fotoluminiscencia (en unidades  $W_0$ ) como función de  $(\hbar\omega - E_g)$  para un punto cuántico esférico de GaAs-(Ga,Al)As de 500 Å de radio con potencial de confinamiento finito.

Los espectros ópticos que se observan en la Fig. 1.2 muestran dos picos en diferentes valores de energía los cuales determinan la cantidad de portadores que decaen de la banda de conducción a la banda de impurezas aceptadoras, dicho comportamiento muestra relación con la función densidad de estados la cual tiene un importante efecto sobre las propiedades de estos sistemas, y presenta un cambio funcional (de funciones continuas a discretas), a medida que se reduce la dimensionalidad del sistema electrónico. Las nanoestructuras son fabricadas utilizando técnicas sofisticadas de crecimiento tales como; Epitaxia de haz molecular (MBE), y Deposición de vapor químico órgano-metálico (MOCVD), siendo estas dos las más representativas. Las aleaciones de materiales como el arseniuro de galio (GaAs), y el (Ga,Al)As son las más utilizadas debido su poca reactividad, y a que se conoce bastante la cinética de los materiales tipo III-V, además esta es una aleación con una discontinuidad de banda grande, con propiedades de gran movilidad en presencia de señales con baja intensidad, también es notable su capacidad para detectar y emitir radiación en el infrarrojo próximo, todo lo anterior en comparación con los semiconductores de Silicio.

En la figura 1.3 se muestra como S.Y. López y colaboradores [9] calcularon los espectros de absorción óptica relativa a impurezas donadoras en pozos cuánticos de GaAs-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As bajo efectos de presión hidrostática, y encontraron estructuras bien definidas en el espectro de absorción, una de ellas relacionada con impurezas cerca al centro del pozo y otra cerca a las paredes de la estructura, adicionalmente asociado con la presión del gap (brecha) en el GaAs, se presenta un corrimiento al azul del espectro de absorción.



**Fig. 1.3** Espectro de absorción óptica relativo a impurezas donadoras en pozos cuánticos de GaAs-Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As. Los resultados son para radios de pozo cuántico de 50 y 100 Å y para diferentes valores de presión hidrostática: 0, 10, 20, 30 kbar, denotado por los números 1, 2, 3, 4 respectivamente, donde para cada espectro, los picos a la izquierda y a derecha representan transiciones ópticas para impurezas localizadas en el centro y en el borde del pozo cuántico respectivamente.

En este trabajo se han estudiado propiedades ópticas relativas a impurezas donadoras y aceptadoras en puntos cuánticos de Arseniuro de Galio bajo los efectos de presión hidrostática, en particular el efecto de absorción será calculado desde la banda de

valencia a la banda de impurezas donadoras, y el espectro de fotoluminiscencia será calculado desde la banda de conducción a la banda de impurezas aceptadoras teniendo en cuenta distribuciones de impurezas uniformes en la región del punto cuántico para ambos casos. De igual forma se usó el método variacional con el propósito de determinar los autovalores de energía próximos a aquellos obtenidos a través de la solución exacta del hamiltoniano más sencillo que no tiene en cuenta la interacción coulombiana de la impureza ni el potencial efectivo que ella genera. Así mismo se usó el formalismo de la masa efectiva el cual ayuda a determinar el comportamiento de los electrones en la interfase de los materiales III-V en conjunto con las condiciones de frontera que se imponen en esta situación.

Este trabajo se organiza de la siguiente forma; primero se hace un compendio de las herramientas necesarias de la mecánica cuántica y el estado sólido, se continúa con una revisión bibliográfica de impurezas hidrogenoides en puntos cuánticos de GaAs-(Al,Ga)As, luego se hace una revisión de los espectros de absorción óptica y fotoluminiscencia asociados con impurezas hidrogenoides en puntos cuánticos esféricos de GaAs-(Ga,Al)As, y finalmente se analizan las transiciones ópticas en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As afectados por presión hidrostática con sus respectivas conclusiones y perspectivas.

**SEMICONDUCTORES Y HETEROESTRUCTURAS**

***2.1. Introducción***

El estudio de semiconductores ha evolucionado desde hace muchas décadas, sin embargo es a partir del descubrimiento de los semiconductores modernos, el cual comenzó con la rectificación de su comportamiento en base a las juntas metal-semiconductor (1874), y el análisis del diodo Schottky (1938) y que una gran cantidad de rectificaciones han sido propuestas desde el punto de vista experimental y teórico particularmente los primeros en llamar la atención sobre este tópico fueron los laboratorios Bell quienes estaban interesados en el desarrollo del transistor, este hecho provoco enormes estudios en estos dispositivos generando por ejemplo la creación del transistor de campo (1985). Posterior a esta fecha se han realizado estudios cada vez mas estructurados hasta llegar actualmente a producir semiconductores que involucran efectos de espín. En igual forma el estudio de semiconductores permitió la investigación de heteroestructuras de diferentes aleaciones mostrando que ellas son eficaces en la implementación de aparatos electrónicos. En la actualidad se trabajan heteroestructuras de baja dimensionalidad partiendo de materiales III-V a II-VI lo que ha hecho posible que la industria de aparatos modernos las implemente creando dispositivos electrónicos de alto desempeño y tamaños muy pequeños. De acuerdo con este perfil, aquí se presenta un estudio rápido de dichos dispositivos concentrándonos en los tópicos más importantes para el desarrollo de este trabajo de investigación.

***2.2 Ondas Mecánicas***

Teniendo en cuenta la ecuación de Broglie en la que el momentum de la partícula tiene asociada una onda, de longitud  $\lambda$ , dada por

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.1)$$

Así una partícula en el vacío sin influencia de campos electromagnéticos, puede ser descrita por una función de onda de la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.2)$$

En donde  $t$  es el tiempo,  $\omega$  es la frecuencia angular, y el módulo del vector de onda es

$$\vec{k} = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.3)$$

En mecánica cuántica el momentum es un operador lineal que actúa sobre una función de onda  $\psi$ , en donde  $\vec{p}$  surge como un valor propio, la ecuación diferencial correspondiente es de la forma:

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi = \vec{p} \psi \quad (2.4)$$

Donde

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \quad (2.5)$$

Cuando la expresión (2.5), actúa sobre la función de onda de una partícula en el vacío se deduce una relación para el momentum así:

$$-i\hbar \vec{\nabla} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) = \vec{p} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.6)$$

Y por consiguiente:

$$-i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right) \exp i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t) = \vec{p} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.7)$$

Por lo tanto

$$-i\hbar\left(\hat{k}_x\hat{i}+\hat{k}_y\hat{j}+\hat{k}_z\hat{k}\right)\exp i\left(k_x x+k_y y+k_z z-\omega t\right)=\vec{p}\exp i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right) \quad (2.8)$$

Luego

$$\vec{p}=\hbar\left(k_x\hat{i}+k_y\hat{j}+k_z\hat{k}\right)=\hbar\vec{k} \quad (2.9)$$

La expresión anterior se puede colocar de la forma

$$p=\hbar|\vec{k}|=\frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{h}{\lambda} \quad (2.10)$$

Lo cual nos conduce a la relación de Broglie (2.1), ahora teniendo en cuenta el formalismo de la mecánica clásica sabemos que la energía cinética de una partícula esta dada por:

$$T=\frac{1}{2}mv^2=\frac{(mv)^2}{2m}=\frac{p^2}{2m} \quad (2.11)$$

Buscando una analogía con la mecánica cuántica, esta energía cinética se pueda representar por una ecuación de valor propio de un operador a través de

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)^2\psi=\vec{T}\psi \quad (2.12)$$

De la cual el operador  $\vec{\nabla}^2$  esta dado por:

$$\vec{\nabla}^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.13)$$



Donde T es el valor propio de la energía cinética. Cuando (2.12), actúa sobre la función de onda para una partícula libre en el vacío se obtiene la siguiente expresión:

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) = T \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.14)$$

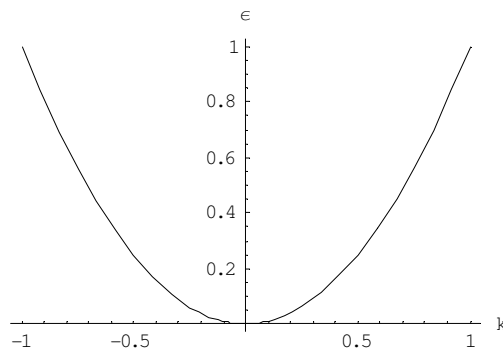
De esta forma la ecuación anterior se puede escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2 + i^2 k_y^2 + i^2 k_z^2) \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) = T \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (2.15)$$

Debido a que dicha ecuación se comporta como una ecuación de valores propios, se obtiene el valor propio de la energía cinética el cual está dado por:

$$T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.16)$$

Así para una partícula en el vacío sin influencia de campos electromagnéticos, entonces la energía total E es solo la energía cinética T. De esta manera la dispersión o la curva energía versus momentum (la cual es proporcional al vector de onda k), es una parábola, de igual forma que para partículas clásicas libres, como se ilustra en la siguiente figura:



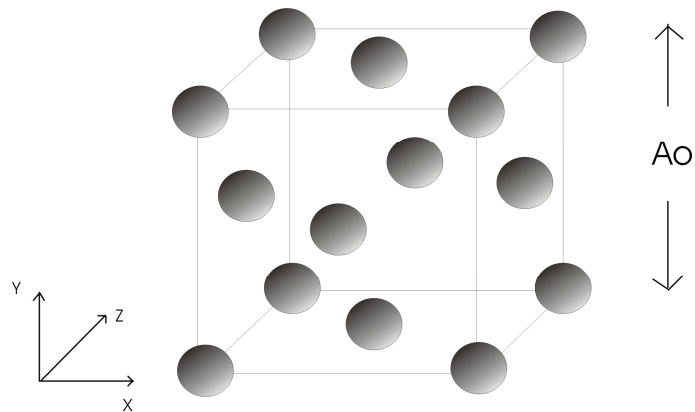
**Fig.2.1** Curva que muestra el comportamiento de la energía en función del vector de onda k (proporcional al momentum), para una partícula libre en la primera zona de Brillouin.

En resumen la ecuación que describe la energía total de la partícula, en formalismo ondulatorio se conoce como ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, y para este caso en el que se tiene únicamente en cuenta la energía cinética, esta puede ser expresada de la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi \quad (2.17)$$

### 2.3. Estructura Cristalina

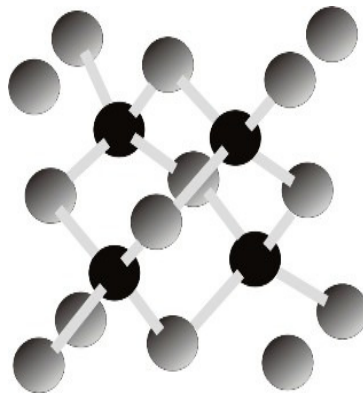
La gran mayoría de los principales semiconductores presentan una red de bravais cúbica centrada en las caras como se ilustra en la fig. 2.2



**Fig. 2.2.** En este grafico se presenta la estructura cristalina o Red de Bravais cúbica centrada en las caras de ancho  $A_0$  la cual es básica para el estudio de materiales III-V.

La estructura completa del cristal se obtiene localizando bases atómicas en cada uno de los puntos de la red de Bravais. Para materiales tales como Si, Ge, GaAs, AlAs, InP, etc. Los dos átomos están localizados, el primero en  $(1/8 \ 1/8 \ 1/8)$ , y el segundo en  $(-1/8 \ -1/8 \ -1/8)$ , con un parámetro de red de  $A_0$ .

Para materiales del grupo IV, como el Si y el Ge, debido a que los átomos dentro de la base son los mismos, entonces la estructura del cristal es equivalente a la del diamante. Para semiconductores compuestos por elementos de los grupos III-V, y II-VI, tales como GaAs, AlAs, InP, HgTe y CdTe, el catión se localiza en la posición  $(-1/8 -1/8 -1/8)$ , y el anión en  $(1/8 1/8 1/8)$ , este tipo de cristales se conocen con el nombre de estructura Blenda de Zinc, ver Fig. (2.3) ZnS, la única excepción a la regla es GaN.



**Fig. 2.3.** Estructura cristalina Blenda de Zinc.

#### **2.4. Masa Efectiva**

Debido a que el potencial del cristal es complejo y por simplicidad, se puede tomar este como constante, entonces la ecuación de Schrödinger para un electrón en el vacío puede ser aplicada, pero es real que dentro de un cristal las condiciones son diferentes a las del espacio vacío entonces se debe introducir un parámetro empírico de ajuste llamado masa efectiva  $m^*$ . Para entender el concepto de masa efectiva primero se debe tener en cuenta la relación que existe entre la energía y el vector de onda para electrones libres en el vacío que está dada por  $E = (\hbar^2/2m)k^2$ , en donde el coeficiente de  $k^2$ , determina la curvatura en la gráfica de E vs. K. Tomándolo de otro punto de vista se puede decir que  $1/m$ , la masa recíproca determina la curvatura, en ciertas regiones de las bandas los electrones pueden presentar una inusual alta curvatura en cercanías de la frontera del gap. Si la energía del gap es pequeña en comparación con la energía de un electrón libre

$\lambda$  en el límite, y la curvatura se refuerza por un factor  $\lambda/E_g$ , así mismo este término refuerza la masa recíproca.

En semiconductores el ancho de banda, es comparable con la energía del electrón libre, y es del orden de 20 eV, mientras que para la banda prohibida esta en el rango de 0.2 a 2 eV. Así la masa efectiva recíproca se refuerza por un factor de 10 a 100, y la masa efectiva se reduce en un factor de 0.1-0.01 de la masa del electrón libre. Estos valores son aplicados en cercanías de la banda prohibida, alejándose del gap es probable tomar una aproximación para electrones libres.

Un electrón en cercanías del borde más bajo de la banda de conducción tiene una energía que puede ser escrita de la forma:

$$E(k) = E_c + \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \right) k^2, \frac{m_e}{m} = \frac{1}{\left[ \left( \frac{2\lambda}{U} \right) - 1 \right]} \quad (2.18)$$

En donde  $E_c$  es la energía del estado fundamental en la banda de conducción,  $U$  representa el potencial periódico de la red,  $\lambda$  es la energía del electrón libre,  $k$  es el vector de onda medido en la zona de frontera, y  $m_e$  es la masa efectiva del electrón cerca del borde de la banda de conducción.

Un electrón en la cima de la banda de valencia tiene una energía:

$$E(k) = E_v + \left( \frac{\hbar^2}{2m_h} \right) k^2, \frac{m_h}{m} = \frac{1}{\left[ \left( \frac{2\lambda}{U} \right) + 1 \right]} \quad (2.19)$$

Siendo  $E_v$  la energía para el estado fundamental en la banda de valencia. La curvatura y ahora la masa será negativa cerca a la cima de la banda de valencia, pero se ha introducido un signo menos en la ecuación anterior ya que el símbolo  $m_h$  para la masa de un hueco tendrá un valor positivo teniendo en cuenta que  $m_h = -m_e$ .

Sin embargo el punto importante aquí es que un electrón en un potencial periódico es acelerado relativamente a la red, en un campo eléctrico o magnético aplicado como si la masa del electrón fuera igual a una masa efectiva, la cual se expresa como:

Teniendo presente la variación de la velocidad de grupo con respecto al tiempo

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{d^2E}{dkdt} = \hbar^{-1} \left( \frac{d^2E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \right) \quad (2.20)$$

De donde  $dk/dt = F/\hbar$ , y  $v_g$  es la velocidad de grupo

$$\frac{dv_g}{dt} = \left( \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \right) F \quad \text{ó} \quad F = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \frac{dv_g}{dt} \quad (2.21)$$

Si se identifica  $[\hbar^2/(d^2E/dk^2)]$ , como una masa entonces la ecuación anterior toma la forma de la segunda ley de Newton, y se define la masa efectiva como  $m^*$  por:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad (2.22)$$

Es fácil generalizar esta relación de la masa efectiva para una superficie anisotópica de energía, la cual varía con la dirección, entonces se introducen los componentes del tensor de masa efectiva recíproca:

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_k}{dk_\mu dk_\nu}, \quad \frac{dv_\mu}{dt} = \left( \frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} F_\nu \quad (2.23)$$

Donde  $\mu, \nu$  son coordenadas cartesianas.

## **2.5 Teoría de Bandas**

### *2.5.1. Introducción*

El modelo del electrón libre para metales da una buena intuición para la capacidad calórica, conductividad térmica, conductividad eléctrica, susceptibilidad magnética y electrodinámica de metales, pero el modelo falla para ayudarnos con grandes preguntas como; la distinción entre metales, semimetales, semiconductores, y aislantes, la ocurrencia de valores positivos de el coeficiente de Hall, la relación de electrones de conducción en los metales para los electrones de valencia de átomos libres y muchas propiedades de transporte, particularmente magneto transporte.

La diferencia entre un buen conductor y un buen aislante es llamativa [26]. Ya que la resistividad eléctrica de un metal puro puede ser tan baja como  $10^{-10}$  ohm-cm a una temperatura de 1 kelvin, apartando por supuesto la posibilidad de superconductividad. La resistencia de un buen aislante puede ser tan alta como  $10^{22}$  ohm-cm. Este rango de  $10^{32}$  puede ser el más ancho para cualquier propiedad física común de sólidos.

Todos los sólidos contienen electrones, una importante pregunta para la conductividad eléctrica es como los electrones responden a un campo eléctrico, se debe ver que los electrones en cristales esta arreglados en bandas de energía. Tales regiones prohibidas son llamadas gaps de energía, y resultan de la interacción de las ondas de los electrones de conducción con los núcleos de los iones del cristal. El cristal se comporta como un aislante si las bandas de energía permitida están llenas o vacías, por lo tanto los electrones no se pueden mover en un campo eléctrico. Se comporta como un metal si una o más bandas están parcialmente llenas, entre un 10 a 90 por ciento llenas. Y como es un semiconductor o un semimetal si una o dos bandas están ligeramente llenas o ligeramente vacías.

Para entender la diferencia entre aislantes y conductores se debe extender el modelo del electrón libre para tomar en cuenta la red periódica del sólido. La posibilidad de una banda prohibida es la más importante propiedad nueva que aparece. Debemos encontrar otra propiedad realmente notable de electrones en cristales por ejemplo, ellos responden

a campos eléctricos y magnéticos aplicados como si los electrones estuvieran dotados con una masa efectiva  $m^*$ , la cual puede ser mas grande o mas pequeña que la masa del electrón libre, o puede incluso ser negativa. Los electrones en cristales responden a campos aplicados como si estuvieran dotados con cargas negativas o positivas,  $-e$  o  $+e$  y ahí yace la explicación de los valores positivos o negativos del coeficiente de Hall.

### 2.5.2. Modelo del electrón cuasi libre

En el modelo del electrón libre los valores de energía permitida están distribuidos continuamente de cero a infinito. Teniendo en cuenta el gas de electrones libres de Fermi se tiene que:

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.24)$$

Donde, para condiciones limite periódicas sobre un cubo de lado  $L$ , la funciones de onda del electrón libre son de la forma:

$$k_x, k_y, k_z = 0 ; \quad \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots \quad \varphi(r) = \exp(ik \cdot r) \quad (2.25)$$

Estas funciones representan ondas viajeras, con momentum  $p = \hbar k$ . La estructura de banda de un cristal puede frecuentemente ser explicada por el modelo del electrón cuasi libre en este modelo los electrones en la banda son tratados si solo las afectara una perturbación débil debida al potencial periódico de los núcleos de los iones; este modelo responde a casi todas las preguntas cualitativas sobre el comportamiento de electrones en metales. Es conocido que la reflexión de Bragg es un rasgo característico de la propagación de ondas en cristales, dicha reflexión de ondas de electrones en cristales es la causa de los gaps de energía. Estos gaps de energía son de gran importancia en la determinación de la conductividad de un sólido.

Se puede explicar físicamente el origen de los gaps de energía al observar el problema simple de un sólido lineal de constante de red  $a$ , La condición de Bragg  $(k+G)^2 = k^2$ , para la difracción de una onda de vector de onda  $k$  se vuelve en una dimensión:

$$k = \pm \pi \frac{1}{2} G = \pm n \frac{\pi}{a} \quad (2.26)$$

Donde  $G=2\pi n/a$ , es un vector de red recíproco y  $n$  es un integrador. La primera reflexión y el primer gap de energía ocurren en  $k=\pm\pi/a$ . La región en el espacio  $k$  entre  $-\pi/a$  y  $\pi/a$ , es la primera zona de Brillouin de esta red. Otros gaps de energía ocurren para diversos valores de  $n$ .

Las funciones de onda en  $k=\pm\pi/a$ , no son las ondas viajeras  $\exp(i\pi x/a)$ , o  $\exp(-i\pi x/a)$  de electrones libres. En estos valores especiales de  $k$  las funciones de onda son compuestas de partes iguales de ondas viajando a la derecha y a la izquierda, cuando la condición de la reflexión de Bragg  $k=\pm\pi/a$ , se satisfaga por el vector de onda, una onda viajando a la derecha es afectada por la refracción de Bragg para viajar a la izquierda y viceversa. Cada reflexión de Bragg subsiguiente invertirá la dirección de viaje de la onda. Una onda que no viaja ni a izquierda ni a derecha es una onda estacionaria.

El estado independiente del tiempo es representado por ondas estacionarias,

$$\begin{aligned} \varphi(+) &= \exp(i\pi x / a) + \exp(-i\pi x / a) = 2 \cos(\pi x / a) \\ \varphi(-) &= \exp(i\pi x / a) - \exp(-i\pi x / a) = 2i \sin(\pi x / a) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Las ondas estacionarias están marcadas (+) y (-), de acuerdo a si o no cambian de signo cuando  $-x$  es sustituido por  $x$ . Ambas ondas estacionarias están compuestas por partes iguales de ondas viajeras dirigidas a izquierda o derecha.

### 2.5.3. Origen del gap de energía

Las dos ondas estacionarias  $\varphi(+)$  y  $\varphi(-)$ , agrupan electrones de diferentes regiones, y por consiguiente las dos ondas tienen diferentes valores de la energía potencial, este es el origen del gap de energía. La densidad de probabilidad  $\rho$  de una partícula es



$\varphi^* \varphi = |\varphi|^2$ . Para una onda viajera pura  $\exp(-i\pi x)$ , tenemos  $\rho = [\exp(-ikx)] \exp(ikx) = 1$ , así que la densidad de carga es constante. Sin embargo la densidad de carga no es constante para combinaciones lineales de ondas planas. Considerando la onda estacionaria  $\varphi(+)$  se tiene:

$$\rho(+)=|\varphi(+)|^2 \propto \cos^2 \frac{\pi x}{a} \quad (2.28)$$

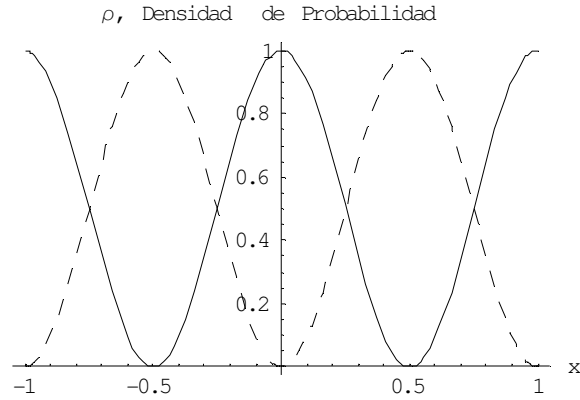
Esta función agrupa electrones (carga negativa) en los iones positivos centrados en  $x=0$ ,  $a$ ,  $2a \dots$  donde la energía potencial es más baja.

Por otra parte los núcleos de los iones soportan una carga positiva neta debido a que los átomos están ionizados en el metal con los electrones de valencia retirados para formar la banda de conducción. La energía potencial de un electrón en el campo de un ion positivo es negativa, así que la fuerza entre ellos es atractiva.

Para la otra onda estacionaria  $\varphi(-)$ , la densidad de probabilidad es:

$$\rho(-)=|\varphi(-)|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi x}{a} \quad (2.29)$$

La cual concentra electrones lejos de los núcleos de los iones. Cuando calculamos el promedio o valores esperados de la energía potencial sobre estas tres distribuciones de carga, encontramos que la energía potencial de  $\varphi(+)$  es más baja que la de la onda viajera, mientras que la energía potencial de  $\varphi(-)$ , es más grande que la onda viajera. Se tiene un gap de energía con un ancho  $E_g$ , si las energías de  $\rho(-)$  y  $\rho(+)$  difieren en  $E_g$  como se aprecia en la grafica 2.5.



**Fig. 2.4** Grafica para la densidad de probabilidad  $\rho (+)$  y  $\rho (-)$ , (línea continua y discontinua, respectivamente), en función de  $x$ .

#### 2.5.4. Magnitud del gap de energía

Las funciones de onda en el contorno de la zona de Brillouin  $k=\pi/a$ , son  $2^{1/2}\cos(\pi x/a)$ , y  $2^{1/2}\sin(\pi x/a)$ , normalizadas en unidades de longitud. Se puede escribir la energía potencial de un electrón en cristal en un punto  $x$  como:

$$U(x) = U \cos \frac{2\pi x}{a} \quad (2.30)$$

La diferencia de la energía de primer orden entre los estados de las dos ondas estacionarias es:

$$E_g = \int_0^1 dx U(x) [|\varphi(+)|^2 - |\varphi(-)|^2] = 2 \int dx U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \left(\cos^2 \frac{\pi x}{a} - \sin^2 \frac{\pi x}{a}\right) = U \quad (2.31)$$

Aquí se puede ver que el gap es igual a la componente de Fourier del potencial del cristal.

### 2.5.5. Funciones de Bloch

A través de las funciones periódicas se genera un teorema importante el cual expresa que las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico deben ser de la forma:

$$\varphi_k(r) = u_k(r) \exp(ik.r) \quad (2.32)$$

Donde  $u_k(r)$ , tiene el periodo de la red del cristal con  $u_k(r) = u_k(r+T)$ . La relación anterior expresa la función de Bloch.

Las funciones propias de la ecuación de onda para un potencial periódico son expresadas como el producto de una onda plana  $\exp(ikr)$ , veces una función  $u_k(r)$ , la cual tiene en cuenta el periodo de la red del cristal.

Dichas funciones de Bloch pueden ser agrupadas en paquetes de onda localizados con el propósito de representar electrones que se propagan libremente a través de los campos de potencial de los núcleos de los iones.

Igualmente existe una prueba restringida del teorema de Bloch, valido cuando  $\varphi_k$ , es no degenerado. Esto es, cuando no hay otras funciones de onda con la misma energía y vector de onda como  $\varphi_k$ . Teniendo en cuenta las condiciones de contorno cíclicas de Born y Von Karman se puede establecer que cuando se consideran N puntos idénticos de una red en un ciclo de longitud Na, la energía potencial se comporta como una función periódica en "a" con una expresión de la forma;  $U(x) = U(x+sa)$ , donde s es un integrador.

Ahora haciendo uso de estas condiciones de contorno cíclicas, se pueden obtener soluciones para la ecuación de onda tales que:

$$\varphi(x+a) = C\varphi(x) \quad (2.33)$$

Donde C es una constante. Entonces para un ciclo se tiene:

$$\varphi(x+Na) = \varphi(x) = C^N \varphi(x) \quad (2.34)$$

Porque  $\varphi(x)$  debe ser un valor único, luego  $C$  es una de las  $N$  raíces;

$$C = \exp\left(\frac{i2\pi s}{N}\right); s = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (2.35)$$

Luego:

$$\varphi(x) = u_k(x) \exp(i2\pi s x / Na) \quad (2.36)$$

Satisface  $\varphi(x+a) = C\varphi(x)$ , proporcionando que  $u_k(x)$ , tiene periodicidad "a", así que  $u_k(x) = u_k(x+a)$ , con  $k = 2\pi s / Na$ , se tiene la relación de Bloch:

$$\varphi_k(r) = u_k(r) \exp(ik.r) \quad (2.37)$$

### 2.5.6. Modelo de Kronig-Penney

Teniendo en cuenta lo anterior, un potencial periódico para el cual la ecuación de onda puede ser resuelta en términos de funciones elementales es el arreglo del pozo cuadrado. Para este modelo la ecuación de onda adquiere la forma

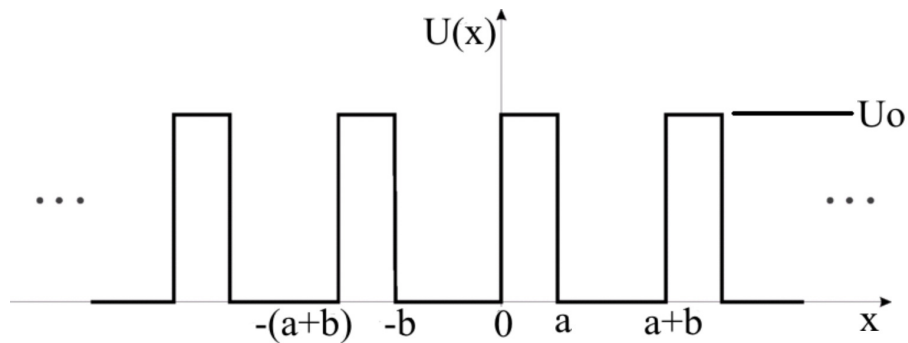


Fig.2.5 Pozo cuadrado de potencial Periódico correspondiente al modelo de Kronig y Penney

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + U(x) = E\varphi \quad (2.38)$$

Donde  $U(x)$ , es la energía potencial y  $E$ , es el valor propio de la energía. En la región  $0 < x < a$  en la cual  $U=0$ , la función propia es una combinación lineal

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-Kx} \quad (2.39)$$

De ondas planas viajando a la derecha a la izquierda, con energía

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (2.40)$$

En la región  $-b < x < 0$ , dentro de una barrera la solución es de la forma

$$\psi(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad (2.41)$$

Con

$$U_0 - E = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m} \quad (2.42)$$

Se necesita una solución completa que tenga la forma de funciones Bloch, así la solución en la región  $a < x < a+b$ , debe estar relacionada con la solución en la región,  $(-b) < x < 0$ , por el teorema de Bloch:

$$\varphi(a < x < a + b) = \varphi(-b < x < 0) \exp[ik(a + b)] \quad (2.43)$$

Lo cual sirve para definir el vector de onda  $k$ , usado como un índice para etiquetar la solución.

Las constantes  $A, B, C, D$ , son escogidas tal que  $\varphi$  y  $d\varphi/dx$ , sean continuas en  $x=0$ , y  $x=a$ . Teniendo en cuenta las usuales condiciones de contorno en mecánica cuántica, para problemas que implican pozos de potencial cuadrado, se tiene que en  $x=0$ :

$$A + B = C + D \quad (2.44)$$

$$ik(A - B) = Q(C - D) \quad (2.45)$$

En  $x=a$ , usando el teorema de Bloch para  $\varphi(a)$ , bajo la barrera en términos de  $\varphi(-b)$ ,

$$A \exp(iKa) + B \exp(-iKa) = [C \exp(-Qb) + D \exp(Qb)] \exp[ik(a+b)] \quad (2.46)$$

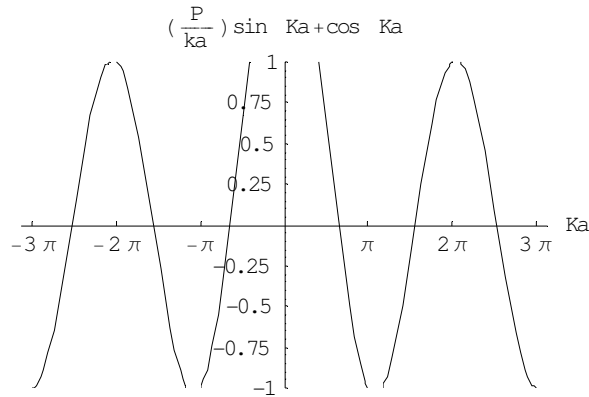
$$iK[A \exp(iKa) - B \exp(-iKa)] = Q[C \exp(-Qb) - D \exp(Qb)] \exp[ik(a+b)] \quad (2.47)$$

Las cuatro ecuaciones anteriores tienen solución únicamente si el determinante de los coeficientes A, B, C, D, desaparece o si,

$$[(Q^2 - K^2) / 2QK] \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b) \quad (2.48)$$

El resultado se simplifica si se representa el potencial por una función delta periódica, la cual se obtiene cuando pasamos del límite  $b=0$  a  $U_0 = \infty$ , en tal forma que  $P=Q^2ba/2$ , es una cantidad finita. En estas condiciones límite se presenta que  $Q \gg K$  y  $Q \ll 1$ , entonces la ecuación anterior se reduce a  $(P/ka) \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$ .

Los rangos de K para los cuales esta ecuación tiene solución se muestran en la fig. 2.6. Para el caso  $P=3\pi/2$ , el vector de onda k de las funciones de Bloch es un índice importante, y difiere de K en (2.39), el cual está relacionado con la energía en (2.40).



**Fig.2.6** Diagrama que muestra las bandas de energía E prohibidas y permitidas, en donde  $Ka = (2mE/\hbar^2)^{1/2} a$ , para la cual la función está entre  $\pm 1$ . Para otros valores de energía no hay ondas viajeras o soluciones tipo Bloch para la ecuación de onda y entonces se forma el espectro de energías para las brechas prohibidas (Discontinuidades).

## 2.6. Heteroestructuras

### 2.6.1. Impurezas hidrogenoides para materiales en bloque

En un material cristalino infinito no es necesario conocer precisamente cual celda unitaria alberga el ion impureza. Dos impurezas localizadas en  $R_i$  y  $R_j$ , las cuales difieren en un vector de red son equivalentes, las energías de enlace para estas dos posiciones serán las mismas.

Para bandas no degeneradas e isotrópicas con relación de dispersión parabólica la función envolvente de los estados de impurezas cumple la ecuación (2.49)

$$\left[ \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (2.49)$$

Donde  $m^*$  es la masa efectiva de los portadores y  $\epsilon$  es la constante dieléctrica relativa del material. La función de onda del estado fundamental ligado  $1s$  es:

$$\varphi_{1s}(r) = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \exp(-r/a_0) \quad (2.50)$$

Donde  $a_0$  es el radio de Bohr tridimensional efectivo:

$$a_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2} = (0.53) \epsilon \left( \frac{m_0}{m^*} \right) \left[ \text{\AA} \right] \quad (2.51)$$

En GaAs  $\epsilon=12.85$ ,  $m^*=0.067 m_0$ , y  $a_0 \approx 100 \text{\AA}$ . El estado  $1s$  tiene una energía de enlace  $R_0$  dada por

$$R_0 = \frac{1}{2} \frac{m^* e^4}{\epsilon^2 \hbar^2} = \left( \frac{13600}{\epsilon^2} \right) \left( \frac{m^*}{m_0} \right) [\text{meV}] \quad (2.52)$$

En GaAs  $R_0 \approx 5.5 [\text{meV}]$ .

### 2.6.2 Impurezas en heteroestructuras

En contraste con los materiales en bloque, las heteroestructuras están caracterizadas por la falta de invariancia traslacional a lo largo del crecimiento de los ejes. Así la energía de enlace de la impureza depende explícitamente de la localización precisa de la impureza. Es importante por ejemplo saber donde el átomo de Al está localizado en una heteroestructura de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As ya que la energía de enlace del estado donador asociada con el Al dependerá de si esta se localiza en el centro del pozo de GaAs, en el borde de este pozo o lejos en la barrera de Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. La segunda característica importante de problemas coulombicos en heteroestructuras es la variación de la energía de enlace de la impureza con la dimensión característica del pozo, es decir si L es espesor del pozo cuántico rectangular, cuando L decrece, la energía de enlace de la impureza se incrementa, esto puede sorprender a primera vista puesto que intuitivamente se asocia una energía cinética extra con la localización de una partícula en una región finita del espacio. Además esto es actualmente verdadero ya que la posición de la energía del estado ligado fundamental de la impureza  $E_g(R, r_0)$ , se incrementa a medida que R decrece, cuando esta se mide con respecto a una referencia fija (en el fondo del pozo),



**SOLUCIONES A LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER**

***3.1 Pozo de Potencial Infinito, unidimensional y tridimensional***

***3.1.1 El pozo infinito unidimensional (coordenadas esféricas)***

Consideremos un pozo infinito unidimensional con un potencial de la forma:

$$V(r) = \begin{cases} 0, r < a \\ \infty, r > a \end{cases} \quad (3.1)$$

Fuera del pozo la función es cero, dentro del pozo la ecuación radial se expresa como:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} ER = 0 \quad (3.2)$$

Donde  $r$  es el radio del punto cuántico o de la esfera que ese este considerando,  $m$  es la masa del electrón libre y  $\hbar$  es la constante de Plank. Realizando un cambio variables en esta ecuación diferencial homogénea se tiene que:

$$u(r) = rR(r) \rightarrow R = \frac{u}{r} \quad (3.3)$$

Derivando la expresión anterior:

$$\frac{dR}{dr} = \frac{\left[ r \left( \frac{du}{dr} \right) - u \left( \frac{dr}{dr} \right) \right]}{r^2} \rightarrow \left[ r^2 \left( \frac{dR}{dr} \right) \right] = r \frac{du}{dr} - u \quad (3.4)$$

Reemplazando en el primer término de (3.2) y derivando con respecto a  $r$ :

$$r^2 \left( \frac{dR}{dr} \right) = \left[ r \left( \frac{du}{dr} \right) - u \right] \quad (3.5)$$

$$\frac{d}{dr} \left[ r^2 \left( \frac{dR}{dr} \right) \right] = \frac{d}{dr} \left[ r \left( \frac{du}{dr} \right) - u \right] \quad (3.6)$$

$$\frac{d}{dr} \left[ r^2 \left( \frac{dR}{dr} \right) \right] = r \frac{d^2u}{dr^2} \quad (3.7)$$

Ya que el vector de onda lo podemos colocar en términos de la energía la ecuación (3.8) se puede expresar como:

$$r \frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{2mr^2E}{\hbar^2} \left( \frac{u}{r} \right) = -\frac{2mrEu}{\hbar^2} \quad (3.8)$$

Pero:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.9)$$

Entonces:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -k^2u \quad (3.10)$$

Finalmente:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2u = 0 \quad (3.11)$$

Ya que (3.11) es una ecuación diferencial de segundo orden, tiene una solución de la forma:

$$u = e^{\alpha r} \quad (3.12)$$

Diferenciando esta expresión:

$$u' = \alpha e^{\alpha r} \quad (3.13)$$

$$u'' = \alpha^2 e^{\alpha r} \quad (3.14)$$

Reemplazando (3.12) y (3.14) en (3.11)

$$\alpha^2 e^{\alpha r} + k^2 e^{\alpha r} = 0 \quad (3.15)$$

La ecuación auxiliar tiene la forma:

$$e^{\alpha r} (\alpha^2 + k^2) = 0 \quad (3.16)$$

$$\alpha^2 + k^2 = 0 \quad (3.17)$$

$$\alpha^2 = -k^2 \quad (3.18)$$

$$\alpha = \pm \sqrt{-k^2} = \pm ik \quad (3.10)$$

Sustituyendo estos valores (3.10), en la ecuación (3.12), se tiene:

$$u_1 = e^{ikr} \quad (3.19)$$

$$u_2 = e^{-ikr} \quad (3.20)$$

Luego la solución general es de la forma:

$$u(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr} \quad (3.21)$$

La expresión anterior concuerda con la superposición de dos ondas planas en un pozo, viajando en direcciones diferentes de  $r$ .

Ahora se necesita hallar el valor de las constantes, para eso se tiene en cuenta las condiciones iniciales.

$$u(r) = 0, \text{ en } r = 0 \quad (3.22)$$

$$A + B = 0 \quad (3.23)$$

$$A = -B \quad (3.24)$$

Reemplazando en (3.21)

$$u(r) = Ae^{ikr} - Ae^{-ikr} \quad (3.25)$$

Luego se tiene una solución de la forma:

$$u(r) = A(e^{ikr} - e^{-kr}) \quad (3.26)$$

$$u(r) = 2iA\text{Sin}(kr) \quad (3.27)$$

Teniendo en cuenta la segunda condición inicial:

$$u(a) = 0 \quad (3.28)$$

$$0 = 2iA\text{Sin}(ka) \quad A \neq 0 \quad (3.29)$$

$$\text{Sin}(ka) = 0, \quad ka = n\pi \quad (3.30)$$

$$k = \frac{n\pi}{a}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.31)$$

La expresión para la energía toma la forma siguiente:

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (3.32)$$

$$E = \frac{n\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m} \quad (3.33)$$

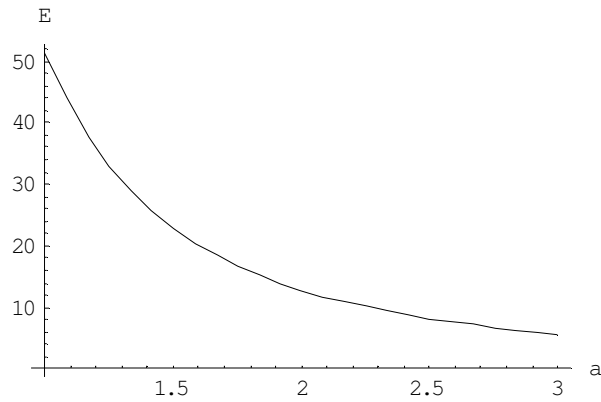


Fig. 3.1 Variación de la energía con respecto a el tamaño del pozo (a)

Ahora normalizamos para hallar el valor de A. Primero multiplicamos la función de onda  $u(r)$  por su conjugado  $u^*(r)$ :

$$u(r) = 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{a} r\right) \quad (3.34)$$

$$u^*(r) = -2iA \sin\left(\frac{n\pi}{a} r\right) \quad (3.35)$$

Luego integrando:

$$\int_0^a u(r)u^*(r)dr = \int_0^a 4A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi r}{a}\right)dr = 1 \quad (3.36)$$

$$4A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi r}{a}\right)dr \quad (3.37)$$

$$B = \frac{n\pi r}{a} \quad (3.38)$$

$$dr = \frac{a}{n\pi} dB \quad (3.39)$$

$$\frac{4A^2 a}{n\pi} \int_0^a \sin^2 B dB \quad (3.40)$$

$$\frac{4A^2 a}{n\pi} \left[ \frac{1}{2} B - \frac{1}{4} \sin 2B + C \right]_0^a = \frac{4A^2 a}{n\pi} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{n\pi r}{a} \right) - \frac{1}{4} \sin 2 \left( \frac{n\pi r}{a} \right) \right]_0^a \quad (3.41)$$

$$2A^2 \left[ r - \frac{1}{2} \frac{a}{n\pi} \sin 2 \left( \frac{n\pi r}{a} \right) \right]_0^a = 2A^2 \left[ a - \frac{1}{2} \frac{a}{n\pi} \sin(n\pi) \right] \quad (3.42)$$

$$2A^2 a = 1 \quad (3.43)$$

Así:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2a}} \quad (3.44)$$

Y finalmente reemplazando esta constante en la función de onda se tiene:

$$u_n(r) = i \frac{2}{\sqrt{2a}} \sin \left( \frac{n\pi r}{a} \right) \quad (3.45)$$

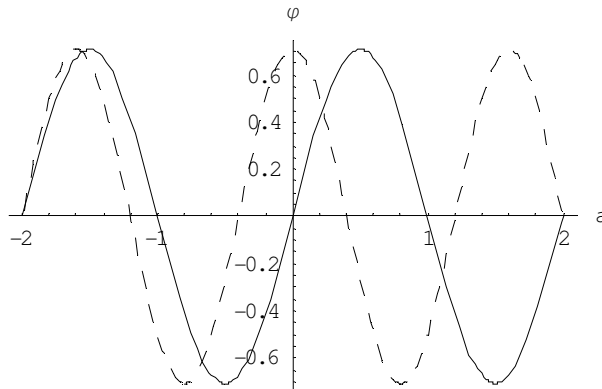


Fig. 3.2 En esta grafica se muestra la probabilidad de encontrar la partícula en el pozo.

La solución para la ecuación radial para un  $l$  arbitrario no es tan familiar y es de la forma:

$$u(r) = A r j_l(kr) + B r n_l(kr) \quad (3.46)$$

Donde  $j_l(x)$ , es la función esférica de Bessel de orden  $l$ , y  $n_l(x)$ , es la función esférica de Neumann de orden  $l$ , así:

$$j_l(x) = (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} \quad (3.47)$$

Y

$$n_l(x) = -(-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad (3.48)$$

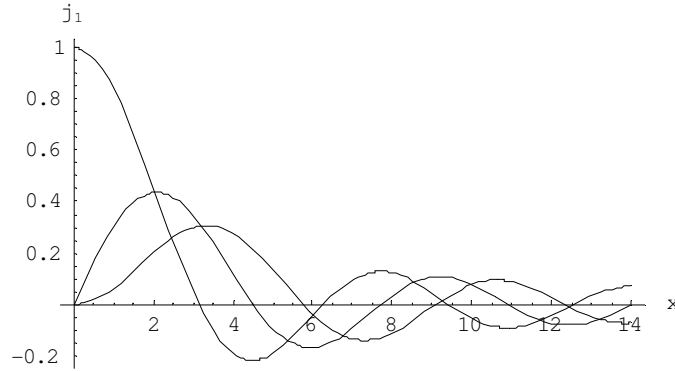


Fig. 3.3 Grafica para mostrar las primeras cuatro funciones esféricas de Bessel,  $n=0, 1, 2, 3$ .

La función de Bessel como se ve en la grafica anterior tiene una cantidad infinita de ceros los cuales no se pueden localizar sencillamente, por ello para las condiciones de contorno se requiere que  $k=(1/a)\beta_{nl}$ , donde  $\beta_{nl}$  es el  $n^{\text{th}}$  de la  $l^{\text{th}}$  función esférica de Bessel, por lo tanto las energías permitidas están dadas por

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2 \quad (3.49)$$

Y las funciones de onda son:

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r / a) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.50)$$

Donde la constante  $A_{nl}$ , será determinada por normalización.

### 3.1.2 El pozo infinito tridimensional (coordenadas esféricas)

Para analizar este caso se tiene en cuenta el operador Laplaciano en tres dimensiones y en coordenadas esféricas el cual se define como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (3.51)$$



Teniendo en cuenta este operador la ecuación (3.51), la Schrödinger independiente del tiempo adquiere la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi \quad (3.52)$$

Para el pozo de potencial infinito:

$$V(r) = \begin{cases} 0, r < a \\ \infty, r > a \end{cases} \quad (3.53)$$

Por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] = E\psi \quad (3.54)$$

Utilizando separación de variables:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (3.55)$$

Bajo esta separación de variables obtenemos entonces una ecuación diferencial separada completamente en  $r$ ,  $\theta$  y  $\phi$  o sea,

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = Y \frac{\partial R}{\partial r} \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = R \frac{\partial Y}{\partial \theta} \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} = Y \frac{\partial^2 R}{\partial \phi^2} \quad (3.58)$$

Ahora remplazando estas expresiones en la ecuación (3.54):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \quad (3.59)$$

$$\left[ -\frac{2mr^2}{YR\hbar^2} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -\frac{2mr^2}{\hbar^2} E$$

Simplificando:

$$\left[ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E \right] + \frac{1}{Y} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = 0 \quad (3.60)$$

Se introduce una variable de separación:

$$l(l+1) \quad (3.61)$$

Luego:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = l(l+1) \quad (3.62)$$

$$\frac{1}{Y} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -l(l+1) \quad (3.63)$$

### 3.1.2.1 La ecuación Angular:

Tomando (3.63) y multiplicándola por:

$$Y \sin^2 \theta \quad (3.64)$$

Se vuelve.

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1) Y \sin^2 \theta \quad (3.65)$$

Separando variables:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Psi(\phi) \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \theta} = \Psi \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \phi} = \Theta \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \quad (3.68)$$

Reemplazando en (3.65) y dividiendo por:

$$\Theta\Psi$$

Se tiene:

$$\left\{ \frac{1}{\Theta} \left[ \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} + \frac{1}{\Psi} \frac{d^2 \Psi}{d\phi^2} = 0 \quad (3.69)$$

Dado que la ecuación anterior esta en variables separables, es posible introducir una constante de separación  $m^2$ , la cual facilita el estudio de cada una de estas ecuaciones por separado y darles su respectiva interpretación física, así:

$$\frac{1}{\Theta} \left[ \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \quad (3.70)$$

$$\frac{1}{\Psi} \frac{d^2 \Psi}{d\phi^2} = -m^2 \quad (3.71)$$

La solución para  $\Psi$  es conocida:

$$\frac{d^2\Psi}{d\phi^2} = -m^2\Psi \quad (3.72)$$

Y es de la forma:

$$\Psi(\phi) = e^{im\phi} \quad (3.73)$$

La solución para  $\Theta$ :

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [1(1+1)\sin^2\theta - m^2] \Theta = 0 \quad (3.74)$$

Y es de la forma:

$$\Theta(\theta) = AP_1^m \cos\theta \quad (3.75)$$

$P_1^m$ , es la función Asociada de Legendre

$$P_1^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \left( \frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_1(x) \rightarrow l^{\text{th}} \text{ Polinomio de Legendre} \quad (3.76)$$

Este polinomio es mejor expresarlo por la formula de Rodríguez como:

$$P_1(x) = \frac{1}{2^1 1!} \left( \frac{d}{dx} \right)^1 (x^2 - 1)^1 \quad (3.77)$$

### 3.1.2.2 La ecuación Radial:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = l(l+1) \quad (3.78)$$

Haciendo un cambio de variable:

$$u(r) = rR(r) \quad (3.79)$$

$$R = \frac{u}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{\left[ r \frac{du}{dr} - u \frac{dr}{dr} \right]}{r^2} = \frac{\left[ r \frac{du}{dr} - u \right]}{r^2} \rightarrow r^2 \frac{dR}{dr} = r \frac{du}{dr} - u \quad (3.80)$$

Luego:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{d}{dr} \left( r \frac{du}{dr} - u \right) = r \frac{d^2u}{dr^2} + \frac{dr}{dr} \frac{du}{dr} - \frac{du}{dr} = r \frac{d^2u}{dr^2} \quad (3.81)$$

Entonces:

$$r \frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{2mr^2E}{\hbar^2} \frac{u}{r} = \frac{2mrEu}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.82)$$

Finalmente:

$$r \frac{d^2u}{dr^2} + k^2u = 0 \quad (3.83)$$

Ahora se supone una solución de la forma:

$$u = e^{kr} \quad (3.84)$$

La cual nos lleva a:

$$u(r) = 2iA \sin kr, \quad k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.85)$$

Y la Energía es de la forma:

$$E = \frac{k^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (3.86)$$

Valor propio de la energía la cual tiene en cuenta el número entero  $n$ , que es igual al número de nodos de la parte radial de la función de onda. De forma similar dicha expresión de energía varía con el inverso al cuadrado de la distancia lo cual muestra también que si el radio disminuye dicha energía aumenta y que se obtiene radios críticos para los cuales la energía presenta valores discretos ligados al principio de indeterminación.

### ***3.2 Pozo de Potencial Finito, unidimensional y tridimensional***

#### *3.2.1 El pozo finito unidimensional*

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a < x < a \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad (3.87)$$

Donde  $V_0$  es una constante positiva, el pozo finito admite estados ligados (con  $E < 0$ ) y estados de dispersión (con  $E > 0$ ).

Primero miraremos los estados ligados. En la región  $x < -a$ , el potencial es cero, entonces la ecuación de Schrödinger queda de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi, \quad \text{o,} \quad \frac{d^2\varphi}{dx^2} = k^2\varphi \quad (3.88)$$

Donde:

$$k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (3.89)$$

Es real y positiva. La solución general es:

$$\varphi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx} \quad (3.90)$$

El primer término desaparece cuando  $x \rightarrow \infty$ , así que la solución físicamente admisible es:

$$\varphi(x) = Be^{kx}, \text{ para } (x < -a) \quad (3.91)$$

En la región  $-a < x < a$ ,  $V(x) = -V_0$ , y la ecuación de Schrödinger queda de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} - V_0\varphi = E\varphi, \text{ o, } \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = l^2\varphi \quad (3.92)$$

Donde:

$$l = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (3.93)$$

Aunque  $E$  es negativo, para un estado fundamental, este debe ser más grande que  $-V_0$  por el viejo teorema  $E < V_{\min}$ , así  $l$  es también real y positivo, la solución general es:

$$\varphi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \text{ para } (-a < x < a) \quad (3.94)$$

Donde  $C$  y  $D$  son constantes arbitrarias. Finalmente en la región  $x > a$ , el potencial es cero otra vez; la solución general es:

$$\varphi(x) = Fe^{-kx} + Ge^{kx} \quad (3.95)$$

Pero el Segundo término desaparece cuando  $x \rightarrow \infty$ , entonces solo nos queda:

$$\varphi(x) = Fe^{-kx}, \text{ para } x > a \quad (3.96)$$

El próximo paso será imponer las condiciones de contorno:

$\varphi$  y  $d\varphi/dx$ , continuas en  $-a$  y  $+a$

Luego se trabajara con funciones pares y en un solo lado del pozo, ya que el coseno es función par y el seno es función impar así que tendremos soluciones de la forma:

$$\varphi(x) = \begin{cases} Fe^{-kx}, x > a \\ D \cos(lx), 0 < x < a \\ \varphi(-x), x < 0 \end{cases} \quad (3.97)$$

La continuidad de  $\varphi(x)$  en  $x=a$  dice:

$$Fe^{-kx} = D \cos(la) \quad (3.99)$$

y la continuidad de  $d\varphi/dx$  dice que:

$$-kFe^{-kx} = -lD \sin(la) \quad (3.100)$$

Dividiendo las anteriores ecuaciones queda:

$$k = l \tan(la) \quad (3.101)$$

La ecuación anterior es una fórmula para las energías permitidas desde que  $k$  y  $l$  sean ambas funciones de  $E$ . Es conveniente adoptar otra notación para resolver  $E$ , así.

$$z = la, \text{ y } z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad (3.102)$$

De acuerdo a las ecuaciones para  $k$  y  $l$  tenemos:

$$(k^2 + l^2) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (3.103)$$

Así:

$$ka = \sqrt{z_0^2 - z^2} \quad (3.104)$$

Entonces la ecuación para  $k$  queda de la forma:

$$\tan = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \quad (3.105)$$

Esta es una ecuación trascendental para  $z$  (y ahora para  $E$ ) como una función de  $Z_0$  (la cual es una medida del tamaño del pozo).



### 3.2.2 El pozo finito tridimensional (coordenadas esféricas)

Para estados estacionarios el comportamiento de un electrón en un pozo de potencial esférico finito  $V(r)$ , se puede representar por:

$$H\psi = E\psi \quad (3.122)$$

Donde el operador de energía esta dado por:

$$H = -\frac{\hbar}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (3.123)$$

Sea  $L^2$ , el operador de momentum angular, y es de la forma

$$L^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (3.124)$$

Los estados que satisfacen (3.122), poseen valores bien definidos de energía,  $L^2$  y la componente  $z(L_z)$  del momentum angular, debido a que los operadores  $L^2$  y  $L_z$  conmutan con  $H$ .

La dependencia en  $\theta$  y  $\phi$  de los estados estacionarios esta determinada por los armónicos esféricos  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ , que son las funciones propias de los operadores  $L^2$  y  $L_z$ , con valores propios  $L^2=l(l+1)\hbar^2$  y  $L_z=m\hbar$  respectivamente,  $l$  es el numero cuántico orbital, y  $m$  es el numero cuántico magnético.

Los estados estacionarios de un electrón con valores definidos de  $L^2$  y  $L_z$  son

$$\Psi_{E,l,m}(r) = f_{E,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.125)$$

Donde  $f_{E,l}$  es la función es la función de onda radial, y su forma depende de la energía  $E$ , el valor de  $L^2$ , y el potencial  $V(r)$ . Si se reemplaza (3.124), en (3.122), se obtiene para  $f_{E,l}$ , la siguiente ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] f_{E,l}(r) = E f_{E,l}(r) \quad (3.126)$$

La función  $f_{E,l}$ , no depende del número cuántico  $m$ , porque el potencial  $V(r)$  tiene simetría esférica. El segundo término a la izquierda de la ecuación (3.126), es el

potencial centrífugo que se atribuye al momento angular, este termino mas el potencial  $V(r)$ , forma el potencial efectivo  $V_{\text{eff}}$ . Se observa que la variable  $r$  solo puede tomar valores reales positivos, luego el potencial  $V_{\text{eff}}$  es mayor o igual a cero y actúa como un potencial repulsivo.

Así la ecuación (3.126) se puede expresar de la forma

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + V_{\text{eff}}(r) \right] f_{E,l}(r) = E f_{E,l}(r) \quad (3.127)$$

Cuando el potencial  $V(r)$  toma un valor constante como cero, la ecuación radial (3.126) toma la forma:

$$\left[ \frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] f_l(\rho) = 0 \quad (3.128)$$

Donde  $\rho=kr$  y  $k^2=2mE/\hbar^2$ .

Las soluciones complejas de esta ecuación diferencial son las funciones esféricas de Hankel de primer orden (+) y de segundo orden (-) dadas por

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = C_l^{\pm} \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} \quad (3.129)$$

Donde los coeficientes complejos  $C_l^{\pm}$  son polinomios dependientes de  $\rho^{-1}$  de la forma

$$C_l^{\pm} = (\pm i)^l \sum_{s=0}^l \frac{1}{2^s s! (l-s)!} (\pm i\rho)^{-s} \quad (3.130)$$

Un conjunto equivalente de soluciones, son las funciones esféricas de Bessel y Neumann, las cuales son una combinación lineal de las funciones de Hankel.

$$j_l(\rho) = \frac{1}{2i} [h_l^{(+)}(\rho) - h_l^{(-)}(\rho)] \quad (3.131)$$

Y Neumann

$$n_l(\rho) = \frac{1}{2} [h_l^{(+)}(\rho) + h_l^{(-)}(\rho)] \quad (3.132)$$

El termino de las funciones esféricas de Hankel puede expresarse como

$$h_l^{(+)}(\rho) = n_l(\rho) \pm i j_l(\rho) \quad (3.133)$$

El comportamiento de las funciones esféricas de Bessel y Neumann para valores pequeños del argumento es

$$j_l(\rho) \sim \rho^l, \quad n_l(\rho) \sim \rho^{-(l+1)} \quad (3.134)$$

Y para  $\rho$  muy grande

$$\begin{aligned} j_l(\rho)_{\rho \rightarrow \infty} &\propto \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \\ n_l(\rho)_{\rho \rightarrow \infty} &\propto \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.135)$$

Donde la función esférica de Neumann  $n_l(\rho)$  diverge en el origen, solo la función esférica de Bessel  $j_l(\rho)$  es la única solución de la ecuación radial (3.128) que es regular en el origen.

Las funciones esféricas de Hankel, son necesarias para obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger radial (3.126), cuando se considera un pozo de la forma

$$V(r) = \begin{cases} V_I = 0, & 0 \leq r \leq R \\ V_{II} > 0, & r \geq R \end{cases} \quad (3.136)$$

Este sistema es analizado para estados ligados, es decir, para energías menores que el potencial,  $0 < E < V_{II}$ . En la región I la ecuación radial (3.126) toma la forma de la ecuación (3.128), las soluciones las funciones esféricas de Bessel  $j_l(\rho)$ , debido a que no divergen en  $r = 0$ . En la región II las soluciones son las funciones esféricas de Hankel  $h_l^{(+)}(\rho)$ , donde  $\rho = i\eta = iK_{II}r$  y  $K_{II} = [2m(V_{II} - E)/\hbar^2]^{1/2}$ . Las funciones de Hankel son de la forma

$$h_l^{(\pm)}(i\eta) = (\pm i)^{l \pm 1} \sum_{s=0}^l \frac{1}{2^s s! (l-s)!} (\pm \eta)^{-s} \frac{e^{\pm \eta}}{\eta} \quad (3.137)$$

La función  $h_l^{(+)}(i\eta)$  cumple, es característico para la descripción de estados ligados fuera del pozo de potencial. Su comportamiento asintótico para  $\eta$  grande es

$$i^{l+1}h_l^{(+)}(i\eta) \sim \frac{e^{-\eta}}{\eta}, \eta \rightarrow \infty \quad (3.138)$$

Las soluciones para el pozo de potencial son

$$f_l(r) \begin{cases} A_{II}j_l(k_I r), & 0 \leq r \leq R \\ B_{III}h_l^{(+)}(ik_{II}r), & r \geq R \end{cases} \quad (3.139)$$

Teniendo en cuenta las condiciones de frontera, el coeficiente de  $B_{III}$ , puede ser expresado en términos de  $A_{II}$ , el cual está determinado por la normalización de la función de onda y por la continuidad en la derivada de la función de onda en  $r=R$ , así se obtiene una ecuación trascendental para los estados discretos de la energía.

Para el estado fundamental  $n=1, l=0$ , se puede escribir la ecuación (3.139) de la siguiente forma:

$$f_l = \begin{cases} A_{II}j_0(k_I r) = A_{II} \frac{\sin(k_I r)}{r}, & 0 \leq r \leq R \\ B_{III}h_0^{(+)}(ik_{II}r) = B_{III} \frac{e^{-k_{II}r}}{r}, & r \geq R \end{cases} \quad (3.140)$$

### 3.3 Densidad de Estados

#### 3.3.1 Gas de electrones libres de Fermi

Podemos entender muchas propiedades de los metales, en términos del modelo del electrón libre. De acuerdo a este modelo los electrones de valencia de los átomos constituyentes se vuelven electrones de conducción y se mueven libremente a través de volumen del metal. Así mismo en metales para los cuales el modelo del electrón libre trabaja mejor, la distribución de carga de los electrones de conducción refleja el potencial electrostático fuerte de los núcleos de los iones. La utilidad del modelo del electrón libre es más grande para propiedades que dependen esencialmente de las propiedades cinéticas de los electrones de conducción. Los metales más simples son los

metales alcalinos, Litio, Sodio, Potasio, Cesio, y Rubidio. En un átomo libre de Sodio el electrón de valencia esta en un estado 3s; y en el metal este electrón se vuelve un electrón de conducción así pues se hablara de la banda de conducción 3s. Un cristal monovalente que contiene N átomos tendrá N electrones de conducción y N núcleos de iones positivos .El núcleo del Ion  $\text{Na}^+$  Contiene 10 electrones que ocupan los 1s, 2s, y 2p del Ion libre. Los núcleos de los iones llenan solo el 15 por ciento del volumen de un cristal de sodio .El radio del Ion libre del  $\text{Na}^+$  es de 0.98 Å, considerando que la mitad de la distancia al vecino más cercano del metal es de 1.83 Å. La interpretación de las propiedades metálicas en términos del movimiento de los electrones libres fue desarrollada a lo largo del tiempo antes de la invención de la mecánica cuántica. La teoría clásica tiene varios triunfos eminentes, notablemente el origen de la Ley de Ohm y la relación entre conductividad eléctrica y térmica. Pero falla al explicar la capacidad calórica y la susceptibilidad magnética de la conducción de electrones (estos no son los fracasos del modelo del electrón libre pero si de la función de distribución de Maxwell). Hay una gran dificultad. Para muchos tipos de experimentos es claro que los electrones de conducción en un metal pueden moverse libremente en una trayectoria continua a través de muchas distancias atómicas, sin desviarse por colisiones con otros electrones o por colisiones con los núcleos atómicos. En una muestra pura en condiciones de baja temperatura, esto puede significar una trayectoria permitida a lo largo de  $10^8$  espacios Inter-atómicos (o sea mas de 1 cm.).

Porque es la materia condensada tan transparente a la conducción de electrones? La respuesta a esta pregunta contiene dos partes:

Un electrón de conducción no es desviado por núcleos de iones dispuestos en una red periódica porque ondas de materia se propagan libremente en una estructura periódica. O sea dicho electrón de conducción es dispersado solo ocasionalmente por otro electrón de conducción, como una consecuencia del principio de exclusión de Pauli, que en este caso permitirá estudiar dicho fenómeno como un gas de electrones libres.

### 3.3.2 Niveles de energía en una dimensión

Considere un gas de electrones libres en una dimensión tomando en cuenta la teoría cuántica y el principio de Pauli. Un electrón de masa  $m$  es confinado a una longitud  $L$  por una barrera infinita. La función de onda  $\psi_n(x)$ , del electrón es una solución de la ecuación de Schrödinger  $H\psi=E\psi$ ; Omitiendo la energía potencial tenemos que:

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (3.122)$$

Donde  $p$  es el momentum. En teoría cuántica  $p$  puede ser representado por

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (3.123)$$

Así que:

$$H\Psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_n}{dx^2} = E_n \Psi_n \quad (3.124)$$

Donde  $E_n$  es la energía del electrón en el orbital. Usamos el término orbital para denotar una solución de la ecuación de onda para un sistema de solo un electrón. El término nos permite distinguir entre un estado cuántico exacto de la ecuación de onda de un cierto sistema de otro sistema de  $N$  electrones y un estado cuántico aproximado el cual construimos asignando los  $N$  electrones a  $N$  diferentes orbitales, donde cada orbital es una solución de una ecuación de onda para un electrón. El modelo del orbital es exacto solo si no hay interacciones entre electrones.

Las condiciones de contorno son  $\psi_n(0)=0$ ;  $\psi_n(L)=0$ , son impuestas por la barrera de energía de potencial infinita. Ellas se satisfacen si la función de onda es sinusoidal con un número integrador  $n$  de media longitud de onda entre  $0$  y  $L$ :

$$\Psi_n = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right); \quad \frac{1}{2} n\lambda_n = L \quad (3.125)$$

Donde A es una constante. Se puede apreciar que (3.125) es una solución de (3.124), porque:

$$\frac{d\Psi_n}{dx} = A\left(\frac{n\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right); \frac{d^2\Psi_n}{dx^2} = -A\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (3.126)$$

De donde la energía  $E_n$  esta dada por:

$$m_s = \pm \frac{1}{2} E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (3.127)$$

Deseamos acomodar N electrones en una línea .De acuerdo al principio de exclusión de Pauli dos electrones no pueden tener sus números cuánticos idénticos. Esto es cada orbital puede ser ocupado a lo sumo por un electrón o dos con espín diferente. Esto aplica para electrones en átomos, moléculas o sólidos.

En un sólido lineal los números cuánticos del orbital de un electrón de conducción son  $n, m_s$ , donde n es cualquier integrador positivo, y el número cuántico magnético  $m_s = \pm 1/2$ , de acuerdo a la orientación del espín. En una pareja de orbitales marcada por el número cuántico n, pueden acomodarse dos electrones, uno con espín arriba y uno con espín abajo. Más de un orbital puede tener la misma energía, el número de orbitales con la misma energía se llama la degenerancia.

Denotemos como  $n_f$ , el máximo nivel de energía lleno, empezamos llenando los niveles del extremo  $n=1$ , y continuamos llenando los niveles más altos con electrones hasta que todos los N electrones están acomodados. Es conveniente suponer que N es un número par. La condición  $2n_f=N$  determina  $n_f$ , que es el valor de n para el nivel lleno más alto. La energía de Fermi  $E_f$  es definida como la energía del nivel lleno más elevado en el estado fundamental de un sistema de N electrones. Para (3.127) con  $n=n_f$ , se tiene en una dimensión:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_f\pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L}\right)^2 \quad (3.128)$$

### 3.3.3 Gas de electrones libres en tres dimensiones

La ecuación de Schrodinger en tres dimensiones es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \varphi_k(\mathbf{r}) \quad (3.129)$$

Si el electrón está confinado en un cubo de borde L, la función de onda es la onda estacionaria:

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = A \sin\left(\frac{\pi n_x x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L}\right) \quad (3.130)$$

Donde  $n_x, n_y, n_z$ , son integradores positivos. El origen esta en una esquina del cubo. Es conveniente introducir una función de onda que satisfaga las condiciones de contorno periódicas. Se requiere que las funciones sean periódicas en x, y, z, con periodo L así:

$$\varphi(x+L, y, z) = \varphi(x, y, z) \quad (3.131)$$

y similarmente para las coordenadas y, z. Las funciones de onda que satisfacen la ecuación de Schrödinger para una partícula libre y las condiciones de periodicidad son de la forma de una onda plana viajera.

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.132)$$

Con tal que la componente del vector de onda satisfaga:

$$k_x = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots \quad (3.133)$$

Y así similarmente para:  $k_y$  y  $k_z$ .

Cualquier componente de k es de la forma  $2n\pi/L$ , donde n es un integrador positivo o negativo, las de k son los números cuánticos del problema junto con el número cuántico



$m_s$ , para la dirección del espín. Confirmamos que estos valores de  $k$  satisfacen (3.131)

para:

$$e^{[ik_x(x+L)]} = e^{\left[\frac{i2n\pi(x+L)}{L}\right]} = e^{\left(\frac{i2n\pi}{L}\right)} e^{i2n\pi} = e^{\left(\frac{i2n\pi x}{L}\right)} = e^{(ik_x x)} \quad (3.134)$$

Ahora sustituyendo (3.132) en (3.129) tenemos la energía  $\epsilon_k$ , del orbital con vector de onda  $k$ :

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.135)$$

La magnitud del vector de onda esta relaciona con la longitud de onda  $\lambda$  por:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.136)$$

El momento lineal  $p$ , puede ser representado en mecánica cuántica por el operador

$$p = -i\hbar\nabla \quad (3.137)$$

De donde para el orbital (3.132)

$$p\Psi_k(r) = -i\hbar\nabla\Psi_k(r) = \hbar k\Psi_k(r) \quad (3.138)$$

Así que la onda plana  $\Psi_k$ , es una función propia del momento lineal con el valor propio  $\hbar k$ . La velocidad de la partícula en el orbital  $k$  esta dada por:

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (3.139)$$

En el estado base de un sistema de  $N$  electrones libres la ocupación de orbitales puede ser representada como puntos dentro de una esfera en el espacio  $k$ . La energía en la superficie de la esfera es la energía de Fermi; el vector de onda en la superficie de Fermi tiene una magnitud  $k_f$  tal que:

$$\epsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} k_f^2 \quad (3.140)$$

De (3.133) vemos que hay un vector de onda permitido, esto es una tripleta de números cuánticos  $k_x, k_y, k_z$ , para el elemento de volumen  $(2\pi/L)^3$ , del espacio  $k$ . Así en el volumen de una esfera  $4\pi k_f^3/3$ , el número total de electrones es:

$$2 \frac{4\pi k_f^3 / 3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_f^3 = N \quad (3.141)$$

Donde el factor 2 en la parte izquierda viene de los dos valores permitidos de  $m_s$ , el número cuántico espín, para cada valor de  $k$ . Entonces:

$$k_f = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.142)$$

El cual depende solo de la concentración de la partícula, usando (3.140)

$$\epsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.143)$$

Esta relaciona la energía de Fermi a la concentración de electrones  $N/V$ . La velocidad del electrón  $v_f$ , en la superficie de Fermi es:

$$v_f = \left( \frac{\hbar k_f}{m} \right) = \left( \frac{\hbar}{m} \right) \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.144)$$

Los valores de  $k_f, v_f$  y  $\epsilon_f$  están dados en las tablas para metales seleccionados, también están dados los valores de la cantidad  $T_f$ , la cual esta definida como  $T_f = \epsilon_f / k_B$ .

Ahora encontramos una expresión para el numero de orbitales por unidad de rango energía,  $D(\epsilon)$  llamada densidad de estados, ahora usamos (3.143), para el numero total de orbitales de energía  $\leq \epsilon$  :

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.145)$$

Así que la densidad de estados es:

$$D(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}} \quad (3.146)$$

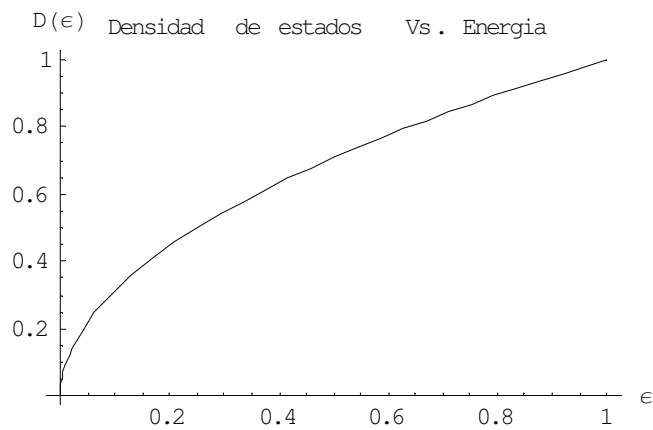


Fig. 3.4 Grafica para el número de estados permitidos por rango de energía para un material en bloque.

Este resultado puede ser expresado más simplemente, escribiendo (3.146) como:

$$\ln N = \frac{3}{2} \ln \epsilon + \text{cte} : \frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \quad (3.147)$$

De donde:

$$D(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{3N}{2\epsilon} \quad (3.148)$$

Dentro de un factor del orden de la unidad, el número de electrones por unidad de rango energía en la energía de Fermi es el número total de electrones de conducción dividido por la energía de Fermi, justo como se habría esperado.

### 3.4 Operadores

Los valores promedios tienen la forma:

$$\langle F \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{F} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.149)$$

Donde  $\hat{F}$  es un operador que se coloca entre  $\psi^*$  y  $\psi$ . Si  $\hat{F}$  es un operador diferencial debe estar obligatoriamente entre  $\psi^*$  y  $\psi$ . Si  $\hat{F}$  es un operador de multiplicación supuesto en (3.149), es indiferente. Como en el formalismo de Hamilton cualquier cantidad física depende de las coordenadas generalizadas y de los momentos canónicos correspondientes, la formula (3.149) se puede usar para calcular el promedio de cualquier cantidad física  $F(\vec{r}, \vec{p})$ , si se construye el operador  $\hat{F}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})$  que le corresponde. Los operadores que corresponden a cantidades físicas se llaman operadores físicos. Un operador actuando sobre una función de onda da, en general, otra función de onda:

$$\hat{F}\psi = \psi' \quad (3.150)$$

Para que se cumpla el principio de superposición es necesario que el operador físico satisfaga la condición

$$\hat{F}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 + \dots) = \lambda_1\hat{F}\psi_1 + \lambda_2\hat{F}\psi_2 + \dots \quad (3.151)$$

Los operadores que satisfacen la condición (3.151), se llaman operadores lineales.

Además como una cantidad física es medible su valor promedio debe ser real, es decir se debe cumplir que

$$\langle F \rangle = \langle F \rangle^* \quad (3.152)$$

O usando (3.149)

$$\int \psi^* \hat{F} \psi d\vec{r} = \int \psi \hat{F}^* \psi^* d\vec{r} \quad (3.153)$$

La igualdad (3.153) es un caso particular de

$$\int \psi^* \hat{F} \phi d\vec{r} = \int \phi \hat{F}^* \psi^* d\vec{r} \quad (3.154)$$

Que es la definición general de los operadores hermiticos. En (3.154)  $\psi$  y  $\phi$  son funciones arbitrarias que dependen de las variables sobre las cuales actúa el operador  $\hat{F}$  y las integrales tienen valores finitos. Entonces para que los valores promedios de las cantidades físicas sean reales, los operadores físicos deben ser hermiticos. En resumen, los operadores físicos deben ser lineales, para que se cumpla el principio de superposición, y hermiticos para que los valores promedios sean reales.

Evidentemente, el operador de coordenadas  $\vec{r}$  es lineal y hermético pues cumple trivialmente (3.151) y (3.154). El operador de momento es también lineal y hermitico. En efecto,  $\vec{p} = -i\hbar\nabla$  cumple con (3.151)

$$-i\hbar\nabla(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 + \dots) = \lambda_1(-i\hbar\nabla\psi_1) + \lambda_2(-i\hbar\nabla\psi_2) + \dots \quad (3.155)$$

Y por consiguiente, es lineal.  $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ , cumple también con (3.154). Integrando por partes y teniendo en cuenta que  $\psi$  y  $\phi$ , siendo normalizadas a 1, son iguales a cero en el infinito, se obtiene:

$$\begin{aligned} \int \psi^* \vec{p} \phi d\vec{r} &= \int \psi^* (-i\hbar\nabla) \phi d\vec{r} = -i\hbar \int \psi^* \nabla \phi d\vec{r} = \\ &= -i\hbar \left( [\psi^* \phi]_{x,y,z=0}^{\infty} - \int \phi \nabla \psi^* d\vec{r} \right) = i\hbar \int \phi \nabla \psi^* d\vec{r} = \\ &= \int \phi (i\hbar\nabla) \psi^* d\vec{r} = \int \phi \vec{p}^* \psi^* d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.156)$$

Es decir,  $\vec{p}$  es hermitico. Algunos operadores físicos lineales y hermiticos de uso común en mecánica cuántica:

Cantidad física	Símbolo	Operador
Posición	$r$	$r$
Momento	$p$	$\frac{\hbar}{i} \nabla$
Energía cinética	$T$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
Energía potencial	$V$	$V(r)$
Energía total	$H$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$

Tabla 3.1 Algunos operadores hermiticos y lineales usados en mecánica cuántica

***4.1 Integración Numérica***

La integración numérica también llamada cuadratura, tiene una historia que se extiende desde mucho antes de la invención del cálculo, el hecho de que integrales de funciones elementales no podían en general ser calculadas analíticamente, y la aparición del computo automático, influyeron en que la cuadratura se convirtiera en solo una de las tareas numéricas entre tantas. Para usos numéricos en el cálculo de integrales en este trabajo fue utilizada la función romberg, que es un integrador adaptativo que utiliza la regla de cuadratura de Newton-Cotes llamada quanc8, y una batería de integradores adaptativos. El método de romberg es una generalización del método de Simpson para esquemas de integración que son de orden más alto que la regla de Simpson, la idea general es usar los n refinamientos de la regla trapezoidal extendida.

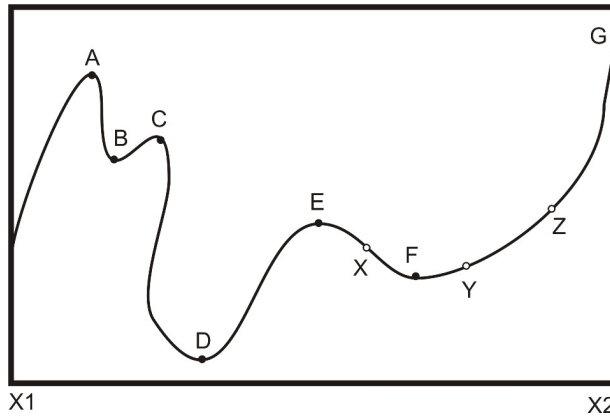
La cuadratura es uno de los casos especiales más simples y consiste en la evaluación de la integral:

$$\int_a^b f(x)dx \tag{4.1}$$

Que es precisamente un mecanismo de sumas en el integrando dentro de un rango de integración. El objetivo es obtener una integral tanta exactitud como sea posible.

***4.2 Maximización y Minimización de Funciones***

Cuando se tiene una función única f que depende de una o más variables independientes, se puede encontrar el valor de aquellas variables donde f toma un valor máximo o mínimo. Un extremo (punto máximo o mínimo), puede ser global (verdaderamente el valor más alto o más bajo de la función), o local (el mas alto o mas bajo en un vecindario finito, y no en el límite del vecindario), ver figura 4.1.



En la figura 4.1 se presenta el extremo de una función en un intervalo. Los puntos A, C, y E, son locales pero no máximos globales, B y F son locales pero no mínimos globales, el máximo global ocurre en G, el cual está sobre el límite del intervalo, así que la derivada de la función no necesariamente desaparece ahí. El mínimo global está en D, en el punto E derivadas mayores que la primera desaparecen, esta situación puede causar dificultad para algunos algoritmos. Los puntos X, Y, y Z muestran la localización del mínimo F, ya que Y es menor que ambos X y Z.

En este trabajo se usó el algoritmo de la función  $f_{min}$ , el cual es adecuado para la minimización de la función de energía de enlace, se eligió teniendo en cuenta el modelo de minimización unidimensional (minimización de una función con una sola variable).

#### 4.2.1 Función $f_{min}$ .

Esta función realiza una minimización unidimensional por el método de Brent, este método combina la búsqueda de sección de oro, y una interpolación parabólica, la convergencia es más rápida comparada con el método de búsqueda de fibonacci. Esta función  $f$  nunca es evaluada en dos puntos cercanos tal que:

$$\text{eps} * \text{abs}(f_{min}) + (\text{tol}/3) \tag{4.1}$$



Donde  $\epsilon$ , es aproximadamente la raíz cuadrada de la precisión relativa de la maquina. Si  $f$  es una función uní modal, y el valor computado de  $f$  es siempre uní modal, cuando esta separado por al menos:

$$\epsilon * \text{abs}(x) + (\text{tol} / 3) \quad (4.2)$$

Entonces  $f_{\min}$ , aproxima la abcisa del mínimo global de  $f$ , en el intervalo  $(ax, bx)$ , con un error menor que:

$$3 * \epsilon * \text{abs}(f_{\min}) + \text{tol} \quad (4.3)$$

Si  $f$  no es uní modal, entonces  $f_{\min}$  puede aproximarse a un mínimo local de la misma precisión, pero quizás no a un global.

Este método de minimización usa los siguientes parámetros de entrada:

- \*  $ax$ , limite izquierdo del intervalo inicial.
- \*  $bx$ , limite derecho del intervalo inicial.
- \*  $f$ , una clase que sobrecarga la función, llamada operador, para implementar la función  $f(x)$ , para cualquier  $x$  en el intervalo  $(ax, bx)$ .
- \*  $tol$ , es la longitud deseada del intervalo en el cual el mínimo esta determinado a quedar (este debe ser más grande que, aproximadamente  $3.0 \times 10^{-8}$ ).

#### ***4.3 Método Variacional de Ritz***

Este método no requiere la solución exacta de ecuaciones más simples ni la pequeñez de la energía de interacción adicional y es muy útil especialmente cuando la teoría de perturbaciones no se puede aplicar.

Con este método primero se calcula la energía y la función de onda del estado fundamental del sistema y después, sucesivamente, las energías y las funciones de onda

de los estados excitados. El método variacional de Ritz para el cálculo de la energía del estado fundamental  $E_0$  del sistema se basa en el uso de la desigualdad.

$$E_0 \leq \int \psi^* H \psi dr \quad (4.1)$$

Donde  $H$  es el hamiltoniano del sistema y  $\psi$  es una función de onda arbitraria que esta normalizada a 1,

$$\int \psi^* \psi dr = 1 \quad (4.2)$$

Para obtener (4.1) denotamos el conjunto completo de funciones propias de  $H$ , orto normalizadas, con  $\phi_n$ ,

$$H\phi_n = E_n \phi_n \quad (4.3)$$

Y desarrollamos la función arbitraria  $\psi$  de (1) en términos de  $\phi_n$ ,

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n \quad (4.4)$$

Donde los coeficientes de desarrollo  $a_n$  cumplen con

$$\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1 \quad (4.5)$$

Introduciendo (4.2) y (4.4) y teniendo en cuenta que las funciones propias  $\phi_n$  de  $H$  son orto normalizadas se obtiene

$$\int \psi^* H \psi dr = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n \quad (4.6)$$

Cambiando en cada término de la última suma el valor propio  $E_n$  por el menor valor propio, que es  $E_0$ , y teniendo en cuenta (4.4) se encuentra

$$\int \psi^* H \psi dr \geq E_0 \quad (4.7)$$

Que es exactamente (4.1). De (4.7) se ve que el cálculo de la energía del estado fundamental del sistema  $E_0$  se reduce al cálculo del mínimo de la integral  $\int \psi^* H \psi dr$ , es decir,

$$E_0 = \min \int \psi^* H \psi dr \quad (4.8)$$

Bajo la condición (4.2). Prácticamente, el uso de la formula (4.8) para el cálculo de  $E_0$  se reduce a lo siguiente: Se elige una función de prueba  $\psi$  que contiene varios parámetros desconocidos  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  y se calcula la integral obteniendo una expresión  $I(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$  que depende de estos parámetros:

$$I(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \int \psi^*(r; \alpha, \beta, \gamma, \dots) H \psi(r; \alpha, \beta, \gamma, \dots) dr,$$

Según (4.8) la energía  $E_0$  será igual a

$$E_0 = \min I(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \quad (4.9)$$

Para encontrar los valores  $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots$  de los parámetros  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  que dan el mínimo de  $I(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$  se deben resolver las ecuaciones:

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial \beta} = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial \gamma} = 0, \quad \dots \quad (4.10)$$

Entonces, la energía del estado fundamental será igual a

$$E_0 = I(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots) \quad (4.11)$$

La expresión (4.11) es aproximada y su exactitud depende de la elección de la función de prueba. La función de onda del estado fundamental  $\phi_0$  será, aproximadamente,

$$\phi_0 = \psi(r; \alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots) \quad (4.12)$$

El cálculo de la energía  $E_1$  del primer estado excitado se reduce al calculo de

$$E_1 = \min \int \psi_1^* H \psi_1 dr \quad (4.13)$$

Bajo las condiciones

$$\int \psi_1^* \psi_1 dr = 1 \quad (4.14)$$

Y

$$\int \psi_1^* \phi_0 dr = 0 \quad (4.15)$$

En (4.13)  $\psi_1$ , es función de prueba, que debe cumplir dos condiciones: Debe ser normalizada a 1 (4.14), y debe ser ortogonal a la función del estado fundamental  $\phi_0$  (4.15). La relación (4.13) se puede probar por analogía corroborando (4.8). La única diferencia es que en el desarrollo

$$\psi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \phi_n \quad (4.16)$$

El coeficiente  $b_0$  es igual a cero debido a la condición (4.15). La función de onda del primer estado excitado es

$$\phi_1 = \psi_1(q; \alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots) \quad (4.17)$$

De esta manera se indica de forma rápida cual es el procedimiento de búsqueda de auto valores y auto funciones que involucran un parámetro variacional. Dicha forma numérica de obtener los resultados es muy aceptable y brinda información rápida del problema físico que se está estudiando.

***5.1 Antecedentes***

La invención del transistor hacia el final de los años 40 y el desarrollo de la tecnología de los circuitos integrados en los 60 permitieron compactar diferentes aparatos eléctricos, debido a esta miniaturización se ha impulsado la investigación teórica y experimental en nuevos materiales. En la década del 70 la técnica de crecimiento epitaxial facilitó la construcción de dispositivos electrónicos muy pequeños permitiendo que capas finísimas de materiales semiconductores fueran depositadas unas sobre otras ordenadamente formando sándwich cristalinos de materiales diferentes con una precisión de los ángstrom mediante la técnica denominada Molecular Beam Epitaxy. Es relevante en este contexto la característica ondulatoria de los electrones ya que ellos circulan a lo largo del sistema manteniendo la memoria de fase y difracción, ocasionando transporte de carácter balístico. Aquí el electrón no sufre dispersión elástica o inelástica, aunque se tenga en cuenta otros grados de libertad. En la actualidad el fenómeno de transporte está empezando a ser estudiado en términos de efectos de espín conduciendo al análisis de conductibilidad y movilidad que involucran procesos de transporte cuántico. Es importante tener en cuenta que la parte experimental es de carácter fundamental en el diseño y construcción de dispositivos opto electrónicos modernos, sin embargo el estudio de la estructura de los anteriores mecanismos se puede realizar de manera alternativa a través de métodos teóricos y diversas técnicas computacionales. También existen técnicas que permiten hacer un control adecuado del tipo de impurezas que pueden acompañar la deposición de capas de materiales, importantes al momento de determinar las características del material crecido ya que se torna más viable el control de las propiedades físicas de los átomos constituyentes en el material debido a que el electrón presenta un carácter dual onda-partícula cuando se estudian los efectos de tunelamiento a través de la barrera. En este proyecto se pretende analizar la estructura electrónica de una barrera de potencial rectangular y parabólica afectada por impurezas poco profundas, presión hidrostática y sus transiciones ópticas

.El objetivo de este estudio es determinar el comportamiento de las funciones de onda , obtener los coeficientes de reflexión y transmisión de la onda involucrada en el proceso , las energías de enlace de impurezas superficiales cuando se dopa la estructura , densidad de estados .Para ello se utilizaran métodos de aproximación como el método variacional. Utilizaremos interfaces compuestas por pozos de confinamiento finito con una profundidad determinada por la discontinuidad de la banda prohibida de cada uno de los sistemas cuánticos y en el medio que los rodea.

## 5.2 Fundamento Teórico

Los puntos cuánticos o átomos artificiales son unas nanoestructuras cristalinas, que miden millonésimas de milímetro inventadas hace casi dos décadas que puede transformar la luz. Una sustancia que ha sido construida en el laboratorio partiendo de unos pocos átomos, con técnicas que manipulan la materia a escalas de nanómetros, tales como Molecular Beam Epitaxy y Molecular Organical Chemical Vapor Deposition, a esas dimensiones el material se convierte en una matriz sobre la que han crecido estructuras, como pirámides o montañas, formadas por unos pocos cientos o miles de átomos.

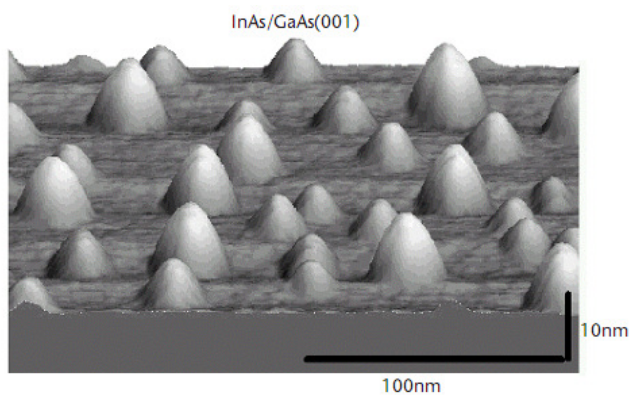


Fig. 5.1 Imagen de un microscopio de fuerza atómica de islas de InAs sobre GaAs (001), note la fluctuación del tamaño y la distribución espacial aleatoria.

El punto cuántico se considera que tiene una mayor flexibilidad que otros materiales fluorescentes, lo que lo hace apropiado para utilizarlo en construcciones a nanoescala de aplicaciones computacionales donde la luz es utilizada para procesar la información, y tienen un sinfín de aplicaciones en áreas tan variadas como las telecomunicaciones, la computación cuántica, la seguridad o la biomedicina.

"Los puntos cuánticos emiten luz brillante y muy estable. Además, la longitud de onda tan específica a la que brillan evita las superposiciones.

Los puntos cuánticos están hechos de una variedad de diferentes materiales del grupo III-V, llamados componentes binarios tales como arseniuro de indio, fosfuro de indio, Arseniuro de galio, junto con aleaciones ternarias como Arseniuro de Galio Aluminio  $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , en especial GaAs cuyas ventajas específicas se basan en la velocidad con que los electrones se mueven en operaciones con señales de baja intensidad, y su capacidad para emitir y detectar radiación en el infrarrojo próximo, siendo mayor en estos sistemas que en los semiconductores tradicionales (Silicio), además en el GaAs se pueden modificar las separaciones entre sus bandas electrónicas o niveles de energía. Esta separación es mayor en el GaAs que en el silicio, pero su ancho puede controlarse sustituyendo los átomos que constituyen este material por otros diferentes (aleación), también este semiconductor presenta un perfil parabólico de bandas en el cual el máximo de la banda de valencia coincide con el mínimo de la banda de conducción (gap de energía directa), es decir, pueden absorber o emitir luz sin intervención de fonones en el proceso lo que conlleva a que se utilicen en la construcción de láser y detectores ópticos muy eficientes.

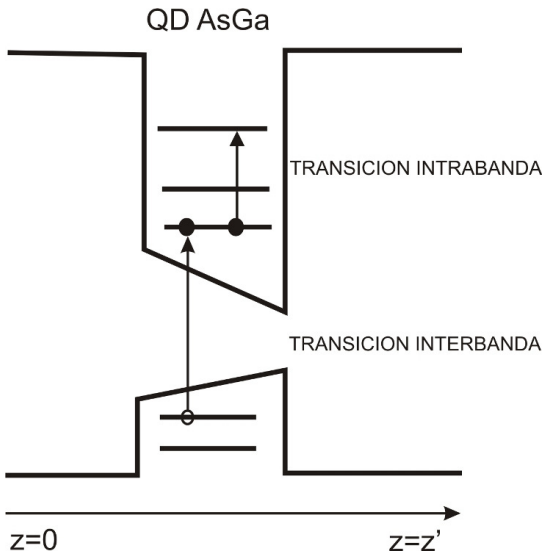


Fig.5.2 Líneas de los bordes de las bandas de conducción y de valencia que definen el potencial de confinamiento.

El punto cuántico es llamado en ocasiones transistor de un solo electrón , bit cuántico, o "qubit"; se podría definir como una partícula de materia tan pequeña que la adición de un único electrón produce cambios en sus propiedades, debido a que el movimiento del electrón está confinado en todas las direcciones obteniendo un sistema cero dimensional, donde el espectro de energía es discreto y la densidad de estados se comporta como una serie de picos correspondientes a una función delta de Dirac, el grueso de un punto cuántico creado de una heteroestructura de GaAs-AlGaAs por el sistema de auto ensamblado es de aproximadamente unos 10-20 nm.



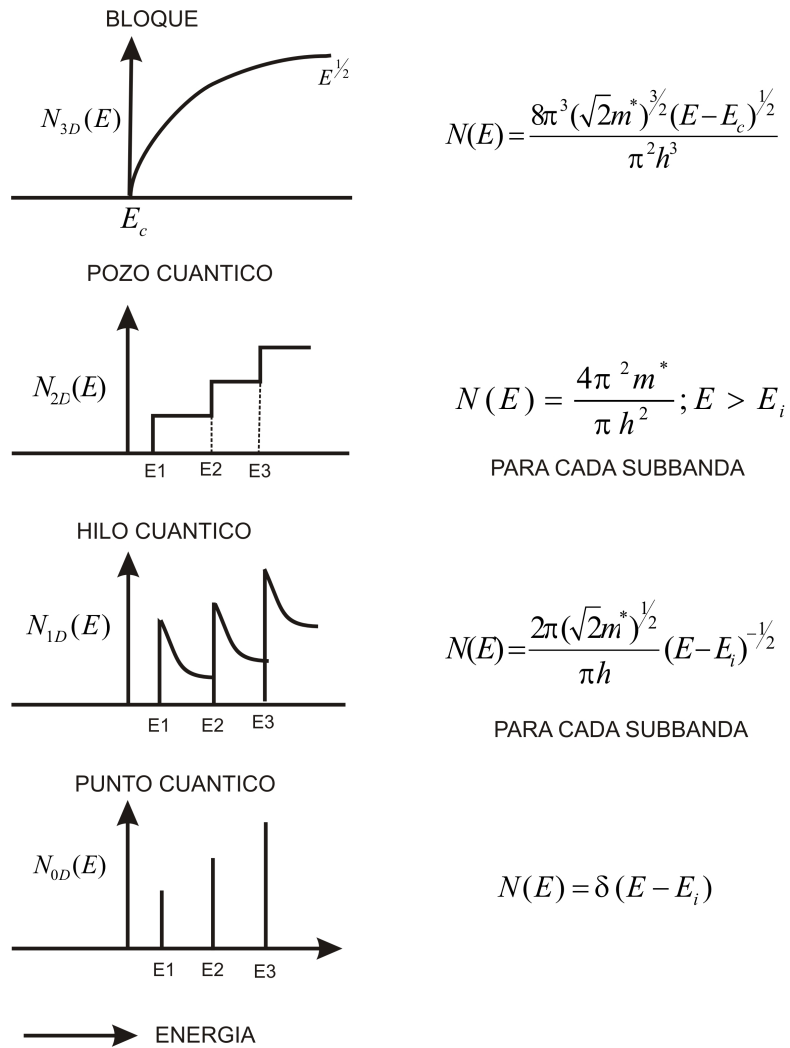


Fig. 5.3 Esquema del cambio de la densidad de estados como una función de la dimensionalidad para un material en bloque, un pozo, un hilo, y un punto cuántico.

El atributo cuántico sirve para recordar que el comportamiento del electrón en tales estructuras debe ser descrito en términos de la teoría cuántica. Los átomos son ejemplos de puntos cuánticos. Estructuras hechas de unos pocos cientos de átomos también son puntos cuánticos, lo especial es que, en ellos, los electrones están obligados a permanecer atrapados, confinados en las tres dimensiones, y eso genera curiosos fenómenos cuánticos. En concreto, los electrones se disponen en el punto como en un único átomo, de ahí el apodo átomos artificiales. Y de ahí, también, el que la materia

estructurada en puntos cuánticos tenga propiedades que pueden ser controladas a voluntad.

Una de ellas es que, al ser iluminados, los puntos cuánticos reemiten luz en una longitud de onda muy específica y que depende del tamaño del punto cuántico. Cuanto más pequeños sean los puntos, menor es la longitud de onda y más acusadas las propiedades cuánticas de la luz que emiten.

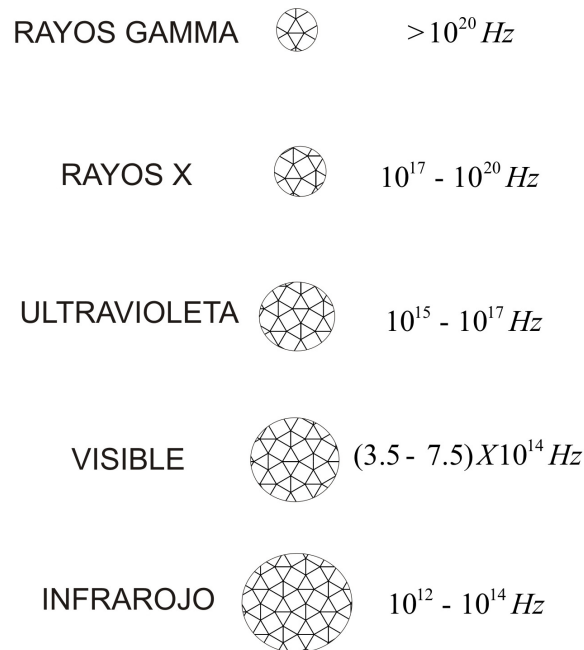


Fig. 5.4 Dependencia de la frecuencia como función del tamaño del punto cuántico.

Esta es una propiedad que los laboratorios llevan queriendo aprovechar desde principios de los noventa, "pero sólo ahora la tecnología de fabricación ha alcanzado un grado de calidad aceptable para las aplicaciones comerciales".

Hay una aplicación obvia: la opto electrónica. Con los puntos cuánticos de materiales semiconductores se fabrican diodos láser emisores de luz más eficientes que los usados hoy en lectores de CD, de códigos de barras y demás. Así que se espera que acaben sustituyéndolos a corto o medio plazo.

Pero además se abren muchas más posibilidades: en células fotovoltaicas, en telecomunicaciones, en seguridad ,en billetes o documentos, en los que se emben

puntos cuánticos invisibles a simple vista , en criptografía cuántica, o en computación cuántica, en la que los puntos cuánticos proporcionarían las unidades de información, los qubits, de los aún hipotéticos ordenadores cuánticos de enorme capacidad de cálculo. En el momento se fabrican ya diodos láser de altas prestaciones en los que se integran puntos cuánticos de semiconductor con técnicas de auto ensamblado por epitaxia de haces moleculares, en los cuales al variar la brecha de energía permite sintonizar el color de la luz emitida.

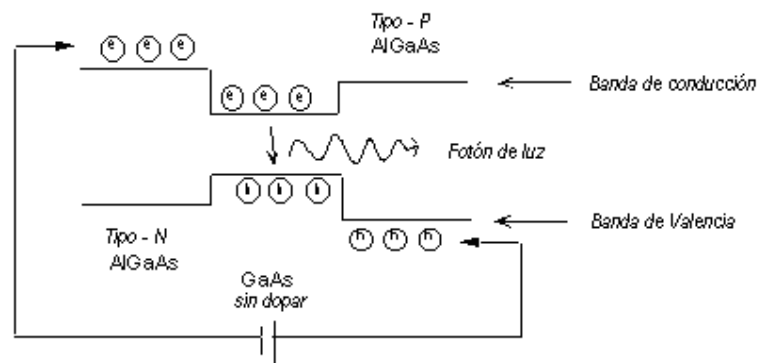


Fig. 5.5 Esquema de un diodo láser de punto cuántico fabricado con AlGaAs – GaAs.

### 5.3 Puntos Cuánticos Dopados

#### 5.3.1 Aleación GaAs/AlAs

El sistema AlGaAs es una de las más importantes aleaciones, debido a que el GaAs y El AlAs tienen estructuras de red muy similares, como se muestra en la Fig. 5.6. Así que la aleación

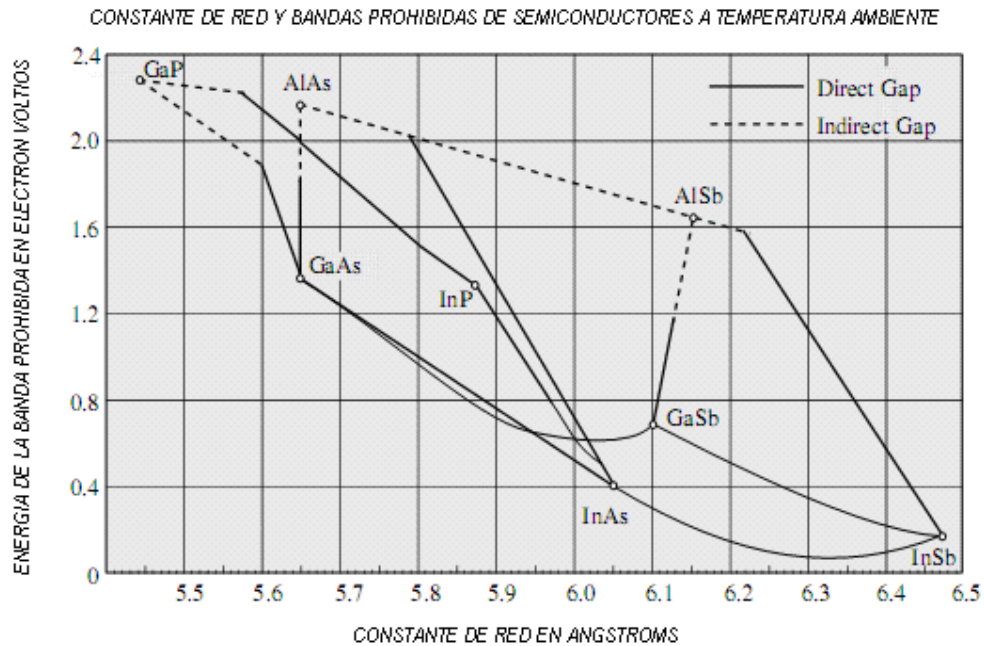


Fig.5.6 Rango de bandas gaps para formación de aleaciones en semiconductores de componentes III-V

puede ser crecida sobre un sustrato de GaAs, sin invertir energía extra. Como resultado el AlGaAs se vuelve un importante componente en dispositivos electrónicos de alta velocidad, por ejemplo el MODFET's (the modulation doped field effect transistor), y dispositivos opto electrónicos como (moduladores, detectores y láser). La aleación tiene una muy interesante conmutación de gap directo a indirecto cuando estas estructuras se dopan con impurezas sustitucionales, por ejemplo. En dicho fenómeno físico tiene la participación de fonones que modificará ostensiblemente las propiedades ópticas entre otras. O sea, En la Fig. 5.7. Se muestra la dependencia de la composición del valle de la banda de conducción, ya que el material se vuelve indirecto para fracciones de aluminio por encima del 35%, la mayoría de las estructuras para dispositivos utilizan valores por debajo de este valor.

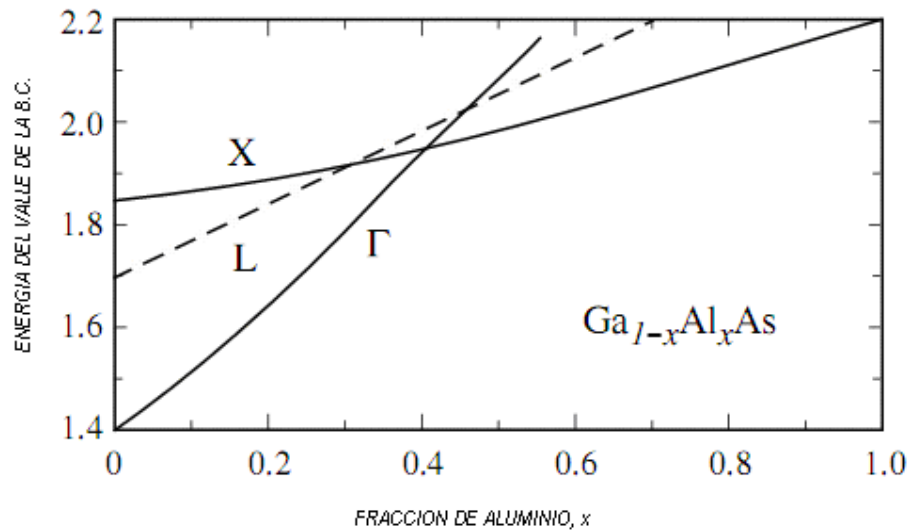


Fig.5.7 Variación del valle de la banda de conducción en el AlGaAs como función de la composición a 300 K

#### 5.4 Tecnología basada en puntos Cuánticos

El uso de aleaciones y heteroestructuras suministra una amplia versatilidad de parámetros espaciales disponibles para explotar. Aleaciones semiconductoras son ya una parte integral de muchos sistemas tecnológicos avanzados, como los siguientes:

- \* La aleación de HgCdTe, es una de los más importantes materiales para imágenes de alta potencia en aplicaciones con longitudes de onda extensas (10-14  $\mu\text{m}$ ), estas aplicaciones incluyen visión nocturna, visión a través de la niebla, imágenes termales de partes del cuerpo humano para aplicaciones medicas.

- \* La aleación de AlGaAs, es un ingrediente en dispositivos de heteroestructuras de GaAs/AlGaAs, las cuales manejan una multitud de tecnologías incluyendo operación de circuitos de micro ondas por encima de los 100 GHz, láser para redes de área local, y reproductores de disco compacto.

- \* Aleaciones de GaAs e InGaAsP, son ingredientes activos en operaciones sobre los 100 GHz, en láser de comunicación óptica para largas distancias.

Mientras las aleaciones son importantes ingredientes de muchas tecnologías, se debe enfatizar nuevamente en que estas no son estructuras perfectamente periódicas. Esto conduce a fluctuaciones de potencial aleatorio, lo que las convierte en mecanismos importantes de dispersión que limitan un desempeño eficiente y seguro. Por ejemplo la baja temperatura, el bajo campo de movilidad, es severamente afectada por la dispersión de las aleaciones. El crecimiento y problemas de fabricación en sistemas de aleaciones también son algunas veces serios debido a la miscibilidad que puedan presentar los gaps.

## ***5.5 Tecnología para el crecimiento de Puntos Cuánticos***

### ***5.5.1 Epitaxia de haz molecular (MBE)***

MBE es capaz de controlar la cobertura de la deposición de una submonocapa sobre un sustrato y así llega a ser una de las técnicas epitaxiales más importantes. Casi todos los semiconductores han sido crecidos mediante esta técnica. MBE es una técnica de alto vacío ( $\sim 10^{-11}$  torr), en la cual crisoles que contienen una gran variedad de cargas elementales se colocan en la cámara de crecimiento Fig. 5.8. Los elementos contenidos en los crisoles constituyen los componentes del cristal que será crecido, así como los dopantes que pueden ser usados. Cuando el crisol es calentado, las cargas de los átomos o moléculas son evaporadas, estas viajan en línea recta para chocar con el sustrato a alta temperatura. La velocidad de crecimiento en MBE es aproximadamente de una monocapa por segundo y esta baja velocidad acoplada con obturadores localizados en el frente de los crisoles permite un cambio en la composición para el crecimiento del cristal con control de monocapa. Ya que sin ocurrencia de reacciones químicas en el MBE, el crecimiento es el más simple de todas las técnicas epitaxiales y es realmente controlable. Sin embargo ya que el crecimiento involucra alto vacío, las fugas pueden ser un mayor problema. Las paredes de la cámara de crecimiento son enfriadas con nitrógeno líquido para asegurar alto vacío y previenen que los átomos/moléculas escapen por las paredes de la cámara.

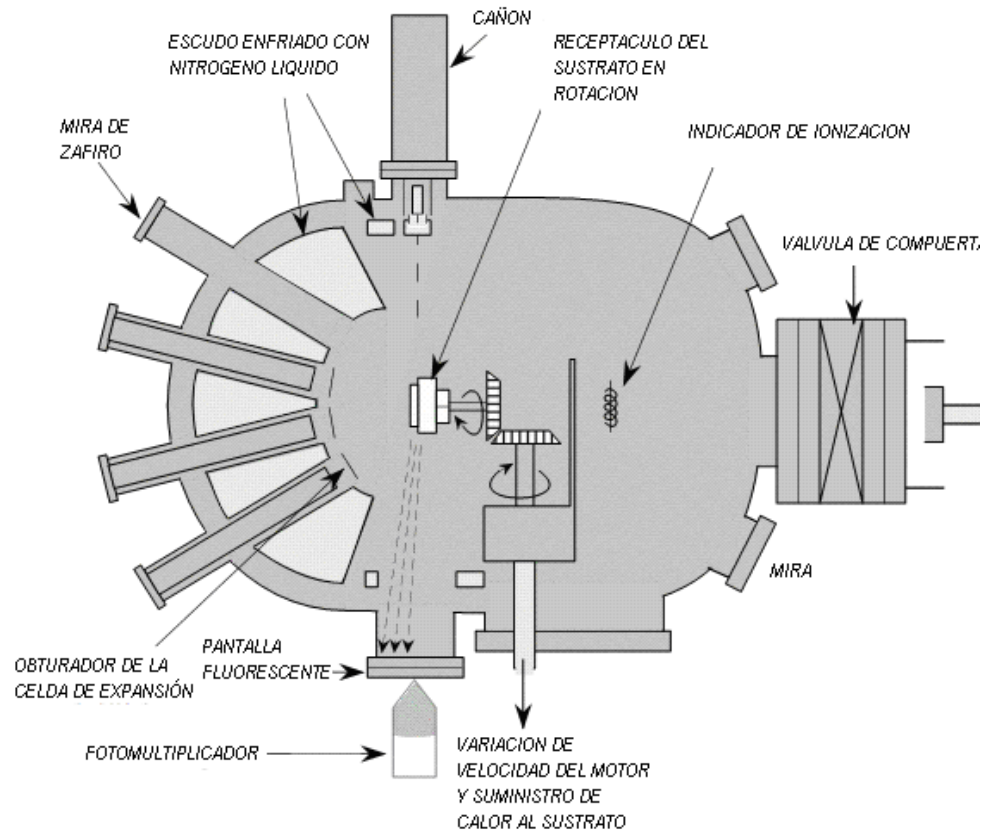


Fig. 5.8 Esquema de un sistema de crecimiento MBE.

### 5.5.2 Deposición de vapor químico metal orgánico (MOCVD)

Importante técnica de crecimiento ampliamente usada para heteroepitaxia. Como MBE es capaz de producir abruptas interfaces de monocapas entre semiconductores. Un típico sistema (MOCVD), se muestra en la Fig. 5.9. Como en MBE los gases que son usados en (MOCVD), no son hechos de elementos únicos pero son moléculas complejas las cuales contienen elementos como Ga o As para formar el cristal. Así el crecimiento depende de la ocurrencia de las reacciones químicas, en la superficie de los sustratos al calor, por ejemplo en el crecimiento de GaAs, por supuesto se usa Trietil galio y arseniuro entonces el crecimiento del cristal depende de la reacción:



Una ventaja del crecimiento que ocurre vía reacción química es que se puede usar un control de temperatura lateral para llevar a cabo el crecimiento en un área local. Crecimiento en áreas locales asistidas por láser es también posible para algunos materiales y puede ser usado para la construcción de nuevas clases de estructuras para dispositivos, tales áreas de crecimiento local presentan dificultad para el MBE.

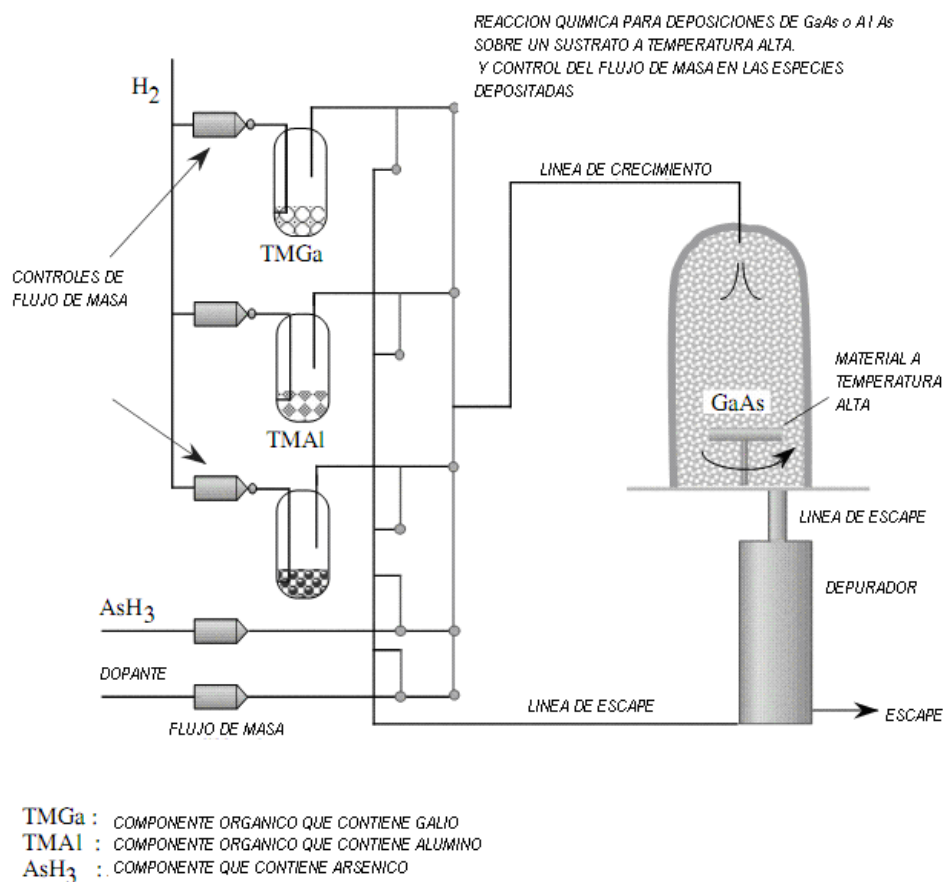


Fig. 5.9 Esquema de un sistema (MOCVD), empleando alquidico

Hay variedad de reactores de (MOCVD), La cámara atmosférica de crecimiento (MOCVD), como su nombre lo indica trabaja a presión atmosférica, se necesita una gran cantidad de gases para el crecimiento en este caso, aunque no tiene problemas



asociados con generación de vacíos, en el (MOCVD), de baja presión la velocidad de crecimiento es menor que en el MBE.

El (MOCVD), presenta problemas por el nivel de riesgo, ya que es demasiado toxico, pero hay un método que combina estas dos técnicas de crecimiento y se llama (MOMBE), Metal organic MBE

## CAPITULO 6. PUNTOS CUÁNTICOS E IMPUREZAS POCO PROFUNDAS

### ***6.1 Introducción***

Las propiedades físicas de los materiales semiconductores son fuertemente afectadas por la presencia de impurezas, que alteran el número de portadores por unidad de volumen, e introducen estados localizados en el gap antes inexistentes (en un cristal puro). Una consecuencia importante de estos estados localizados es que la impureza puede existir en varios estados de carga dependiendo si estos estados localizados están ocupados o no. Así se puede definir ahora donadores y aceptores de la siguiente forma: Estados de carga positiva de una impureza son definidos como estados donadores, y estados de carga negativa son definidos como estados aceptores.

El papel de una impureza en un semiconductor depende fuertemente de la localización de los niveles de energía que estas introducen en el gap de la banda prohibida, en la concentración con la cual estas puedan ser incorporadas en el sistema, y en la naturaleza de otras impurezas presentes en el mismo. Las impurezas son muy importantes debido a que ellas modifican las propiedades ópticas y de transporte en un semiconductor.

### ***6.2 Impurezas poco profundas Aceptoras y Donadoras***

Se usa el término estados de impurezas para indicar estados electrónicos localizados en el cristal, el cual se debe a causas tales como:

- a) La presencia de un átomo diferente en la red (impureza sustitucional o intersticial).
- b) La ausencia de uno o más átomos en la red (vacancia).
- c) El desplazamiento de uno o más átomos de la posición de equilibrio regular en la red (intersticiales, dislocaciones)

En estos casos hay un rompimiento de la simetría traslacional de la red, que se ocasiona por un potencial, que tiende a cero para posiciones muy distantes de la impureza. En la aproximación de un electrón la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+(V_c+U)\psi=E\psi \quad (6.1)$$

Donde  $V_c$  denota el potencial de la red y  $U$  el potencial debido a la impureza.

En semiconductores se presenta que sus estados electrónicos se encuentran débilmente ligados a la impureza luego sus funciones de onda son muy extendidas a través de la red. Los autovalores y las auto funciones de estos estados son dominados por el potencial periódico  $V_c$ , y en este caso el potencial debido a la impureza  $U(r)$ , juega el papel de una pequeña perturbación. Este es el caso, por ejemplo, de impurezas donadoras de As o impurezas aceptadoras de Ga. Los estados descritos anteriormente reciben el nombre de impurezas razas.

### ***6.3 Formalismo de la aproximación de la Masa Efectiva***

Cerca al borde de la banda, los electrones en los semiconductores se comportan como si ellos tuvieran una masa  $m^*$ , la cual es llamada masa efectiva. Para semiconductores de gap directo la masa efectiva de los electrones en el borde de la banda de conducción esta dada por la siguiente relación aproximada

$$\frac{1}{m^*} \cong \frac{1}{m_0} + \frac{2p_{cv}^2}{E_g} \quad (6.2)$$

La cual resulta de cálculos detallados de la estructura de banda, donde para la mayoría de los semiconductores  $\frac{p_{cv}^2}{m_0} \cong 20\text{eV}$ , donde  $m_0$ , es la masa del electrón libre. La masa efectiva en la banda de conducción decrece rápidamente a medida que decrece la banda gap, como se muestra en la siguiente figura.

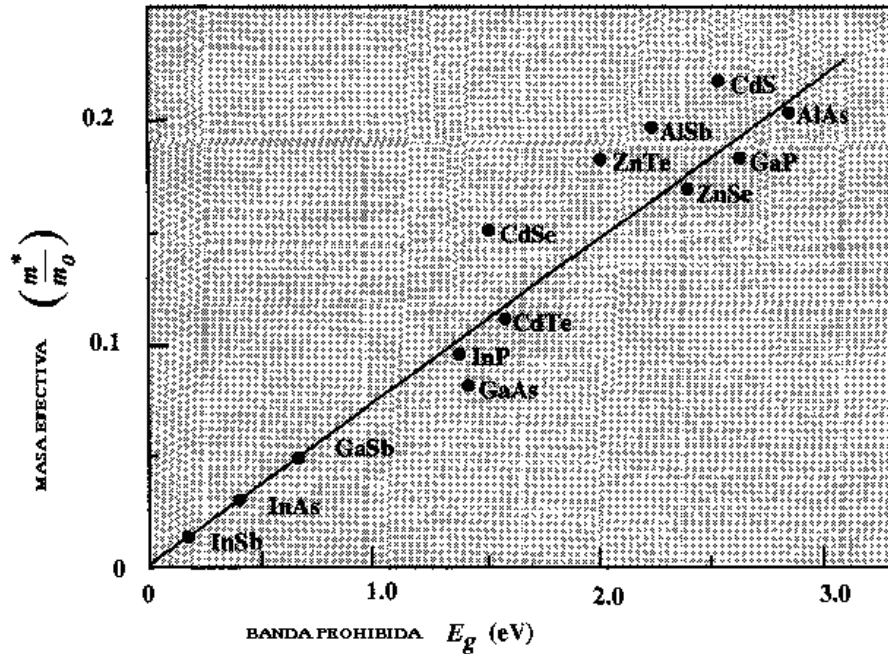


Fig.6.1 Masa efectiva del electrón,  $m^*$  como función del gap directo más bajo  $E_g$ , para varios compuestos semiconductores. Es interesante notar como la masa efectiva decrece tanto como la banda gap decrece.

En general la masa efectiva se define por la relación:

$$\frac{1}{m^*} \cong \frac{1}{\hbar^2} + \frac{d^2E}{dk^2} \quad (6.3)$$

#### 6.4 Energía de enlace en Heteroestructuras Semiconductoras

El siguiente análisis sobre energía de enlace en heteroestructuras semiconductoras se ha basado en el artículo de N. Porrás-Montenegro, and S. T. Pérez - Merchancano, Phys. Rev. B 46, 9780 (1992).

##### 6.4.1 Energía de enlace impurezas hidrogenoides en Qd's de GaAs-(Ga, Al) As.

En puntos cuánticos esféricos de GaAs-(Ga, Al) As han sido calculadas como función del radio del punto tanto la energía del estado fundamental como la energía de enlace de impurezas hidrogenoides. La energía de enlace ha sido calculada siguiendo un procedimiento variacional dentro de la aproximación de masa efectiva. Se ha usado un

pozo de potencial de confinamiento finito con profundidad determinada por la discontinuidad de la banda prohibida en el punto cuántico y en el revestimiento. También fueron realizados cálculos para un potencial de confinamiento infinito. Para el pozo de potencial infinito se encuentra que las impurezas incrementan la energía de enlace como decrece el radio del punto considerando que en la situación del pozo de potencial finito la energía de enlace alcanza un valor pico como el radio del punto decrece y entonces disminuye a un valor límite correspondiente al radio para el cual no hay estado ligados en el pozo. Se encuentra que el confinamiento electrónico más fuerte en estos puntos cuánticos se refleja en la energía del estado fundamental y en la energía de enlace de las impurezas, las cuales son más grandes que aquellas encontradas en pozos e hilos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As.

El desarrollo de técnicas experimentales tales como deposición de vapor químico, epitaxia de fase líquida, y epitaxia de haz molecular han llevado a la fabricación de muchas estructuras, pozos-cuánticos con dimensiones comparables a la longitud de onda electrónica de Broglie. Debido a su pequeño tamaño estas estructuras presentan algunas propiedades físicas tales como propiedades ópticas y características de transporte electrónico que son realmente diferentes de aquellas constituyen semiconductor en bloque. Se espera que estas características sean más pronunciadas ya que el confinamiento electrónico se incrementa con la reducción de la dimensionalidad. Las estructuras producidas por crecimiento de películas ultra delgadas son inherentemente bidimensionales y así investigaciones teóricas y experimentales han sido principalmente dedicadas a heteroestructuras en las cuales solo el portador de momentum normal a la interfase es cuantizado. Recientes avances en la tecnología de micro fabricación han permitido la construcción de estructuras con confinamiento cuántico unidimensional QWWs, alambres cuánticos, y se han iniciado intrigantes investigaciones dentro de la física unidimensional. En este sentido algunos autores han reportado la fabricación de puntos y algunos fenómenos electrónicos asociados tales como la observación de estados electrónicos discretos en nanoestructuras de GaAs-(Ga, Al) As y fotoluminiscencia de puntos cuánticos de GaAs-(Ga, Al) As, anormalmente crecidos.

El estudio de estados de impurezas en estas heteroestructuras de baja dimensionalidad es un importante aspecto al cual muchos trabajos experimentales y teóricos han sido dedicados. Desde el trabajo pionero de Bastard sobre la energía de enlace de impurezas Hidrogenoides dentro de una estructura de pozo de potencial infinito, usando una aproximación variacional, mucha atención ha sido dedicada al estudio de estado de impurezas en pozos cuánticos QW. Los resultados muestran una intensificación de la energía de enlace de la impureza con el decremento del espesor de la capa. Además se ha encontrado que la energía de enlace de la impureza depende de la localización dentro del pozo. Igualmente muchos trabajos teóricos se han hecho para caracterizar los estados de impurezas en QWWs. Bryant estudio el efecto del cambio en la forma de la sección transversal de un QWW, en la energía de enlace y encontró que en el caso de hilos con la misma área de sección transversal, las energías de enlace son casi iguales para los hilos cilíndricos y rectangulares y proporciono que la forma rectangular no se desvía demasiado lejos de la forma cuadrada. Weber, Schultz, y Oliveira calcularon la energía de enlace como función de la posición de la impureza y la densidad de estados de la impureza en QWWs, de GaAs-(Ga, Al) As con sección transversal rectangular diferente y para un pozo de profundidad infinita. Brown y Spector calcularon la energía de enlace potenciales de confinamiento cilíndrico finito e infinito para impurezas axiales y no axiales. Porrás Montenegro, López Gondar y Oliveira calcularon las energías de enlace de impurezas como una función de la posición de la impureza en la dirección radial, y la densidad de estados de la impureza como una función de la energía de enlace para diferentes radios del pozo y para finito e infinito QWWs cilíndricos de GaAs-(Ga,Al)As. Mas recientemente Latgé, Porrás-Montenegro, y Oliveira han calculado las transiciones infrarrojas entre estados hidrogenoides en QWWs, de GaAs-(Ga, Al) As. En esta trabajo se presentan resultados para energías de Enlace de impurezas donadoras y aceptadoras en puntos cuánticos esféricos de GaAs-(Ga, Al) As, como función del radio del punto usando un procedimiento variacional y la aproximación de la masa efectiva.

El Hamiltoniano de una impureza hidrogenoide única en un sistema de punto cuántico esférico esta dado por:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{\epsilon |r - r_0|} + V(r) \quad (6.4)$$

Donde  $m$  es la masa efectiva electrónica,  $\epsilon$  es la constante dieléctrica del material de QD,  $V(r)$  es el potencial de confinamiento, y  $r_0$  es la posición de la impureza, la cual en este caso se toma en el centro del punto.

#### 6.4.1.1 Confinamiento infinito

La función propia del hamiltoniano en ausencia de la impureza para el estado fundamental ( $n=1$  y  $l=0$ ), y para un pozo de potencial infinito es:

$$\Psi_{10}(r) = \frac{\sin(k_{10}r)}{(2\pi R)^{3/2}} \quad (6.5)$$

Donde  $r$  es  $(r, \theta, \phi)$ . Para satisfacer las condiciones de contorno  $\psi(r=R)=0$ , las energías propias correspondientes a las ecuaciones (6.1) y (6.2) son:

$$E_{10k} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{10}^2, \quad \text{con } k_{10}^2 = \frac{\pi}{R} \quad (6.6)$$

Donde  $R$  es el radio del punto.

La ecuación (6.5) es la función de onda de una partícula confinada en un pozo de potencial esférico infinito. La inclusión del potencial de la impureza hace necesario usar un método variacional para aproximar la función de onda y los valores propios implicados por el hamiltoniano.

Teniendo en cuenta la geometría de confinamiento esférico y el potencial de la impureza hidrogenoide se usa como función de prueba:

$$\Psi(r) = \begin{cases} N \frac{\sin(k_{10}r)}{r} e^{-\lambda r}, & r \leq R \\ 0, & r \geq R \end{cases} \quad (6.7)$$

Para la función de onda del estado fundamental, donde  $N$  es la constante de normalización, y  $\lambda$  es el parámetro variacional obtenido para la minimización de la energía de enlace.

La energía de enlace  $E_b(R, r_0)$ , de la impureza hidrogenoide esta definida como la energía del estado fundamental del sistema sin la impureza, menos la energía del estado fundamental con la impureza presente  $\xi(R, r_0)$ , es decir:

$$E_b(R, r_0) = \frac{\hbar^2}{2m} k_{10}^2 - \xi(R, r_0) \quad (6.8)$$

Con  $\xi(R, r_0) = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ , donde  $\langle T \rangle$  y  $\langle U \rangle$  están dadas por

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} (\lambda^2 + k_{10}^2) \quad (6.9)$$

Y

$$\langle U \rangle = -\frac{4\pi e^2 N^2}{\epsilon} \int_0^R \frac{\sin^2(k_{10}r)}{r} e^{-2\lambda r} \quad (6.10)$$

Respectivamente, con

$$N^2 = \frac{\lambda(\lambda^2 + k_{10}^2)}{\pi(1 - e^{-2\lambda R})} \quad (6.11)$$

#### 6.4.1.2 Confinamiento finito

En la aproximación del modelo del pozo finito el potencial  $V(r)$  en el hamiltoniano [Eq. (6.7)] será tomado como cero para  $r \leq R$ , y  $v \geq R$ . Las condiciones de contorno en la



función de onda son tales que  $\psi(r)$  y su primera derivada normal sean continuas en la frontera de este potencial.

Las funciones propias del hamiltoniano en ausencia de la impureza son.

$$\Psi(r) = \begin{cases} N \frac{\sin(\zeta_{10}r)}{r}, r \leq R \\ N \frac{\sin(\zeta_{10}R)}{r} e^{\chi_{10}(R-r)}, r \geq R \end{cases} \quad (6.12)$$

Con

$$\zeta_{10} = \left( \frac{2mE_{10}}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad Y \quad \chi_{10} = \left( \frac{2m(V - E_{10})}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (6.13)$$

Donde  $E_{10}$  es la energía del estado fundamental dada por la ecuación trascendental

$$-\zeta_{10} = \chi_{10} \tan(\zeta_{10}R) \quad (6.14)$$

La cual también puede ser escrita como

$$-\left( \frac{V}{E} - 1 \right)^{1/2} = \tan(\zeta_{10}R) \quad (6.15)$$

Y de la cual se puede encontrar que el radio mas pequeño para la existencia de un estado ligado esta dado por

$$R = \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mV} \right)^{1/2} \quad (6.16)$$

En forma similar como en el caso del pozo infinito, la inclusión del potencial de la impureza en el hamiltoniano fuerza a usar el método variacional. Entonces la función de prueba para el estado fundamental con la impureza presente se toma como

$$\Psi(r) = \begin{cases} N \frac{\sin(\zeta_{10} r)}{r} e^{-\lambda r}, r \leq R \\ N \frac{\sin(\zeta_{10} R)}{r} e^{\chi_{10}(R-r)} e^{-\lambda r}, r \geq R \end{cases} \quad (6.17)$$

Con

$$N^{-2} = 4\pi(A + B) \quad (6.18)$$

Donde

$$A = \frac{1 - e^{-2\lambda R}}{4\lambda} - \frac{\lambda + e^{-2\lambda R} [-\lambda \cos(2\zeta_{10} R) + \zeta_{10} \sin(2\zeta_{10} R)]}{4(\lambda^2 + \zeta_{10}^2)} \quad (6.19)$$

Y

$$B = \frac{\sin^2(\zeta_{10} R) e^{-2\lambda R}}{2(\chi_{10} + \lambda)} \quad (6.20)$$

Y  $\lambda$  es el parámetro variacional

Definiendo la energía de enlace  $E_b$  como antes, se tiene

$$E_b(R, r_0) = \frac{\hbar^2 \zeta_{10}^2}{2m} - \xi(R, r_0) \quad (6.21)$$

Calculando  $\xi(R, r_0) = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ , se tiene

$$\langle T \rangle = -\frac{4\pi\hbar^2 N^2}{2m} \left[ (\lambda^2 - \zeta_{10}^2) A - \frac{\lambda \zeta_{10}}{2(\lambda^2 + \zeta_{10}^2)} C + (\chi_{10} + \lambda)^2 B \right] \quad (6.22)$$

Donde C esta dado por

$$C = \zeta_{10} - e^{-2\lambda R} [\lambda \sin(2\zeta_{10} R) + \zeta_{10} \cos(2\zeta_{10} R)] \quad (6.23)$$

Y para la energía potencial

$$\langle U \rangle = -\frac{4\pi e^2 N^2}{\epsilon} [D + \sin^2(\zeta_{10} R) e^{2\chi_{10} R} F] + 2\pi N^2 V \frac{\sin^2(\zeta_{10} R)}{(\chi_{10} + \lambda)} e^{-2\lambda} \quad (6.24)$$

Donde

$$D = \int_0^R \frac{\sin^2(\zeta_{10} r)}{r} e^{-2\lambda r} dr \quad (6.25)$$

Y

$$F = \int_R^\infty \frac{e^{-2(\chi_{10} + \lambda)r}}{r} e^{-2\lambda R} dr \quad (6.26)$$

### 6.5 Resultados Teóricos

Los resultados son presentados en unidades atómicas reducidas(a.u), las cuales corresponden a unidades de longitud de un radio de Bohr efectivo  $a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}$ , y a una

unidad de energía de un Rydberg efectivo  $R_0^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}$ . Para QDs de GaAs-(Ga,Al)As

estas unidades son  $a^* \approx 100 \text{ \AA}$ , y  $R_0^* \approx 5.72 \text{ meV}$  para donadores (electrones) y  $a^* \approx 22 \text{ \AA}$  y

$R_0^* \approx 26 \text{ meV}$  para aceptadores (huecos), en los cálculos se ha asumido una masa

efectiva esférica para ambos donadores y aceptadores. También se ha ignorado

variaciones en la masa efectiva y constante dieléctrica, y se consideraron valores del

GaAs para toda la heteroestructura del QD. Se asume que la discontinuidad de la banda

prohibida en una heteroestructura de QD de GaAs-(Ga<sub>1-x</sub>,Al<sub>x</sub>)As, esta distribuida en un

40% en la banda de valencia y un 60% en la banda de conducción con una diferencia

total de la banda prohibida  $\Delta E_g$  entre GaAs y (Ga<sub>1-x</sub>,Al<sub>x</sub>)As, dada como función de la

concentración del aluminio, para  $x < 0.45$ ,  $\Delta E_g = 1.247x$ . Tanto para la banda de

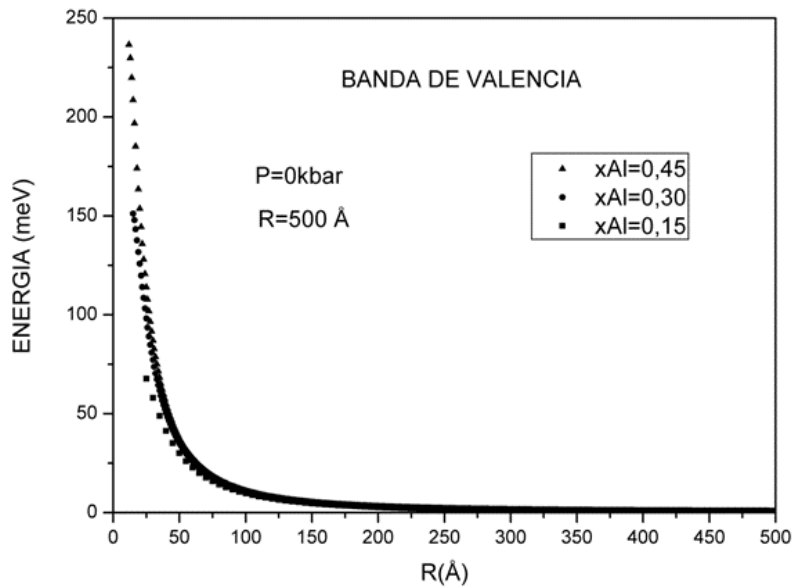
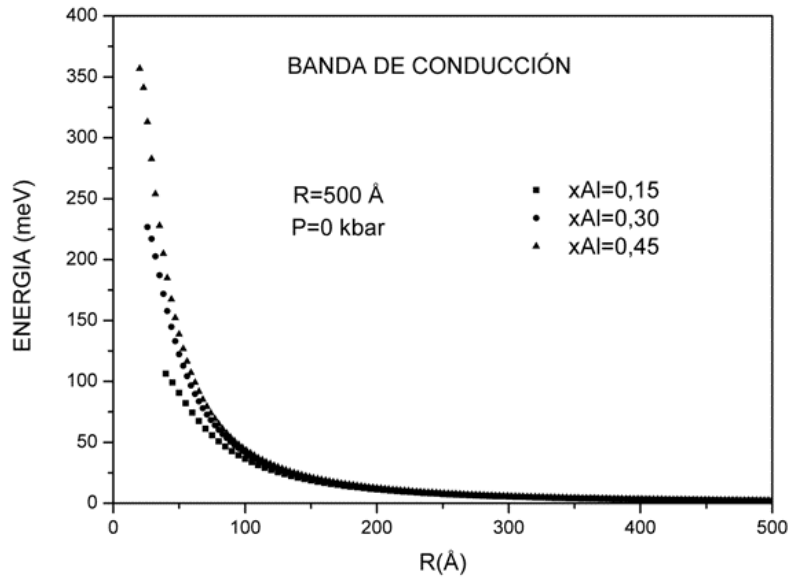
conducción como la de valencia la energía se incrementa a medida que el radio del

punto decrece y se aproxima a un valor limite correspondiente al ancho del pozo,

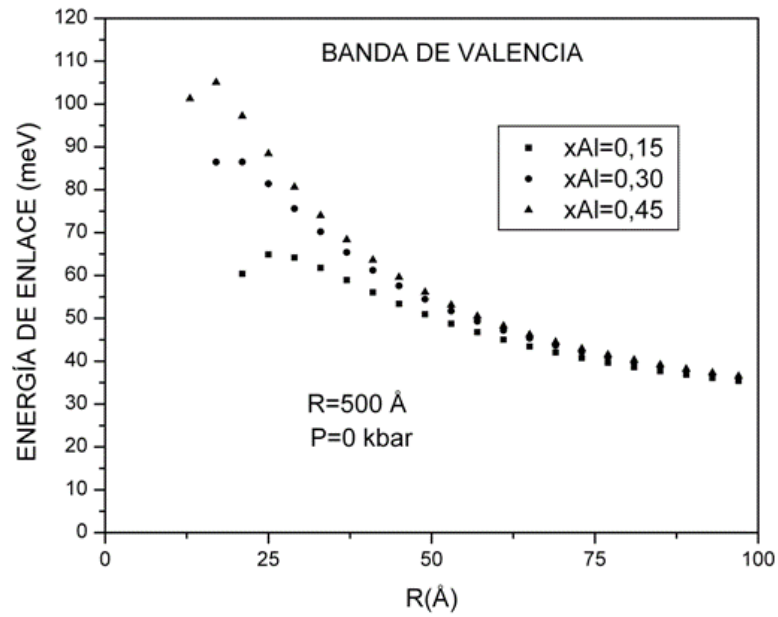
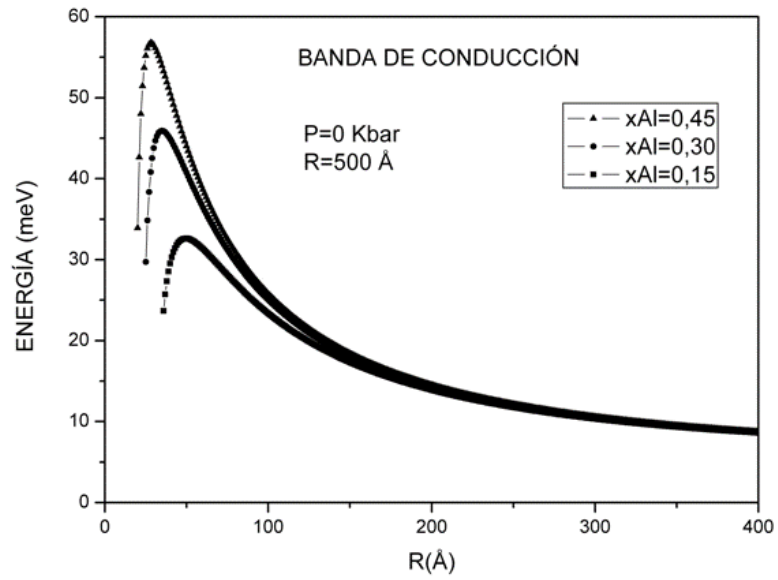
cuando el radio se estrecha a un valor dado por la Eq.(6.14), también se ve que la

energía tiende a cero en el límite del volumen para radios grandes, como se ve en la

Fig.6.2



En la Fig.6.2. Se presenta la energía del estado fundamental sin el potencial de la impureza en un QD de GaAs – Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As como una función del radio del punto para la banda de conducción y para la banda de valencia, para diferentes concentraciones de aluminio.



En la Fig. 6.3. Se presenta la energía de enlace de un QD de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, en función del radio del punto para impurezas hidrogenoides donadoras (a) y aceptadoras (b), y para diferentes concentraciones de Al.

La energía de enlace se incrementa tanto como el radio del punto decrece, alcanza un valor máximo y entonces disminuye a un valor límite correspondiente a un radio particular del pozo, el radio límite en el cual es posible encontrar el nivel de energía fundamental, como se muestra en la Fig.6.2. Los radios más pequeños para los cuales es posible obtener energía de enlace para donadores son  $0.20 a^*$ ,  $0.25 a^*$ , y  $0.35 a^*$ , para concentraciones de aluminio de 0.45, 0.30, 0.15, respectivamente, y para la energía de enlace de aceptadores son  $0.53 a^*$ ,  $0.65 a^*$ ,  $0.93 a^*$ , con las mismas concentraciones de aluminio, también se observó que la energía de enlace tiende a  $1 R_0^*$  en el límite del volumen para radios del punto grandes.

Se ha calculado la energía del estado fundamental y la energía de enlace de impurezas superficiales aceptadoras y donadoras localizadas en el centro en QD's esféricos de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, siguiendo un método variacional dentro de la aproximación de la masa efectiva. Para el potencial infinito se encontró que la energía de enlace se incrementa tanto como el radio del punto decrece, considerando que en el pozo de potencial finito la energía de enlace alcanza un valor pico a medida que el radio del punto decrece y entonces disminuye a un valor límite correspondiente al valor del radio para el cual no hay estados ligados en el pozo. Como se esperó se encuentra que el confinamiento electrónico fuerte en estas estructuras de Qd, muestra que la energía del estado fundamental y la energía de enlace de las impurezas son considerablemente más altas que las encontradas en QWW's, cilíndricos de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Además en la Fig. 6.4, se presenta el análisis de la energía de enlace para puntos cuánticos de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, en función de la posición de la impureza en la cual se puede ver que a medida que la impureza se mueve del borde al centro del pozo del punto cuántico, la energía de enlace se incrementa, y esto se presenta para diferentes tamaños de puntos cuánticos.

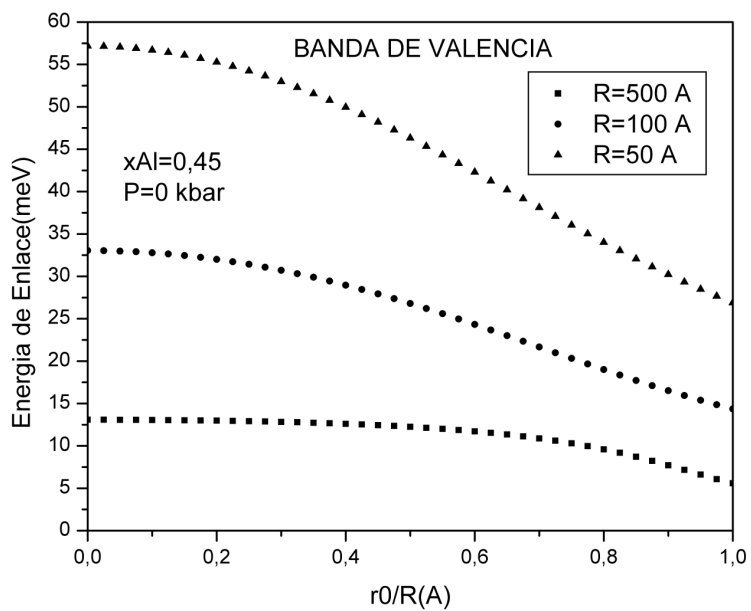
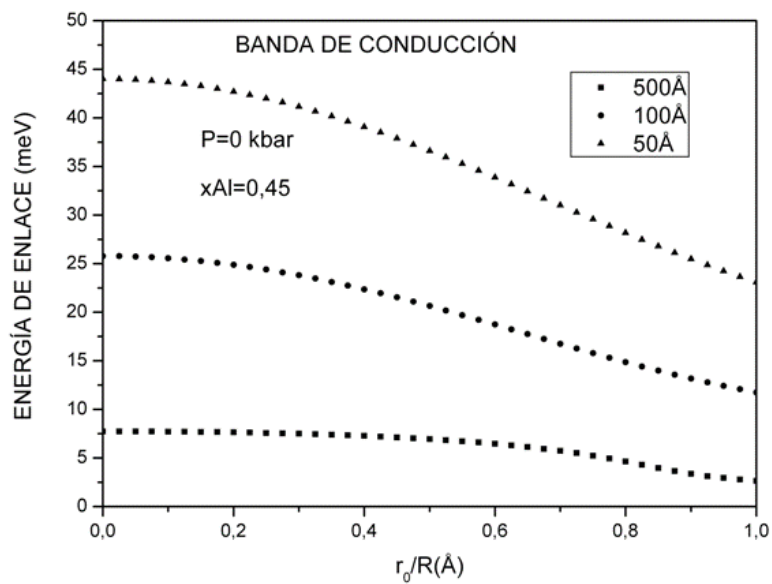


Fig. 6.4 Energía de enlace, a presión cero para diferentes radios del punto cuántico en función de la posición de la impureza.

## 6.6 *Energía de enlace en Heteroestructuras Semiconductoras con Presión Hidrostática.*

En el numeral anterior se analizo el comportamiento de las energías de enlace sin presión hidrostática y se obtuvo comportamientos singulares para puntos cuánticos esféricos de Ga As-(Ga, Al) As. En esta sección se pretende analizar dichos fenómenos físicos pero ahora involucrando presión hidrostática la cual a grosso modo es el cambio que se presenta en la estructura de bandas lo que permite que el punto cuántico varíe drásticamente su comportamiento en función de sus condiciones geométricas. En particular el radio y los niveles de confinamiento y de manera obvia el comportamiento en presencia de impurezas. Igualmente en este contexto la presión hidrostática es un fenómeno físico que involucra otras variables y parámetros físicos. Para nuestro análisis tendremos en cuenta los cambios de elasticidad sobre la diagonal principal ya que ella actúa uniformemente en todo el sistema; el parámetro que cambia apreciablemente dicha presión es también la temperatura el cual se puede tomar de 0 a 80 K sin perder ganancia apreciable del fenómeno físico, para temperaturas superiores se debe tener en cuenta en el estudio de puntos cuánticos, los fonones ópticos y acústicos los cuales involucran un gap indirecto en el sistema. De forma semejante, la dependencia de la energía de enlace con la presión hidrostática esta principalmente relacionada con el cruzamiento que se presenta en la banda de conducción X de la capa que conforma la barrera de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  y la banda de conducción  $\Gamma$  de la capa que conforma el pozo y que a altas presiones permite un mayor confinamiento de los electrones. En la aproximación de la masa efectiva el hamiltoniano para una impureza donadora en un punto cuántico de Ga As/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , bajo efectos de presión hidrostática (P), a baja temperatura esta dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m_{w,c}^* (P; T)} \nabla \right) - \frac{e^2}{\epsilon_{w,b}^* (P, T)r} + V(r, P) \quad (6.4)$$

Donde r es la distancia entre el electrón y la impureza y los subíndices w y b definen las regiones del pozo y la barrera, respectivamente.



La presión hidrostática también influencia cambios en la constante dieléctrica y en la masa efectiva de los materiales que conforman el punto cuántico de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. [19], a continuación se tienen en cuenta otros parámetros que también se modifican con la presión hidrostática en la siguiente forma:

### 6.6.1 El Gap de energía en el punto $\Gamma$

La discontinuidad entre las bandas de conducción y valencia  $E_g^\Gamma$ , de la heteroestructura de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As se puede tomar como un 60%(40%) de la diferencia total entre la banda y la brecha prohibida, además tiene una fuerte dependencia con la presión hidrostática y con la temperatura en el punto  $\Gamma$ . Y se comporta de la siguiente manera:

$$E_g^\Gamma(P, T) = E_g^0 + \alpha P + \beta P^2 + \frac{bT^2}{T + c} \quad (6.27)$$

Donde  $E_g^0$  es la energía de la brecha prohibida a  $T=0$ , y  $P=0$ . Los coeficientes de temperatura para las regiones del pozo y la barrera son tomados de [20] como:

$$b = 0.5405 \left[ \frac{\text{meV}}{\text{K}} \right] \quad \text{y} \quad c = 204 [\text{K}].$$

Material	$E_g^0 (10^3 \text{ meV})$	$\alpha (\text{meV}/\text{Kbar})$	$\beta (\text{meV}/\text{Kbar}^2)$
GaAs	1.519	10.7	-0.0377
$Al_x Ga_{1-x} As$	$1.155x + 0.37x^2$	$11.5 - 1.3x$	0

Tabla 6.1. Parámetros correspondientes a la discontinuidad banda-brecha, coeficientes de presión y temperatura para los materiales Ga As y Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

### 6.6.2 Masa Efectiva afectada por Presión Hidrostática

La masa efectiva en el pozo del punto cuántico esta relacionada con la energía de la brecha  $E_p^\Gamma(P, T)$  que depende del esfuerzo que se le aplica al semiconductor de GaAs en

el punto  $\Gamma$  a bajas temperaturas, teniendo en cuenta como se afecta dicho parámetro la masa efectiva se expresa de la siguiente forma [20]:

$$\frac{m_c^*(P, T)}{m_0} = \left[ 1 + E_p^\Gamma \left( \frac{2}{E_g^\Gamma(P, T, 0)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(P, T, 0) + \Delta_0} \right) \right]^{-1} \quad (6.28)$$

Donde  $\Delta_0 \equiv$  Split-off del gap de energía, y  $m_0$  es la masa del electrón libre, a continuación en la tabla 6.2 se muestran los valores de energía para la brecha del GaAs.

Material	$\Delta_0 \times 10^3$ meV	$E_p^\Gamma \times 10^3$ meV
GaAs	0.341	7.51

Tabla 6.2. Valores de la brecha prohibida y el Split-off para el semiconductor de GaAs.

### 6.6.3 Constante Dieléctrica del material en función de la Presión Hidrostática.

Teniendo en cuenta la dependencia de la constante dieléctrica con la presión y la temperatura, se tomo de la siguiente manera [21].

$$\epsilon(P, T) = \epsilon_0(T_0) e^{\partial_1(T-T_0)} e^{\partial_2 P} \quad (6.29)$$

Donde los parámetros que se relacionan a continuación son tomados producto de medidas experimentales [19].

$T(K^0)$	$T_0$	$\epsilon_0(T_0)(a, u)$	$\partial_1 \times 10^{-5} K^{-1}$	$\partial_2 \times 10^{-4} kbar^{-1}$
$0 \leq T \leq 200$	75.6	12.74	9.4	-16.7
$T > 200$	300	13.18	20.4	-17.3

Tabla 6.3. Valores experimentales de la constante dieléctrica, y la temperatura en escala logarítmica teniendo en cuenta la presión para un pozo cuántico de Ga As.

Debido a que no se tiene información sobre el  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , se debe considerar tanto la masa efectiva como la Constante Dieléctrica del material de la siguiente forma [19].

Material	$m_c^\Gamma$	$\epsilon_0$
GaAs	0.067	13.18
$Al_xGa_{1-x}As$	$0.067+0.083 x$	$13.18-3.12 x$

Tabla 6.4 En esta tabla no se tienen en cuenta los efectos de la Presión Hidrostática y son calculados a  $T=60K^0$ .

Según la tabla anterior y siguiendo la masa efectiva y la constante dieléctrica en la barrera son de la siguiente forma [19].

$$m_b^* = m_w^* + 0.083x \quad (6.30)$$

Y

$$\epsilon_b = \epsilon_w - 3.12x \quad (6.31)$$

Ahora estas relaciones se deben seguir cumpliendo al considerar la Presión Hidrostática y se expresan de la siguiente forma:

$$m_b^*(P, T, x) = m_w^*(P, T) + 0.083x \quad (6.32)$$

Los resultados anteriores coinciden con los de la tabla 6.4 a  $P=0$ , o a Presión Atmosférica.

#### 6.6.4 Altura de la Barrera de Potencial

Teniendo en cuenta que la altura de la barrera se ve afectada fuertemente con la presión hidrostática y la concentración de aluminio, esto favorece que la energía de ionización se incremente en forma más dramática y se debe a que se presenta un mayor confinamiento, así la expresión para la altura de la barrera queda de la siguiente forma [22,23].

$$V_0(Z, P, x) = Q_c \Delta E_g^\Gamma(P, x) \times 10^3 \text{ meV} \quad (6.33)$$

Donde  $Q_c$  es el parámetro permitido por la banda.

$$\Delta E_g^\Gamma(P, x) = E_{g,b}^\Gamma(P, T, x) - E_{g,w}^\Gamma(P, T, x) \quad (6.34)$$

$$E_g^\Gamma(P, x) = 1.36x - 0.22x^2 - 1.36xP + 0.0377P^2 \quad (6.35)$$

Con este modelo de barrera se puede trabajar hasta 50 GPa [22], o de 0-15 kbar y 0-100 kbar [23], en concordancia con trabajos previos [19], pero en particular en este trabajo se considera una presión entre 0-40 kbar.

#### 6.6.5 Ancho de la Barrera

El ancho de la barrera es uno mas de los parámetros que se afectan con la presión hidrostática y puntualmente tiene relación con las constantes de elasticidad [20,23], teniendo en cuenta lo dicho anteriormente la expresión para el ancho de la barrera es:

$$a_z(P) = a_z(0)[1 - (S_{11} + 2S_{12})P] \quad (6.36)$$

Donde  $a_z(0)$ , es el ancho de la barrera a presión atmosférica,  $S_{11}$  y  $S_{12}$  corresponden a las constantes de elasticidad.

Material	$S_{11} \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$	$S_{12} \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$
Ga As	1.17	0.37
$Al_xGa_{1-x}As$	$1.17 + 0.03x$	$0.37 + 0.02x$

Tabla 6.5. Valores para las constantes de elasticidad de los semiconductores de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$

Teniendo en cuenta lo anterior se consiguen las expresiones para el ancho de la barrera de potencial de la siguiente forma:

$$a_{z,w}(P) = a_{z,w}(0)[1 - 0.43P] \quad (6.37)$$

Y

$$a_{z,p}(P, x) = a_{z,b}(0)[1 - (0.43 - 0.01x)P] \quad (6.38)$$

### 6.6.6. Resultados y Discusiones

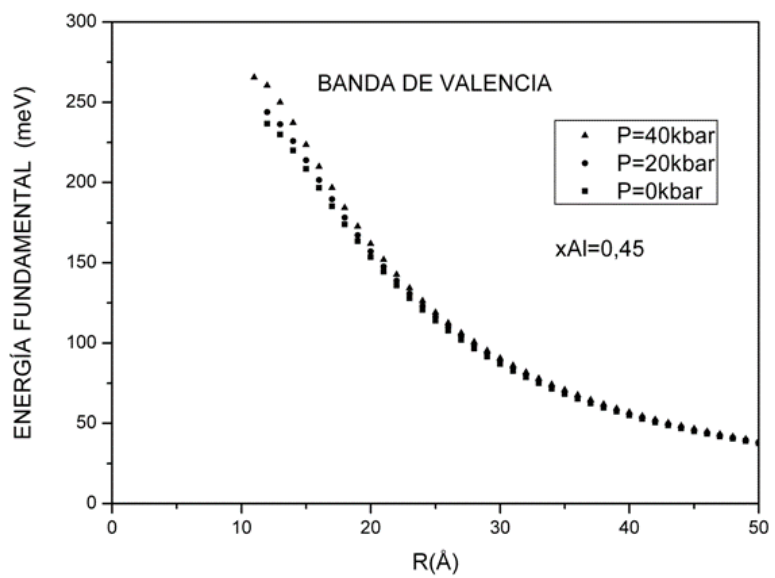
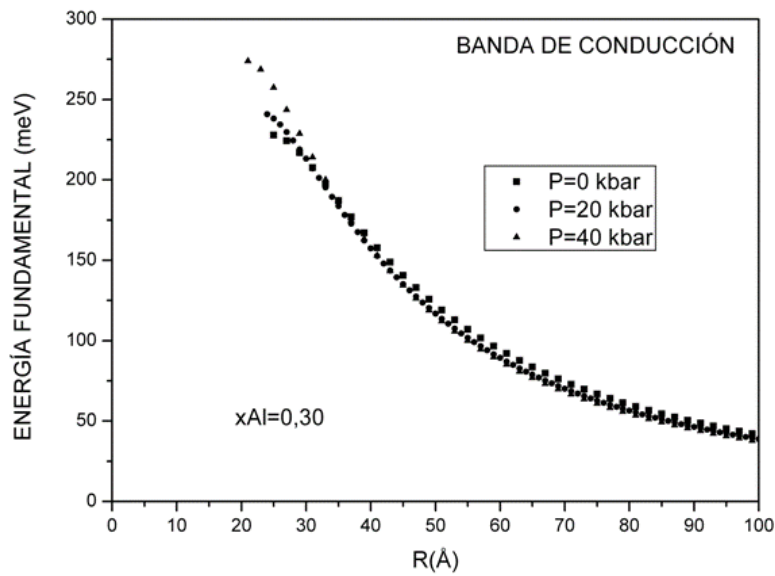


Fig. 6.5 Energía del estado fundamental, con variación de la presión hidrostática, para una concentración de aluminio del 30%, note que la energía incrementa su valor, en comparación con la Fig. 6.2. Debido al aumento del confinamiento.

En la figura 6.5 se presentan las energías del estado fundamental en función del radio y de la presión hidrostática (0, 20 y 40 Kbar), para un punto cuántico esférico de GaAs/GaAlAs, para la banda de conducción y valencia, en estas graficas se puede apreciar que para una concentración de aluminio fija, la energía de enlace se incrementa cuando se presenta un aumento en la presión hidrostática, esto se debe a que la presión favorece el confinamiento cuántico, otro aspecto que también es de importancia es cuando se deja fija la presión hidrostática y la concentración de aluminio, entonces para radios del punto cuántico pequeños la energía del estado fundamental también se incrementa.

En la fig.6.6 se presenta la energía de enlace de impurezas superficiales en un punto cuántico esférico, con confinamiento finito en función del radio del punto y de la presión hidrostática con la impureza localizado en el centro del punto cuántico, para las bandas de conducción y de valencia, se puede observar que a  $P=0$ , la energía de enlace disminuye a medida que el radio aumenta, estos resultados están en concordancia con Pérez et. al. y Zhu et. al. [12,24], otro factor importante de mencionar es que para diferentes valores de presión hidrostática, se observa que la energía de enlace se incrementa a partir de los valores para materiales en bloque del GaAs, a medida que el radio del punto se reduce, luego alcanza un valor máximo y entonces se coloca en un valor característica correspondiente a materiales en bloque para la barrera, a medida que el radio tiende a cero.

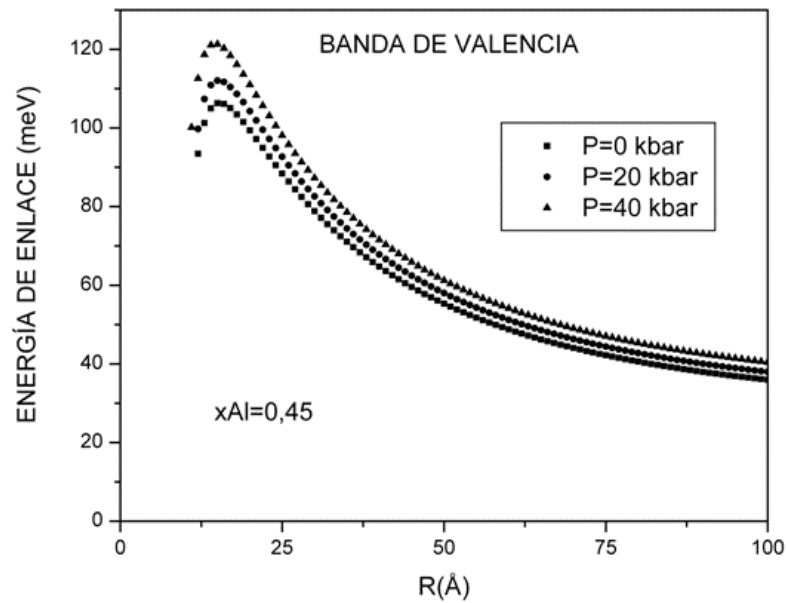
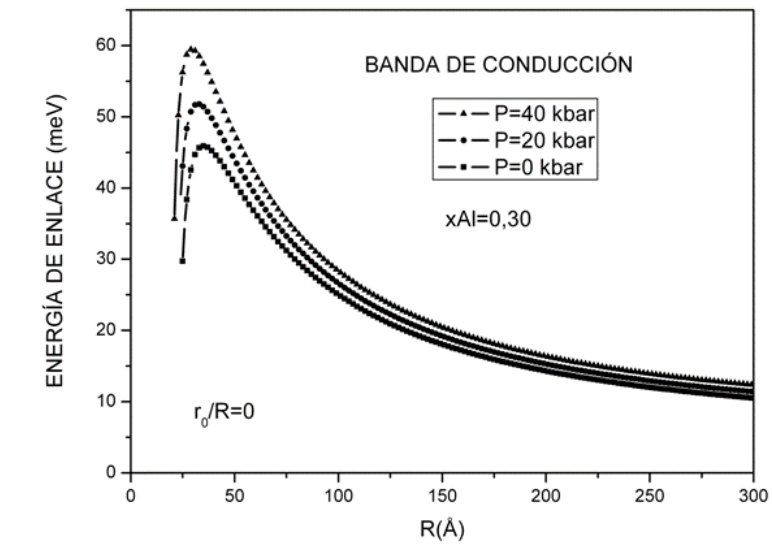


Fig. 6.6 Energía de enlace, para una impureza donadora localizada en el centro de un punto cuántico de GaAs-(Ga,Al)As, en función del radio del punto para diferentes presiones hidrostáticas, con una concentración de aluminio del 45%, note que la energía crece respecto a las energías de la Fig. 6.3, esto se debe al aumento del confinamiento.

En la figura 6.7 se presenta la dependencia de la energía de enlace con la posición de la impureza dentro del punto cuántico, para un radio fijo de  $500\text{\AA}$ , y valores de la presión hidrostática de  $P=0, 20$  y  $40$  kbar, en cada caso la energía de enlace de la impureza localizada en el borde es más baja que cuando la impureza se encuentra localizada en el centro, La energía de enlace decrece continuamente a medida que la impureza cambia de posición y se aleja del centro del punto cuántico, alcanzando un valor mínimo en el borde[25]. Finalmente en los gráficos se puede notar que para cualquier posición de la impureza dentro del punto, la energía de enlace se incrementa con la presión. Los efectos de la presión hidrostática son más apreciables para impurezas lejos del borde del punto cuántico, debido a que ahí la repulsión de la función de onda por la barrera de potencial es más intensa y esto disminuye el efecto del confinamiento a causa de la presión hidrostática.

En la fig. 6.8 se presenta la energía de enlace en función de la posición de la impureza donadora, dentro del punto cuántico, para un pozo de potencial finito y para diferentes radios del punto cuántico. La presión hidrostática es constante e igual a  $40\text{Kbar}$ ,. La energía de enlace decrece, La energía de enlace de la impureza donadora, decrece a medida que dicha impureza se mueve hacia el borde del punto cuántico y alcanza un mínimo cuando la posición de la impureza es igual al radio del punto cuántico. También es importante notar que la variación de la energía de enlace con la presión hidrostática es más notoria para puntos cuánticos de radio pequeño. Estos resultados concuerdan con los reportes sin presión [25], y con presión [23]. En la obtención de estos resultados no se tuvo en cuenta efectos no parabólicos, importantes para el análisis de puntos cuánticos pequeños.



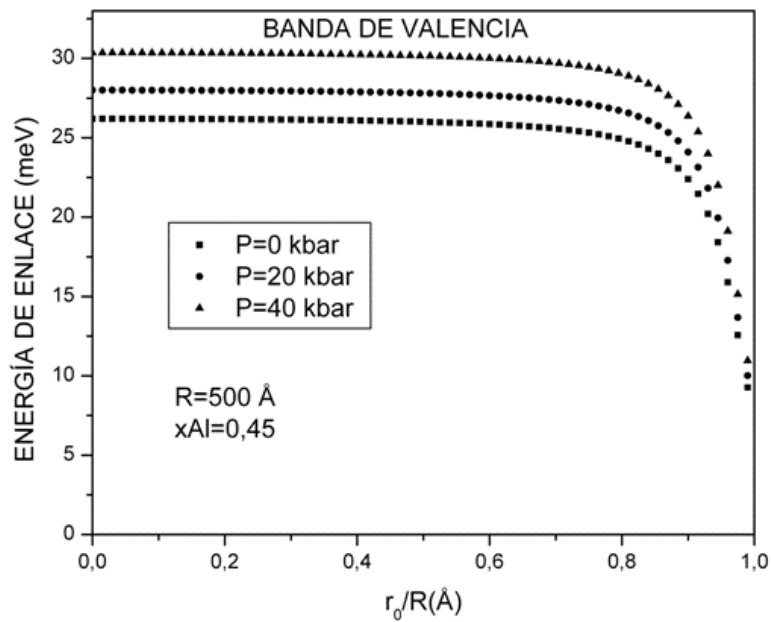
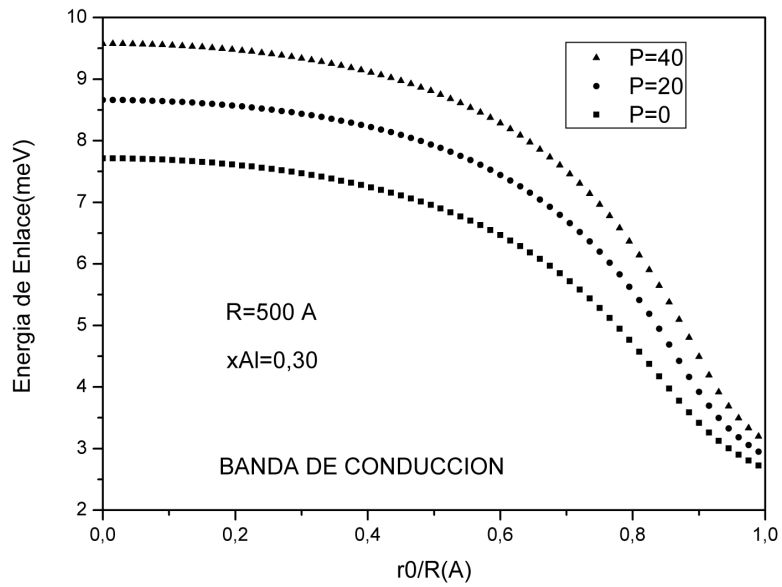


Fig. 6.7 Energía de enlace para impurezas donadoras en un punto cuántico de GaAs-(Ga,Al)As, con  $R=500 \text{ \AA}$ , en función de la posición de la impureza  $r_0/R$ , y considerando tres valores diferentes de presión. ( $P=0$ , Curva en cuadros, 20, curva en círculos y 40 Kbar curva en triángulos) para una concentración de aluminio de  $x=0.45$  y un radio fijo del punto cuántico de  $500 \text{ \AA}$ .

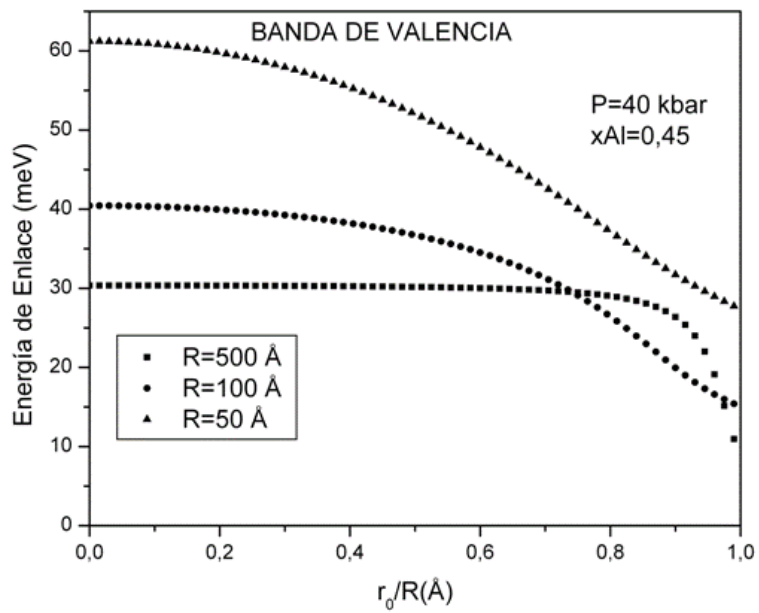
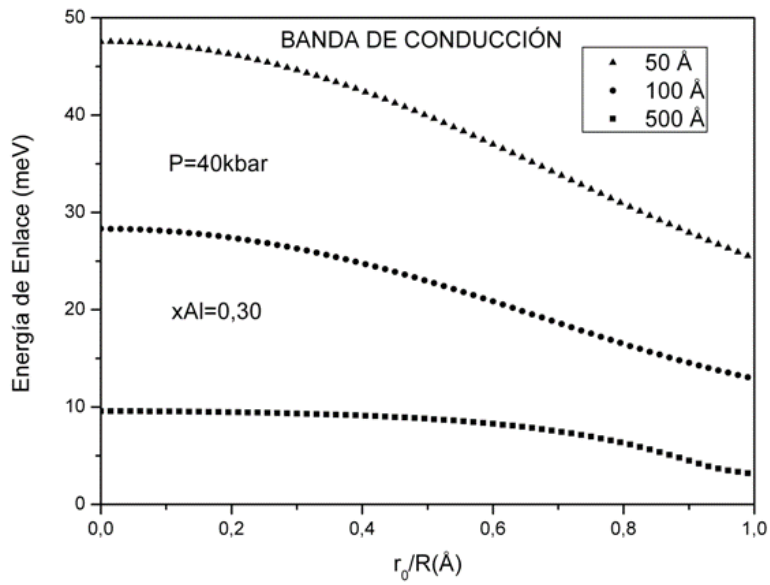


Fig. 6.8 Energía de enlace como función de la posición de la impureza para puntos cuánticos GaAs-(Ga,Al)As, con radios de 50,100 y 500 Å a presión constante.

## CAPITULO 7.

### PROPIEDADES ÓPTICAS EN PUNTOS CUÁNTICOS

El siguiente análisis sobre propiedades ópticas en puntos cuánticos está basado en la tesis de maestría titulada: *H. Paredes. Espectros de absorción óptica y fotoluminiscencia asociados a Impurezas hidrogenoides en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As.* (1997).

#### *7.1 Transiciones ópticas entre bandas*

El análisis de la interacción con la materia juega un papel fundamental en el estudio de la naturaleza de las cosas. En particular varios trabajos de investigación científica de este campo han sido canalizados para el descubrimiento de propiedades especiales en nanociencia y en nanotecnología. A partir de 1990 un gran número de aportes científicos se realizaron, en temas como pozos, hilos, puntos cuánticos y nanoestructuras semiconductoras. Sin embargo el estudio de puntos cuánticos presenta propiedades físicas exóticas, ya que se obtuvo grandes cambios en la densidad de estados y en las propiedades ópticas de estos sistemas. En la actualidad se continúa trabajando en estos tópicos en presencia de agentes externos como presión hidrostática, con efectos térmicos, dicho campo también ha abierto un amplio escenario de trabajo, debido a su potencial aplicación en dispositivos ultrarrápidos.

El efecto de un campo de radiación sobre los estados electrónicos de un cristal, o de un sistema de baja dimensionalidad, puede ser estudiado usando los principios y métodos de la mecánica cuántica. El análisis de materiales y en particular de semiconductores, a través de propiedades ópticas es de carácter muy importante ya que dicho compendio se torna una herramienta muy valiosa al momento de estudiar la estructura electrónica y fonónica en dichos materiales. Ello ha contribuido al rápido desarrollo de técnicas de medida ópticas que pueden ser atribuidas al estudio de láser de poder, detectores de alta sensibilidad en diferentes longitudes de onda entre otros. Estas nuevas técnicas permiten respuestas débiles en semiconductores puedan ser detectadas y cuantificadas cuando se realiza estudios teóricos.

En este capítulo se realiza una introducción al estudio de propiedades ópticas en nano dispositivos semiconductores en el cual se realiza un rápido análisis del campo electromagnético en puntos cuánticos el cual estará mediando en los diferentes procesos ópticos de estos dispositivos semiconductores. En particular se analiza el comportamiento de transiciones íter banda tanto la absorción como los procesos de recombinación en presencia de impurezas poco profundas y los efectos de presión hidrostática los cuales muestran comportamientos relevantes en dichos fenómenos físicos.

El uso de espectros de absorción óptica en el estudio de propiedades ópticas de materiales semiconductores es un método muy establecido. Aquí se inicia describiendo los diferentes tipos de absorción. En particular, aquí se detallara la absorción intrínseca de la transición entre la banda de valencia y la banda de conducción. Para ello se hace uso de un formalismo mecánico cuántico basado en la regla de oro de Fermi y en el análisis de resultados a través del método variacional. Igualmente es relevante destacar que una transición íter banda corresponde a la absorción de un fotón por lo cual se genera la transición de electrones a la banda de conducción y la presencia de huecos en la banda de valencia. En este caso de puntos cuánticos semiconductores o átomos artificiales dicha transición se realiza entre el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia donde se han involucrado únicamente huecos ligeros. Dicho punto geométrico es conocido como el punto gamma o de gap directo.

En presencia de un campo electromagnético la energía cinética de un electrón esta dada por:

$$E_c = \frac{1}{2m_0} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(r, t) \right]^2 \quad (7.1)$$

Donde  $e$  es el valor absoluto de la carga del electrón,  $\vec{A}$  es el potencial vectorial del campo electromagnético, y el potencial escalar es considerado cero, sin perder generalidad, debido a la arbitrariedad en el escogencia del gauge. La condición de Lorentz y la elección del potencial escalar cero, implican que  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ . Por consiguiente los efectos no lineales son despreciados eliminando los términos mayores o iguales a

$\bar{A}^2$ . De esta manera se observa que el hamiltoniano de interacción entre un electrón y el campo de radiación esta dado por:

$$H_{er} = \frac{e}{m_0 c} \bar{\mathbf{p}} \cdot \bar{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \quad (7.2)$$

Donde  $m_0(e)$  es la masa (carga) del electrón libre y  $c$  es la velocidad de la luz.

El efecto de un campo de radiación sobre los estados de un cristal, se puede estudiar analizando a  $H_{er}$ , como un termino perturbativo que depende del tiempo, este hará que los electrones realicen transiciones entre las bandas ocupadas y las vacías.

De acuerdo a la teoría de perturbación, la probabilidad por unidad de tiempo para que una perturbación de la forma  $L e^{-i\omega t}$  (donde el término  $e^{-i\omega t}$  depende totalmente del tiempo), induce transiciones con la absorción de un cuanto  $\hbar\omega$ , del estado inicial  $|i\rangle$  de energía  $E_i$ , al estado final  $\langle f|$  de energía  $E_f$  es:

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|L|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (7.3)$$

Si los estados inicial (banda de valencia) y final (banda de conducción) del electrón están dados por  $|i\rangle = |\psi_{vK_i S_i}\rangle$ , y  $\langle f| = \langle \psi_{cK_f S_f}|$ , donde  $K$  y  $S$ , son el vector de onda y el espin de cada estado, luego el elemento de matriz de (7.3) queda de la forma.

$$\langle f|L|i\rangle = \langle \psi_{cK_f S_f} | H_{er} | \psi_{vK_i S_i} \rangle = \frac{e}{m_0 c} \delta_{S_i S_f} \langle \psi_{cK_f} | \bar{\mathbf{A}} \cdot \bar{\mathbf{p}} | \psi_{vK_i} \rangle \quad (7.4)$$

Para un campo de radiación de frecuencia  $\omega$  el potencial vectorial puede escribirse de la siguiente forma.

$$\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = A_0 \bar{\mathbf{e}} \exp^{i(\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{r}} - \omega t)} + c.c \quad (7.5)$$

Donde  $\bar{\mathbf{e}}$ , es el vector de polarización en la dirección del campo eléctrico,  $\bar{\mathbf{n}}$  es el vector de onda de la radiación y  $c.c$ , es la conjugada compleja.

De (7.3), se puede escribir la probabilidad de transición por unidad de tiempo como.

$$P_{vK_i, S_i - cK_f, S_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{m_0c} \right)^2 \delta_{S_i, S_f} \left| \langle \psi_{vK_i} | \exp^{i\vec{n}\cdot\vec{r}} \vec{e}\cdot\vec{p} | \psi_{vK_f} \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (7.6)$$

El elemento de matriz  $\left| \langle \psi_{vK_i} | \exp^{i\vec{n}\cdot\vec{r}} \vec{e}\cdot\vec{p} | \psi_{vK_f} \rangle \right|$ , es distinto de cero si,  $\vec{K}_f = \vec{K}_i + \vec{n} + \vec{h}$  (conservación del momentum en un medio periódico), donde  $\vec{h}$ , es un vector de la red reciproca.

Para energías típicas del fotón, del orden de un electronvoltio, la longitud de onda es de  $10^4 \text{ \AA}$  y  $\vec{n} \approx \frac{2\pi}{10^4} \text{ \AA}^{-1}$ . El rango de variación de  $K_i$  y  $K_f$  es de  $2\pi/a$ , con  $a$  de unos pocos ángstrom. Para propósitos prácticos se puede considerar  $\vec{n} = 0$ , y debido a que  $K_i$ , y  $K_f$  están en la primera zona de Brillouin se tiene que  $K_i \cong K_f$ , lo cual expresa una aproximación bipolar y entonces son permitidas transiciones verticales por el campo de radiación.

Finalmente se tiene que la probabilidad de transición entre un estado de la banda de valencia y un estado de la banda de conducción es.

$$P_{v-c} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{m_0c} \right)^2 \left| \vec{e}\cdot\vec{M}_{vc}(\vec{K}) \right|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar\omega) \quad (7.7)$$

Donde

$$\vec{e}\cdot\vec{M}_{vc}(\vec{K}) = \langle \psi_{cK} | \vec{e}\cdot\vec{p} | \psi_{vK} \rangle = \vec{e}\cdot \int \psi_c^*(\vec{K}, \vec{r}) [-i\hbar\vec{\nabla}] \psi_v(\vec{K}, \vec{r}) d\vec{r} \quad (7.8)$$

Para transiciones desde la banda de valencia a la banda de estados de impurezas donadoras, la expresión anterior es válida, si se reemplaza la función de onda del estado final, por la función de onda de un estado de impureza, así.

$$\vec{e}\cdot\vec{M}_{vi}(\vec{K}) = \langle \psi_{iK} | \vec{e}\cdot\vec{p} | \psi_{vK} \rangle = \vec{e}\cdot \int \psi_i^*(\vec{K}, \vec{r}) \vec{p} \psi_v(\vec{K}, \vec{r}) d\vec{r} \quad (7.9)$$

Donde  $\psi_i$  y  $\psi_v$ , son las funciones propias para los estados de impureza donadoras (valencia), que están dadas por.

$$\psi_i(r) = \int dK \phi_i(K) \Psi_i(K, r) \quad (7.10)$$

$$\psi_v(r) = \int dK \phi_v(K) \Psi_v(K, r) \quad (7.11)$$

Reemplazando las dos funciones anteriores en (7.9) se obtiene.

$$\bar{e} \cdot \bar{M}_{vi}(\bar{K}) = \bar{e} \cdot \int [dK' \phi_i^*(K') \Psi_i^*(K', r)] \bar{p} \int [dK \phi_v(K) \Psi_v(K, r)] dr \quad (7.12)$$

Intercambiando el orden de integración se tiene.

$$\bar{e} \cdot \bar{M}_{vi}(\bar{K}) = \bar{e} \cdot \iint dK' dK \phi_i^*(K') \phi_v(K) C(K', K) \quad (7.13)$$

Donde

$$C(K', K) = \int dr \Psi_i^*(k', r) \bar{p} \Psi_v(K, r) \quad (7.14)$$

Para el arseniuro de galio se considera que las funciones de Bloch solo dependen de  $r$  y están determinadas por la parte periódica, tal que  $C(K', K)$ , no depende de  $K'$  y  $K$ . La expresión anterior toma la forma.

$$\bar{P}_{vi} = C(K', K) = \int dr \phi_i^*(r) \bar{p} \phi_v(r) \quad (7.15)$$

Y la expresión (7.13) queda.

$$\bar{e} \cdot \bar{M}_{vi}(\bar{K}) = \bar{e} \cdot \bar{P}_{vi} S_{vi} \quad (7.16)$$

Con

$$S_{vi} = \int dr \phi_v^*(r) \phi_i(r) \quad (7.17)$$

Es la magnitud relevante, que aporta toda la información.

Luego la probabilidad de transición entre un estado en la banda de valencia y un estado en la banda de impurezas donadoras, en la aproximación de la masa efectiva para el GaAs, esta determinada por.

$$P_{v-i} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{m_0c} \right)^2 |\vec{e} \cdot \vec{P}_{vi}|^2 S_{vi}^2 \delta(E_i - E_v - \hbar\omega) \quad (7.18)$$

Finalmente el numero de transiciones  $W(r_0, \omega)$ , por unidad de tiempo y por unidad de volumen, inducida por luz de frecuencia  $\omega$ , es igual a la suma a través de todos los estados posibles que se encuentren en un volumen determinado, o sea la sumatoria de todos los estados iniciales en la primera subbanda de valencia y de todos los estados de impurezas razas, tal que.

$$W(r_0, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{m_0c} \right)^2 \sum_{i,v} |\vec{e} \cdot \vec{P}_{vi}|^2 S_{vi}^2 \delta(E_i - E_v - \hbar\omega) \quad (7.19)$$

## 7.2 Absorción Óptica

Para transiciones desde el primer nivel de valencia a la banda de donadores (absorción óptica), los estados iniciales y finales están dados por:

$$\Psi_{10}^i(r) = \begin{cases} N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^v r)}{r}, r \leq R \\ N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^v R)}{r} e^{\chi_{10}^v (R-r)}, r \geq R \end{cases} \quad (7.20)$$

$$\Psi_{10}^f(r) = \begin{cases} N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^c r)}{r} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \leq R \\ N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^c R)}{r} e^{\chi_{10}^c (R-r)} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \geq R \end{cases} \quad (7.21)$$



Donde la energía del estado fundamental  $E_{10}^{c,v}$  para la banda de conducción (valencia) y  $\zeta_{10}^{c,v}$  y  $\chi_{10}^{c,v}$  están dados por las expresiones (6.13) y (6.14) respectivamente. Las constantes de normalización ( $N_1$  y  $N_2$ ) y los valores esperados de la energía cinética y potencial se encuentran en el apéndice.

Si el origen de energía es colocado en la primera subbanda de conducción como aparece en la figura 6, la energía del estado inicial (primer nivel de valencia) esta dada por:

$$E_i = -\epsilon_g \quad (7.22)$$

Donde

$$\epsilon_g = E_g + \frac{\hbar^2 \zeta_{10}^{c^2}}{2m_c^*} + \frac{\hbar^2 \zeta_{10}^{v^2}}{2m_v^*} \quad (7.23)$$

Aquí  $E_g$ , representa la brecha de energía del Ga As en el material en bloque y  $m_c^*$  ( $m_v^*$ ) es la masa efectiva del electrón en la banda de conducción (valencia).

La energía del estado final es:

$$E_f = -E_b(R, r_0) \quad (7.23)$$

Siendo  $E_b$ , la energía de enlace dada por (6.21).

La probabilidad de transición por unidad de tiempo para transiciones entre el primer nivel de valencia y la banda de impurezas donadoras, asociada con una impureza localizada en  $r_0$  esta dada por:

$$W(r_0, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{eA_0}{m^*c} \right)^2 \sum_{vi} |\vec{e} \cdot \mathbf{P}_{vi}|^2 S_{vi}^2 \delta(E_i - E_v - \hbar\omega) \quad (7.24)$$

Donde la sumatoria se extiende a los estados iniciales (valencia) y finales (impurezas).

Debido al confinamiento tridimensional solo tenemos estados discretos en la banda de valencia y la sumatoria de la ecuación (7.24) se realiza solo para los estados de impureza (estados donadores).

Una representación esquemática de un punto cuántico de GaAs (Ga, Al) As, dopado con una distribución homogénea de impurezas donadoras es mostrado en la figura siguiente.

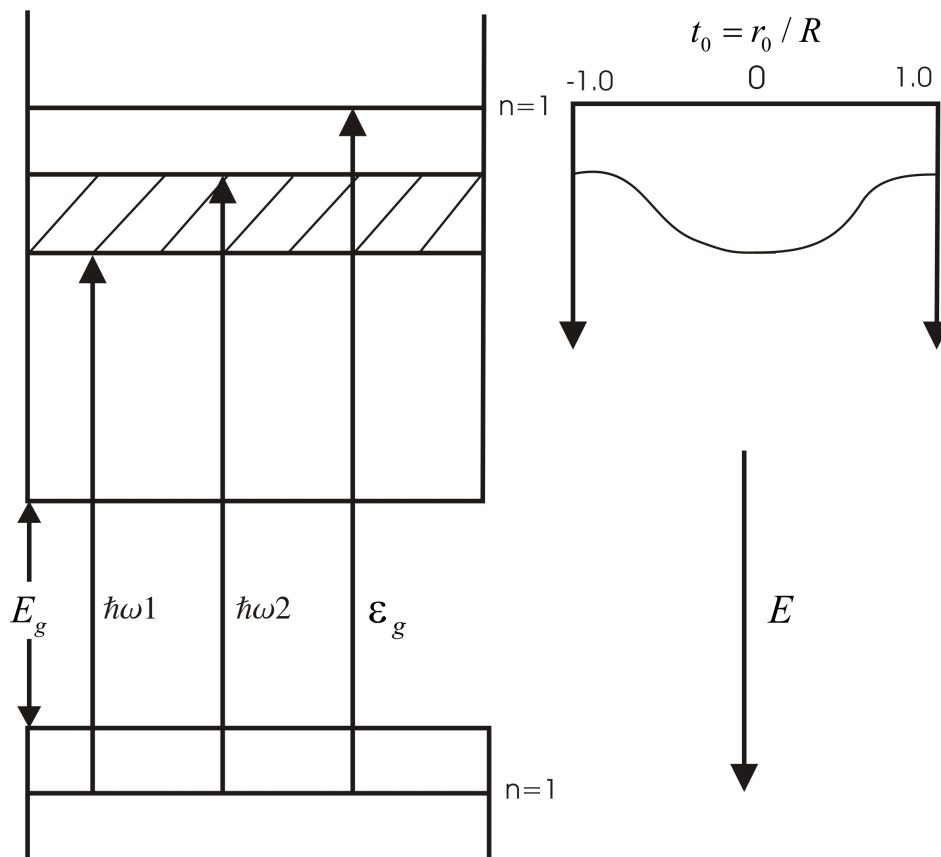


Fig. 7.1 Diagrama de bandas para el espectro de absorción, para transiciones desde la banda de valencia a la banda de impurezas donadoras, en un punto cuántico de 500 Å. La dependencia de la energía de enlace con la posición de la impureza es mostrada sobre la derecha.

Se observan las diferentes transiciones desde el primer nivel de valencia a la banda de impurezas donadoras, solo existe la probabilidad de transición para una impureza localizada en  $r_0$ , si la energía del fotón es igual a la diferencia de energía del estado

final (estados de impurezas donadoras) y la energía del estado inicial (valencia) ( $\hbar\omega = E_f - E_i$ ).

La probabilidad de transición para una impureza que se encuentra en  $r_0$ , en función de  $\omega$  esta dada por:

$$W(r_0, \omega) = W_0 \left( \frac{\pi \hbar^2}{2m_0 a_0^2} \right) S_{vi}^2(r_0, R) \delta(E_i - E_v - \hbar\omega) \quad (7.25)$$

Donde

$$W_0 = \frac{4m_0}{\hbar^3} a_0^2 \left( \frac{eA_0}{m^*c} \right)^2 |\tilde{e} \cdot P_{vi}|^2 \quad (7.26)$$

Aquí  $a_0$  es el radio de Bohr,  $m_0$  es la masa del electrón libre y la función  $S_{vi}$  que nos da el overlapping entre las funciones envolventes, está definido explícitamente en el apéndice.

Para una distribución dada de impurezas  $P(r_0)$  dentro del punto cuántico la probabilidad total de transición desde el primer nivel de valencia hasta la banda de impurezas donadoras es igual a la suma de la probabilidad de transición debida a cada estado de impureza.

Si las impurezas están homogéneamente distribuidas y no interactúan entre si en el punto cuántico la densidad de estados de impureza por energía de enlace esta dada por:

$$g(E_b) = \frac{3}{4\pi R^3} \int_{s(E)} \frac{ds}{|\nabla E_b|} = \frac{3r_0^2}{R^3} \left| \frac{dE_b}{dr_0} \right|^{-1} \quad (7.27)$$

Siendo  $E_b$  la energía de enlace.

La fracción de estados de impureza cuyas energías se encuentran entre  $E_b$  y  $E_b + dE_b$  están determinados por  $g(E_b)dE_b$ , que también es igual a la fracción de estados asociados con las impurezas que se encuentran entre  $r_0$  y  $r_0 + dr_0$ .

Por lo dicho en el párrafo anterior la probabilidad total de transición esta dada por:

$$W_T(\omega) = \int g(E_b) d(E_b) W(r_0, \omega) \quad (7.28)$$

Tal que:

$$W_T = W_0 \left[ \frac{\pi \hbar^2}{2m_0 a_0^2} \right] \int_0^R S_{vi}^2(r_0, R) \frac{3r_0^2}{R^3} \delta(E_i - E_v - \hbar\omega) dr_0 \quad (7.29)$$

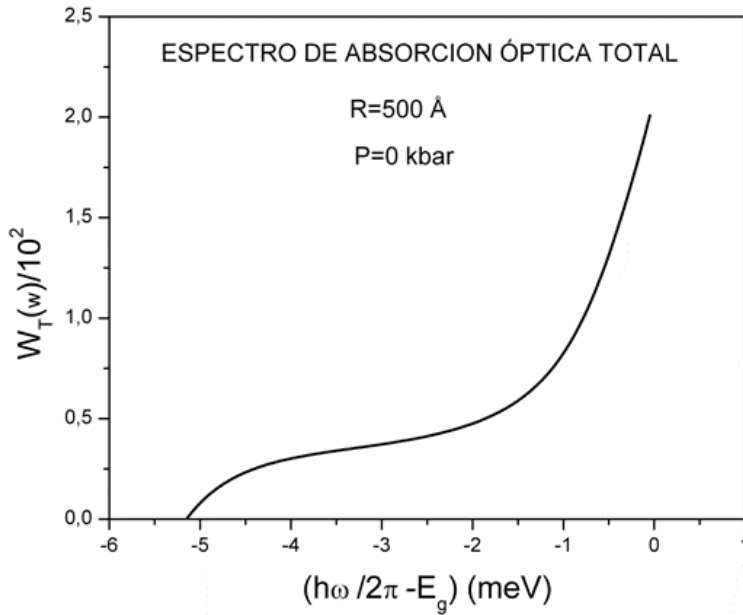


Fig. 7.2 Espectro de absorción óptica total  $W_T$ (en unidades  $W_0$ ), para un punto cuántico esférico de GaAs/(Ga,Al)As, con un radio de 500 Å, y a presión 0 Kbar, y con potencial de confinamiento finito.

En la figura 7.2 se presenta el espectro de absorción óptica total para una impureza en un punto cuántico esférico de GaAs/(Ga, Al)As, con una distribución homogénea de impurezas se pueden observar un pico dominante asociado con transiciones que involucran impurezas situadas cerca al borde, se observa además la presencia de otro pico mas pequeño, asociado con transiciones que involucran impurezas localizadas cerca al centro del punto cuántico, el cual tiende a desaparecer para valores pequeños del radio del punto cuántico, los resultados concuerdan con los reportados para pozos e hilos cuánticos.

### 7. fotoluminiscencia

Para transiciones desde el primer nivel de conducción a la banda de aceptadores los estados inicial y final están dados por:

$$\Psi_{10}^i(r) = \begin{cases} N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^c r)}{r}, r \leq R \\ N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^c R)}{r} e^{\chi_{10}^c (R-r)}, r \geq R \end{cases} \quad (7.30)$$

$$\Psi_{10}^f(r) = \begin{cases} N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^v r)}{r} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \leq R \\ N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^v R)}{r} e^{\chi_{10}^v (R-r)} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \geq R \end{cases} \quad (7.31)$$

El origen de energía es tomado en el primer nivel de conducción(n=1) como en el espectro de absorción, esto lo podemos observar en la figura siguiente.

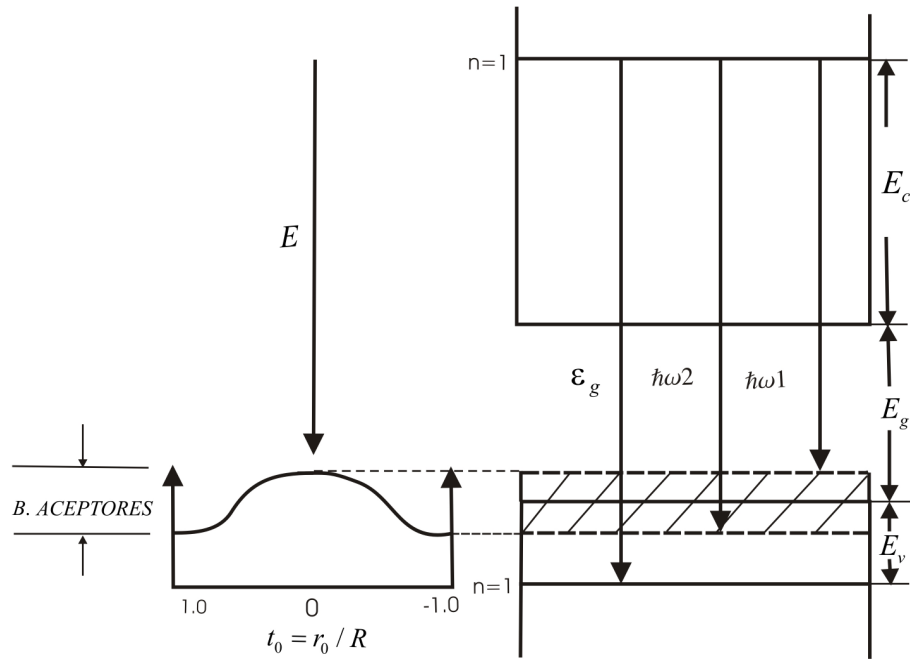


Fig. 7.3 Diagrama de fotoluminiscencia, para transiciones desde la banda de conducción a la banda de impurezas aceptadoras, en un punto cuántico de 500 Å. La dependencia de la energía de enlace con la posición de la impureza se muestra esquemáticamente sobre la izquierda.

Definido de esta forma el nivel de energía, entonces las expresiones (7.23) y (7.27) son las mismas para el espectro de fotoluminiscencia.

Se considera una distribución homogénea de impurezas aceptadoras  $P(r_0)$  dentro del punto cuántico. Cuando se ejecuta el proceso físico, el sistema debe de estar permanentemente en la presencia de un láser que se chopea con el propósito de mantener el equilibrio para poder tener una distribución electrónica en la banda de conducción (en este contexto se realiza una recombinación electrón - hueco). El espectro de fotoluminiscencia relacionado con impurezas aceptadoras está definido por:

$$L(\omega) = \int g(E_b) dE_b W(r_0, \omega) f(E_f) \quad (7.32)$$

Donde

$$f(E_f) = \frac{1}{\{1 + \text{Exp}[\beta(\Delta - E_f)]\}} \quad (7.33)$$

Es la función de distribución de Fermi para el nivel de conducción con  $\beta=1/K_B T$ ,  $E_f$  es el cuasi nivel de energía de Fermi y  $K_B$  es la constante de Boltzmann. En una estructura cero dimensional, como es el caso de un punto cuántico,  $\Delta = 0$  indicando que no hay ley de dispersión electrónica en la banda de conducción.

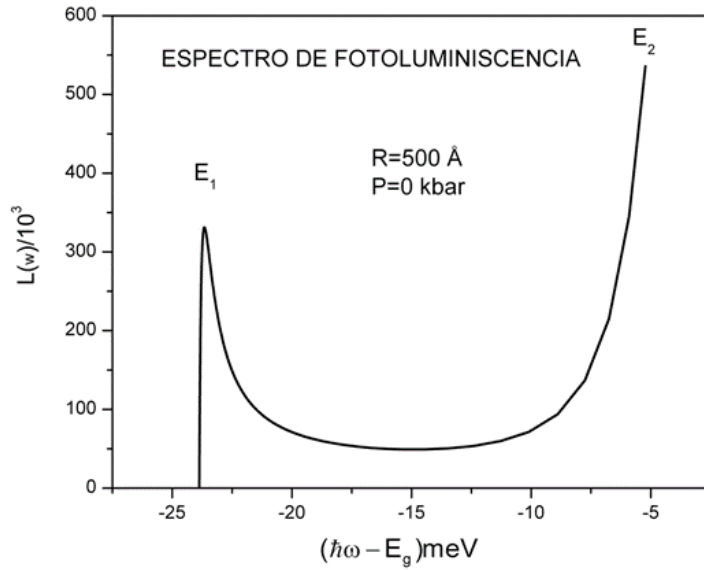


Fig. 7.4 Espectro de fotoluminiscencia (en unidades  $W_0$ ), como función de  $(\hbar\omega - E_g)$ , para un punto cuántico esférico de GaAs-(Ga,Al)As, en confinamiento finito y para un radio de 500 Å, a presión 0 Kbar

En el espectro de fotoluminiscencia se encontró que el rango de variación de la energía es mayor en puntos cuánticos que en pozos e hilos cuánticos de tamaños comparables.

El espectro de fotoluminiscencia en un punto cuántico de GaAs/(Ga,Al)As, con una distribución homogénea de impurezas y para un cuasi nivel de energía Fermi  $E_F=0$ , presenta dos estructuras asociado con impurezas localizadas en el centro y en el borde del punto cuántico. Para radios grandes del punto el pico asociado con impurezas localizadas en el centro es mayor que el pico asociado a impurezas en el borde. A medida que el radio del punto cuántico disminuye el pico asociado con impurezas en el borde domina al pico asociado con impurezas en el centro. Este comportamiento es muy similar a los encontrados en pozos e hilos cuánticos de dimensiones comparables.

#### ***7.4 Espectros de absorción y fotoluminiscencia afectados por presión hidrostática.***

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos para las energías de enlace en el capítulo anterior se presentan los espectros de absorción y fotoluminiscencia para un punto cuántico de arseniuro de GaAs-(Ga,Al)As. En la Fig. 7.5. Se observa el espectro de absorción óptica total para un punto cuántico en función de la energía del sistema, y la presión hidrostática (aquí se ha considerado presión  $P= 0, 20, 40$  Kbar) para una concentración de aluminio  $x= 0.45$  y un radio del punto cuántico de 500 Ångstrom afectado por presión hidrostática. En el caso en que la presión hidrostática es nula, observamos un incremento del espectro de absorción óptica en la medida que la energía de emisión que tiene en cuenta la energía de las impurezas en valor absoluto disminuye. La disminución de la energía muestra que la impureza se desplaza del centro y hace que dicha absorción sea mayor permitiendo que una mayor cantidad de electrones transiten de la banda de valencia a la banda de conducción. En este sentido también se observa que en un valor específico de la energía ocurre un cambio apreciable en el comportamiento de la absorción debido a que en este valor se presenta una singularidad de van Hove. Punto donde la energía de enlace presenta un valor crítico ya que ella muestra los efectos del confinamiento cuántico en estos átomos artificiales. Posteriormente dado que la impureza se desplaza hacia el borde del pozo del punto cuántico, los efectos de confinamiento son menores y se determina un rápido aumento en la cantidad de electrones en la banda de conducción. En la medida en que la energía es menor se presenta nuevamente un cambio singular en el comportamiento de este fenómeno físico obteniéndose nuevamente dicha singularidad pero ahora debido a que no hay más estados ligados dentro del punto y no obtenemos presencia de niveles en el punto cuántico en estudio. De igual forma en esta gráfica se observa que en la medida que se incrementa la presión hidrostática la absorción óptica disminuye permitiendo que un menor número de electrones estén presentes en la banda de conducción debido a que la energía de enlace es mayor cuando la presión aumenta. Dichas curvas presentan comportamientos similares mostrando las singularidades de van Hove y posteriormente cuando la presión es mayor y la energía disminuye se observa que la tasa de electrones



es cada vez menor, solo que la singularidad de van Hove se presenta para estos casos a energías mayores por efectos de presión.

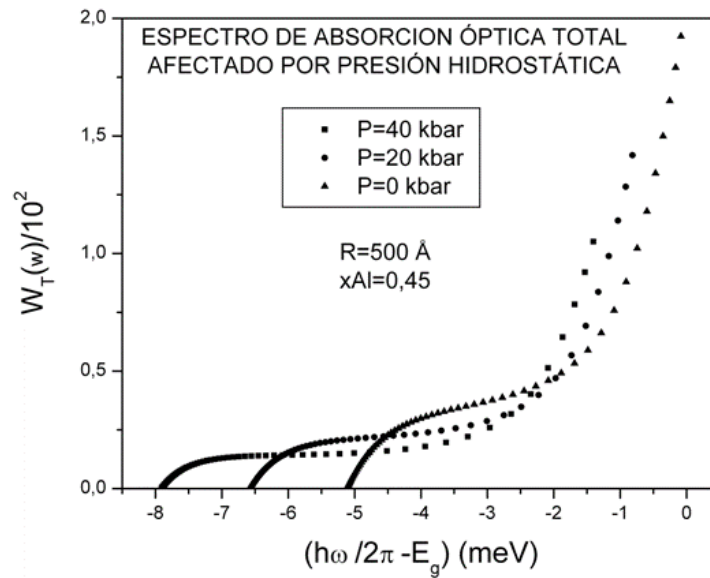


Fig. 7.5 Espectro de absorción óptica total, afectado por presión hidrostática, para un punto cuántico de arseniuro de galio de 500 Å de radio y una concentración de aluminio del 45%, para diferentes valores de presión hidrostática, P=0, 20 y 40 Kbar

Para el espectro de fotoluminiscencia ocurre algo muy similar comparándolo con el espectro de absorción óptica presentado anteriormente, como se puede ver en la Fig.7.6, las curvas que representan el espectro de fotoluminiscencia tienen un corrimiento hacia energías más bajas, esto se presenta a medida que la presión hidrostática aumenta.

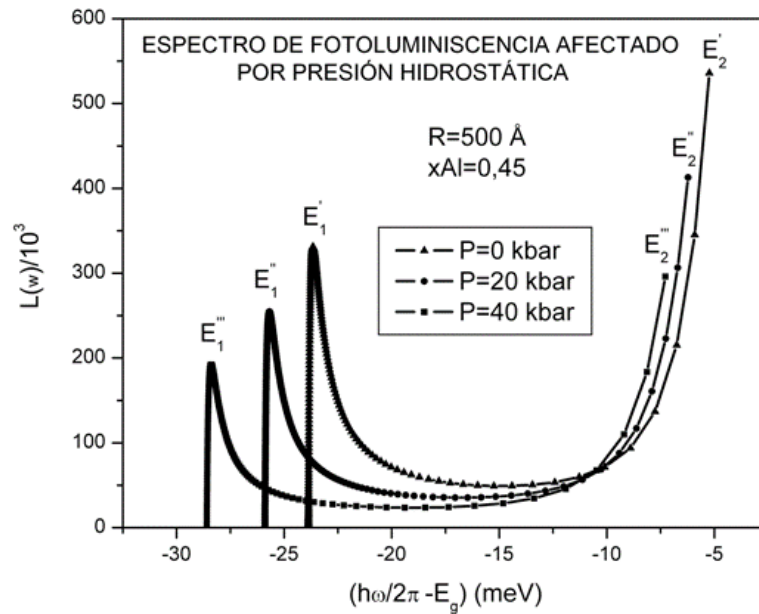


Fig. 7.6 Espectro de Fotoluminiscencia afectado por presión hidrostática, para un punto cuántico de arseniuro de GaAs/(Ga,Al)As, con un radio de 500 Å, y una concentración de aluminio del 45%, para diferentes valores de presión hidrostática, P=0, 20 y 40 Kbar

En la figura 7.6. Se observa el espectro fotoluminiscencia en función de la energía del sistema que tiene en cuenta la energía de las impurezas poco profundas o hidrogenoides. Dicha grafica muestra en primera instancia que la singularidad de van hove ocurre a energías menores en la medida en que la presión hidrostática aumenta dejando ver que una concentración apreciable de electrones desciende de la banda de conducción a la banda de valencia en la medida que la presión hidrostática aumenta hecho que muestra que el sistema en estudio es más eficiente cuando este está sometido a presiones hidrostáticas cada vez mayores. El fenómeno físico indica que la cuantización de niveles en el punto cuántico es más efectiva o de mejor desempeño en la medida en que la presión aumenta Permitiendo una mayor captura de electrones por parte de las impurezas aceptadoras. Dichos procesos físicos también indican que el punto cuántico emite de forma más efectiva lo que hace un sistema físico de alta aplicación tecnológica como en láser de puntos cuánticos los cuales deben poseer alta coherencia. Por otra

parte en la medida en que la energía aumente se observa un cambio en la pendiente en el comportamiento de la curva indicando un que hay menos estados ligados por el desplazamiento de la impureza a lo largo del pozo. Posteriormente se observa que si aumentamos la energía suministrada al sistema se tiene nuevamente una concentración apreciable de electrones que transitan a las impurezas aceptadoras y a la banda de valencia. Este transito se incrementa en la medida que dicha energía aumenta de manera que para altas presiones y altas energías aun tenemos estados cuantizados con capacidad de aceptar portadores, ello se debe en gran parte al desplazamiento de la impureza al borde del pozo del punto cuántico.

## CONCLUSIONES

En este trabajo se presentan los resultados teóricos relacionados con la energía del estado fundamental y la energía de enlace de impurezas superficiales donadoras y aceptadoras en puntos cuánticos de GaAs-(GaAs)Al, localizadas en el centro y en el borde del punto cuántico, también se calcularon los espectros de absorción y fotoluminiscencia, los anteriores cálculos se hicieron utilizando un procedimiento variacional y dentro de la aproximación de la masa efectiva, además teniendo en cuenta parámetros como, el potencial de confinamiento, la concentración de la impureza, el tamaño del punto cuántico, y la presión hidrostática.

Para la energía del estado fundamental sin tener en cuenta el potencial de la impureza, en función del radio del punto y para diferentes concentraciones de aluminio, teniendo en cuenta la banda de conducción y de valencia, se encontró que la energía del estado fundamental aumenta, a medida que el radio del punto decrece y se aproxima a un valor límite correspondiente a la altura del pozo. También se puede ver que la energía tiende a cero, para radios grandes que se acercan al límite de los materiales en bloque, Por otro lado la energía de enlace de impurezas donadoras y aceptadoras en puntos cuánticos esféricos en función del radio del punto, para diferentes concentraciones de aluminio se puede observar que en un pozo de confinamiento infinito, la energía de enlace se incrementa a medida que el tamaño del punto cuántico se reduce, mientras que para un pozo de potencial finito la energía de enlace alcanza un valor máximo cuando el radio decrece y disminuye para radios menores hasta un valor límite correspondiente al valor del menor radio para el cual no hay estados ligados en el pozo. Para la energía del estado fundamental y la energía de enlace se puede apreciar que son considerablemente más altas que las calculadas para pozos e hilos cuánticos, esto se debe al fuerte confinamiento que se presenta en los puntos cuánticos.

Para el caso de un punto cuántico con potencial de confinamiento finito y afectado con presión hidrostática, para los valores de 0 a 40 kbars, y teniendo en cuenta el radio y la posición de la impureza dentro del punto cuántico, se encontró que las energías de enlace a  $P=0$  kbars es similar a los resultados previos. Para las demás presiones se

observa que a medida que el radio disminuye, la energía de enlace se incrementa desde los valores para materiales en bloque del GaAs, hasta un valor máximo y entonces empieza a disminuir desde el valor característico para materiales en bloque del material de la barrera cuando el radio tiende a cero. También se puede apreciar que para cualquier valor de la presión hidrostática la energía de enlace se incrementa esto se debe a un confinamiento adicional debido a la presión, otro aspecto importante es que los efectos del confinamiento adicional debido a la presión son mas apreciables en puntos cuánticos angostos.

Por otro lado para la energía de enlace en función de la posición de la impureza dentro del punto cuántico, y para una presión hidrostática de 20 kbars, se encontró que la energía de enlace decrece a medida que la impureza se desplaza desde el centro hasta el borde del punto cuántico, esto se debe a que la repulsión de la función de onda por la barrera de potencial es relevante y dicha repulsión disminuye el efecto del confinamiento debido a la presión.

Este comportamiento es importante ya que sistemas que operan bajo presión hidrostática, pueden ser usados para sintonizar la salida de los dispositivos opto electrónicos, sin modificar el tamaño físico del punto cuántico. En este trabajo no se han considerado presiones por encima de 40 kbars, debido a que en este punto se presentan una transición entre las bandas del GaAs de directa a indirecta.

Para los espectros de absorción óptica total y fotoluminiscencia se encontró que el rango de variación de la energía es mayor en puntos cuánticos que en pozos e hilos cuánticos de tamaños comparables.

El espectro de absorción óptica total en un punto cuántico de GaAs-(Ga, Al) As, con una distribución homogénea de impurezas y potencial de confinamiento finito, presenta dos estructuras especiales asociadas con impurezas localizadas en el centro y en el borde del punto cuántico. El pico asociado con impurezas que se encuentran cerca al borde del punto cuántico, domina debido a que la distribución homogénea de impurezas escogida hace que el número de estados de impurezas sea mayor en el borde. A medida que el radio del punto cuántico disminuye el pico asociado con impurezas en el borde domina al pico asociado con impurezas en el centro. El pequeño pico asociado con transiciones que involucran impurezas que se encuentran en el centro esta indicando que

es el límite del material en bloque ( $R_y=5.72$  meV), esta situación es distinta, a la que se presenta para pozos e hilos cuánticos con igual distribución de impurezas, donde para situaciones cercanas al bloque, domina el pico relacionado con impurezas localizadas en el centro de la estructura. Este comportamiento es muy similar a los encontrados en pozos e hilos cuánticos de dimensiones comparables.

Para el espectro de fotoluminiscencia asociado con impurezas aceptadoras en un punto cuántico de GaAs, con una distribución homogénea de impurezas, en un pozo de potencial finito, a una temperatura de  $5$  K<sup>0</sup>, y para un nivel  $n=1$  de la banda de conducción, indicando que el cuasi nivel de Fermi es cero ( $E_f = 0$ ), y para un punto cuántico  $\Delta=0$ , entonces la función de distribución de Fermi toma el valor de  $f(E_f)=1/2$ . Se encontró dos estructuras especiales, esto es dos picos asociados con transiciones que involucran impurezas localizadas en el centro del punto cuántico y que se localiza en un Rydberg efectivo ( $R_y=26$  meV), indicando el límite del material en bloque, y el cual tiende a disminuir a medida que el radio del punto decrece. El otro pico está relacionado con impurezas en el borde del punto cuántico el cual domina el espectro, esto se debe al gran confinamiento cuántico. Los espectros de fotoluminiscencia se pueden entender en términos de la densidad de estados asociada con impurezas aceptadoras. Para valores grandes del punto cuántico ( $R>1000\text{Å}$ ), la densidad de estados asociadas con impurezas próximas al centro es mayor que la densidad de estados asociada con impurezas próximas al borde.

Para el espectro de absorción óptica total y fotoluminiscencia, teniendo en cuenta el efecto de la presión hidrostática, se observa el gran cambio que se presenta en el volumen del punto cuántico, en la discontinuidad de las brechas, la masa efectiva, y la constante dieléctrica, cuando se calcula la energía de los niveles en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin, estos parámetros influyen principalmente las variaciones que pueda presentar la energía de enlace de las impurezas, como efecto de la presión hidrostática, estos cambios en la energía de enlace afecta de forma muy marcada las energías de transición en el punto cuántico, haciéndolas tender hacia energías más bajas, este fenómeno se presenta, tanto para el espectro de absorción óptica total, como para el de fotoluminiscencia. El comportamiento teórico de los espectros de absorción óptica total y de fotoluminiscencia afectados por presión hidrostática es importante, debido a

que se puede aplicar en el desarrollo de dispositivos optoelectronicos, tales como moduladores de electro- absorción infrarrojo, detectores y láser de longitud de onda sintonizable, donde las propiedades de dichos dispositivos optoelectronicos pueden ser ajustadas controlando el tamaño del punto cuántico y el efecto de la presión hidrostática sobre dicha heteroestructura.

## **BIBLIOGRAFÍA**

- [1] L. Esaki, R. Tsu. IBM J. Res. Devel. 14, 61 1970
- [2] R. Tsu, L. Esaki. Appl. Lett. 22,562.1973
- [3] H. Paredes. Espectros de absorción óptica y fotoluminiscencia asociados a Impurezas hidrogenoides en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As. (1997)
- [4] G. Bastard, Phys. Rev. B24, 4714(1981).
- [5] L. E. Oliveira y R. Pérez-Álvarez, Phys. Rev. B 40, 10460 (1989)
- [6] L. E. Oliveira y J. López-Gondar, Phys. Rev. B 41,3719 (1990)
- [7] N. Porrás-Montenegro, A. Latge, y L. E. Oliveira, J. Appl. Phys.70,5555(1991)
- [8] A. Latge, N. Porrás Montenegro, y L. E. Oliveira, Phys. Rev B 45,6742(1992)
- [9] S. Y. López, N. Porrás-Montenegro y C. A. Duque, Revista Colombiana de Física, Vol. 37, No. 1. 2005
- [10] Atkin, R.H. *Mathematics and Wave Mechanics*, John Wile & Son; 1st edition. 1956
- [11] N. Porrás-Montenegro, and S. T. Pérez - Merchancano, Phys. Rev. B 46, 9780 (1992)
- [12] N. Porrás-Montenegro, and S. T. Pérez - Merchancano, and A. Latge, J Appl Phys 74, 7624 (1993)
- [13] Paul Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 1<sup>st</sup> edition, Springer- Verlag, 1998.
- [14] E.M. Dizhur, A. Ya. Shulman, I.N. Kotelnikov, A.N Voronovsky *Pressure Dependence of the Barrier Height in Tunnel n-GaAs-Au Junctions*, Cond-matt/0010200 2005.
- [15] Hyeonsik M. Cheong, J. H. Burnett, W. Paul P. F. Hopkins, K. Campman, and A. C. Gossard *Hydrostatic – pressure coefficient of the direct band- gap energy of  $Al_x Ga_{1-x}As$  for  $x=0.35$* , Physical Review B vol 53 10916, 1996.
- [16] A. Mujica, Angel Rubio, A. Muñoz and R. J. Needs *high-pressure phases of group- IV. III-V, and II- VI compounds*, Review of Modern Physics, Vol. 75, 2003.
- [17] Jasprit Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of semiconductor*



structures, Cambridge University Press 2003

- [18] H. Ohiambo Oyoko, N. Porrás-Montenegro, S. Y. López, C. A. Duque. *Comparative study of the hydrostatic pressure and temperature effects on the impurity-related optical properties in single and double GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells*, Phis. Stat. Sol. (c) 4, No. 2, 298-300 (2007).
- [19] A. M. Elabsy. *Effect of the  $\Gamma$ -X crossover on the binding energies of confined donors in single GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum-well microstructures*, J. Phys: Condens. Matter 6(1994) 10025-10030.
- [20] N. Raigoza, C.A. Duque, N. Porrás-Montenegro, L.E Oliveira. *Correlated electrón- hole transition in quantum-well wires: Effects of hydrostatic pressure*, Physica B 371 (2006) 153-157.
- [21] N. Raigoza, C.A. Duque, E. Reyes-Gómez, L.E Oliveira. *Hydrostatic pressure effects on the exciton states in GaAs-(Ga,Al)As semiconductor quantum-wells*, PACS numbers: 71.35.Cc, 78.67.De, 78.55.Cr.
- [22] A. John Peter, *the effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots*, Physica E 28 (2005) 225-229.
- [23] H. O. Oyoko, C. A. Duque, N. Porrás Montenegro, *Uniaxial stress dependence of the binding energy of shallow donor impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots*, Journal of applied physics, volume 90, number 2.
- [24] Zhu, J. L. Xiong J, J. GU., B.L., Phys. Rev. B 41, 6001(1990).
- [25] Silva-Valencia J, and Porrás-Montenegro, *N 1997 J. Appl. Phys. 81 901*.
- [26] Charles Kittel, *Introducción a la física del estado sólido*, 2<sup>da</sup> edición. Editorial Reverte, S.A. 1984.

**VALOR ESPERADO DE LA ENERGÍA Y CONSTANTE DE NORMALIZACIÓN**

La función de prueba para el estado fundamental de la impureza es:

$$\Psi_{10}(r) = \begin{cases} N \frac{\sin(\zeta_{10}r)}{r} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \leq R \\ N \frac{\sin(\zeta_{10}R)}{r} e^{\chi_{10}(R-r)} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \geq R \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Donde  $N(r_0, \lambda)$ , es la constante de normalización de la función de onda y  $\lambda$  es el parámetro variacional, necesario para minimizar la energía de enlace.

La constante de normalización se calcula resolviendo la integral

$$\int_V dr \varphi^*(r) \varphi(r) = 1 \quad (\text{A.2})$$

Y esta dada por

$$N^2(r_0, \lambda) = \frac{2\lambda^2 r_0}{\pi [C_0 + \sin^2(\zeta_{10}R) e^{(2\chi_{10}R)} D_0]} \quad (\text{A.3})$$

Donde

$$C_0 = [2\lambda(I_1 + I_2) + (1 + 2\lambda r_0)(I_4 - I_5)] e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_3 + (1 - 2\lambda r_0) I_6] e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.4})$$

Y

$$D_0 = [2\lambda I_{22} + (1 + 2\lambda r_0)I_{23}]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{22} + (1 - 2\lambda r_0)I_{23}]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.5})$$

La energía de enlace de la impureza hidrogenoide está definida como, la energía del estado fundamental del sistema sin la impureza presente menos la energía del estado fundamental de la impureza, así.

$$E_b(R, r_0) = \frac{\hbar^2 \zeta_{10}^2}{2m} - \xi(R, r_0) \quad (\text{A.6})$$

Con  $\xi(R, r_0) = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ , donde  $\langle T \rangle$  y  $\langle U \rangle$ , son los valores esperados de la energía cinética y potencial respectivamente, y están dados por:

#### VALOR ESPERADO DE LA ENERGÍA CINÉTICA

$$\langle T \rangle = -2\pi(a_0^*)^2 N^2(r_0, \lambda) [T_1 + T_2 \sin^2(\zeta_{10}R) e^{(2\lambda r_0 R)}] \quad (\text{A.7})$$

Con

$$T_1 = \frac{\zeta_{10}}{2r_0} A - \frac{(\lambda^2 - \zeta_{10}^2)}{4\lambda^2 r_0} B + \left( \frac{r_0}{\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} \right) e^{(-2\lambda r_0)} C - \left( -\frac{r_0}{\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} \right) D \quad (\text{A.8})$$

Donde

$$A = (I_{13} - I_{14})e^{(-2\lambda r_0)} - I_{15}e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.9})$$

$$B = [2\lambda(I_1 + I_2) + (1 + 2\lambda r_0)(I_4 - I_5)]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_3 + (1 - 2\lambda r_0)I_6]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.10})$$

$$C = \frac{\lambda \zeta_{10}}{2r_0} (I_{16} + I_{17}) - \frac{\lambda}{r_0} (I_7 + I_8) + \frac{\zeta_{10}}{4r_0} (I_{19} - I_{20}) - \frac{1}{2r_0} (I_{10} - I_{11}) \quad (\text{A.11})$$

$$D = \frac{\lambda \zeta_{10}}{2r_0} I_{18} - \frac{\lambda}{r_0} I_9 + \frac{\zeta_{10}}{4r_0} I_{21} - \frac{1}{2r_0} I_{12} \quad (\text{A.12})$$

Y

$$T_2 = -\frac{\chi_{10}^2 + \lambda^2}{4\lambda^2 r_0} E - \chi_{10} F - \frac{\zeta_{10}}{4\lambda_2 r_0} G - \frac{1}{4\lambda^2 r_0} H \quad (\text{A.13})$$

Donde

$$E = [2\lambda I_{22} + (1+2r_0)I_{23}]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{22} + (1-2\lambda r_0)I_{23}]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.14})$$

$$F = \frac{1}{r_0} [e^{(-2\lambda r_0)} - e^{(2\lambda r_0)}] I_{22} + [e^{(-2\lambda r_0)} + e^{(2\lambda r_0)}] [I_{23} + \frac{I_{24}}{\zeta_{10}}] \quad (\text{A.15})$$

$$G = [2\lambda I_{23} + (1+2\lambda r_0)I_{24}]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{23} + (1-2\lambda r_0)I_{24}]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.16})$$

$$H = [2\lambda I_{24} + (1+2\lambda r_0)I_{25}]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{24} + (1-2\lambda r_0)I_{25}]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.17})$$

### VALOR ESPERADO DE LA ENERGÍA POTENCIAL

$$\langle V \rangle = \frac{2\pi(a_0^*)^2}{\lambda r_0} N^2(r_0, \lambda) I - \frac{\pi V_0 N^2(r_0, \lambda) \sin^2(\zeta_{10} R) e^{(2\chi_{10} R)}}{2r_0 \lambda^2} J \quad (\text{A.18})$$

Donde

$$I = [I_4 - I_5]e^{(-2\lambda r_0)} - I_6 e^{(2\lambda r_0)} + \sin^2(\zeta_{10} R) e^{(2\chi_{10} R)} [e^{(-2\lambda r_0)} - e^{(2\lambda r_0)}] I_{23} \quad (\text{A.19})$$

$$J = [2\lambda(I_{22} + r_0 I_{23}) + I_{23}]e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda(I_{22} - r_0 I_{23}) + I_{23}]e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.20})$$

Con

$$I_1 = \int_0^R dr \sin^2(\zeta_{10}r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_3 = \int_{r_0}^R dr \sin^2(\zeta_{10}r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_5 = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_7 = \int_0^R dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_9 = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{11} = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r^3} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{13} = \int_0^R dr \sin(2\zeta_{10}r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{15} = \int_{r_0}^R dr \sin(2\zeta_{10}r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{17} = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{19} = \int_0^R dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{21} = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{23} = \int_R^\infty dr \frac{1}{r} e^{[-2(\chi_{10}+\lambda)r]}$$

$$I_{25} = \int_R^\infty dr \frac{1}{r^3} e^{[-2(\chi_{10}+\lambda)r]}$$

$$I_2 = \int_0^{r_0} dr \sin^2(\zeta_{10}r) e^{(2\lambda r)}$$

$$I_4 = \int_0^R dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_6 = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin^2(2\zeta_{10}r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_8 = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{10} = \int_0^R dr \frac{\sin^2(2\zeta_{10}r)}{r^3} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{12} = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}r)}{r^3} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{14} = \int_0^{r_0} dr \sin(2\zeta_{10}r) e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{16} = \int_0^R dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{18} = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{20} = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin(2\zeta_{10}r)}{r^2} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{22} = \int_R^\infty dr e^{[-2(\chi_{10}+\lambda)r]}$$

$$I_{24} = \int_R^\infty dr \frac{1}{r^2} e^{[-2(\chi_{10}+\lambda)r]}$$

***FUNCIÓN DE OVERLAPING  $S_{vi}$***

Para transiciones desde el primer nivel de valencia a la banda de valencia a la banda de donadores los estados inicial y final están dados por

$$\Psi_{10}^i(r) = \begin{cases} N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^v r)}{r}, r \leq R \\ N_1 \frac{\sin(\zeta_{10}^v R)}{r} e^{\chi_{10}^v (R-r)}, r \geq R \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

$$\Psi_{10}^f(r) = \begin{cases} N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^c r)}{r} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \leq R \\ N_2 \frac{\sin(\zeta_{10}^c R)}{r} e^{\chi_{10}^c (R-r)} e^{-\lambda|r-r_0|}, r \geq R \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

Donde las constantes de normalización están dadas por las siguientes expresiones

$$N_1^2(r_0, \lambda) = \frac{1}{4\pi[I_{26} + I_{27} \sin^2(\zeta_{10}^v R) e^{(2\chi_{10}^v R)}]} \quad (\text{A.23})$$

Y

$$N_2^2(r_0, \lambda) = \frac{2r_0 \lambda^2}{\pi[K + L]} \quad (\text{A.24})$$

Con

$$K = [2\lambda(I_{28} + I_{29}) + (1 + 2\lambda r_0)(I_{30} - I_{31})] e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{32} + (1 - 2\lambda r_0)I_{33}] e^{(2\lambda r_0)} \quad (\text{A.25})$$

$$L = \sin^2(\zeta_{10}^c R) e^{(2\chi_{10}^c R)} \{ [2\lambda I_{34} + (1 + 2\lambda r_0) I_{35}] e^{(-2\lambda r_0)} - [2\lambda I_{34} + (1 - 2\lambda r_0) I_{35}] e^{(2\lambda r_0)} \} \quad (\text{A.26})$$

La función  $S_{vi}$ , que da el overlapping entre las funciones envolventes de los estados iniciales  $\psi_{10}^i$  y finales  $\psi_{10}^f$ , se define en la ecuación (7.17) toma la forma siguiente

$$S_{vi} = -\frac{2\pi N_1 N_2}{r_0 \lambda^2} \{ M + N \sin(\zeta_{10}^c R) \sin(\zeta_{10}^v R) e^{(\chi_{10}^c + \chi_{10}^v) R} \} \quad (\text{A.27})$$

Donde

$$M = [\lambda(I_{36} + I_{37}) + (1 + \lambda r_0)(I_{38} - I_{39})] e^{(-\lambda r_0)} - [\lambda I_{40} + (1 - \lambda r_0) I_{41}] e^{(\lambda r_0)} \quad (\text{A.28})$$

$$N = [\lambda I_{42} + (1 + \lambda r_0) I_{43}] e^{(-\lambda r_0)} - [\lambda I_{42} + (1 - \lambda r_0) I_{43}] e^{(\lambda r_0)} \quad (\text{A.29})$$

Con

$$I_{26} = \int_0^R dr \sin^2(\zeta_{10}^v r)$$

$$I_{27} = \int_R^\infty dr e^{(-2\chi_{10}^v r)}$$

$$I_{28} = \int_0^R dr \sin^2(\zeta_{10}^c r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{29} = \int_0^{r_0} dr \sin^2(\zeta_{10}^c r) e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{30} = \int_0^R dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}^c r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{31} = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}^c r)}{r} e^{(2\lambda r)}$$

$$I_{32} = \int_{r_0}^R dr \sin^2(\zeta_{10}^c r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{33} = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin^2(\zeta_{10}^c r)}{r} e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{34} = \int_R^\infty dr e^{[-2(\chi_{10}^c + \lambda)r]}$$

$$I_{35} = \int_R^\infty dr \frac{1}{r} e^{[-2(\chi_{10}^c + \lambda)r]}$$

$$I_{36} = \int_0^R dr \sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r) e^{(-2\lambda r)}$$

$$I_{37} = \int_0^{r_0} dr \sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r) e^{(\lambda r)}$$

$$I_{38} = \int_0^R dr \frac{\sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r)}{r} e^{(-\lambda r)}$$

$$I_{40} = \int_{r_0}^R dr \sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r) e^{(-\lambda r)}$$

$$I_{42} = \int_R^\infty dr e^{[-(\chi_{i0}^c + \chi_{i0}^v + \lambda)r]}$$

$$I_{39} = \int_0^{r_0} dr \frac{\sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r)}{r} e^{(\lambda r)}$$

$$I_{41} = \int_{r_0}^R dr \frac{\sin(\zeta_{10}^c r) \sin(\zeta_{10}^v r)}{r} e^{(-\lambda r)}$$

$$I_{43} = \int_R^\infty dr \frac{1}{r} e^{[-(\chi_{i0}^c + \chi_{i0}^v + \lambda)r]}$$