ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID

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

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLIN
DEPTO. DE BIBLIOTECA
BIBLIOTECA "EFE"

ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID

Tesis de Grado presentada como requisito parcial para optar al título
de
Doctor en Ciencias Naturales (Física)

Director:
Dr. ILIA D. MIKHAILOV

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

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
DEPTO. DE BIBLIOTECAS
BIBLIOTECA "EFE" GOMEZ

90
08

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

ACTA DE SUSTENTACIÓN Y CALIFICACIÓN DE TESIS DOCTORAL EN CIENCIAS NATURALES (FÍSICA)

(Art.128 y Art. 129. Acuerdo del Consejo Superior No. 074 de 2005, Reglamento General de Posgrado)

Bucaramanga, 1 de septiembre de 2008

Los suscritos **MIEMBROS DE LA TESIS DOCTORAL**, intitulada:

"Espectro Energético de los Sistemas de Pocas Partículas Fuertemente Confinadas en Heterojunturas Semiconductoras"

del Candidato a Doctor en Ciencias Naturales (Física), JAIRO HUMBERTO MARIN CADAVID, código: 2057081, hacemos constar que después de sustentada la Tesis Doctoral de manera escrita y en defensa oral el día 1 de Septiembre de 2008, se ha acordado su aprobación __X__, su aplazamiento_____.
En respaldo a este concepto firman los integrantes del **Jurado Evaluador de la Tesis Doctoral**

Dr. Gilmar Eugenio Marques
Universidad Federal de Sao Carlos
Calificador.

Dra. Angela Stella Camacho Beltrán
Universidad de los Andes
Calificador.

Dr. Valeriy Dougar Zhabon
Universidad Industrial de Santander
Calificador

Dr. Carlos Arturo Ramirez
Universidad Industrial de Santander
Calificador

Dr. ILIA MIKHAILOV
Director de la Tesis Doctoral y Calificador

Ciudad Universitaria, Carrera 27 - Calle 9
Apartado Aéreo 678 Tel(x): (+57) 6344000
Bucaramanga, Colombia www.uis.edu.co

NC 525348

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

ACTA DE RECOMENDACIÓN DEL TRABAJO DE TESIS DOCTORAL EN CIENCIAS NATURALES -FÍSICA

(Art.101. Acuerdo del Consejo Superior No. 074 de 2005, Reglamento General de Posgrado)

Bucaramanga, Lunes 01 Septiembre de 2008

Los suscritos **MIEMBROS DEL JURADO DEL TRABAJO DE INVESTIGACIÓN DE MAESTRÍA EN FÍSICA**, titulado:

"*Espectro Energético de los Sistemas de Pocas Partículas Fuertemente Confinadas en Heterojunturas Semiconductoras*"

Del estudiante de Doctorado en Ciencias Naturales (Física), JAIRO HUMBERTO MARIN CADAVID, código: 2057081.

Actuando en concordancia con el *Acuerdo del Consejo Superior Nº 074 de 2005, Reglamento General de Posgrado. Recomienda al Honorable Consejo de la Universidad Industrial de Santander, una vez verificado el cumplimiento de las características contempladas en el artículo 101, el otorgamiento de la distinción* ***MERITORIA____ LAUREADA _X___*** *al trabajo de Tesis Doctoral del estudiante Jairo Humberto Marín Cadavid.*

Dr. Gilmar Eugenio Marques
Universidad Federal de Sao Carlos
Calificador.

Dra. Ángela Stella Camacho Beltrán
Universidad de los Andes
Calificador.

Dr. Valeriy Dougar Zhabon
Universidad Industrial de Santander
Calificador

Dr. Carlos Arturo Ramírez
Universidad Industrial de Santander
Calificador

Dr. ILIA MIKHAILOV
Director de la Tesis Doctoral y Calificador

Ciudad Universitaria, Carrera 27 - Calle 9
Apartado Aéreo 678, PBX: (7) 6344000
Bucaramanga, Colombia, www.uis.edu.co

ENTREGA DE TRABAJOS DE GRADO, TRABAJOS DE INVESTIGACION O TESIS Y AUTORIZACIÓN DE SU USO A FAVOR DE LA UIS

Yo, JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID, mayor de edad, vecino de Bucaramanga, identificado con la Cédula de Ciudadanía No. 15 505 486 de COPACABANA, actuando en nombre propio, en mi calidad de autor de la tesis denominada(o):

ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS.,

hago entrega del ejemplar respectivo y de sus anexos de ser el caso, en formato digital o electrónico (CD o DVD) y autorizo a LA UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER, para que en los términos establecidos en la Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, decisión Andina 351 de 1993, Decreto 460 de 1995 y demás normas generales sobre la materia, utilice y use en todas sus formas, los derechos patrimoniales de reproducción, comunicación pública, transformación y distribución (alquiler, préstamo público e importación) que me corresponden como creador de la obra objeto del presente documento. PARÁGRAFO: La presente autorización se hace extensiva no sólo a las facultades y derechos de uso sobre la obra en formato o soporte material, sino también para formato virtual, electrónico, digital, óptico, uso en red, Internet, extranet, intranet, etc., y en general para cualquier formato conocido o por conocer.

EL AUTOR – ESTUDIANTE, manifiesta que la obra objeto de la presente autorización es original y la realizó sin violar o usurpar derechos de autor de terceros, por lo tanto la obra es de su exclusiva autoría y detenta la titularidad sobre la misma. PARÁGRAFO: En caso de presentarse cualquier reclamación o acción por parte de un tercero en cuanto a los derechos de autor sobre la obra en cuestión, EL AUTOR / ESTUDIANTE, asumirá toda la responsabilidad, y saldrá en defensa de los derechos aquí autorizados; para todos los efectos la Universidad actúa como un tercero de buena fe.

Para constancia se firma el presente documento en dos (02) ejemplares del mismo valor y tenor, en Bucaramanga, a los 24 días del mes de NOVIEMBRE de 2008.

EL AUTOR / ESTUDIANTE:

(Firma) Jairo Marín C.

Nombre JAIRO MARIN CADAVID CC 15505486

Dedico el fruto de este esfuerzo
a toda mi familia, y en
particular a mis padres,
Manuel Antonio y Maria
Teresa.

A Chochis, mi gran amor,
alegría en mi tristeza,
apoyo en las dificultades
y amor a cada instante.

AGRADECIMIENTOS

Al hacedor de todas las cosas, a ti Dios que me has sostenido a cada instante.

A la Universidad Nacional de Colombia por haberme otorgado la comisión para realizar estudios de doctorado en la UIS

A la UIS por su apoyo para asistir a los diferentes eventos científicos en los cuales pude participar como expositor.

Al Doctor Ilia Mikhailov, por haber aceptado ser el director de esta tesis, pero muy especialmente por su permanente capacidad para enseñar y formar, no solo desde el punto de vista académico si no también a nivel personal. Por eso te recordaré siempre como lo que eres, un gran maestro!

Al profesor Javier Betancur, por sus consejos, colaboración, pero sobre todo por su amistad.

Al profesor Francisco García que con su incorregible manera de ser me hacia gozar con las cosas que decía y hacía, pero sobretodo con las que le pasaban. También quiero agradecerle su permanente deseo de ayudar sin esperar nada a cambio.

A mis colegas de la Escuela de Física de la Universidad Nacional, sede Medellín, quienes siempre me han alentado en esta etapa de mi vida.

A mis compañeros de posgrado: William, Juan Carlos, Carlos Arnulfo, Javier del Cristo, Janeth, Ligia y Rosita, mi gratitud eterna por aguantar mi mal genio y mi acelere. Esto no fue tarea fácil, son todos unos héroes.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
DEPTO. DE BIBLIOTECA
BIBLIOTECA "EFE" GÓMEZ

CONTENIDO

Página

INTRODUCCION.....20

Sistemas de pocas partículas en bloquesemiconductores.....20

Complejos móviles o exexcitónicos.....21

Complejos inmóviles.....22

Sistemas de pocas partículas en heterojunturas semiconductoras...22

Puntos cuánticos autoensamblados.....24

Lista de publicaciones y de eventos.....32

1. **SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN EL LÍMITE ADIBÁTICO**.....35

1.1 Dos electrones en anillos cuánticos acoplados verticalmente.....39

1.2 Dos partículas en anillos cuánticos concéntricos.....43

1.3 Triones X^- y X^+ en estructuras unidimensionales axialmente simétricas.....46

1.4 Aproximación adiabática.....50

1.5 Efecto del tamaño sobre el espectro energético de dos electrones en anillo cuántico.....53

1.6 Efecto del tamaño sobre el espectro energético de un excitón en un punto cuántico.....62

2. **EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DEL CAMPO MAGANÉTICO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA D^0 Y DE UN IÓN D^- CONFINADOS EN SAQDs**.....73

2.1 Modelo.....75

2.2 Energía del estado base para el electrón libre.....78

2.3 Energía del estado base para una donadora neutra D^0 y donadora cargada negativamente D^-.....82

2.4 Espectro de energía del estado base para una donadora neutra D^0.82

2.5 Espectro de energía del estado base para una donadora cargada negativamente.....91

3. **DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN PUNTO CUÁNTICO CON EXCITÓN ATRAPADO**.....101

3.1 Análisis comparativo de la distribución de carga en discos y anillos cuánticos.....105

3.1.1 Modelo teórico.....106

3.1.2 Energía de enlace del estado base de un excitón atrapado en discos y anillos.....110

3.2 Efecto de la morfología sobre la distribución de carga de un excitón en SAQDs.....121

3.3 Distribución de carga en puntos cuánticos acoplados verticalmente con excitón.....132

CONCLUSIONES.....138

REFERENCIAS.....141

LISTA DE FIGURAS

Página

Figura 1. Representación esquemática de algunos complejos excitónicos en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.....21

Figura 2. Representación esquemática de algunos complejos inmóviles en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.....22

Figura 3. Parámetros de red y brechas de energía para algunos materiales binarios.....25

Figura 4. Representación esquemática del proceso de fabricación de SAQDs mediante la técnica de Stranski-Krastanov. En la figura se muestran las cuatro etapas principales: A) Elección de los materiales base con parámetros de red diferentes, B) deposición de un semiconductor sobre el otro hasta que se forme la capa húmeda, C) formación espontánea de los QDs a causa de los efectos de tensión-relajación y D) recubrimiento del QD con el semiconductor usado como sustrato.....26

Figura 5. Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes morfologías con simetría axial a) anillo, b) disco, c) lente, d) pirámide cónica y e) pirámide truncada.....22

Figura 6. Energías totales normalizadas $\widetilde{E}(M,m,s)$ de dos electrones en función del radio R de los anillos cuánticos verticalmente acoplados para tres diferentes valores de la razón β entre la distancia y el radio de los anillos: 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete.....41

Figura 7. Energías totales normalizadas $\widetilde{E}(M,m,s)$ de dos electrones en función de la distancia d entre los anillos acoplados verticalmente con dos radios diferentes $R=1a_0^*$ (curvas superiores) y $R=5a_0^*$ (curvas inferiores).....41

Figura 8. Energías normlizadas $\tilde{E}(M,m,s)$ en función del campo magnético γ para dos electrones verticalmente acoplados en anillos uni-dimensionales de radio $R=1a_0^*$ y separación $d=0.1a_0^*$.....42

Figura 9. Energías normalizadas $\tilde{E}(0,0,+)$ y $\tilde{E}(0,2,-)$ en función del radio, para dos electrones en dos anillos cuánticos coaxiales con diferentes razones β para los radios interior y exterior. Las líneas para $\beta=1$ corresponden a la referencia [74] y las líneas para $\beta=0.8$ y $\beta=0.95$ son los resultados obtenidos en esta tesis.....45

Figura 10. Dependencia con el radio R de los estados pares de energía más bajos del par electrón-hueco (lado izquierdo) y del par electrón-electrón (lado derecho) en anillos cuánticos coaxiales con razón $\beta=0.95$.....46

Figura 11. Representación esquemática de dos sistemas uni-dimensionales formados por dos electrones y un hueco (trión X^-) y dos huecos y un electrón (trión X^+).....47

Figura 12. Curvas de potencial $V_z(\tilde{z})$ para diferentes separaciones entre anillos.....48

Figura 13. Energía normalizada $\tilde{E}(M,m,s,n,p)$ en función del radio de los anillos.....49

Figura 14. Energía normalizada $\tilde{E}(M,m,s,n,p)$ en función de la separación entre anillos.....50

Figura 15. Geometría para dos electrones confinados en un QR donde el material A es $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ y el material B es $In_{0.55}Al_{0.45}As$. En la parte inferior se puede observar el perfil de la BC de estos dos materiales.....53

Figura 16. Niveles de energía para un electrón con número radial n = 1 y diferentes valores del número cuántico orbital.....55

Figura 17. Funciones de onda para los estados con número radial n = 1 y número cuántico orbital entre 1 y 8.....56

Figura 18. Energías normalizadas para algunos estados singletes de dos electrones en un QR en función del radio interior R_i, construidas con dos valores diferentes del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía E(M,m).....60

Figura 19. Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función del espesor del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y de la altura. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.....61

Figura 20. Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función de la altura del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y exterior. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.....62

Figura 21. Tipos de puntos cuánticos axialmente simétricos que contienen un par electrón-hueco.....64

Figura 22. Formas del potencial de confinamiento y las correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral de un electrón en un QD de forma piramidal, pirámide truncada y disco.....69

Figura 23. Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QD para tres valores diferentes de la razón R_i/R_e.....70

Figura 24. Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QP para tres valores diferentes de la altura: $d_0 = 2nm$, $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$.....71

Figura 25. Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el potencial de confinamiento V_0.....76

Figura 26. Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el nivel de energía para el estado base de un electrón libre en un segundo pozo.....77

Figura 27. Curvas del potencial confinamiento normalizado del movimiento electrónico bidimensional en puntos cuánticos de diferente morfología y dos alturas diferentes.....79

Figura 28. Distribución de carga electrónica en el plano $\rho - z$ para diferentes QDs obtenidos mediante el uso de la función de onda 2.10.....81

Figura 29. Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2,4,6\, y\, 8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....87

Figura 30. Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0,1,3,6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....88

Figura 31. Energía de enlace para el estado base de una D^0 en función del radio R_e de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.....90

Figura 32. Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2,4,6\, y\, 8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....91

Figura 33. Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0,1,3,6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....92

Figura 34. Energía de enlace para el estado base de una D^- en función del radio R_0 de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y

la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.....93

Figura 35. Razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ como función de la distancia de la donadora al eje para diferentes alturas del QD (a) y para diferentes intensidades del campo magnético.....94

Figura 36. Razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ como función del radio de la base de QDs en forma de disco, lente y pirámide cínica para dos alturas: $d_0 = 2nm$ (líneas continuas) y $d_0 = 4nm$ (líneas a trazos).....96

Figura 37. Curvas de nivel de la energía de correlación de una D^0 y un ión D^- en un plano a través de el eje de simetría de un QD en forma de lente con radio de la base 25 nm, altura de 4nm, y espesor de la capa húmeda de 2nm, para $\gamma = 0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma = 3$ (figura 2.13c y d).....97

Figura 38. Curvas de contorno de las energías ΔE requeridas para el intercambio de carga entre donadoras localizadas en un plano que pasa a través del eje de simetría, estando las donadoras sobre y fuera del eje del QD. Las curves se hacen sin (a) y con (b) campo magnético. Las partes sombreadas de las figuras indican las posiciones de las donadoras descentradas para las cuales el intercambio de carga con la donadora centrada es de carácter exotérmico.....99

Figura 39. Representación esquemática del estado base de energía, E_z, para una partícula confinada en un QD de altura d_0. El punto se fabrica a partir de dos materiales A=InAlAs y B=AlGaAs.....101

Figura 40. Representación esquemática en tres dimensiones para un anillo cuántico.....105

Figura 41. Comparación de los resultados de cálculo de la energía obtenidos en esta tesis para el estado base de un excitón en un disco de (a) $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ y (b, c) $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con los resultados teóricos obtenidos previamente (a, b) y experimentalmente (c). Los resultados de esta tesis (líneas sólidas) para la energía de enlace del estado base de un excitón como función del radio

del disco cuántico se compara con (a) los resultados variacionales (diferentes símbolos) y (b) tratamiento 3D (círculos abiertos). Los cálculos de esta tesis (líneas sólidas y a tramos) del desplazamiento diamagnético de la energía del excitón como función del campo magnético externo se compara con los resultados experimentales (cuadrados) en la figura (c).....111

Figura 42. Densidad de probabilidad de encontrar al electrón (línea continua) y al hueco (línea punteada) sobre el plano de simetría, en función de la distancia desde la posición de la particula al eje del QR, para dos radios exteriores diferentes: $0.7\,a_0^*$ (a) y $1.5\,a_0^*$ (b). En ambos casos el espesor del QR es de $0.5\,a_0^*$. Las líneas verticales representan las posiciones de las junturas del QR.....113

Figura 43. Curvas de nivel para la densidad radial de la distribución de carga en un plano que pasa a través del eje de simetría del disco cuántico (a, b) de radio 5nm y espesor de 5nm y también para un QR (c, d) con radio interior y exterior de 10 y 15nm, respectivamente y espesor de 5nm. Las diferentes nanoestructuras se toman sin WL (a y c) y con WL (b y d). Las líneas sólidas corresponden a la carga positiva y las líneas a tramos son los niveles con densidad de carga negativa.....115

Figura 44. Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en un disco de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ (línea a tramos) y en varios anillos de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con diferentes espesores de capa húmeda (líneas continuas).....117

Figura 45. Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en anillos de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con diferentes radios exteriores, 10, 15 y 25 nm. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del campo magnético. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en la figura principal.....119

Figura 46. Energía de enlace del excitón en un anillo de InAlAs-AlGaAs en función del radio exterior para un espesor fijo del anillo y para diferentes intensidades del campo magnético. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del radio exterior. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en el la figura principal.....121

Figura 47. Curvas de potencial efectivo para el movimiento del electrón en el plano en puntos cuánticos en forma de disco, lente y pirámide cónica.....124

Figura 48. Curvas de contorno de la distribución de carga radial inducida por excitón en un plano que pasa a través del eje de simetría de un QD de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ cuyas formas corresponden a un disco, una lente y una pirámide cónica. Para las tres morfologías se toma un radio de la base igual a 20nm y la altura máxima para los QDs de la izquierda sin capa húmeda es de 3nm. Para los QDs de la derecha la máxima altura por encima de la con húmeda es de 3nm y el espesor de esta capa es de 2nm. Las partes sombreadas de estas figuras indican las regiones que se cargan positivamente dentro del $In_{0.55}Al_{0.45}As$. Las líneas gruesas muestran los perfiles de los QDs.....127

Figura 49. Lo mismo que en la figura 3.10, sólo que aquí se tienen dos pirámides cónicas con alturas de 2nm y 5nm, respectivamente.....129

Figura 50. Energía de correlación del excitón como función del radio de la base para QDs con diferentes perfiles obtenidos con (3.14) (líneas continuas) y usando principio de incertidumbre (líneas a tramos).....130

Figura 51. Energía de correlación del excitón en función del radio del QD de forma piramidal para tres diferentes alturas.....131

Figura 52. Representación esquemática de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados verticalmente.....132

Figura 53. líneas de nivel para densidad de distribución de carga a lo largo de un plano (x-z) para un sistema formado por dos lentes acopladas verticalmente y dentro de las cuales se confina un excitón bajo la presencia de un campo magnético $\gamma = 0$ (figuras de la izquierda a,c) y $\gamma = 3$ (figuras de la derecha b,d).....133

Figura 54. Energía del estado base de un excitón en lentes cuánticas de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ acopladas verticalmente, como función del radio de la base.....136

Figura 55. Energía del estado base de un excitón en lentes cuánticas de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ acopladas verticalmente como función del campo magnético.....137

LISTA DE TABLAS

Página

Tabla 1. Funciones que definen los perfiles para cinco diferentes tipos de SAQDS.....28

Tabla 2. Comparación entre la energía exacta $\tilde{E}(M,m,s)$ dos electrones en anillos acoplados verticalmente tomando $\beta = 0.001$ con dos electrones en un sólo anillo según la Referencia [74].....38

Tabla 3. Notación usada para los diferentes niveles.....48

Tabla 4. Energías de enlace para impurezas D^0 y D^- y su razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ para sistemas en 3D, 2D y cuasi-unidimensionales (modeladas para donadoras en campos magnéticos muy intensos) en materiales en el bloque y los correspondientes valores máximos alcanzados por estas energías en pozos (QW), hilos (QWW) y puntos (SQD) cuánticos esféricos con barrera de potencial de $40\,R_y^*$.....95

ACRÓNIMOS Y SÍMBOLOS

Con el propósito de hacer más simple el proceso de escritura se han utilizado algunos acrónimos y símbolos los cuales se listan a continuación:

MBE	Técnica de haces moleculares
CVD	Deposición de vapor químico
QW	Pozo cuántico
QD	Punto cuántico
S-K	Stranski-Krastanov
WL	Capa húmeda
SAQD	Punto cuántico auto ensamblado
AA	Aproximación adiabática
SQD	Punto cuántico esférico
QP	Pirámide cuántica
QR	Anillo cuántico
QL	Lente cuántica
SPCF	Función de correlación espacial del par
K_B	Constante de Boltzman
K	Grado Kelvin
T	Temperatura
E_k	Energía cinética
U	Energía potencial
A	Potencial vectorial
B	Campo magnético
V_0	Potencial de confinamiento
V_ρ	Potencial de confinamiento radial
e	Electrón
h	Hueco
m_e^*	Masa efectiva del electrón
m_h^*	Masa efectiva del hueco
γ	Factor de Landau
ε	Constante dieléctrica
β	Razón entre dos longitudes
a_0^*	Radio de Bohr efectivo
R_y^*	Rydberg efectivo
D^0	Donadora neutra
D^-	Donadora cargada negativamente
X	Excitón
X^-	Trión negativo
X^+	Trión positivo
D	Dimensión

TITULO: ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS*.

AUTOR: JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID**.

PALABRAS CLAVES: Dos electrones, Excitón, Donadoras Neutras y Cargadas Negativamente, Puntos Cuánticos Autoensamblados, Espectro Energético, Aproximación Adiabática, Método de Dimensión Fractal.

RESÚMEN

Se estudia el espectro energético de los sistemas formados por electrones y huecos: par electrón-electrón, electrón-hueco, trión X^- y trión X^+, así como donadoras neutras D^0 y cargadas negativamente D^-. El análisis se realiza asumiendo particulas fuertemente confinadas en puntos cuánticos auto-ensamblados de $In_yAl_{1-y}As/Al_xGa_{1-x}As$ con simetría axial: anillos, discos, lentes, pirámides cónicas y truncadas.

Inicialmente se analizan modelos unidimensionales ideales para el electrón-electrón, excitón, triones X^- y X^+, a fin de obtener caracteristicas generales de sistemas de pocas particulas y valores límites a los cuales deben tender las energías de sistemas más reales. Los resultados demuestran la existencia de oscilaciones Aharonov-Bohm y de transiciones de Wigner.

Usando la aproximación adiabática y del método de dimensión fractal, se transforman los problemas multidimensionales en problemas de una y dos dimensiones. Estos métodos permiten analizar la incidencia que tienen sobre el espectro de energía factores tales como: la morfología y el tamaño de los puntos cuánticos, posición de las impurezas dentro de los puntos y efecto del campo magnético.

Los resultados demuestran que aun cuando la altura de los puntos sea significativamente menor que la dimensión lateral, no es posible considerar los puntos como películas bi-dimensionales, ya que el espectro de energía depende fuertemente de la altura y la morfología de los puntos, así como del espesor de la capa húmeda.

Con relación a la influencia del campo magnético, se demuestra que éste aumenta la probabilidad de formación de impurezas D^-, mediante la transferencia de un electrón desde una donadora neutra D^0 localizada en la región periférica hacia otra cercana al eje.

---

* Tesis de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Ilia D. Mikhailov (Director)

TITLE: ENERGY SPECTRUM OF FEW-PARTICLE SYSTEMS STRONGLY CONFINED IN SEMICONDUCTOR HETEJUNCTIONS*.

AUTHOR: JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID**.

KEY WORDS: Two-electrons, Exciton, Neutral, Negatively Charged Donors, Self-assembled Quantum Dots, Energy Spectrum, Adiabatic Aproximation, Fractal Dimension Method.

RESUMÉ

The energy spectrum of systems formed by electrons and holes: electron-electron, electron-hole, trion X^- and trion X^+ as well as neutral donor D^0 and negative charged donor D^- are studied. The analysis is realized by assuming that the particles are strongly confined inside the axially symmetric $In_yAl_{1-y}As/Al_xGa_{1-x}As$ self-assembled quantum dots with different morphologies: rings, disks, lenses, conical and truncated pyramids.

Initially, ideal exactly solvable models for multiple-particle systems such as: two-electron, exciton, trions X^- and X^+ in one-dimensional spaces are analyzed in order to obtain general features of few-particle systems and energy limit values at which have to tend the energy of most actual systems. The results show the existence of Aharonov-Bohm oscillations and Wigner type transitions.

The multiple dimensional problems are transformed in one-and-two dimensional problems by means of the adiabatic approximation and the fractal dimension method. These methods allow study of the influence on the energy spectrum of the morphology and size quantum dots, impurity position inside the dots, and magnetic field.

Despite of the quantum dot height is significantly less than the lateral dimension; it is not possible to consider the dots as two-dimensional films since the energy spectrum is strongly dependent on the height and morphology of the dots as well as the thickness of the wetting layer

D^- impurities formation are increased by means of the magnetic field as a consequence of electron transfer from the peripherical donor toward another D^0 closed to the axis.

Finally, it is show that the difference between the electron and hole effective masses is responsible of differential tunneling to the barrier region and the formation of the dipolar and cuadrupolar momenta.

---

* Thesis project

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Ilia D. Mikhailov (Director)

Los sistemas de pocas partículas conforman una parte fundamental del mundo de la física. Su estudio es de mucho interés en el área de semiconductores, ya que la presencia de estos sistemas permiten ejercer un control sobre las propiedades ópticas, tanto en el régimen lineal como no lineal, lo cual constituye la base para la fabricación de diferentes dispositivos opto electrónicos [1].

Una descripción exacta de estos sistemas, requiere incluir los potenciales de interacción entre partículas, haciendo prácticamente inviable una solución directa de la ecuación de Schrödinger. Por esta razón, es necesario acudir a métodos aproximados entre los que se incluyen, el variacional [2-7], diagonalización matricial [8-9], Hartree-Fock [10-12], teoría de funcionales de densidad [13-14], configuración de interacción [15-16] y Monte Carlo Cuántico [17-18].

El estudio teórico de los sistemas de pocas partículas permite clarificar de manera más sencilla el papel que juegan los efectos de correlación y su real incidencia en el espectro energético y en las propiedades de transporte eléctrico. Los métodos elaborados para el estudio de los sistemas de pocas partículas, son importantes debido a que ponen al descubierto ciertas propiedades generales que también son características de los sistemas de muchos cuerpos. Además, estos métodos se pueden utilizar para determinar la validez y el alcance de las técnicas de Funciones de Green [19-20] y Diagramas de Feynman [21-24], las cuales se usan para estudiar las propiedades de los sistemas de muchas partículas.

El interés por los problemas de pocas partículas, recientemente obtuvo un nuevo impulso con el advenimiento de las nanoestructuras semiconductoras, en las cuales los portadores de carga son confinados dentro una región de tamaño comparable con longitudes de ondas de De Broglie. En estas estructuras los sistemas de pocas partículas adquieren unas nuevas propiedades, las cuales pueden ser modificadas fácilmente al variar la geometría o la composición de los materiales. Por esta razón, los métodos teóricos que se utilizan para analizar propiedades de sistemas de pocas partículas en bloque y en nanoestructuras semiconductoras, en general, son diferentes.

SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN BLOQUE SEMICONDUCTORES

El estudio de los sistemas de pocas partículas en semiconductores en el bloque, por ejemplo Ge, GaAs, CdS, etc, se inicia a partir de 1958 cuando Murray A. Lampert [25] estableció las bases teóricas para que se formaran

complejos o agregados multi-particulares con diferentes tipos de portadores de carga. Los resultados mostraron que estos sistemas debían ser muy débilmente ligados e inestables y con tiempos de vida muy cortos $\left(\tau \approx 10^{-9} s\right)$, lo que sólo permitiría su observación a temperaturas por debajo de los 5°K, pues a temperaturas mayores la energía térmica $K_B T$ supera la energía de ionización del sistema. Además se demostró que la estabilidad de los complejos depende de la razón entre las masas efectivas del electrón y del hueco $\left(m_e^* / m_h^*\right)$, siendo más estable cuanto menor sea esta razón.

Según Lampert, los complejos multiparticulares se clasifican en dos grupos: móviles e inmóviles.

COMPLEJOS MÓVILES O EXCITÓNICOS. Estos sistemas están compuestos únicamente por electrones (e) de la banda de conducción y huecos (h) de la banda de valencia. La extrema pequeñez de las masas efectivas de estas partículas cuyos valores son como mínimo de un orden de magnitud menor que la masa del electrón libre, les garantiza una gran movilidad para desplazarse por todo el material.

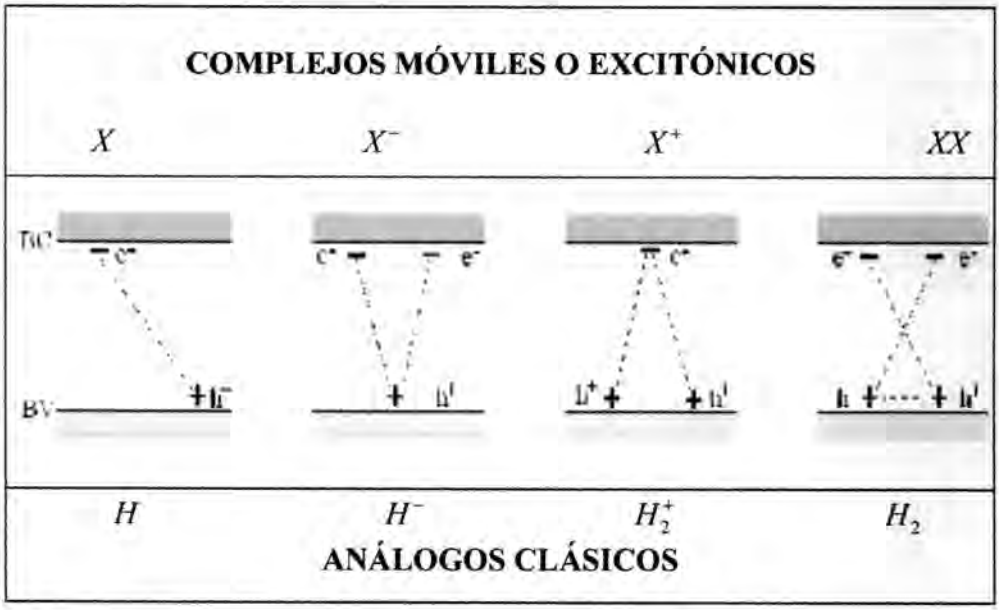

Figura I.1 Representación esquemática de algunos complejos excitónicos en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.

El complejo más simple de este tipo es el excitón (X) el cual está formado por un par e-h. Otros sistemas más complicados se forman cuando un excitón es capaz de ligar o enlazar un electrón o un hueco extra, formándose excitones cargados o ionizados que se conocen con el nombre de triones X^-(eeh) y X^+(ehh), respectivamente. En caso de que la densidad de excitones sea muy grande se puede aumentar la interacción entre ellos y dar

lugar a la formación de sistemas más complicados como la molécula excitónica o bi- excitón (XX). En la figura I.1 se ha hecho un diagrama que muestra algunos de los complejos móviles que se acaban de describir.

COMPLEJOS INMÓVILES. Estos sistemas están formados por centros localizados en posiciones fijas de la red, los cuales surgen debido a impurezas, tanto donadoras (D) como aceptadoras (A). Como consecuencia de la interacción Coulombiana, estos centros localizados pueden llegar a atrapar electrones, huecos o excitones. Un ejemplo de este tipo de complejos es el ión D^- [26] que es análogo al ión de hidrógeno H^- y el cual se forma cuando una donadora neutra D^0 (ión positivo fijo en la red más un electrón) atrapa un segundo electrón. Otros sistemas se forman a partir de dos centros iónicos positivos que ligan uno o dos electrones formándose así los complejos moleculares conocidos como D_2^+ y D_2^0 [27], respectivamente, cuyos análogos clásicos son las moléculas de hidrógeno H_2^+ y H_2^0. Finalmente, las donadoras o las aceptadoras podrían capturar un excitón y así formar complejos del tipo D^0X y A^0X, respectivamente. En la figura I.2 se ha hecho una representación esquemática de varios complejos inmóviles formados por donadoras y aceptadoras.

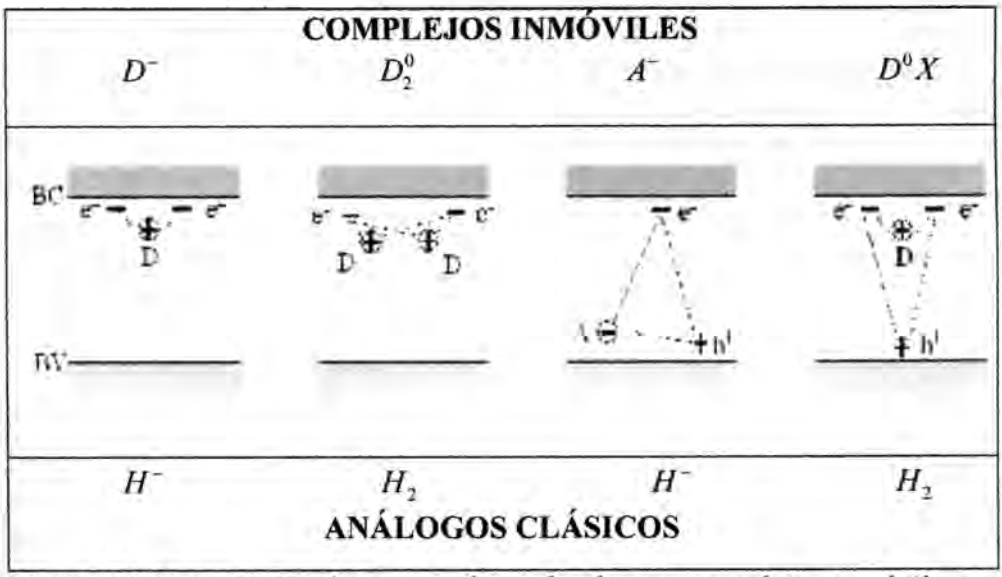

Figura I.2 Representación esquemática de algunos complejos inmóviles en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.

SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

En la década de los 60, Haynes [28] logró demostrar la existencia de algunos de éstos agregados multiparticulares en materiales de silicio dopado

con elementos del grupo III y V de la tabla periódica. A partir de estas investigaciones se pudo comprobar que la observación de estos complejos es una labor muy complicada debido a que ellos son meta estables a temperaturas por encima de los 5°K. Esta dificultad se pudo superar años más tarde, gracias a que las nuevas técnicas de crecimiento cristalino, tales como la de haces moleculares (MBE) [29-30] y deposición de vapor químico (CVD)) [31], permitieron fabricar pozos cuánticos(QW) de GaAs-GaAlAs. Dentro de estas heteroestructuras se pueden confinar diferentes tipos de complejos, haciendo que su energía de enlace aumente significativamente [32] a consecuencia del incremento en la interacción Coulombiana por efecto del mayor acercamiento entre las partículas. Debido al confinamiento espacial en todas las direcciones en un QD, las partículas quedan más confinadas en estos sistemas que en otros tipos de hetroestrucuras, lo que conlleva a tener complejos más estables permitiendo su observación temperatura ambiente [33].

Los puntos cuánticos también denominados átomos artificiales, debido a que las partículas confinadas en ellos poseen un espectro de energía discreto, se han convertido en verdaderos mini-laboratorios, en los que gracias a la posibilidad de variar el confinamiento de las partículas, se puede esclarecer las características específicas de efectos de correlación e-e y e-h. Entre la gran variedad de temas interesantes que han surgido en el proceso de estudio de las propiedades de los QDs, uno de los que más ha cautivado la atención de la comunidad científica, está relacionado con el hecho de que al variar el tamaño de QD, se produzcan cambios abruptos en las características espectrales de los sistemas de pocas partículas, parecidos a los que se observan en las transiciones de fase en sistemas de muchos cuerpos. En el año de 1934, E. Wigner [34] mostró que en un sistema homogéneo de muchos electrones, al variar la concentración debe observarse una transición de fase debido a que la energía cinética promedio es inversamente proporcional al cuadrado de la longitud característica del sistema r_s ($\langle E_k \rangle \propto 1/r_s^2$, siendo r_s la celda de Wigner-Seitz), mientras la energía promedio de interacción Coulombiana entre partículas es inversamente proporcional a r_s ($\langle U \rangle \propto 1/r_s$). Esto resulta en que el estado base del sistema debe tener un carácter completamente diferente en los límites de densidades bajas (r_s grande) y altas (r_s pequeña) como consecuencia de la fuerte competencia entre los términos de energía cinética y potencial. En el límite de alta densidad electrónica, las partículas tienen gran libertad para moverse debido al predominio de la energía cinética sobre la potencial, de tal manera que al estar las partículas débilmente correlacionadas adquieren una configuración similar a la de un gas de electrones. De otro lado, cuando la densidad electrónica disminuye, ambas energías decrecen, pero la energía potencial se impone sobre la energía cinética, haciendo que los efectos de correlación comiencen a dominar fuertemente la estructura electrónica. Para densidades suficientemente

bajas, caracterizadas por un cierto valor crítico de r_s, la interacción Coulombiana hace que el estado base de los electrones se cambie bruscamente, transformándose de un estado gaseoso a una estructura regular conocida como cristal de Wigner [34].

El aspecto novedoso relacionado con los QDs consiste en la posibilidad de generar transiciones similares en sistemas de pocas partículas desde un estado con un movimiento caótico a otro congelado. Recientemente Bryant [35] demostró que los efectos de correlación entre partículas confinadas en QDs, se pueden modular a través del control del potencial de confinamiento, de tal manera que los aportes realizados por las energías cinética y potencial se pueden variar. Dependiendo de la interrelación entre los aportes de estas energías, las partículas en el estado base pueden formar estructuras moleculares ordenadas, similares a los cristales de Wigner con configuraciones poligonales regulares [36]. La aplicación de fuertes campos magnéticos, perpendiculares a la dirección de crecimiento de los QDs, puede favorecer notoriamente la formación de estados localizados, pues en este caso el campo empuja a los electrones hacia el centro del QD, aumentando aún más su confinamiento, y como consecuencia se incrementa el aporte de la energía potencial. Recientemente se demostró que los campos magnéticos externos posibilitan además la formación de estados de fase conocidas como estructura de vórtices magnéticos [37], los cuales son fases intermedias entre las configuraciones desordenadas de tipo gaseoso y las que se asemejan al cristal de Wigner.

Dado que el interés principal de esta tesis gira en torno del análisis de los sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en puntos cuánticos auto ensamblados (SAQDs) [38-39], consideramos conveniente hacer una descripción sucinta de las principales características de los SAQDs, con el propósito de garantizar un mejor entendimiento de los modelos propuestos y de los resultados obtenidos en esta tesis.

PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS

El progreso alcanzado durante los últimos años en las técnicas de crecimiento cristalino, ha permitido la fabricación de heteroestructuras semiconductoras de tamaño nanométrico conocidos como puntos cuánticos, los cuales se forman a partir de dos semiconductores base que pueden ser binarios o ternarios. Los materiales que se utilicen para este propósito deben satisfacer ciertas condiciones dependiendo del método que se utilice. Por ejemplo, la técnica de crecimiento MBE demanda que los semiconductores tengan parámetros de red muy similares y brechas de energía diferentes, mientras que la técnica de Stranski-Krastanov [38-39], usada para la fabricación de SAQDs, demanda que los semiconductores tengan brechas de energía y parámetros de red diferentes. Con la primera

condición se busca garantizar que el material resultante posea propiedades electrónicas novedosas, mientras que con la segunda se explotan las características naturales de los materiales para generar esfuerzos interfaciales, a fin de que se formen de manera espontánea una serie de islotes con diferentes morfologías y tamaños bien definidos. Para determinar que materiales satisfacen estas condiciones, en la figura I.3 se muestran los valores de los parámetros de red de algunos materiales binarios y sus respectivas brechas de energía.

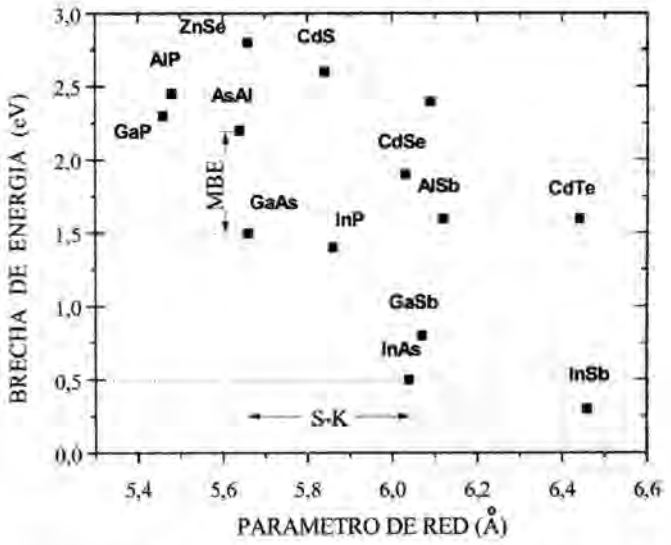

Figura I.3 Parámetros de red y brechas de energía para algunos materiales binarios.

Los materiales más comúnmente usados para fabricar QDs mediante MBE son el GaAs y AlAs por poseer parámetros de red muy similares, pero estos materiales no sirven para fabricar SAQDs mediante S-K. En este caso se utilizan principalmente semiconductores de InAs y GaAs, cuyos parámetros de red difieren en un 7.2%, mientras que las brechas de energía permiten tener potenciales de confinamiento para electrones y huecos del orden de $200\,meV$. En los QDs formados a partir de GaSb-GaAs [40] y CdSe-InP [41] los potenciales de confinamiento para estas partículas es significativamente menor. En general, estos potenciales son susceptibles de modelar o de definir con antelación y para ello basta con reemplazar un material por otro en proporciones estequiométricas adecuadas, pasando así de un semiconductor binario a otro ternario. El sistema formado por $In_{1-x}Al_xAs$-$Ga_{1-y}Al_yAs$ [42] es el ejemplo más representativo y son justamente con estos materiales con que se fabrican los SAQDs que son materia de investigación en esta tesis.

El proceso para fabricar un SAQDs mediante la técnica de S-K, consiste en formar un sustrato con el semiconductor de parámetro de red menor y sobre

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLIN
DEPTO. DE BIBLIOTECA

este material se hace una deposición epitaxial con átomos del segundo semiconductor. Este proceso se realiza hasta que se forme una franja, conocida como capa húmeda (WL), en la que prevalece un ordenamiento atómico de corto alcance. Una vez la WL alcanza un espesor crítico y dependiendo de la energía superficial del material depositado, las monocapas que se depositen a continuación estarán sometidas a un campo de esfuerzos que conllevan a la ruptura del ordenamiento atómico. Si se prosigue el proceso de deposición, los átomos que lleguen a continuación se organizarán de manera espontánea, formándose pequeños islotes que poseen formas regulares y tamaños bien definidos. El islote será catalogado como QD cuando sus dimensiones sean del orden de las longitudes de onda de las partículas que en ellos se confinen. Una vez se forme el QD se procede a recubrirlo con el mismo material semiconductor que se usó como sustrato. En la figura I.4 se ha hecho una representación esquemática del proceso para fabricar SAQDs usando el método de S-K.

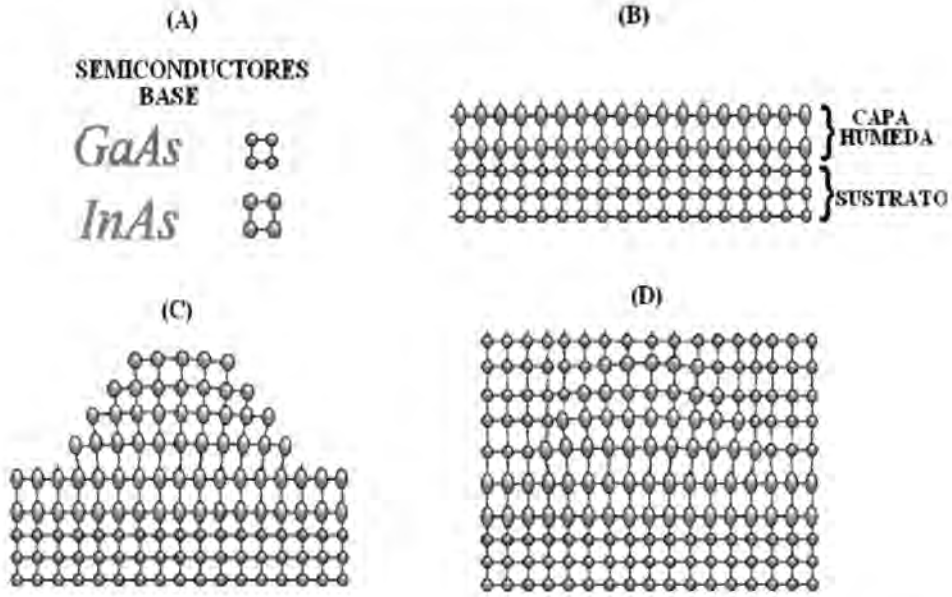

Figura I.4 Representación esquemática del proceso de fabricación de SAQDs mediante la técnica de Stranski-Krastanov. En la figura se muestran las cuatro etapas principales: A) Elección de los materiales base con parámetros de red diferentes, B) deposición de un semiconductor sobre el otro hasta que se forme la capa húmeda, C) formación espontánea de los QDs a causa de los efectos de tensión-relajación y D) recubrimiento del QD con el semiconductor usado como sustrato

El tamaño y forma de los QDs depende principalmente de factores tales como: intensidad de la tensión entre las capas, discontinuidad en las constantes de red, temperatura y velocidad de crecimiento. Bajo ciertas condiciones es posible lograr un control preciso de la geometría de los QDs

y de su posición, al punto tal que ahora se pueden fabricar redes periódicas con puntos cuánticos [43]. Usando técnicas estructurales como: Microscopia de fuerza atómica [44], barrido y tunelamiento [45], reflexión electrónica a altas energías [46] y microscopia electrónica de transmisión [47], se ha podido establecer que los SAQDs tienen diferentes morfologías [48-50], tales como: pirámide cónica, disco, lente, anillo y volcán. Mediante la técnica de S-K también se ha logrado fabricar sistemas formados por dos puntos casi idénticos. Las configuraciones más comunes corresponden al caso de puntos apilados uno encima del otro (acoplamiento vertical) [38] o uno frente al otro (acoplamiento horizontal o lateral) [38]. La importancia de estos sistemas radica en que con ellos se pueden simular moléculas artificiales, donde el complejo molecular más ampliamente estudiado ha sido la molécula de hidrógeno H_2, la cual se obtiene confinando en cada punto acoplado verticalmente un único electrón [51].

Con el propósito de establecer el efecto de la morfología y del tamaño de los SAQDs sobre el espectro energético de los sistemas de pocas partículas, guiados por los resultados estructurales y por razones de simplicidad matemática, se va asumir que los SAQDs poseen simetría axial, cuyas representaciones esquemáticas se muestran en la figura I.5.

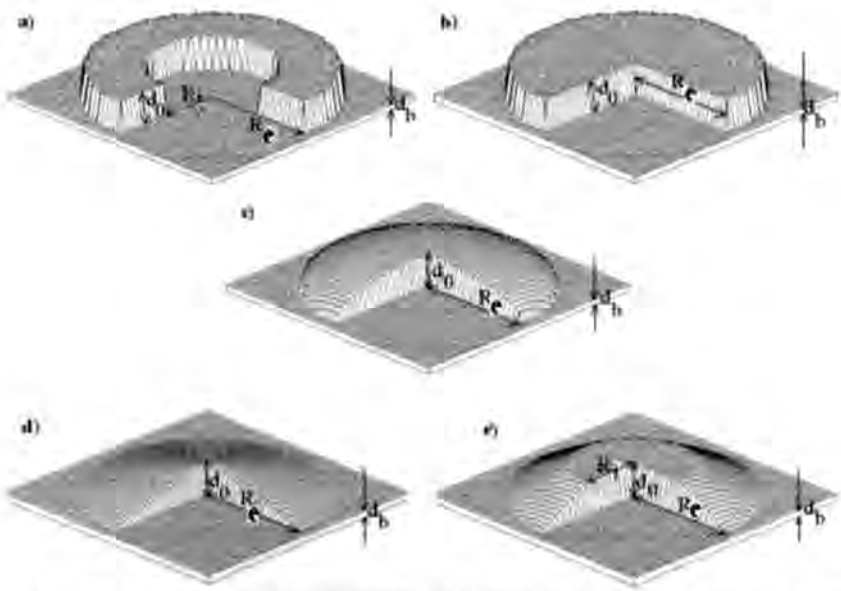

Figura I.5 Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes morfologías con simetría axial a) anillo, b) disco, c) lente, d) pirámide cónica y e) pirámide truncada.

Los factores geométricos que caracterizan estos QD son: El radio de la base R_e, el espesor de la WL d_h y la máxima altura del QD por encima de la WL

d_0. Para definir el radio interior, en el caso del anillo o el radio de la base superior, en el caso de la pirámide truncada, se usa el radio R_i.

Como el espesor de los puntos es variable, el perfil de las diferentes morfologías que poseen los SAQDs (incluyendo WL) se debe describir mediante una función $d(\rho)$, la cual toma en cuenta la variación de la altura del punto cuántico con la distancia radial ρ al eje de simetría z. Estas funciones son seccionalmente continuas y en esta tesis se toman lineales para todas las estructuras, excepto en el caso de la lente que se toma de forma elíptica. Las expresiones matemáticas para estas funciones se presentan en la tabla I.1

MODELO	FUNCIÓN ESPESOR $d(\rho)$
ANILLO	$d(\rho)=\begin{cases} d_0+d_b, & R_i<\rho<R_e \\ d_b, & \rho<R_i\ U\ \rho>R_e \end{cases}$
DISCO	$d(\rho)=\begin{cases} d_0+d_b, & \rho<R_e \\ d_b & \rho>R_e \end{cases}$
LENTE	$d(\rho)=\begin{cases} d_b+d_0\sqrt{1-(\rho/R_e)^2}, & \rho<R_e \\ d_b, & \rho>R_e \end{cases}$
PIRÁMIDE CÓNICA	$d(\rho)=\begin{cases} (1-\rho/R_e)d_0+d_b, & \rho<R_e \\ d_b, & \rho>R_e \end{cases}$
PIRÁMIDE TRUNCADA	$\begin{cases} d_0+d_b, & \rho<R_i \\ \left[(R_e-\rho)/(R_e-R_i)\right]d_0+d_b, & R_i<\rho<R_e \\ d_b, & \rho>R_e \end{cases}$

Tabla I.1 Funciones que definen los perfiles para cinco diferentes tipos de SAQDS

El potencial de confinamiento, debido a la discontinuidad en el perfil de la banda de conducción de los materiales que conforman el QD, está dado por la siguiente función continua a tramos:

$$V_i(\rho,z)=\begin{cases} 0, & si\ 0<z<d(\rho) \\ V_{0i}, & si\ z<0\ U\ z>d(\rho) \end{cases}, i=e,h \qquad (I.1)$$

Aquí y en adelante el índice e corresponde al electrón y el índice h al hueco. Para los SAQDs fabricados a partir de los semiconductores ternarios de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ y $Ga_{0.65}Al_{0.35}As$, el valor de V_{0e} es de aproximadamente $40R_y^*$ y $V_{0h} \approx 27R_y^*$.

Mediante las técnicas estructurales mencionadas anteriormente, también se ha logrado determinar que los SAQDs, debido a su crecimiento epitaxial, se caracterizan por tener una geometría casi plana. Esta afirmación está respaldada por las dimensiones que se han encontrado experimentalmente para estos QDs [50], donde el espesor de la WL es alrededor de 2nm, las alturas máximas del punto por encima de la WL oscilan entre 2 y 4nm, mientras que los tamaños laterales son mucho más grandes y alcanzan los 70nm. Esto significa que la partícula se mueve más rápido en la dirección perpendicular a la base, ya que la función de onda de la partícula dentro del QD en esta dirección llega a ser menos extendida. Debido a esta fuerte restricción en el movimiento de las partículas en dirección vertical, varios autores [52-55] han considerado natural modelar los SAQDs como si fueran películas bidimensionales, cuyo potencial de confinamiento en dirección radial varía en forma parabólica [56-62]. La ventaja de usar el potencial armónico consiste en la simplicidad matemática que ofrece este modelo para analizar sistemas de dos partículas [6-7, 62], ya que en este caso se pueden desacoplar las coordenadas de centro de masa y relativas. Sin embargo, la aplicabilidad de este modelo sólo está garantizado cuando el espaciamiento entre los niveles electrónicos sea mucho menor que la discontinuidad de la banda de conducción en las junturas. A juicio de varios autores, los potenciales rectangular [5,63] y de carga imagen [64-65] son mucho más realistas que el potencial armónico. Además, existen potenciales todavía mucho más versátiles que asumen una forma suave en las junturas. Ejemplos de este tipo de potenciales son el de Wood-Saxon [66] y exponentes de potencias [67], los cuales se usaron para tener en cuenta el desplazamiento de la banda de conducción en una determinada dirección o el carácter no tan abrupto de las interfaces debido a la posible difusión de materiales entre ellas [66].

Las condiciones impuestas por el potencial de confinamiento real, hacen que la descripción teórica de los sistemas de pocas partículas confinadas en QDs resulte ser una tarea realmente difícil, debido a que la ecuación de autovalores debe resolverse en un espacio no homogéneo y anisotrópico. Para resolver este problema se han utilizado diferentes métodos aproximados, siendo los más ampliamente usados el variacional [5-7], el de diagonalización matricial [8,9], expansión por series [68-69], teoría de perturbaciones [70], elementos y diferencias finitas [57,71], soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales [66]. Todas estas técnicas resultan ser bastante complicadas a la hora de analizar el espectro de energía de los

diferentes sistemas, debido a que el esfuerzo computacional crece exponencialmente con el número de partículas.

Adicionalmente existe otra complicación asociada con la suposición de que los SAQDs se pueden modelar como sistemas bidimensionales. En nuestro concepto, esta suposición entraña una contradicción interna, ya que un espesor muy pequeño está asociado con un pozo de potencial muy angosto, lo que obligatoriamente dará lugar a un fuerte desbordamiento de la función de onda de los portadores de carga en dirección transversal. De esta manera, si el espesor es demasiado pequeño las partículas se desbordan fuera del espesor y por lo tanto, no pueden considerarse como bidimensionales, y si el espesor no es muy pequeño, el movimiento de las partículas tampoco puede considerarse como bidimensional. Además, precisamente la variación de la magnitud del espesor, a lo largo de la base, define la distribución de las probabilidades de localización de portadores de carga en SAQDs y los perfiles de potenciales de confinamiento lateral. Por esta razón los modelos bidimensionales desprecian una información muy importante relacionada con los efectos de morfología de SAQDs.

En esta tesis se mostrará que una de las maneras de superar estas dificultades es sacando provecho de las características experimentales de los SAQDs que garantizan espesores mucho menores que sus tamaños laterales. Esta condición permite utilizar la aproximación adiabática (AA) [58,62-63,72-77], lo que tendrá un doble beneficio. Por un lado, la AA permite separar los problemas tridimensionales en otros similares en espacios de una y dos dimensiones con Hamiltonianos renormalizados, los cuales se pueden resolver usando las técnicas de dimensión fractal [78-79] y de barrido trigonométrico [80]. Estas técnicas han sido desarrolladas anteriormente por el grupo de física teórica en materia condensada de la Universidad Industrial de Santander (UIS). Por el otro lado, AA permite tener en cuenta la manera como influyen el tamaño y la morfología de los SAQDs sobre el espectro de energía de los sistema de pocas partículas, los cuales han sido ignorados en muchas investigaciones [51-55].

Un ejemplo ilustrativo de la aplicación exitosa de la AA se presenta en el trabajo de Korkusinski y Hawrylak [81]. Ellos consideraron un problema uniparticular en puntos cuánticos acoplados verticalmente, con el propósito de estudiar la influencia sobre el espectro energético de los factores geométricos de la estructura, de los esfuerzos que se generan entre las capas y del campo magnético. Los resultados conseguidos mediante la AA, están en muy buen acuerdo con los obtenidos por el método de diagonalización exacta [82]. Partoens [76] y Peeters [62] también usaron la AA para estudiar el caso de dos electrones en un solo disco y en dos discos acoplados verticalmente con barrera infinita de potencial entre las capas. Los resultados obtenidos permiten establecer propiedades muy interesantes, tales como la existencia de oscilaciones entre estados con espín singlete y

triplete, la inversión en el ordenamiento de los niveles de energía bajo acción del campo magnético, y la existencia de transiciones de fase de segundo orden.

En general, la AA puede utilizarse como técnica principal para analizar las propiedades de átomos y moléculas artificiales fabricados a partir de SAQDs. Cabe señalar que si bien es posible obtener átomos y moléculas artificiales mediante SAQDs, estos tienen características diferentes de sus análogos de la física atómica y nuclear. En el caso de SAQDs, los electrones están confinados en un volumen mucho mayor que el ocupado por los electrones en un átomo real, lo que conlleva a tener distancias entre partículas muy grandes, haciendo que los efectos de correlación sean predominantes. Otra diferencia entre átomos reales y SAQDs está en la forma de potencial. En los átomos reales la fuerte interacción de Coulomb limita el movimiento electrónico a un pequeño volumen en la vecindad del núcleo, mientras que en los SAQDs el potencial no es central si no que corresponde a una trampa definida por las dimensiones físicas de los semiconductores base y por la discontinuidad de los perfiles de las bandas de conducción y de valencia. La existencia de estos semiconductores base es responsable de la aparición de nuevos efectos relacionados con la anisotropía del medio. Estas diferencias entre átomos naturales y artificiales hacen que los modelos desarrollados en la física atómica y molecular para estudiar el espectro energético de los sistemas de pocas partículas, no sean siempre aplicables al estudio de los SAQDs. Si a lo anterior se le suma el hecho de que el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en QDs, es muy sensible a la variación de la morfología y el tamaño del QD, así como a la presencia de campos externos, entonces se hace absolutamente indispensable desarrollar nuevos métodos teóricos que sean confiables y versátiles, a fin de tener en cuenta los rasgos específicos que caracterizan los SAQDs. Esta es justamente una de las razones que motivaron la realización de esta tesis, pues si bien existe un gran volumen de trabajos teóricos y experimentales sobre SAQDs, son realmente muy pocos los que analizan la manera como influyen el tamaño del espesor y la morfología sobre el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en QDs.

En esta tesis se analiza el espectro de energía de los sistemas de pocas partículas formados por: dos electrones, un excitón, triones del tipo X^+ y X^-, donadoras neutras D^0 y cargadas negativamente D^-. El estudio se llevará a cabo usando la aproximación adiabática en el marco del método de dimensión fractal y las ecuaciones fundamentales se resuelven usando la técnica de barrido trigonométrico. Todos los programas computacionales requeridos para analizar el espectro energético y las distribuciones de carga de los diferentes sistemas de pocas partículas, se han realizado en lenguaje Fortran.

Este trabajo de tesis está formado por tres capítulos cuyos contenidos se describen a continuación. El primero consta de dos partes fundamentales. En la primera mitad se estudian modelos de pocas partículas exactamente solubles en espacios unidimensionales. En la segunda mitad se hace una descripción de la forma como se ha implementado el modelo de aproximación adiabática, de tal manera que permita separar los movimientos rápido y lento de las partículas dentro de los SAQDs. También se hace una descripción del modelo de dimensión fractal y se calcula el espectro de energía de dos electrones y un excitón en el límite adiabático $\left(m_e^*/m_h^* \to 0\right)$. Los resultados se obtienen considerando la influencia del tamaño y la morfología de los SAQDs.

En el segundo capítulo se calcula la energía de enlace para las impurezas neutras D^0 y cargadas negativamente D^- confinadas en SAQDs. El estudio se efectúa tomando funciones de prueba triparamétrica del tipo de Hylleras [83]. Los resultados permiten determinar el papel que juega el campo magnético en la formación del ión D^- y la incidencia que tienen la posición de la impureza, el tamaño y la forma del QD sobre el espectro de energía.

En el último capítulo se calcula la distribución de carga para un excitón confinado tanto en sólo QD como en dos QDs acoplados verticalmente. Se demuestra que la diferencia de masas efectivas de electrones y huecos dan lugar a la formación de momentos cuadrupolares, cuyos valores son mayores en QDs con geometrías más puntiagudas. Adicionalmente, se demuestra que la capa húmeda tiene una gran incidencia tanto en el espectro de energía del excitón como en la distribución de carga y la magnitud del momento cuadrupolar.

LISTA DE PUBLICACIONES Y DE EVENTOS

Esta tesis es el producto del esfuerzo de un trabajo investigativo de más de casi cuatro años y cuyos principales resultados han sido presentados en varias revistas y congresos de carácter nacional e internacional. La lista de los trabajos publicados que a continuación se describen, está hecha en orden cronológico, pero este orden no es el mismo en que se han expuesto los temas desarrollados en cada uno de los capítulos.

1. F. García, F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, W. Gutiérrez, R. Robayo, and **J. H. Marín**, *Negatively Charged Donor and Trion in Quantum Disks*, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3626(2005) [84]
2. F. García, **J. H. Marín**, H. Paredes-Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, *Low-Lying States of Two-Electron Quasi-One-Dimensional Ring*, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3630(2005)[85]

3. I. D. Mikhailov, **J. H. Marín,** and F. García, *Off-Axis Donors in Quasi-Two-Dimensional Quantum Dots with Cylindrical Symmetry*, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 1636(2005) [86]
4. **J. H. Marín**, F. J. Betancur, and I. D. Mikhailov, *Effect of Magnetic Field on the Formation of D^- ions in Lens-Shape Quantum Dots*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 1005(2005)[87]
5. **J. H. Marín**, F. García, and F. J. Betancur, *Electrón-Hole Pair in Quantum Pyramid*, Rev. Col. de Fís. **37**, 94 (2005)[88]
6. W. Gutiérrez, **J. H. Marín**, F. García, and I. D. Mikhailov, *Negatively Charged Donor and Trion in Quantum Ring*, Rev. Col. de Fís. **37**, 150 (2005)[89]
7. L. F. García, **J. H. Marín**, and I. D. Mikhailov, *Negatively Charged Donor in Flat Quantum Dot*, Braz. Jour. of Phys. **36**, 878(2006)[90]
8. **J. H. Marín**, L. F. García,, and I. D. Mikhailov, *Two Electrons in Vertically Coupled One-Dimensional Rings*, Braz. Jour. of Phys. **36**, 940 (2006)[91]
9 I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Effect of the Wetting Layer on Electron-Hole Correlation in Quantum Discs and Rings*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 9493 (2006)[92]
10 L. F. García, I. D. Mikhailov, and **J. H. Marín**, *Spectrum of two Spatially Separated Particles in Coaxial Nanoring*, Rev. Col. de Fís. **38**, 1078 (2006)[93]
11 **J. H. Marín**, I. D. Mikhailov, and L. F. García, *Charge Distribution in Quantum Dot with Trapped Exciton*, Physica B Condensed Matter, **398**, 135(2007)[94]
12 I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, **J. H. Marín**, and Y. Orlik, *Charging Quantum Dots by Captured Exciton*, Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures, Proceedings of the International Conference Nano-Meeting 2007, pág. 125 (2007)[95]
13 C. A. Gómez, L. F. García, W. Gutiérrez and J. H. Marín, D– Energy Spectrum in Toroidal Quantum Ring, accepted to published in Microelectronics Journal [96]
14 **J. H. Marín**, L. F. García, and J. C. Piña, *Wigner Crystallization of Negatively Charged Exciton in Disconnected One-Dimensional Structure*, Rev. Col. de Fís. **39**, 339 (2007)[97]
14 L. F. García, **J. H. Marín**, and, I. D. Mikhailov, *Exactly Solvable Model for Positively Charged Exciton in an Axially Symmetrical One-Dimensional Structure*, Rev. Col. de Fís. **39**, 535 (2007)[98]
15 I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Effect of the Wetting Layer on Electron-Hole Correlation in Quantum Discs and Rings*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 9493 (2006)[99]
16 I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Two-Electron Quantum Dot With Soft-Edge Barrier*, Physica E **40**, 805(2008)[100]
17 I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Vertically Coupled Quantum Dots Charged by Exciton*, Microelectronics Journal **39**, 378(2008) [101]

Los eventos en los cuales se han presentado trabajos es la siguiente:

1. VI Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada (VI ENFMC), Universidad de Antioquia, Medellín-Colombia, octubre 27-29 de 2004.

2 XVII Latin American Symposium on Solid State Physics (XVII SLAFES), La Habana-Cuba, diciembre 6-9 de 2004

3. XXI Congreso Nacional de Física, Universidad del Atlántico, Barranquilla-Colombia, octubre 24-28 de 2005

4. XII Latin American Congress of Surface Science and Its Applications (XII CLACSA), Rio de Janeiro-Brazil, diciembre 5-9 de 2005

5. VII Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada (VII ENFMC), Universidad de Pedagógica y Tecnológica, Tunja-Colombia, octubre 23-27 de 2006

6. International Conference Nano-Meeting 2007, Minsk-Belaurus, mayo 22-25 de 2007

7. VI International Conference on Low Dimensional Structures and Its Applications (VI LDSD), San Andrés Colombia, abril 15-20 de 2007

8. XIII Latin American Congress of Surface Science and Its Applications (XII CLACSA), Santa Marta-Colombia, diciembre 3-7 (2007)