

XXIX CONGRESO NACIONAL DE FÍSICA

**Punto cuántico cónico doble
acoplado de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
bajo efectos de presión y
temperatura**

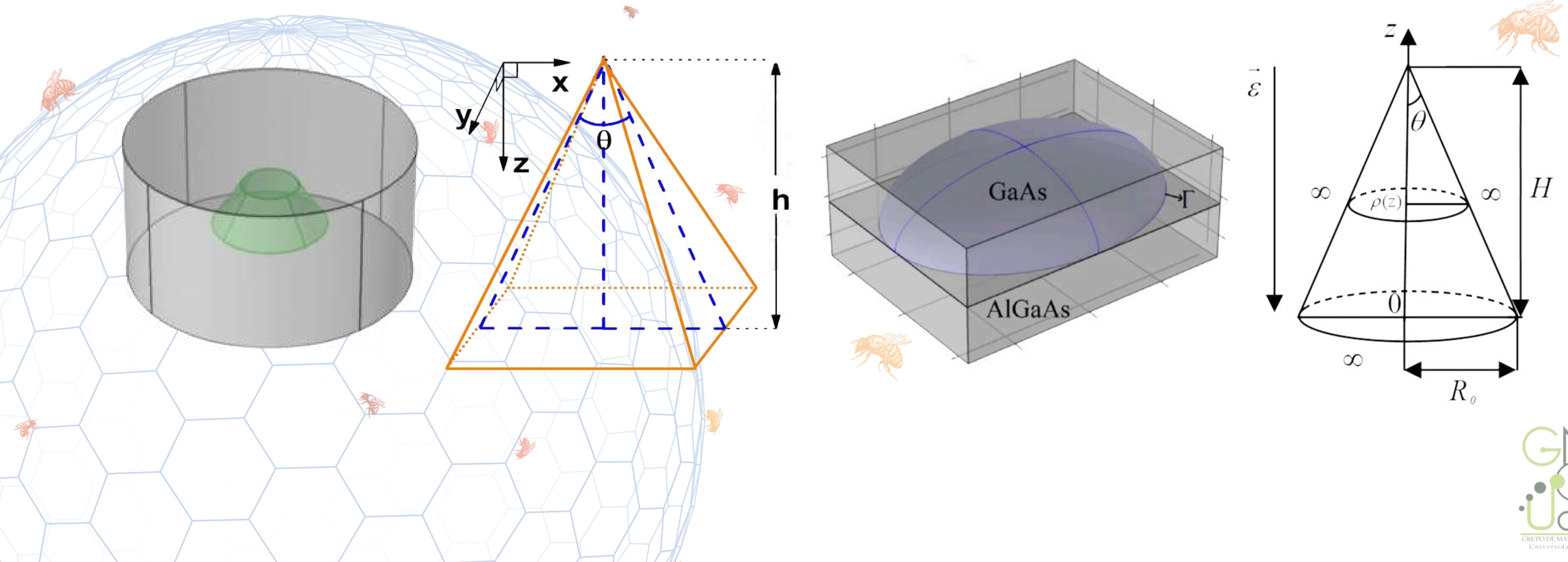
**A. M. López-Aristizábal, F. Mora-Rey,
A. L. Morales y C. A. Duque**

Grupo de Materia Condensada-UdeA, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

Introducción

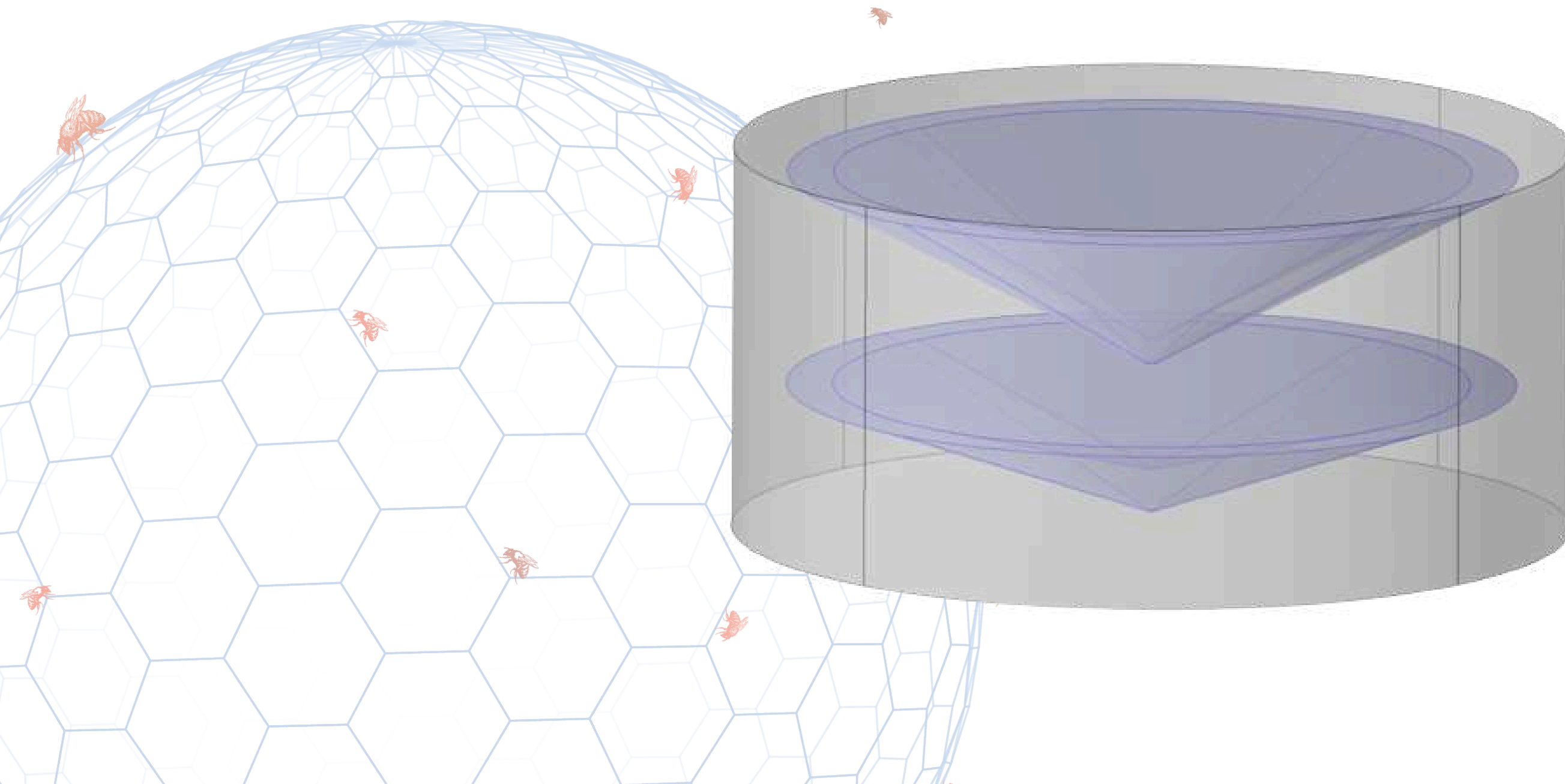
03

En las últimas décadas las nano estructuras han tenido gran impacto en investigaciones de semiconductores debido a sus propiedades y aplicaciones. Una de estas estructuras son los puntos cuánticos, los cuales se han mostrado atractivos para el desarrollo de nuevas tecnologías [1 - 2]. Asimismo, hay una gran variedad de investigaciones con diferentes geometrías de puntos cuánticos tales como piramidales, cónicas, esféricas, cilíndricas y elípticas [3 - 9] y de diferentes materiales semiconductores como InAs/GaAs, GaAs/AlGaAs, CdTe/CdSe, InGaAs/GaAs, CdTe-CdS-ZnS [5 - 8].



04

Este trabajo estudia los diferentes efectos generados a causa de la suministración de temperatura y presión hidrostática a un punto cuántico cónico doble acoplado de GaAs rodeado de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$. Resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método de elementos finitos, se analiza el comportamiento del sistema con una impureza y sin ella, para así estudiar la energía de enlace y evidenciar como los efectos aplicados afectan la magnitud de la constante dieléctrica, la masa efectiva y el ancho de banda prohibida.





Materialles y métodos

Geometría

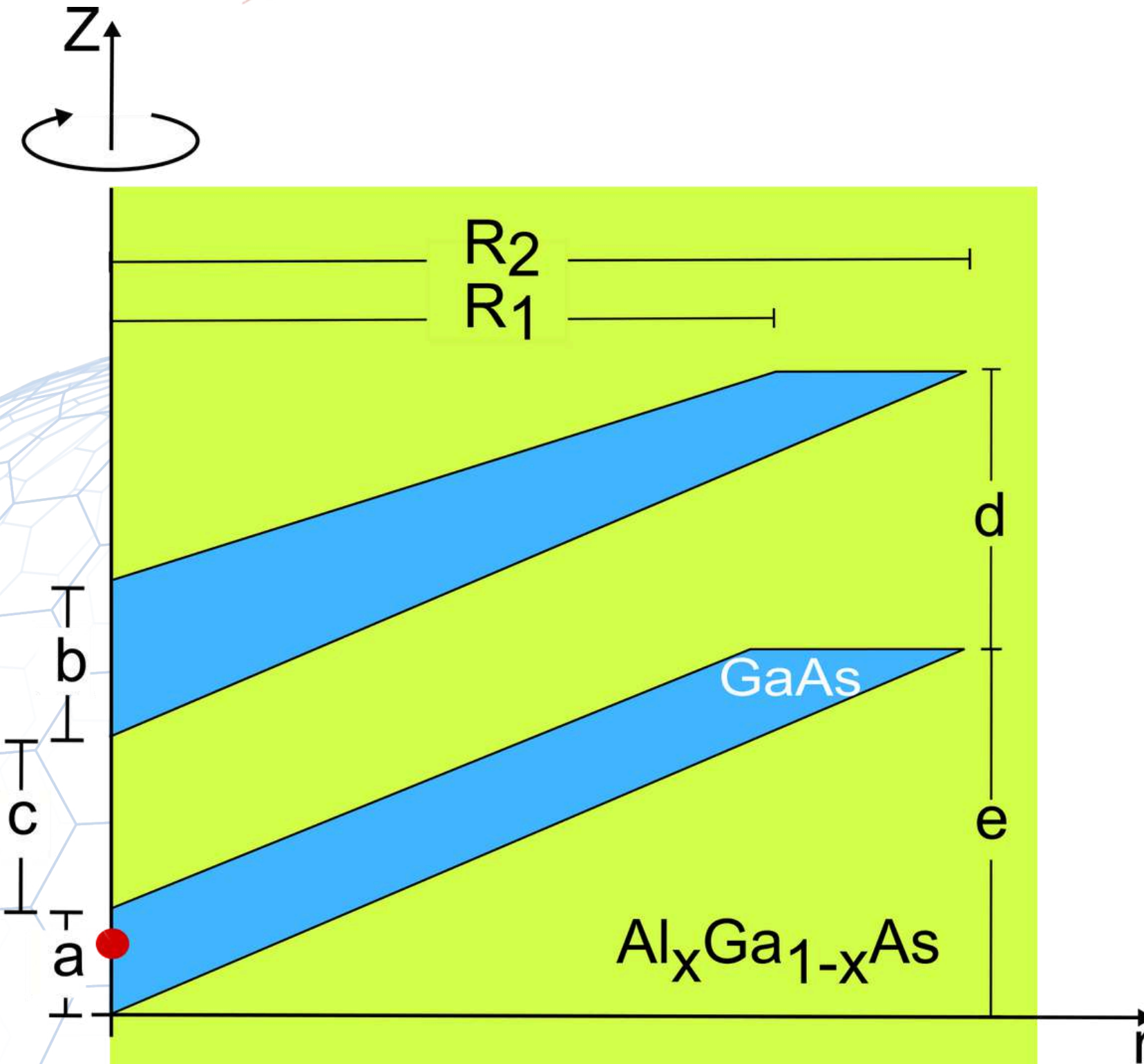
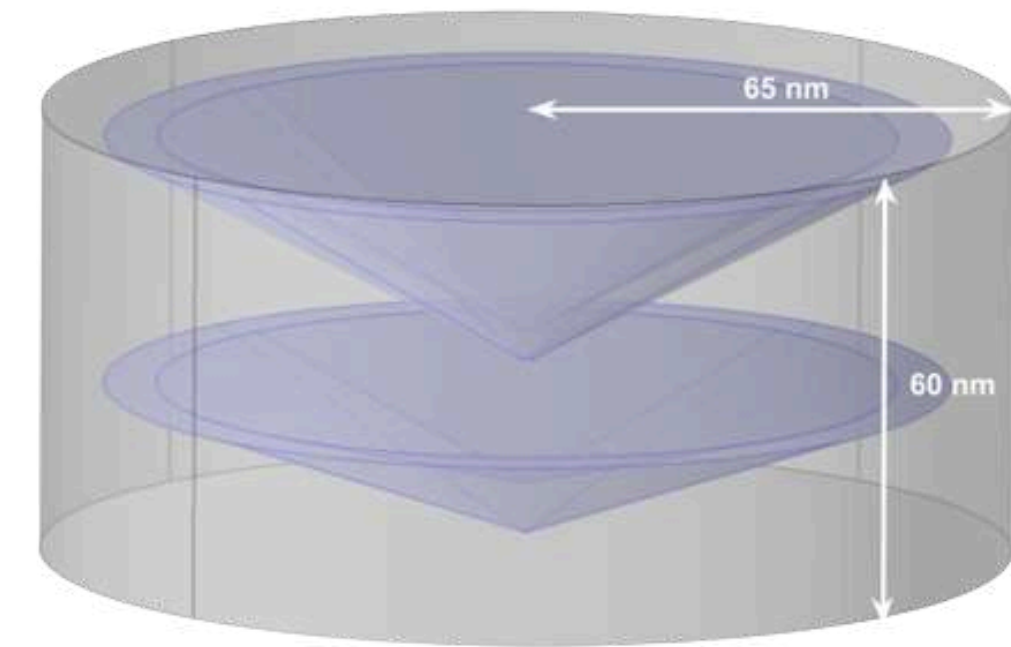


Figura 1. Punto cuántico cónico doble de GaAs rodeado de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$, con dimensiones: $a = 6,5 \text{ nm}$, b variable, $c = 3,45 \text{ nm}$, $d = 20 \text{ nm}$, $e = 30 \text{ nm}$, $R_1 = 49,4 \text{ nm}$, $R_2 = 56,5 \text{ nm}$, con límites frontera de 65 nm de ancho y 60 nm de alto. El punto rojo indica la posición de la impureza en el sistema la cual se encuentra ubicada a 4 nm de altura.



Teoría

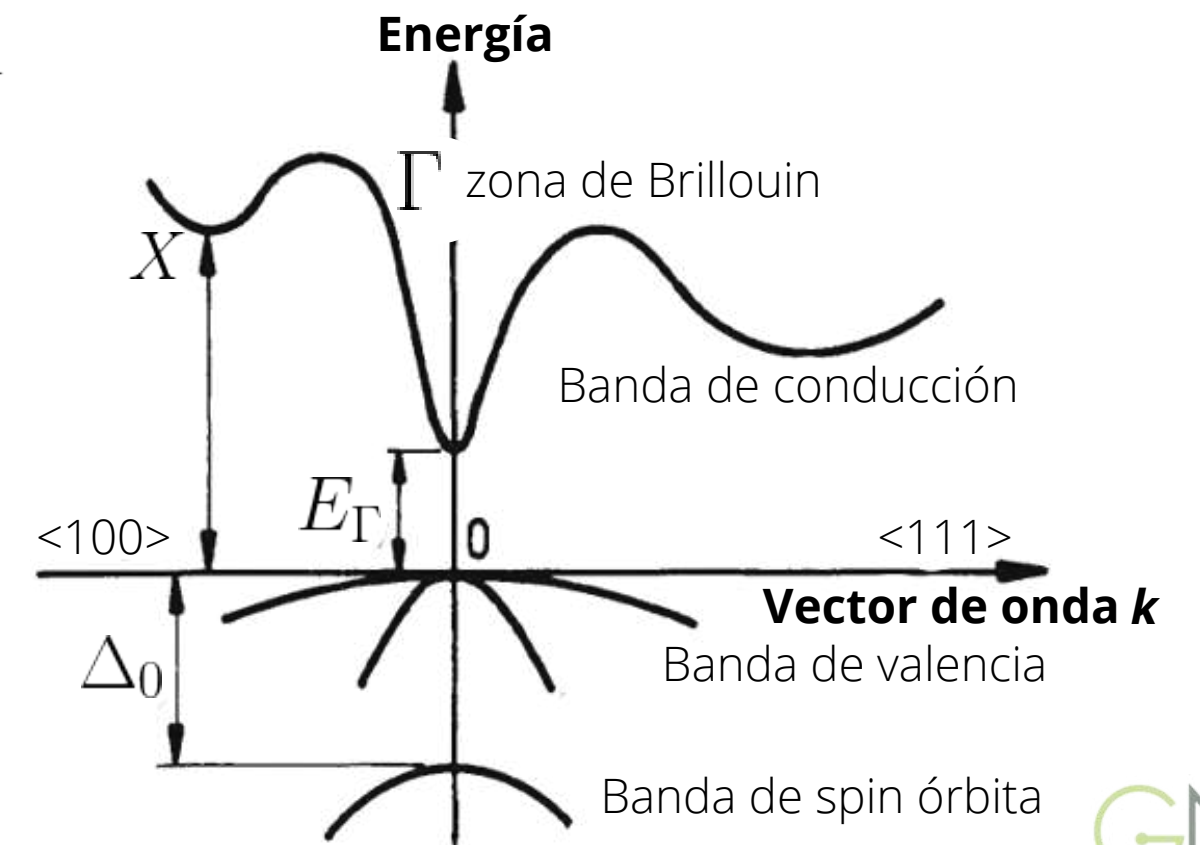
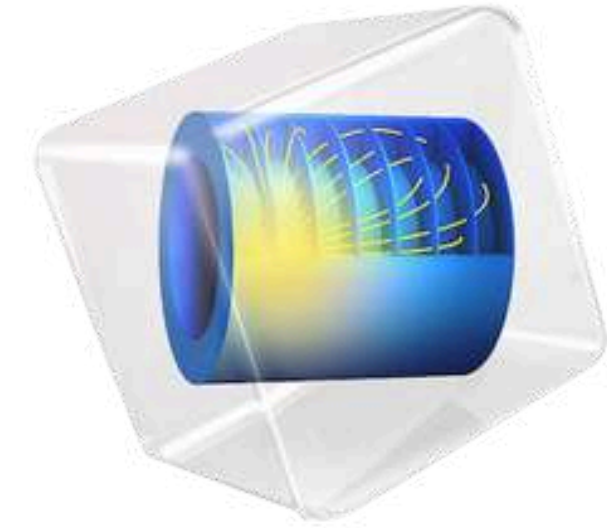
$$(1) \quad \frac{-\hbar^2}{2m_*} \nabla^2 \psi + \left(V(r, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right) \psi = E\psi$$

$$(2) \quad E_{\Gamma}(T, P) = E_j(T, P) + \frac{\alpha T^2}{T + \beta} + \gamma P + \zeta P^2$$

$$(3) \quad m_*(T, P) = m_0 \left[1 + E_p \left(\frac{2}{E_{\Gamma}(T, P)} + \frac{1}{E_{\Gamma}(T, P) + \Delta_0} \right) \right]^{-1}$$

$$(4) \quad \varepsilon(T, P) = \mu_1 \exp(\mu_2 P) \exp(\mu_3 (T - \mu_4))$$

$$(5) \quad E = E_{k=0} - E_{k=1}$$



Resultados y discusión

Variación de la altura del pozo superior

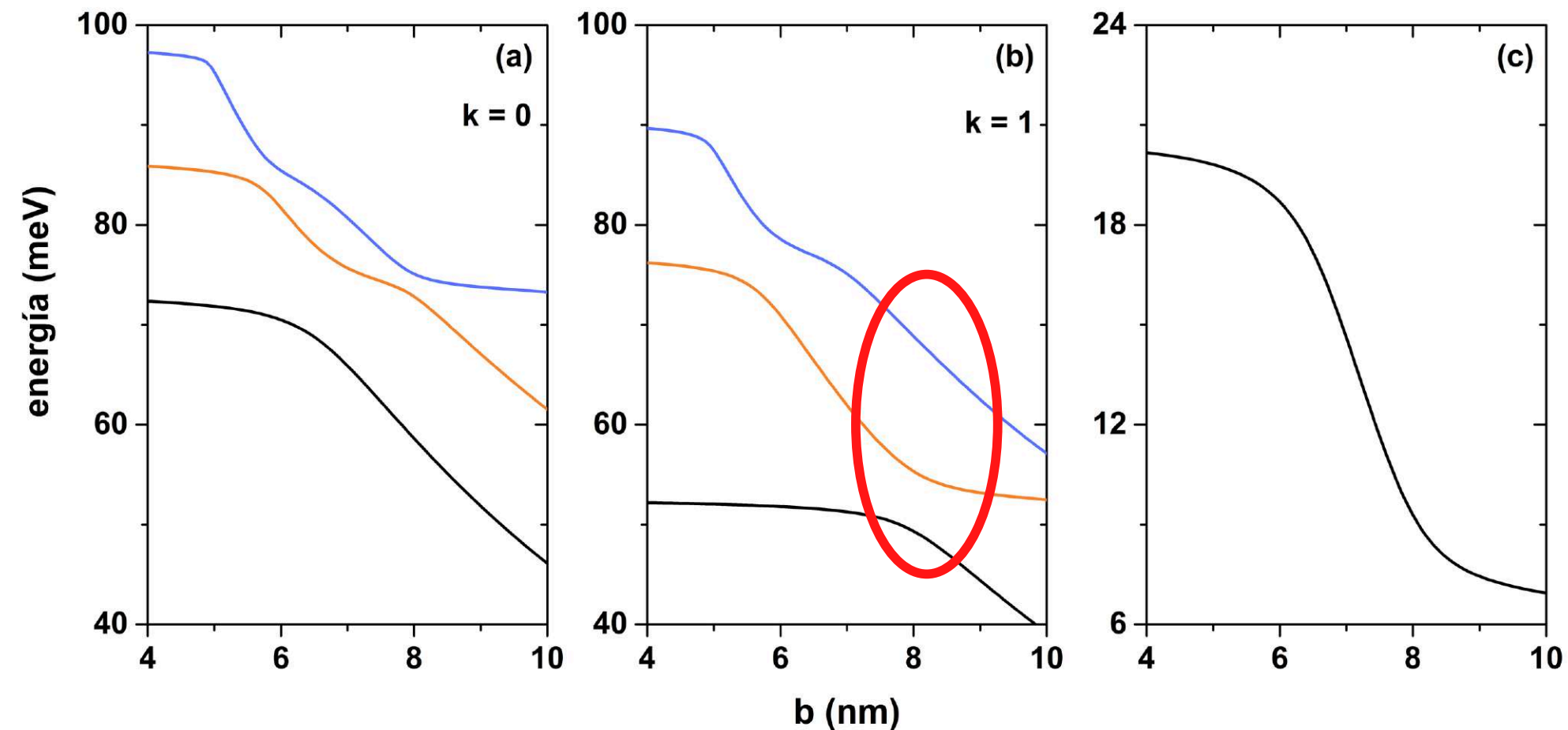
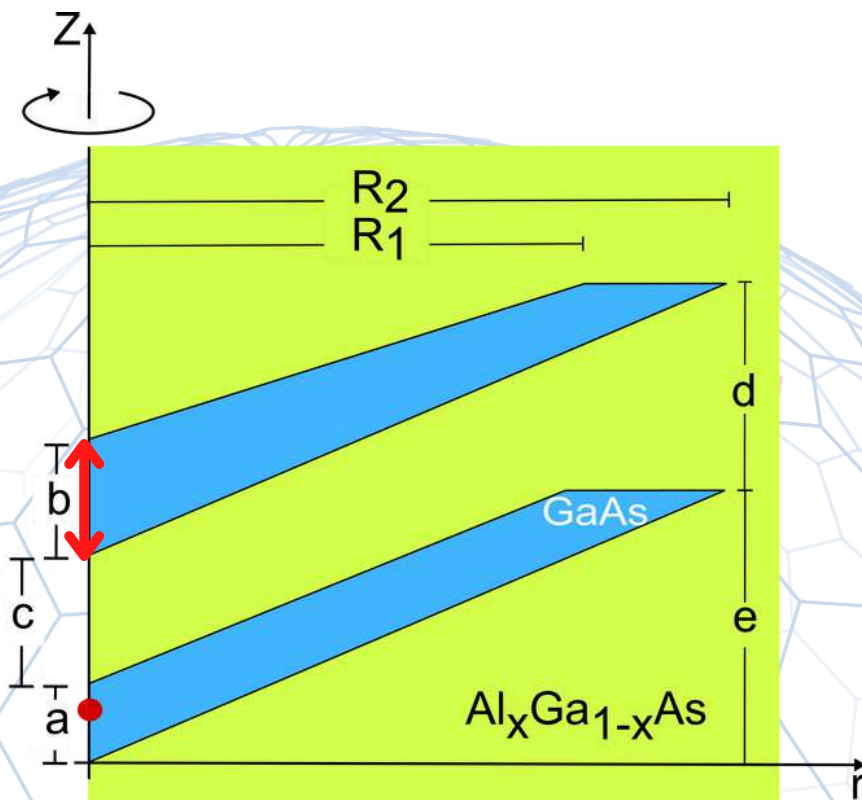


Figura 2. Estado fundamental y dos estados excitados en función de la altura del pozo superior cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza. (c) Energía de enlace con respecto al estado fundamental. Se desprecian los efectos de la temperatura y la presión.

Determinación de dimensiones óptimas

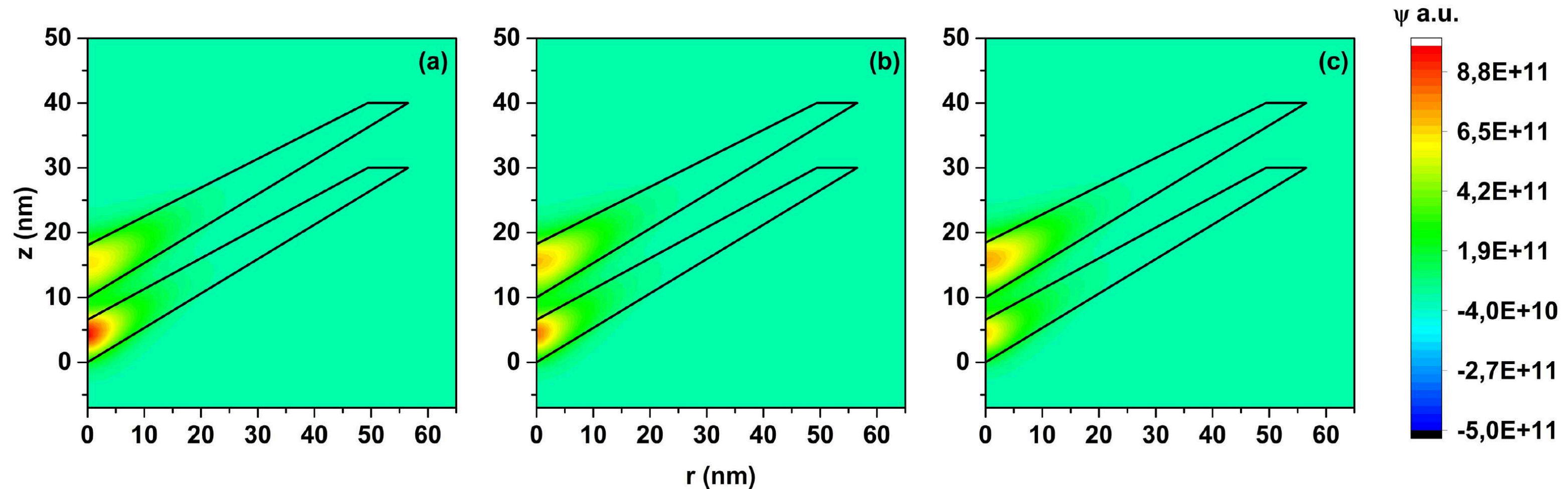


Figura 3. Representación de las funciones de onda normalizadas en la estructura con presencia de la impureza variando la longitud del pozo cuántico superior (a) $b = 8,05$ nm, (b) $b = 8,25$ nm y (c) $b = 8,45$ nm.

Energía de enlace

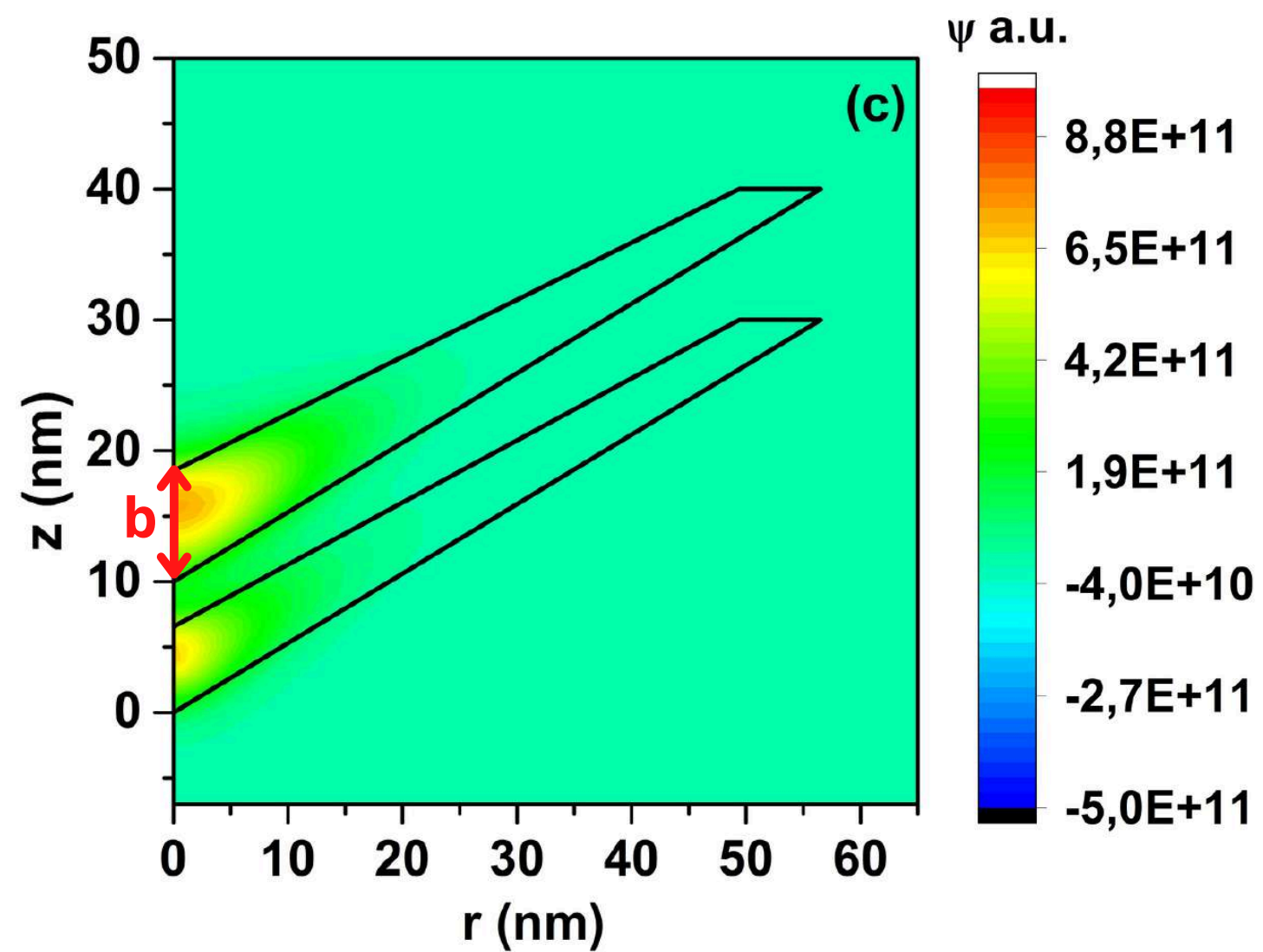


Figura 3. (c) Función de onda normalizada con impureza para $b = 8,45$ nm.

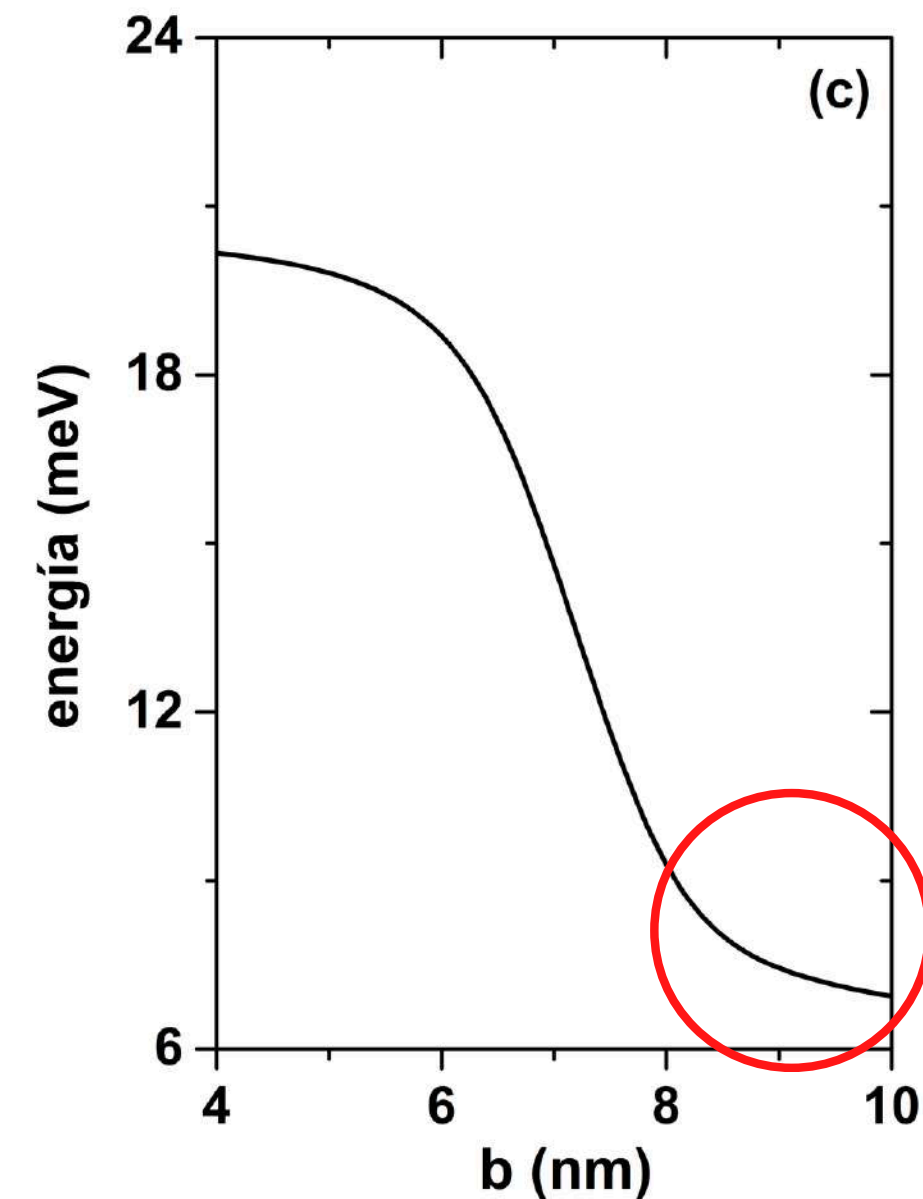


Figura 2. (c) Energía de enlace en función de la altura del pozo superior.

Masa efectiva y GAP

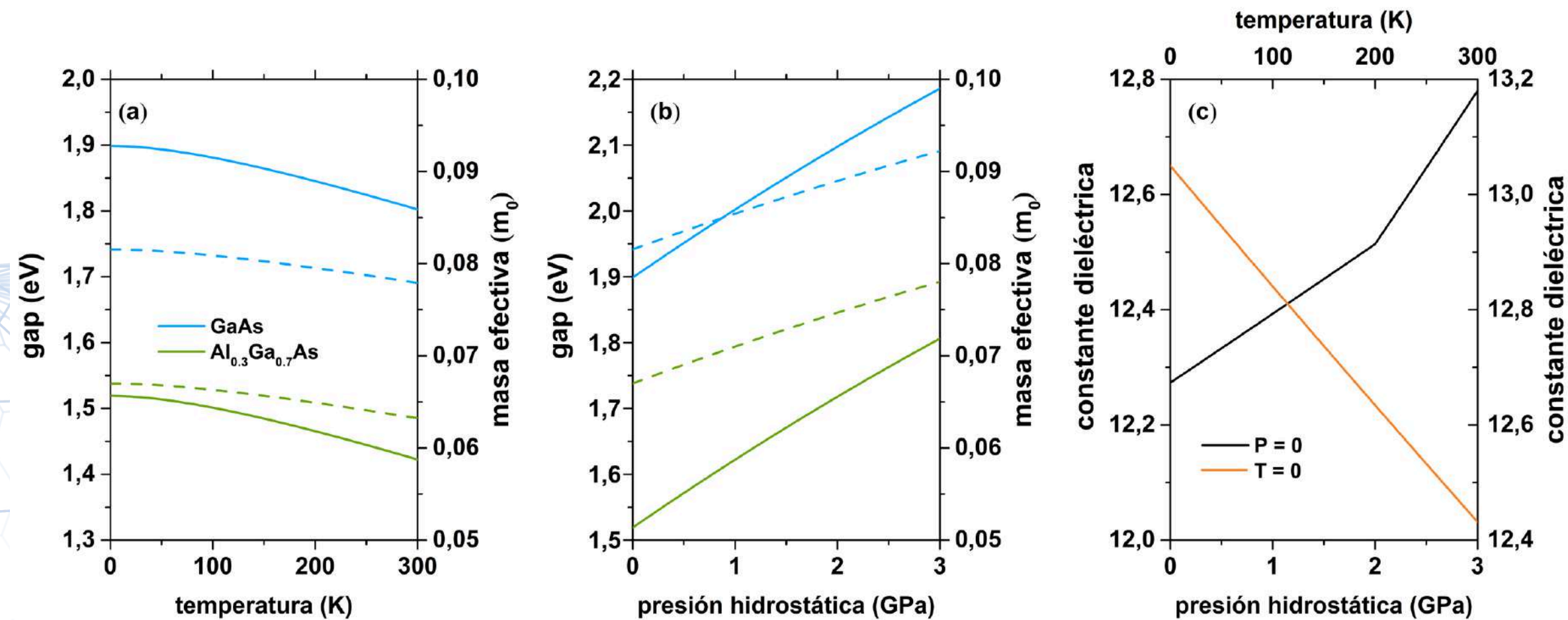


Figura 4. Ancho de banda prohibida (línea sólida) y masa efectiva (línea punteada) para GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ (a) con temperatura de 0 K a 300 K despreciando los efectos de la presión hidrostática y (b) con presión hidrostática de 0 G Pa a 3 G Pa, despreciando los efectos de la temperatura. (c) La constante dieléctrica bajo los efectos de presión hidrostática despreciando la temperatura (línea roja) y bajo los efectos de la temperatura despreciando la presión hidrostática (línea negra).

Efectos de la presión hidrostática

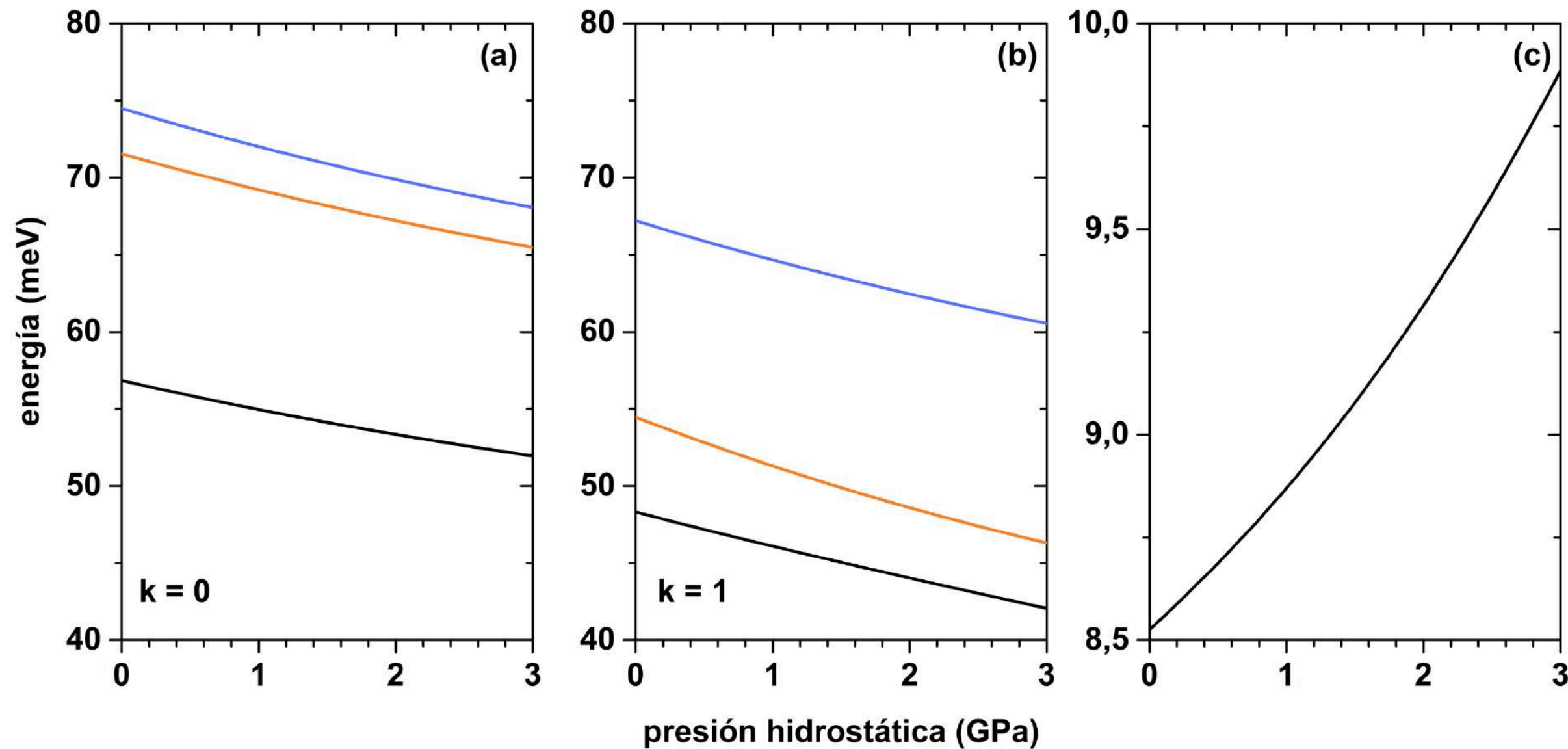


Figura 5. Energía del sistema en función del cambio de la presión hidrostática cuando (a) no hay impureza, (b) hay impureza y (c) la energía de enlace con respecto al estado fundamental. Se desprecian los efectos de la temperatura. La magnitud del parámetro b es 8,25 nm.

Cambios en la constante dieléctrica

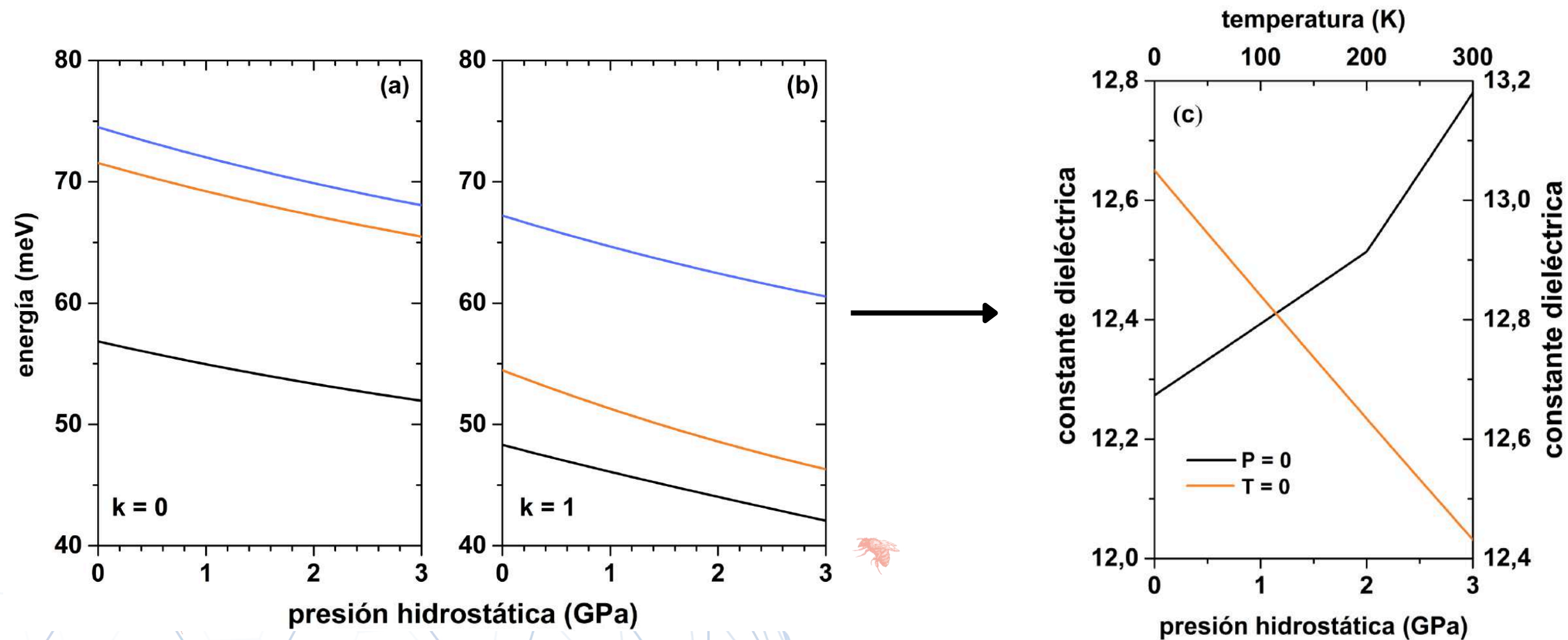


Figura 5. (a) (b) Energía del sistema en función del cambio de la presión hidrostática cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza.

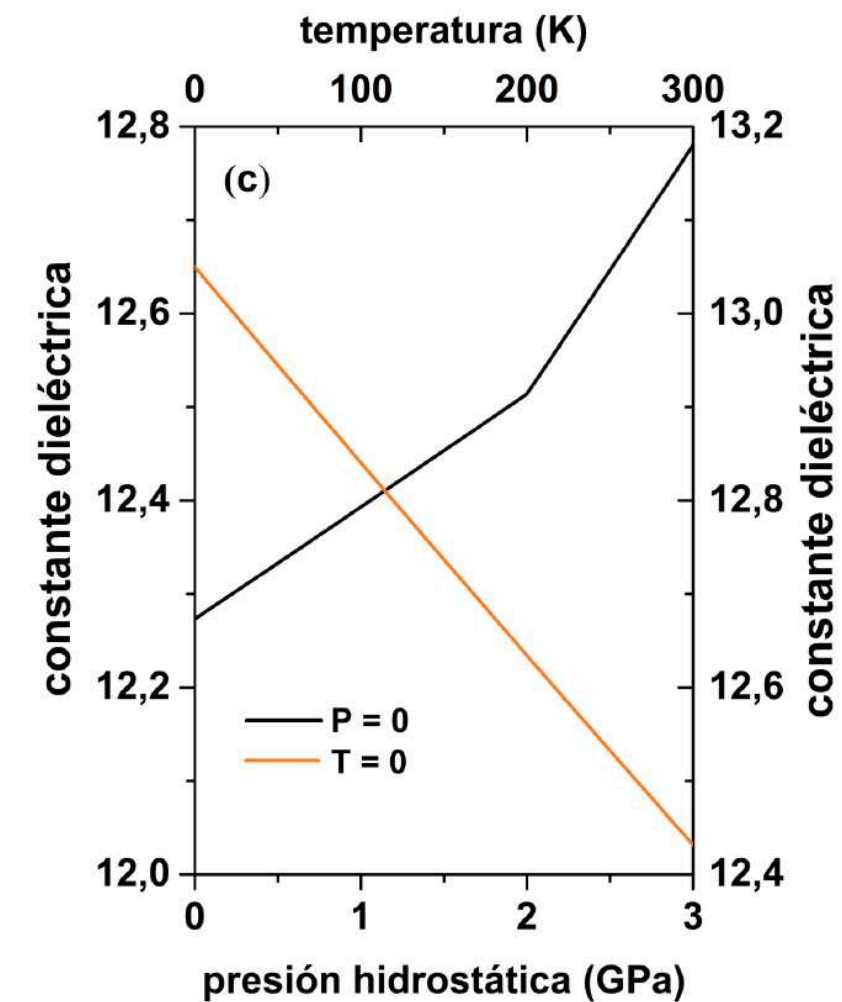


Figura 4. (c) La constante dieléctrica bajo los efectos de presión hidrostática despreciando la temperatura (línea roja) y bajo los efectos de la temperatura despreciando la presión hidrostática (línea negra).

$$\left(V(r, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right) \psi \dots$$

Cambios en el GAP y la masa efectiva

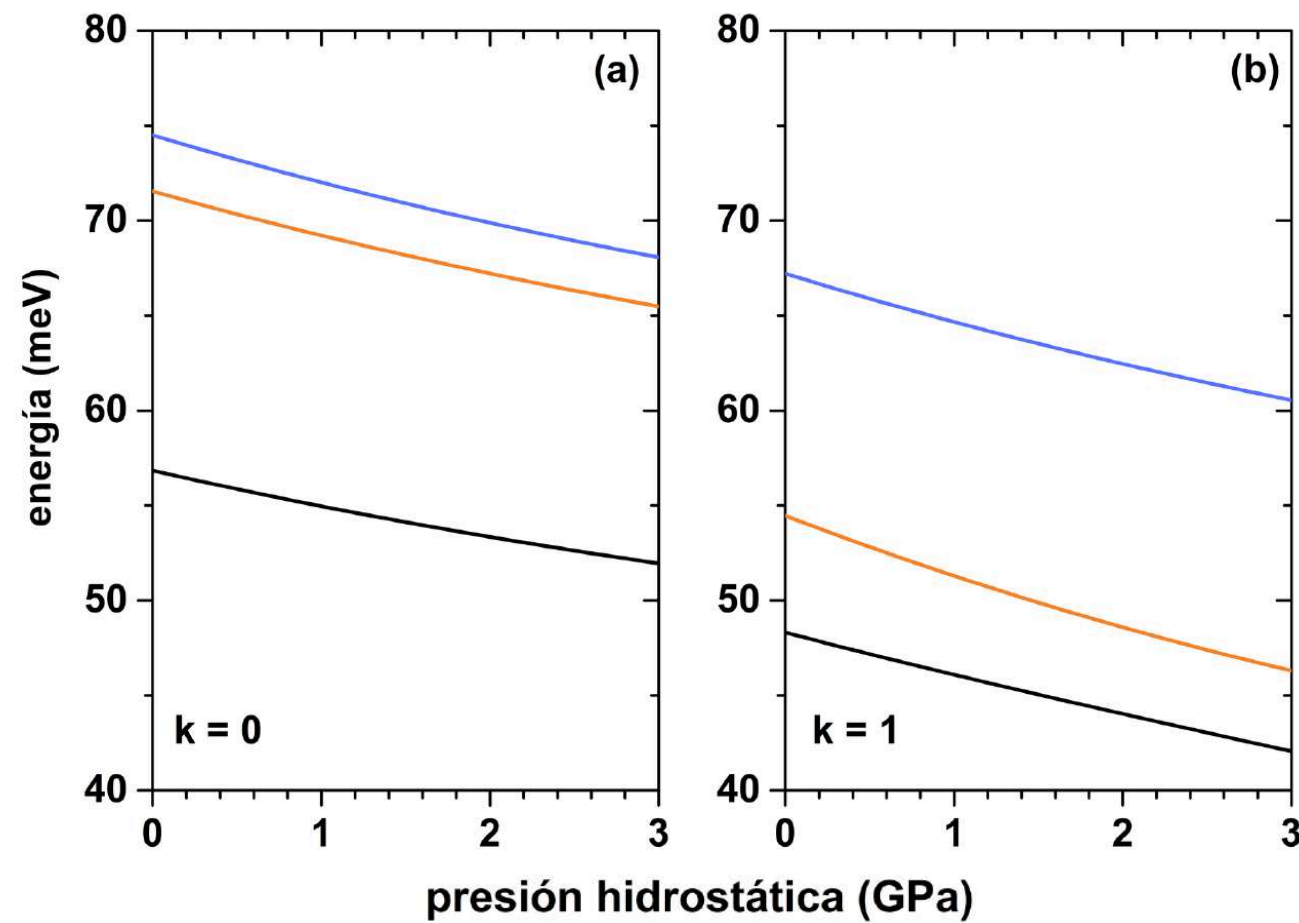
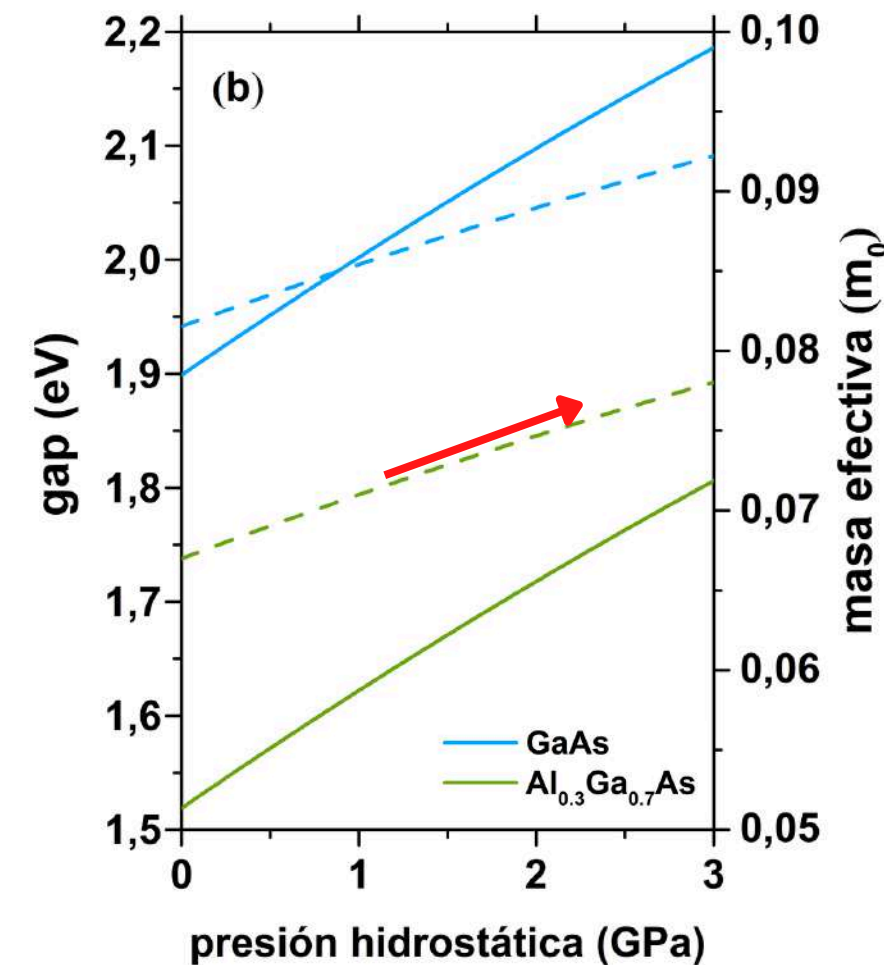


Figura 5. (a) (b) Energía del sistema en función del cambio de la presión hidrostática cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza.



$$\frac{-\hbar^2}{2m_*} \nabla^2 \psi \dots$$

$$\Delta_{\text{gap}} P=0 \text{ GPa} = 228 \text{ meV}$$

$$\Delta_{\text{gap}} P=3 \text{ GPa} = 228 \text{ meV}$$

Figura 4. (b) Ancho de banda prohibida (línea sólida) y masa efectiva (línea punteada) para GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ con presión hidrostática de 0 GPa a 3 GPa, despreciando los efectos de la temperatura.

Efectos de la temperatura

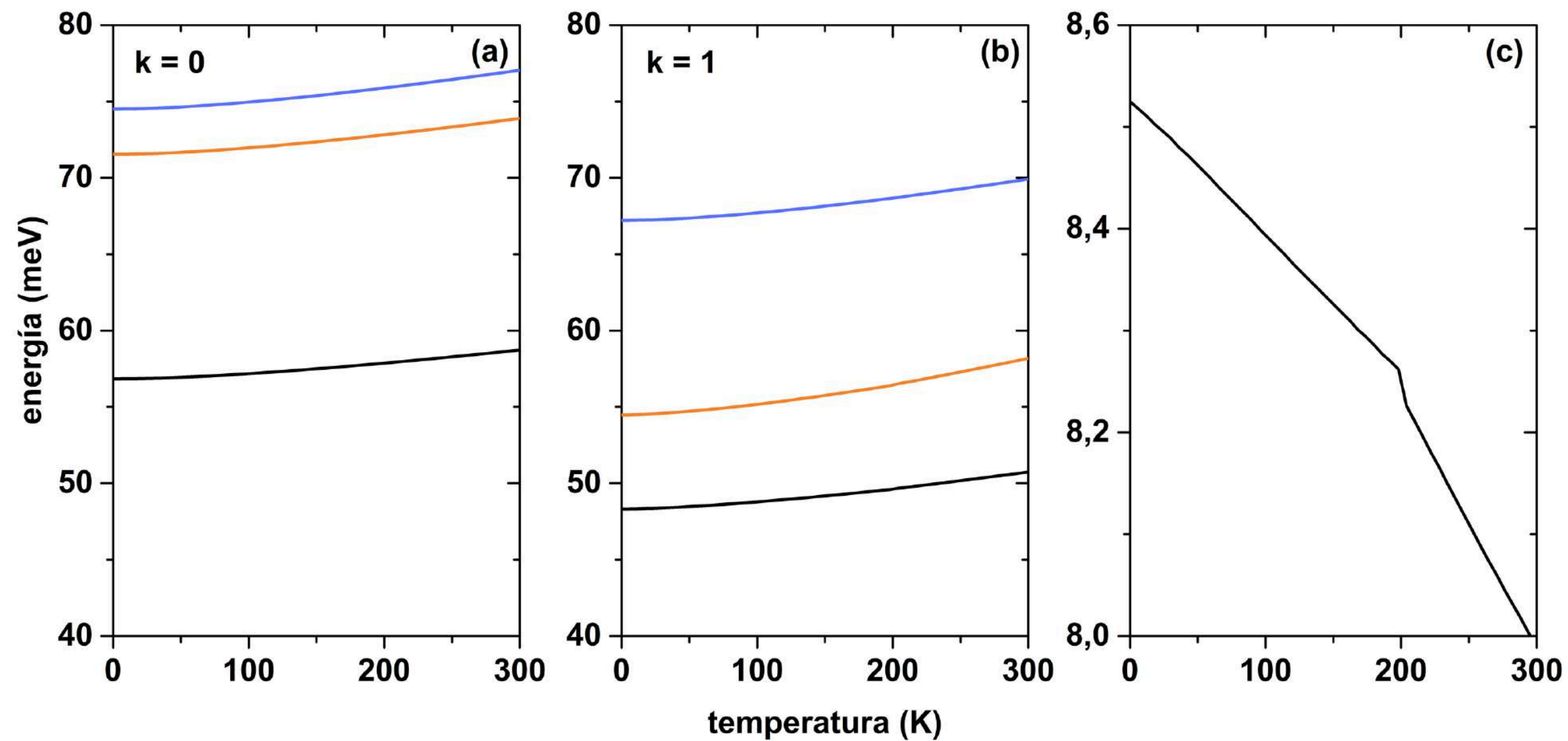


Figura 6. Energía del sistema en función del cambio de la temperatura cuando (a) no hay impureza, (b) hay impureza y (c) la energía de enlace con respecto al estado fundamental. Se desprecian los efectos de la presión hidrostática.

Cambios en el GAP y la masa efectiva

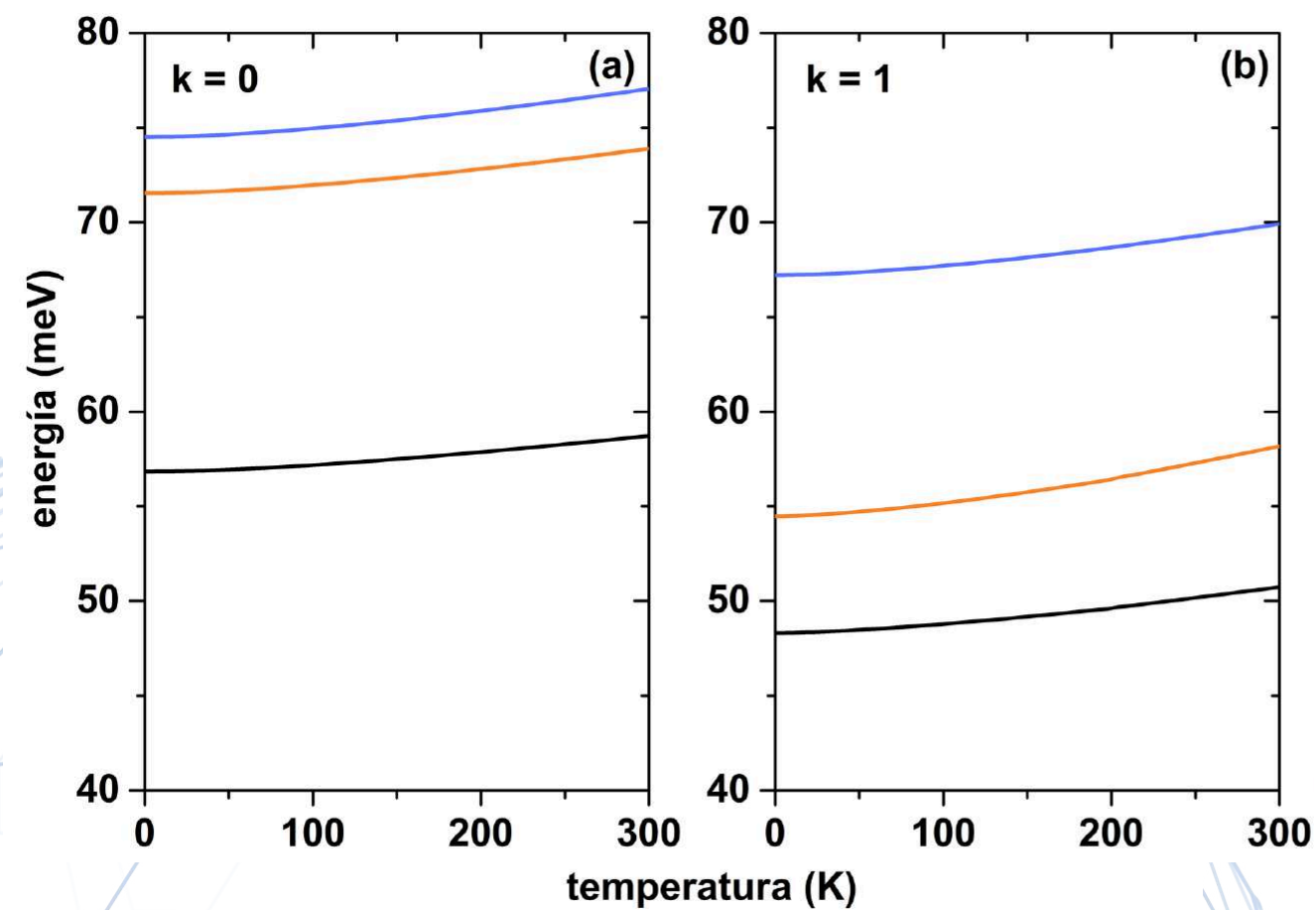


Figura 6. (a) (b) Energía del sistema en función del cambio de temperatura cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza.

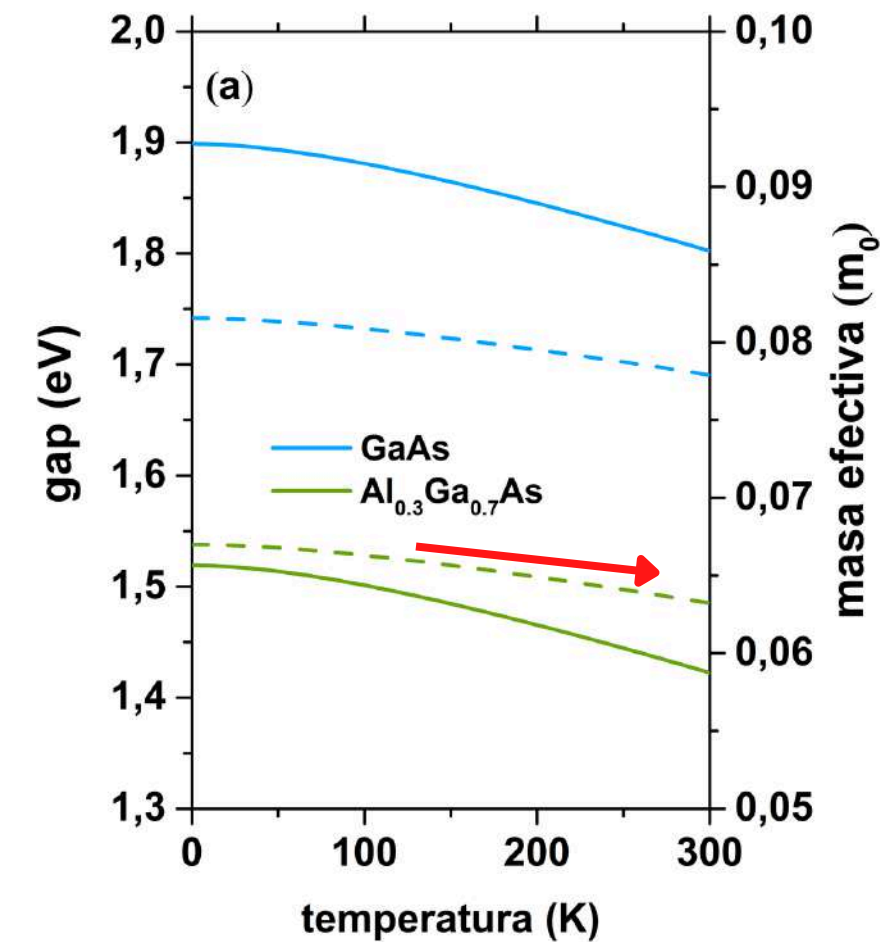


Figura 4. (a) Ancho de banda prohibida (línea sólida) y masa efectiva (línea punteada) para GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ con temperatura de 0 K a 300 K despreciando los efectos de la presión hidrostática.

$$\frac{-\hbar^2}{2m_*} \nabla^2 \psi \dots$$

$$\Delta \text{gap}_{T=0 \text{ K}} = 228 \text{ meV}$$

$$\Delta \text{gap}_{T=300 \text{ K}} = 228 \text{ meV}$$

Cambios en la constante dieléctrica

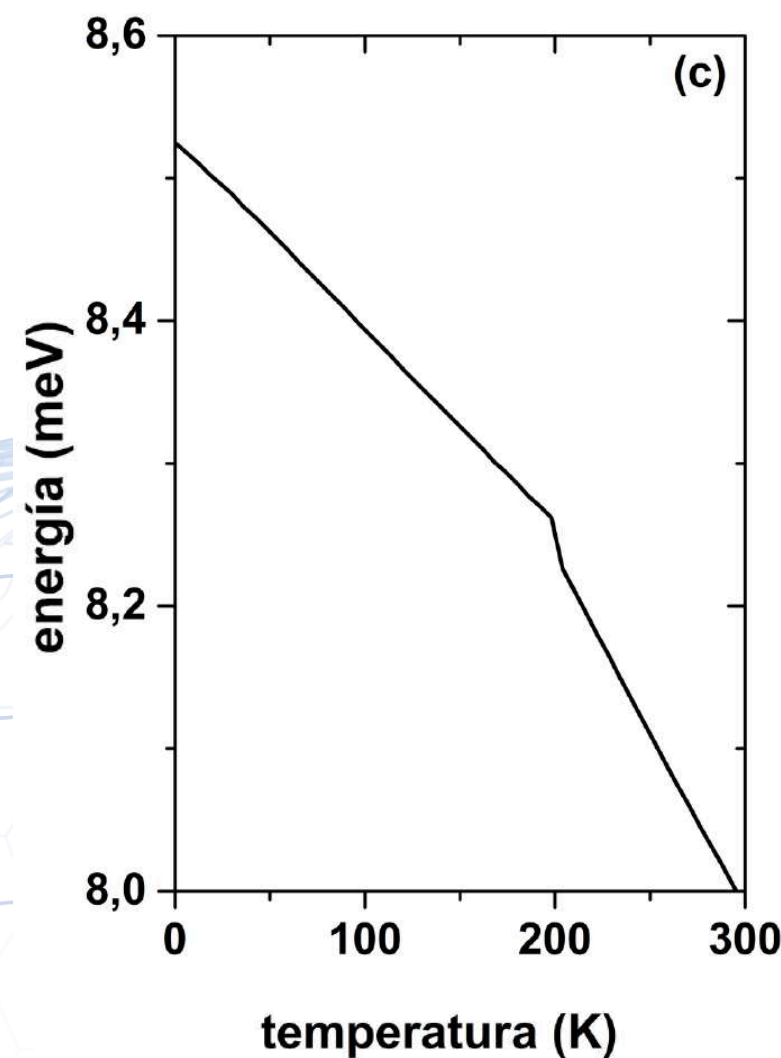


Figura 6. (c) Energía de enlace del sistema en función del cambio de temperatura cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza.

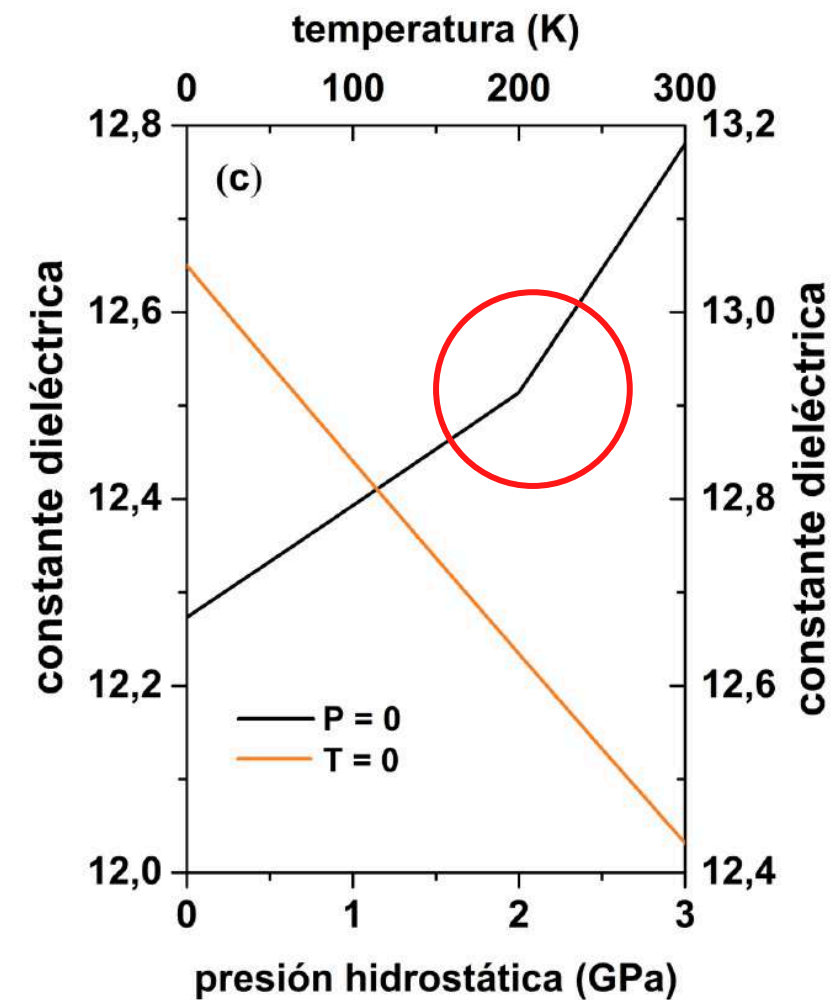


Figura 4. (c) La constante dieléctrica bajo los efectos de presión hidrostática despreciando la temperatura (línea roja) y bajo los efectos de la temperatura despreciando la presión hidrostática (línea negra).

$$\left(V(r, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right) \psi \dots$$

Conclusiones



Debido a la escala en la que se construyó el sistema, evidenciamos que los estados de energía de un electrón en un punto cuántico son discretos. Al variar la altura del pozo superior se nota que la carga tiende a ubicarse en el espacio de menor confinamiento, es decir, el tamaño de los pozos define la ubicación de la carga. En una altura de 8,25 nm para b se evidencia una migración del electrón del pozo cuántico inferior al superior, debido a que para esta dimensión en cada una de las regiones se encuentra un máximo de la función de onda.

En cuanto a la energía de enlace, puede apreciarse que esta es menor a medida que la altura del pozo cuántico superior aumenta ya que la impureza está más alejada del electrón, generando el decrecimiento de la energía.



Referencias

- [1] Gil Corrales, J. A., Morales Aramburo, A. L., and Duque Echeverri, C. A. (2018). Estados electrónicos de puntos cuánticos piramidales y cónicos. *Revista EIA*, **15**(30), 161–175. <https://doi.org/10.24050/reia.v15i30.1257>.
- [2] Pulgar-Velásquez, L., Sierra-Ortega, J., Vinasco, J. A., Laroze, D., Radu, A., Kasapoglu, E., Restrepo, R. L., Gil-Corrales, J. A., Morales, A. L., and Duque, C. A. (2021). Shallow Donor Impurity States with Excitonic Contribution in GaAs/AlGaAs and CdTe/CdSe Truncated Conical Quantum Dots under Applied Magnetic Field. *Nanomaterials*, **11**, 2832(19pp). <https://doi.org/10.3390/nano11112832>.
- [3] Sali, A., Rezzouk, A., Es-Sbai, N., and Ouazzani Jamil, M. (2019). The simultaneous effects of the wetting layer, intense laser and the conduction band non-parabolicity on the donor binding energy in a InAs/GaAs conical quantum dot using the numerical FEM. *Indian Journal of Pure & Applied Physics (IJPAP)*, **57**(7), 483-491. DOI: 10.56042/ijpap.v57i7.20359.
- [4] Osorio, J. A., Caicedo-Paredes, D., Vinasco, J. A., Morales, A. L., Radu, A., Restrepo, R. L., Martínez-Orozco, J. C., Tiutiunnyk, A., Laroze, D., Hieu, Nguyen N., Phuc, Huynh V., Mora-Ramos, M. E., and Duque, C. A. (2020). Pyramidal core-shell quantum dot under applied electric and magnetic fields. *Scientific Reports*, **10**, 8961(14pp). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-65442-x>.
- [5] Roghaieh Parvizi. (2015). Interband optical transitions of a strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dot/wetting layer with various In mole fractions. *Physica B: Condensed Matter*, **456**, 87-92. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.08.029>.

- [6] Zeiri, N., Naifar, A., Abdi-Ben Nasrallah, S., and Said, M. (2019). Theoretical studies on third nonlinear optical susceptibility in CdTe–CdS–ZnS core–shell–shell quantum dots. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, **36**, 100725(11pp). <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2019.100725>.
- [7] Ashrafi-dalkhani, Vahid & Ghajarpour, Sajad & Karimi, and Mohammad Javad. (2019). Effects of spin–orbit interactions, external fields and eccentricity on the optical absorption of an elliptical quantum ring. *The European Physical Journal*, **92**, 19(6pp). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90691-5>.
- [8] Vinasco, J. A., Radu, A., Tiutiunnyk, A., Restrepo, R. L., Laroze, D., Feddi, E., Mora-Ramos, M. E., Morales, A. L., and Duque, C. A. (2020). Revisiting the adiabatic approximation for bound states calculation in axisymmetric and asymmetrical quantum structures. *Superlattices and Microstructures*, **138**, 106384(13pp). <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106384>.

The background features a large, light blue wireframe sphere on the left side, composed of interconnected hexagonal and pentagonal lines. Several bees are scattered across the image: some are orange and positioned on the sphere's surface, while others are yellow and located in the white space to the right of the sphere. The word "GRACIAS" is centered in the middle of the image.

GRACIAS