

Revista Electrónica Nova Scientia

Estados electrónicos para un cascarón cuántico
semiconductor de geometría cilíndrica
Electronic states for a semiconductor quantum
shell cylindrical geometry

**Ri. Betancourt-Riera¹, Re. Betancourt-Riera¹, R. Jordán
Hernández² y R. Riera³**

¹Instituto Tecnológico de Hermosillo, Sonora, México

²Universidad Estatal de Sonora, México

³Departamento de Investigación en Física. Universidad de Sonora

México

Ri Betancourt-Riera. E-mail: rbriera@gmail.com

Resumen

En este trabajo obtenemos los estados electrónicos para un cascarón cuántico semiconductor de geometría cilíndrica obtenido a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. En este caso hemos asumido que el sistema solo tiene una banda la cual se desdobra en un sistema de sub-bandas debido al confinamiento. Utilizando el formalismo de la masa efectiva determinamos las funciones de onda y las energías de los estados.

Palabras clave: estados electrónicos, alambres cuánticos, sistemas nanoestructurados

Recepción: 11-05-2012

Aceptación: 31-10-2012

Abstract

In this work we obtain the electronic states for a semiconductor quantum cylindrical shell in the matrix $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. We have assumed that the system has only one band which splits into a sub-bands system due to confinement. We use the formalism of the effective mass to determine the wave functions and the energies.

Keywords: Electronic states, quantum wires, nanostructured systems

1. Introducción

El desarrollo reciente en las técnicas de fabricación de nanoestructuras semiconductoras, y en particular la fabricación de alambres o hilos cuánticos, han permitido el desarrollo de nuevos dispositivos electrónicos, dando lugar a una revolución no sólo en la electrónica, sino también en la optoelectrónica. Cuando estudiamos un sistema físico desde el punto de vista de la mecánica cuántica, las propiedades de éste están contenidas en la función de onda del sistema (Jusserand y col. 1989; Nammee y col. 1999, 8767; Barticevic y col. 2000, 6963; Tan y col. 1996, 6947 y Ismailov y col. 2005, 72). En este trabajo queremos determinar los estados estacionarios de un electrón sometido a un potencial externo con forma de un cascarón cilíndrico de sección transversal circular.

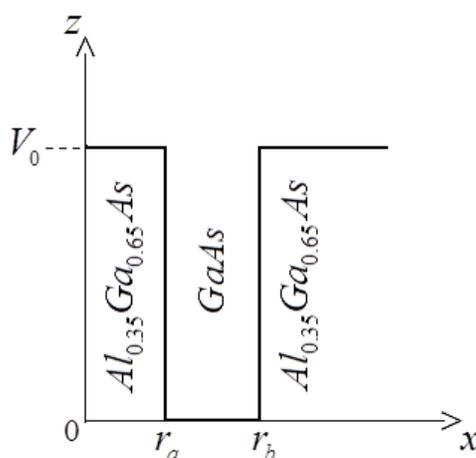


Figura 1: Esquema de las barreras de un cascarón cuántico de simetría cilíndrica, suponiendo que $\theta = 0$.

Las estructuras cuasi-uno-dimensional tienen décadas de investigación debido a una multitud de fenómenos interesantes, que aparecen producto a la interacción espín-orbita combinado con el confinamiento; éstos afectan las propiedades de transporte (Moroz y col. 1999, 14272 y Guzenko y col. 2006, 032102). También es posible observar el efecto Rashba (Sánchez y col. 2008, 035315; Häusler 2004, 115313 y Csontos y col. 2008, 2059). En nuestro caso consideraremos que el dispositivo ha sido desarrollado usando una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, por lo cual podemos asumir que el sistema tiene la banda de conducción parcialmente ocupada y la banda de valencia completamente llena, lo que se debe a que hemos dopado modularmente el sistema de manera que no consideraremos la formación de excitones o pares electrón-hueco, por lo que no será necesario analizar la mezcla de bandas. Asumiremos un sistema de bandas parabólicas

simples para los electrones en el material volumétrico, las cuales se desdoblaron en un sistema de sub-bandas debido al confinamiento en la dirección perpendicular al eje del cascarón cilindro. Este modelo es comúnmente utilizado en los semiconductores binarios II-VI y III-V para describir los estados cerca del centro de la zona de Brillouin en el esquema de zona reducida.

En la figura 1, se muestra un esquema del corte transversal del cascarón cilíndrico, en éste se puede observar que las barreras son consideradas finitas. El modelo de la función envolvente es adecuado para estudiar las propiedades de las cuasi-partículas en las estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad. Este es un método dinámico para la determinación de las bandas de energía de las partículas en la Física del Estado Sólido.

Las nanoestructuras son consideradas sistemas dinámicos debido a que son sólidos que siempre están sometidos a un potencial de barrera o de confinamiento, el cual puede lograrse mediante campos magnéticos o creciendo estructuras cuyas distintas regiones sean de materiales diferentes. Utilizaremos el formalismo de la aproximación de la función envolvente y la aproximación de la masa efectiva, las cuales fueron discutidas, por primera vez, en los sistemas cuasi-bidimensionales por Bastard (Bastard 1981, 5693).

2. Modelo teórico

Estudiaremos los estados electrónicos de un cascarón cuántico de geometría cilíndrica con sección transversal circular de radio interno r_a , radio externo r_b y longitud L , debemos señalar que L debe de ser lo suficientemente grande como para poder despreciar los efectos del confinamiento en la dirección z . El potencial de confinamiento tiene la forma:

$$V = \begin{cases} V_0; & 0 \leq r < r_a \\ 0; & r_a \leq r \leq r_b \\ V_0; & r_b < r < \infty \end{cases} \quad (0.1)$$

La ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas es

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r, \theta, z) + [E - V] \psi(r, \theta, z) = 0 \quad (0.2)$$

donde $\psi(r, \theta, z)$ es la función de onda y E la energía del sistema. La solución de la ecuación (0.2) puede obtenerse utilizando el método de separación de variables. Si proponemos a $\psi(r, \theta, z)$ de la forma

$$\psi(r, \theta, z) = \varphi(r, \theta) \chi(z),$$

se obtienen dos ecuaciones independientes, una en la variable z cuya solución es $\chi(z) = (1/\sqrt{L}) \exp(ik_z z)$, donde $k_z = \sqrt{2\mu E_z}/\hbar$. La otra ecuación está dada en las variables r y θ y toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \varphi(r, \theta) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E_r - V_0] \varphi(r, \theta) = 0 \quad (0.3)$$

La solución de (0.3) la podemos proponer como $\varphi(r, \theta) = (1/\sqrt{2\pi}) R(r) e^{im\theta}$, teniendo en cuenta que $\varphi(r, \theta) = \varphi(r, \theta + 2\pi)$, y la función de onda la podemos escribir como:

$$\psi(r, \theta, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{i(m\theta + k_z z)} R(r)$$

$$E = E_r + E_z \quad \text{y} \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2\mu} k_z^2$$

La parte radial de la ecuación de Schrödinger tiene la forma siguiente

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{m^2}{r^2} \right] R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E_r - V_0] R(r) = 0.$$

La solución de esta ecuación son las funciones de Bessel, pero debemos considerar que la solución debe ser acotada en todo el dominio, entonces se obtiene que

$$R(r) = \begin{cases} AI_m \left(\alpha \frac{r}{r_0} \right); & 0 \leq r < r_a \\ A_1 J_m \left(\alpha \frac{r}{r_0} \right) + B_1 N_m \left(\alpha \frac{r}{r_0} \right); & r_a \leq r \leq r_b, \\ BK_m \left(\gamma \frac{r}{r_0} \right); & r_b < r < \infty \end{cases}, \quad (0.4)$$

siendo

$$\alpha = \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2} E_r} \quad \text{y} \quad \gamma = \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} (V_0 - E_r)}$$

donde $\mu_1(\mu_2)$ es la masa efectiva dentro (fuera) del cascarón cilíndrico. Además, J_m y N_m son las funciones de Bessel de primer y segundo tipo respectivamente. Por otro lado I_m y K_m son las funciones modificadas de Bessel de primer y segundo tipo respectivamente (Abramowitz y col. 1970 y Landau y col. 1977). La energía correspondiente a la parte radial, E_r , y las constantes A , A_1 , B_1 y B se pueden determinar usando la condición de normalización y las condiciones de frontera para la función de onda φ y de $\frac{1}{\mu} \frac{\partial \varphi}{\partial r}$. Por tanto

$$A = [I_1 + I_2 + I_3]^{-\frac{1}{2}} \quad (0.5)$$

$$A_1 = \frac{\bar{A}_1}{C} A, \quad B_1 = -\frac{\bar{B}_1}{C} A, \quad B = \frac{J_m(\alpha r_b) \bar{A}_1 + N_m(\alpha r_b) \bar{B}_1}{K_m(\gamma r_b) \bar{C}} A$$

donde

$$I_1 = \int_0^{r_a} I_m^2(\gamma r) r dr, \quad I_2 = \frac{1}{C^2} \int_{r_a}^{r_b} [\bar{A}_1 J_m(\alpha r) - \bar{B}_1 N_m(\alpha r)]^2 r dr,$$

$$I_3 = \left[\frac{J_m(\alpha r_b) \bar{A}_1 + N_m(\alpha r_b) \bar{B}_1}{K_m(\gamma r_b) \bar{C}} \right]^2 \int_{r_b}^{\infty} K_m^2(\gamma r) r dr,$$

$$\bar{A}_1 = I_m(\gamma r_a) N'_m(\alpha r_a) - \beta I'_m(\gamma r_a) N_m(\alpha r_a),$$

$$\bar{B}_1 = I_m(\gamma r_a) J_m(\alpha r_a) - \beta I'_m(\gamma r_a) J_m(\alpha r_a),$$

$$\bar{C} = J_m(\alpha r_a) N'_m(\alpha r_a) - J'_m(\alpha r_a) N_m(\alpha r_a),$$

siendo $\beta = \sqrt{\frac{\mu_1 V_0 - E_r}{\mu_2 E_r}}$. Mientras que E_r puede determinarse a partir de la siguiente ecuación

trascendente

$$\bar{A}_1 [K_m(\gamma r_b) J'_m(\gamma r_b) - \beta K'_m(\gamma r_b) J_m(\gamma r_b)] =$$

$$\bar{B}_1 [K_m(\gamma r_b) N'_m(\gamma r_b) - \beta K'_m(\gamma r_b) N_m(\gamma r_b)]$$

Como se puede observar para cada valor de m se obtienen n valores de la energía. También es importante señalar que los estados aquí obtenidos son doblemente degenerados (excepto para $m=0$) ya que se obtienen las mismas energías para los valores positivos y negativos de m , es decir para $m = \pm 1, \pm 2, \dots$

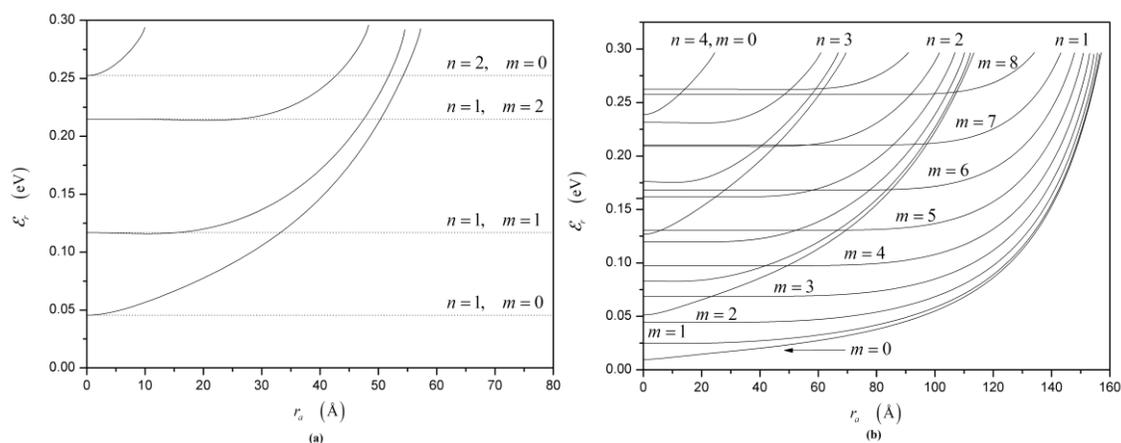


Figura 2: Energía de los estados electrónicos para: a) $r_b = 100 \text{ \AA}$, b) $r_b = 200 \text{ \AA}$

3. Discusión de resultados y conclusiones

Estudiamos el comportamiento de los estados electrónicos para un cascarón cuántico semiconductor de geometría cilíndrica formado en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$; los parámetros utilizados son: $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$ y $V_0 = 0.30\text{eV}$, donde μ_0 es la masa libre del electrón. La figura 2a nos muestra las energías correspondientes a un sistema donde hemos fijado $r_b = 100 \text{ \AA}$, las líneas rectas representan las energías de un alambre cuántico con un radio de 100 \AA . Se puede observar que el aumento de r_a provoca el aumento de la energía de los distintos estados, al aumentar el confinamiento de los electrones. También es visible que este aumento de energía no es igual para todos los niveles. El aumento de r_a , al aumentar el confinamiento, puede llegar a “sacar” todos los niveles dentro del cascarón cilíndrico, esto también está determinado por la altura de la barrera del sistema. A medida que en una sub-banda indicada con el número cuántico n (ver figura 2b) se incrementa el valor del número cuántico m el efecto del confinamiento disminuye, permaneciendo inicialmente con valores similares a los de un alambre cuántico. Como se puede observar en la figura 2a esto se comprueba ya que para el estado $n=1, m=0$ la energía es casi constante hasta $r_a \approx 5 \text{ \AA}$, para $n=1, m=1$ es casi constante hasta $r_a \approx 17 \text{ \AA}$ y para $n=1, m=2$ es casi constante hasta $r_a \approx 28 \text{ \AA}$. En la figura 2b se ha escogido $r_b = 200 \text{ \AA}$. En este caso se observa como el aumento de r_b implica el aumento del número de estados “dentro” del sistema. Además, podemos ver como los estados se agrupan en varias sub-bandas; estas sub-bandas están determinadas por el número cuántico n .

En la figura 3 hemos fijado el ancho del cascarón cilíndrico de manera que $r_b - r_a = 100 \text{ \AA}$, donde las líneas continuas se corresponden a los estados con $n = 1$ y las discontinuas corresponden a los estados con $n = 2$. Como podemos observar, los estados se vuelven a agrupar en sub-bandas, una vez más determinadas por el número cuántico n . Es de notar que los estados tienen una energía límite para cada valor de n ; esto se debe a que el sistema tiene en todo momento un ancho fijo. En el caso de que $(r_b - r_a)/2$ tome valores muy grandes, de aproximadamente 300 \AA , no se reproducen los valores de energía correspondientes a un pozo cuántico, debido a que aún para esos radios se conserva la simetría cilíndrica.

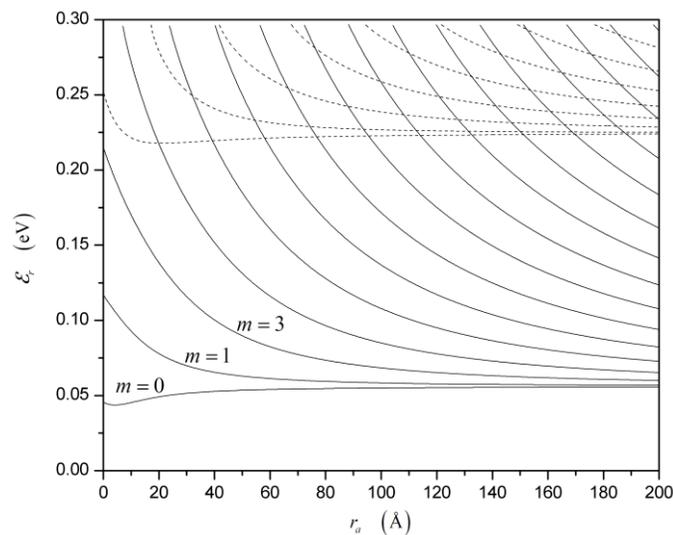


Figura 3: Energía de los estados electrónicos para $r_b - r_a = 100 \text{ \AA}$, las líneas continuas corresponden a los estados donde $n = 1$ y las discontinuas a los estados con $n = 2$.

El trabajo aquí presentado nos muestra la estructura de sub-bandas de un alambre cuántico con forma de cascarón cilíndrico obtenido a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. La estructura de bandas que se muestra en las figuras nos permite comprender cómo afecta el confinamiento la energía del electrón. En nuestro cálculo hemos aplicado un modelo de bandas simplificado, un modelo más realista podría obtenerse aplicando modelos como los de Luttinger-Kohn o el de Kane (Trallero-Giner y col. 1990 y Comas y col. 1986, 3028).

Referencias

Abramowitz M. and Stegun I. A. (1970). *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., New York.

- Barticevic Z., Pacheco M., and Latgé A. (2000). *Phys. Rev. B*, (62): 6963.
- Bastard G.(1981). *Phys. Rev. B* (24): 5693.
- Comas F, Trallero Giner C and Perez-Alvarez R (1986). *J. Phys. C: Solid State Phys.*, (19): 6479.
- Csontos D. and Zülicke U. (2008). *Physica E*, **40**: 2059.
- Guzenko V. A., Knobbe J., Hardtdegen H., Schäpers Th. and Bringer A. (2006). *App. Phys. Lett.*, **88**: 032102.
- Häusler Wolfgang. (2004). *Phys. Rev. B*, **70**: 115313.
- Ismailov T.G. and Mehdiyev B.H. (2005). *Physica E*, **31**: 72.
- Jusserand B and CardonaM (1989) *Light Scattering in Solids V* ,*Springer Topics in Applied Physics* vol 66 ed M Cardona and G G`untherodt Heidelberg: Springer.
- Landau L.D. and E.M. Lifshiz (1977). *Quantum Mechanics (No relativistic Theory)*, Pergamon Press, New York.
- Moroz A. V. and Barnes C. H. W. (1999). *Phys. Rev. B*, **60**: 14272.
- Namsee K., Ihm G., Sim H.-S. and Chang K. J. (1999). *Phys. Rev. B*, **60**: 8767.
- Sánchez David, Serra Llorenç and Choi Mahn-Soo. (2008). *Phys. Rev. B*, **77**: 035315.
- Tan W. C. and Inkson J. C. (1996). *Phys. Rev. B*, (53): 6947.
- Trallero-Giner C., Ruf T. and Cardona M. (1990). *Phys. Rev. B*, (41): 3028.