

EFFECTOS DE LA PRESIÓN HIDROSTÁTICA SOBRE LA ENERGÍA DE ENLACE PARA IMPUREZAS DONADORAS EN PUNTOS CUÁNTICOS DE $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

Effects of the hydrostatic pressure on the binding energy of a shallow donor impurity in $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum dots.

RESUMEN

Usando el método variacional y la aproximación de masa efectiva calculamos la energía de enlace de impurezas donadoras en puntos cuánticos de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ con geometría cúbica, para tres valores de la presión hidrostática externa. Presentamos los resultados en función de la posición de la impureza en las direcciones x , y y z ; de las diagonales en los planos x - z , x - y , y de una diagonal en la heteroestructura; además como función de la presión hidrostática externa en la dirección z .

La energía de enlace disminuye conforme la impureza se acerca a las paredes de la heteroestructura y aumenta según lo hace la presión hidrostática externa.

PALABRAS CLAVES: Energía de enlace, heteroestructura, impurezas donadoras, presión hidrostática, puntos cuánticos.

ABSTRACT

Using the variational method within the effective-mass approximation we calculated the binding energy of a shallow donor impurity in quantum dots $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, with cubic geometry for three different applied values of the hydrostatic pressure. We present results as a function of the position of the donor impurity in the x and z directions, and in the x - z , x - y plane diagonal, and the heterostructure diagonal; moreover, as a function of the applied hydrostatic pressure applied in z direction.

The binding energy decrease according to the impurity is near to the edge of the heterostructure and increase when hydrostatic pressure increase.

KEYWORDS: Binding energy, donor impurity, heterostructure, hydrostatic pressure, quantum dots.

1. INTRODUCCIÓN

El efecto de la presión hidrostática en la energía de enlace es una herramienta importante para el estudio de los parámetros de la estructura de bandas y las propiedades ópticas y electrónicas de los cristales, también de las heteroestructuras de pozos cuánticos [1] y puntos cuánticos.

Con anterioridad a este trabajo ya se había calculado la energía de enlace de impurezas donadoras en pozos cuánticos por Bastard [2] y algunos otros autores. Csavinszky y Elabsy [3] realizaron cálculos de pozos cuánticos de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, con profundidades finita e infinita, para impurezas donadoras hidrogenoides. Duque et al [4], han reportado el efecto en la energía de enlace de aplicar campos eléctricos y magnéticos a impurezas donadoras en hilos cuánticos, no solo de la impureza en el estado base, sino también de algunos estados excitados; en estos estudios, los autores han encontrado un incremento de la energía de enlace con el decrecimiento de las dimensiones del pozo.

Además del estudio de estados de impurezas en hilos y pozos cuánticos, se han realizado estudios también para estados de impurezas en puntos cuánticos. Bose [5] reportó estudios de la energía de enlace de impurezas donadoras poco profundas en puntos cuánticos con geometría esférica, para un confinamiento con potencial parabólico. Varshni [6] ha reportado también resultados de cálculos de energía de enlace para impurezas donadoras en puntos cuánticos para los estados $1s$, $2p$, y $3d$. Elabsy [1] cálculo el efecto de la presión hidrostática a la energía de enlace de impurezas donadoras en pozos cuánticos, encontrando que la energía de enlace crece con el incremento de la presión hidrostática externa para anchos y temperaturas dadas. Oyoko et al [7] han reportado cálculos de la energía de enlace para impurezas donadoras poco profundas en puntos cuánticos rectangulares en función de la presión hidrostática aplicada en la dirección z de la heteroestructura.

En el presente trabajo se reporta, utilizando el método variacional y la aproximación de masa efectiva, los

WALTER OSPINA M.

Físico.

Profesor Auxiliar

Escuela de Ingeniería de Antioquia

pfwalter@eia.edu.co

RICARDO RESTREPO A.

Físico.

Profesor de Cátedra

Escuela de Ingeniería de Antioquia

pfrire@eia.edu.co

PARMÉNIDES ARISTIZÁBAL U.

Físico.

Profesor Auxiliar

Escuela de Ingeniería de Antioquia

pfparme@eia.edu.co

CARLOS A. DUQUE E.

Físico, Ph.D.

Profesor Asociado

Universidad de Antioquia

cduque@fisica.udea.edu.co

cálculos de la energía de enlace para impurezas donadoras hidrogenoides poco profundas, en un punto cuántico de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs con geometría cúbica, y sometido a una presión hidrostática externa aplicada en la dirección z.

2. MARCO TEÓRICO

En la aproximación de masa efectiva, el hamiltoniano para una impureza donadora poco profunda e hidrogenoide en un punto cuántico de Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs con geometría cúbica y sometida a una presión en la dirección z esta dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{w,b(P)}^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_{w,b(P)} r} + V_B(x, y, z, P) \quad (1)$$

donde $r = \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}$, es la distancia de la impureza - portador, y los subíndices w y b se refieren a las regiones del pozo y la barrera de potencial, respectivamente. $m_{w,b(P)}^*$ es la masa efectiva en las regiones antes mencionadas como función de la presión. $\epsilon_{w,b(P)}$ es la constante dieléctrica del material. V_B es la barrera de potencial que confina al electrón en el punto cuántico, y esta dado por

$$V_B(x, y, z, P) = \begin{cases} 0 & \text{para } |z| \leq \frac{L_z(P)}{2}, |x| \leq \frac{L_x}{2}, |y| \leq \frac{L_y}{2}, \\ V_0(P) & \text{para } |z| \geq \frac{L_z(P)}{2}, |x| \leq \frac{L_x}{2}, |y| \leq \frac{L_y}{2}, \\ \infty & \text{para } |x| \geq \frac{L_x}{2}, |y| \geq \frac{L_y}{2}, \end{cases} \quad (2)$$

donde

$$V_0(P) = Q_c \Delta E_g^\Gamma(x, P), \quad (3)$$

es la altura de la barrera, $Q_c = 0,658$ [1] es un parámetro experimental de la banda de conducción y $\Delta E_g^\Gamma(x, P)$ es el gap de energía de la heteroestructura en función de la presión P y la fracción molar de Aluminio x , representada por

$$\Delta E_g^\Gamma(x, P) = \Delta E_g^\Gamma(x) + PD(x), \quad (4)$$

con

$$\Delta E_g^\Gamma(x) = (1,155x + 0,37x^2) \text{ eV} \quad (5)$$

gap de energía y $D(x)$ coeficiente de presión de la banda de energía dada por

$$D(x) = [-1,3 \times 10^{-3}] x \text{ eV/kbar}. \quad (6)$$

En la ecuación (2) L_x , L_y , y L_z son las dimensiones del punto cuántico en las direcciones x , y , y z respectivamente. Para la dirección z , en la cual se aplica la presión

$$L_z(P) = L_z(0)[1 - (S_{11} + 2S_{12})P], \quad (7)$$

donde $S_{11} = 1,16 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ y $S_{12} = -3,7 \times 10^{-4} \text{ kbar}^{-1}$ son las constantes elásticas del GaAs y $L_z(0)$ es el ancho del pozo sin presión externa.

La función de prueba utilizada para los cálculos en el estado base esta dada por

$$\Psi(x, y, z) = N f(r) g(r), \quad (8)$$

donde

$$g(r) = \exp(-\lambda r), \quad (9)$$

es la parte hidrogenoide.

$$f(r) = \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) h(z), \quad (10)$$

con

$$h(z) = \begin{cases} \cos(\eta z) & \text{para } |z| < \frac{L_z(P)}{2}, \\ \cos\left(\eta \frac{L_z(P)}{2}\right) \exp\left[\beta \left(\frac{L_z(P)}{2} - z\right)\right] & \text{para } z \geq \frac{L_z(P)}{2}, \\ \cos\left(\eta \frac{L_z(P)}{2}\right) \exp\left[\beta \left(\frac{L_z(P)}{2} + z\right)\right] & \text{para } z \leq -\frac{L_z(P)}{2}. \end{cases} \quad (11)$$

En las ecuaciones (8) y (9), N y λ son, respectivamente, la constante de normalización y el parámetro variacional. En la ecuación (11) η y β están dadas por

$$\eta = \left[\frac{2m_{w(P)}^*}{\hbar^2} E_0^z \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (12)$$

y

$$\beta = \left[\frac{2m_{b(P)}^*}{\hbar^2} [V_0(P) - E_0^z(P)] \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

La dependencia de la energía de enlace de la impureza donadora con la presión se calcula mediante

$$E_b(P) = E_0(P) - \langle \Psi | H | \Psi \rangle_{\min(\lambda)} \quad (14)$$

donde $E_0(P)$ es el autovalor del hamiltoniano de la ecuación (1) sin el término de interacción con la impureza, y $\langle \Psi | H | \Psi \rangle_{\min(\lambda)}$ es el autovalor con el

término potencial de interacción de la impureza, minimizado con respecto al parámetro variacional λ .

En la siguiente sección presentamos los resultados para la energía de enlace de impurezas donadoras en puntos cuánticos en función de la posición en las direcciones x , y y z ; de las diagonales en los planos x - z , x - y , y de una diagonal en la heteroestructura; además como función de la presión hidrostática externa en la dirección z .

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la figura 1 presentamos los resultados teóricos para la energía de enlace de impurezas donadoras poco profundas en puntos cuánticos de $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ en función de la posición de la impureza en la heteroestructura, para tres valores diferentes de la presión hidrostática aplicada en la dirección z .

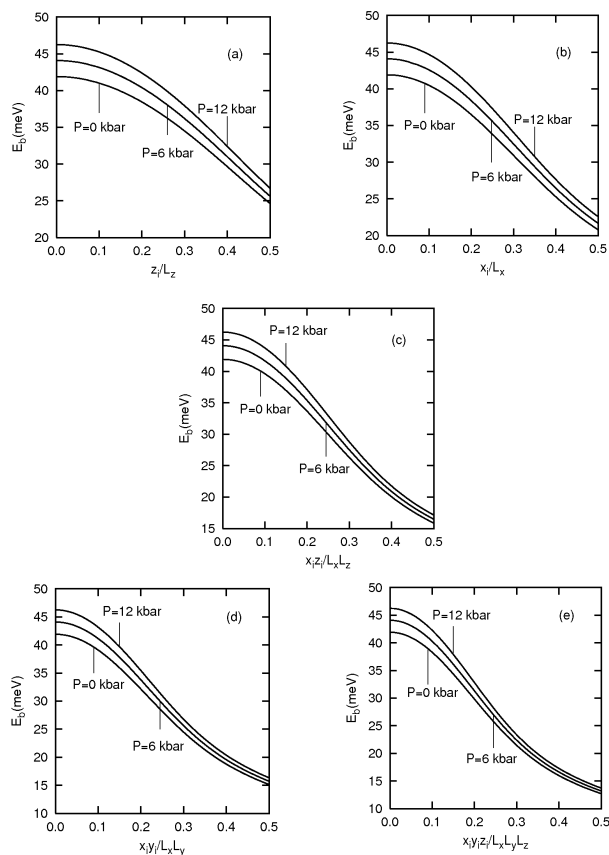


Figura 1. Energía de enlace para impurezas donadoras poco profundas en puntos cuánticos de $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ con geometría cúbica de lados $L_x = L_y = L_z = 100 \text{ \AA}$, como función de la posición de la impureza a lo largo de las direcciones z en (a), x en (b); de las diagonales en los planos x - z en (c), x - y en (d), y de una diagonal x - y - z en la heteroestructura en (e); también como función de la presión hidrostática aplicada en la dirección z .

Las curvas de la figura 1 son para un punto cuántico cúbico de lados $L_x = L_y = L_z = 100 \text{ \AA}$. La energía de enlace para la impureza colocada en el centro del punto cuántico es más alta que la energía de enlace para la impureza colocada en alguna de las caras de éste. Se observa además, que cuando la presión aumenta la energía de enlace también lo hace, debido a la disminución de la dimensión de L_z . La disminución de la energía de enlace, en todos los casos, se debe a la repulsión que la barrera de potencial ejerce sobre la función de onda a medida que la impureza se acerca a la cara de la heteroestructura. La repulsión que las paredes ejercen sobre la función de onda es diferente según la dirección en la que se mueva la impureza, si la impureza se mueve en la dirección z , figura 1(a), se encuentra con una barrera de potencial de valor finito mientras que si se mueve en la dirección x , figura 1(b), la barrera de potencial es infinita, siendo por tanto la repulsión sobre la función de onda mayor, hecho por el cual la energía de enlace en dicha dirección es menor que en la dirección z ; cuando la impureza se mueve por la diagonal del plano x - z hasta llegar al punto de coordenadas $(\frac{L_x}{2}, 0, \frac{L_z}{2})$, figura

1(c), la energía de enlace en dicha dirección es menor que en las direcciones anteriores debido a la repulsión que ejercen al tiempo los dos potenciales, finito en la dirección z e infinito en la dirección x , sobre la función de onda; para la impureza moviéndose por la diagonal del plano x - y hasta llegar al punto de coordenadas $(\frac{L_x}{2}, \frac{L_y}{2}, 0)$, figura 1(d), la repulsión que ejercen al tiempo los dos potenciales infinitos es mayor que en los casos anteriores, siendo por lo tanto la energía de enlace en esta dirección menor; y cuando la impureza se mueve en la diagonal de la heteroestructura hasta llegar al punto de coordenadas $(\frac{L_x}{2}, \frac{L_y}{2}, \frac{L_z}{2})$, figura 1(e), la energía de

enlace es menor que en todas las direcciones anteriores, debido a la repulsión que hacen al tiempo sobre la función de onda los tres potenciales.

Se observa además en la figura 1 diferencias en el desplazamiento de las curvas cuando la impureza se encuentra en el centro de la heteroestructura y en las cercanías de la cara de la misma, esto se debe a que cuando la impureza está en el centro del punto cuántico la función de onda siente el efecto conjunto del acercamiento de las dos caras, mientras que cuando está en una de las caras sólo siente el efecto del acercamiento de ésta.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo calculamos, usando la aproximación de masa efectiva y el método variacional, la energía de enlace del estado fundamental para una impureza donadora poco profunda e hidrogenoide en un punto cuántico de $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ con geometría

cúbica. Se observa que la energía de enlace es función de la posición de la impureza, ya que conforme ésta se mueve desde el centro de la heteroestructura hasta alguna de sus caras, la energía de enlace decrece. Estos resultados están en buen acuerdo con los reportados en la literatura para pozos, hilos y puntos cuánticos con diversas geometrías, y bajo la influencia de distintos potenciales de confinamiento.

La energía de enlace aumenta cuando la presión hidrostática aplicada aumenta. La separación entre las curvas de energía de enlace es mayor cuando la impureza se encuentra en el centro de la heteroestructura. A medida que la impureza se desplaza hacia las fronteras, la separación entre las curvas se hace menor, tendiendo todas a un mismo valor.

En un cálculo realizado para un punto cuántico rectangular de dimensiones $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$ y $L_z = 200 \text{ \AA}$, encontramos que las curvas de la energía de enlace para las presiones hidrostáticas aplicadas de 0kbar, 6kbar y 12kbar, en cada caso, tienen un comportamiento similar al presentado en la figura 1, razón por la cual omitimos las gráficas. En general la energía de enlace cuando la impureza está en el centro de la heteroestructura tiende a un valor de 35 meV.

5. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Dirección de Investigación de la Escuela de Ingeniería de Antioquia-EIA y por el CODI-Universidad de Antioquia.

6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. M. Elabsy, "Hydrostatic pressure dependence of binding energies for donors in quantum well heterostructures," *Phys. Scr.* vol. 48 pp. 376-378, 1993.
- [2] G. Bastard, "Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model," *Phys. Rev. B* vol. 24 pp. 4714-4722, 1981.
- [3] P. Csavinszky, A. M. Elabsy., "Dielectric response to a donor ion in a $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum well of infinite depth," *Phys. Rev. B* vol. 32 pp. 6498-6502, 1985.
- [4] C. A. Duque, A. L. Morales, A. Montes and N. Porrás-Montenegro, "Effects of applied electric fields on the infrared transitions between hydrogenic states in GaAs low-dimensional systems," *Phys. Rev. B* vol. 55 pp. 10721-10728, 1997.
- [5] C. Bose, "Binding energy of impurity states in spherical quantum dots with parabolic confinement," *J. Appl. Phys.* vol. 83 pp. 3089-3092, 1988.
- [6] Y. P. Varshni, "Accurate wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots," *Phys. Lett. A* vol. 252 pp. 248-250, 1999.
- [7] H. O. Oyoko, C. A. Duque, and N. Porrás-Montenegro, "Uniaxial stress dependence of the binding energy of shallow donor impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots," *J. Appl. Phys.* vol. 90 pp. 819-823, 2001.