



Universidad Autónoma de San Luis Potosí
Facultad de Ciencias



**Estudio teórico del confinamiento cuántico de muchos electrones
en nanohilos semiconductores y del uso de planos de GaAs de
alto índice para su autoensamble.**

Presenta:

M. en C. Reyna Méndez Camacho.

Asesor:

Dr. Esteban Cruz Hernández, CIACyT-UASLP.

Co-asesor:

Dr. Ramón Castañeda Priego, DCI-UGTO.

Trabajo de tesis para obtener el grado de **Doctor en Ciencias Aplicadas** en el Área de Nanociencias, Nanotecnología y Energías Alternativas; desarrollada en la Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y Tecnología.

San Luis Potosí, S. L. P., a 19 de Agosto del 2016.

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Facultad de Ciencias

Estudio teórico del confinamiento cuántico de muchos electrones en nanohilos semiconductores y del uso de planos de GaAs de alto índice para su autoensamble.

Presenta:

M. en C. Reyna Méndez Camacho.

para obtener el grado de **Doctor en Ciencias Aplicadas** en el Área de Nanociencias, Nanotecnología y Energías Alternativas; desarrollada en la Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y Tecnología-UASLP.

Comité evaluador

Asesor: Dr. Esteban Cruz Hernández, CIACyT-UASLP.

Co-asesor: Dr. Ramón Castañeda Priego, DCI-UGTO.

Sinodal externo: Dr. Máximo López López, Física-CINVESTAV.

Sinodal: Dra. Mildred Quintana, IF-UASLP.

Sinodal: Dr. Víctor H. Méndez García, CIACyT-UASLP.

San Luis Potosí, S. L. P., a 19 de Agosto del 2016.

Agradecimientos

Quiero agradecer primeramente a mis asesores: El Dr. Esteban Cruz Hernández y Dr. Ramón Castañeda Priego, por el tiempo invertido en mi aprendizaje. Por su dedicación, orientación, motivación, amistad y confianza brindada durante todo este periodo de trabajo. Por aventurarse a realizar nuevos estudios mezclando diferentes áreas de investigación.

A mi familia la cual fue y son mi mayor motor para seguir adelante día con día en las etapas más difíciles y a mis padres y hermanos porque a pesar de la distancia siempre cuento con su apoyo y cariño.

Al grupo SQS: Dr. Víctor Hugo, José Ángel, Irving Eduardo, Eric Eugenio, Dr. Antonio del Río, quienes me apoyaron durante los crecimientos, me enseñaron lo placentero que es trabajar en equipo y me brindaron su amistad.

A los Drs. Donato Valdés, Miguel Angel Vidal y Angel Gabriel quienes me apoyaron en la obtención de las imágenes AFM.

A los Drs. Víctor Hugo, Máximo López y Mildred Quintana por sus correcciones a mi trabajo semestre a semestre.

A la CIACyT, por brindarme un lugar agradable de trabajo.

Al CONACyT por el apoyo económico proporcionado para realizar y obtener mi grado de doctorado.

Contenido

Introducción	1
Motivación	3
Objetivos	8

Capítulo I.- Antecedentes

I.1.- Materiales semiconductores e índices de Miller	9
I.1.1.- Índices de Miller.....	9
I.1.2.- Planos de alto índice de Miller.....	9
I.1.3.- Proyección estereográfica y triángulo estereográfico.....	10
I.1.4.- Semiconductores III-V.....	11
I.1.5.- Semiconductores intrínsecos y dopados.....	12
I.2.- Epitaxia por haces moleculares (MBE)	14
I.3.- Estructuras de baja dimensionalidad	16
I.3.1.- Confinamiento cuántico en heteroestructuras semiconductoras.....	16
I.3.2.- Barreras de potencial de confinamiento.....	18
I.3.3.- Confinamiento 1D: Hilos cuánticos (HCs).....	19
I.4.- Métodos de fabricación HCs	19
I.4.1- Top-down approach (métodos litográficos).....	19
I.4.2- bottom-up approach (métodos auto-ensamble).....	20
I.4.3- Métodos VLS (formación nanocolumnas).....	20
I.4.4- Substratos vecinales y substratos de alto índice (HI).....	21
I.5.- Dinámica superficial en el crecimiento de facetas por MBE	22
I.5.1.- Procesos dinámicos: step-bunching.....	22

1.5.2.- Componente elástica: modelo de Marchenko.....	23
1.5.3.- Procesos no lineales: Coarsening.....	24

Capítulo II.- Marco teórico

II.1.- Diferentes modelos teóricos de HC.....	26
II.1.1- Simulación y modelos teóricos aplicados a HC.....	26
II. 2. - Cristal de Wigner: electrones en 1D.....	31
II.3.- Tratamiento de interacción de muchos cuerpos: Potencial Yukawa.....	32
II.3.1 Potencial Yukawa en cuántica.....	32
II.3.2 Potencial Yukawa en mecánica estadística.....	34
II.4.- Nuestro modelo: Potencial Yukawa para muchos electrones en un HC.....	34
II.4.1- HCs de sección transversal circular y cuadrada.....	35
II.4.2- HCs de paredes infinitas y finitas.....	36
II.4.3 HCs bajo el efecto de un campo eléctrico externo.....	37
II.4.4 HCs acoplados: tunelamiento para un sistema de barreras finitas sin potenciales externos.....	37

Capítulo III.- Desarrollo experimental

III.1.- Difracción de electrones de alta energía difractados (RHEED, por sus siglas en ingles).....	40
III.2.- Microscopía de Fuerza Atómica(AFM, por sus siglas en inglés).....	41
III.3.- Condiciones de crecimiento.....	42

Capítulo IV.- Resultados experimentales

IV.1 Análisis RHEED: formación de nanofacetas.....	44
IV.2.- Patrones RHEED y formación de facetas.....	49

IV.3.- Análisis AFM.....	51
IV.4.- Plano (631) en el triángulo estereográfico.....	55
IV.5.- Nuevas direcciones de facetamiento 1D en substratos Al dentro del triángulo estereográfico.....	57
IV.6.- Evolución del facetamiento 1D en el plano (631).....	60
IV.6.1.- Análisis de perfiles AFM.....	61
IV.7.- Coarsening en superficies GaAs de alto índice.....	62
IV.7.1.- homogeneidades mas allá de $1\mu\text{m}^2$:estructuras 1x-2x.....	63
IV.7.2.- Interacciones elásticas 2D: Estructuras 1x-2x.....	63
IV.7.3.- Análisis ACF: Periodicidad de alto orden.....	70
IV.7.4.-Coarsening en las primeras etapas: difusión a lo largo de los canales.....	73

Capítulo V.- Resultados Teóricos: Muchos electrones dentro de hilos cuánticos.

V.1.- Implementación del Potencial Yukawa a un sistema de 2 electrones en HCs cilíndricos y cuadrados con barreras infinitas.....	74
V.1.1 El límite $\kappa \rightarrow \infty$: electrón libre o material en bulto.....	74
V.1.2 El límite $\kappa \rightarrow 0$: Interacción Coulombica.....	75
V.1.3 Densidades electrónicas para los primeros estados confinados: sección transversal.....	76
V.1.4 Densidades electrónicas para los primeros estados confinados: sección longitudinal.....	78
V.1.5 Potencial Yukawa y formación de cristal de Wigner en una dimensión.....	80
V.2 Implementación del Potencial Yukawa en un sistema de 2 electrones dentro de un Hilo cuántico cilíndrico y cuadrado con barreras finitas.....	82

V.2.1 Barreras finitas: sección transversal.....	83
V.2.2 Sección transversal: tunelamiento electrónico.....	84
V.2.3 Barreras finitas: sección longitudinal.....	86
V.3 Barreras finitas: efecto de un campo eléctrico externo.....	88
V.4 Dos hilos cuadrados paralelos con barreras finitas.....	91
Conclusiones.....	95
Apéndices.....	98
Referencias.....	116

INTRODUCCIÓN

La tecnología ha aportado y aporta grandes beneficios a la humanidad. A lo largo de la historia, el uso de diferentes tipos de tecnologías ha permitido satisfacer de mejor manera necesidades esenciales de alimentación, vestimenta, vivienda, protección personal, comunicación o comprensión del mundo. Al crear herramientas útiles que simplifican y potencializan una gran cantidad de tareas cotidianas, la tecnología juega un papel muy importante en nuestras vidas.

En las últimas décadas, el surgimiento de dispositivos avanzados (telefonía celular, computadoras, internet, láseres, sensores, etc.) ha sido potencializado a partir del desarrollo de la nanotecnología, la cual es la tecnología de sistemas a escala de nanómetros (10^{-9} m). El progreso de la nanotecnología ha sido posible debido a los avances en las técnicas de fabricación de estructuras nanométricas y técnicas avanzadas de microscopía. En el periodo de 1970-1980 fue inventada la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE), la cual se empleó para la fabricación de capas ultradelgadas y superredes de alta calidad cristalina. Durante este periodo surgieron también los procesos de litografía y grabado para fabricar dispositivos a micro y nano-escala. En la década de 1980 y hasta la actualidad, se han desarrollado nuevas técnicas epitaxiales tales, como la epitaxia de fase vapor mediante precursores metalorgánicos (MOVPE), que permitieron reducir costos al permitir fabricar dispositivos a escala industrial.

En la actualidad existe aún el reto de encontrar procesos que permitan fabricar arreglos de nanoestructuras semiconductoras de forma controlada y sin ocupar técnicas costosas o lentas tales como los procesos litográficos. Entre estas nuevas técnicas en exploración se encuentran las basadas en el auto-ensamble de nanoestructuras. Para el caso particular de los hilos cuánticos, que son las nanoestructuras en las que estaremos interesadas en esta tesis, este auto-ensamble puede lograrse mediante el crecimiento epitaxial sobre sustratos de alto índice (AI) que proporcionen la formación de arreglos ordenados de estructuras uniformes unidimensionales (1D) de dimensiones nanométricas. Los sistemas confinados 1D poseen un enorme potencial tecnológico para mejorar el desempeño de dispositivos conocidos (láseres, diodos emisores de luz, transistores, celdas solares) y para generar dispositivos con características completamente novedosas.

En el presente trabajo estudiamos, por el lado experimental, el uso de sustratos de alto índice (631) de GaAs para auto-ensamblar nanoestructuras semiconductoras 1D, los cuales logren presentar efectos de confinamiento de tipo hilo cuántico y, en la parte teórica, la interacción de muchos electrones en estos hilos cuánticos mediante un modelo basado en potenciales tipo Yukawa.

La distribución de esta tesis es la siguiente: En el capítulo I presentamos una breve introducción sobre compuestos semiconductores III-V y la técnica que

utilizamos para los crecimientos. Se introduce además el concepto de confinamiento cuántico en diversas dimensiones, el auto-ensamble de nanoestructuras semiconductoras por medio de MBE y el uso de sustratos de Al. Finalmente, se describen los modelos de step-bunching, el modelo elástico de Marchenko y la teoría de coarsening; los cuales son comúnmente utilizados para describir la formación y evolución de superficies facetadas auto-ensambladas.

En el capítulo II se desarrolla el marco teórico en el cual presentamos un recuento de los diferentes modelos y técnicas de simulación más utilizados en sistemas tipo hilo cuántico. Además, se describe a detalle un nuevo tratamiento, desarrollado en este trabajo de tesis, para tratar la interacción de muchos electrones confinados en sistemas cuánticos por medio del uso del potencial tipo Yukawa. Tal potencial es empleado en este trabajo para sistemas 1D de sección transversal cuadrado y circular con barras finitas e infinitas. Finalmente, se explora el uso de este potencial para tratar sistemas 1D bajo efectos de campo eléctrico externo análogo a transporte estacionario.

En el capítulo III presentamos el desarrollo experimental. Se reportan los detalles experimentales asociados a las muestras de GaAs crecidas por MBE sobre superficies de GaAs de alto índice (631). Se introducen además las técnicas de AFM y RHEED utilizadas en el estudio de la morfología superficial de las muestras.

El capítulo IV se divide en resultados experimentales y teóricos. En la sección de resultados experimentales reportamos la reproducción de facetamiento uniforme en sustratos de GaAs(631) en el equipo de MBE instalado en la CIACYT-UASLP. Además, explicamos diversos procesos superficiales que surgen en el crecimiento sobre sustratos de alto índice localizados dentro del triángulo estereográfico y proponemos un modelo de formación de facetas en este tipo de planos. Adicionalmente, planteamos la existencia de otros planos de Al dentro del triángulo estereográfico para la formación de arreglos de nanofacetas periódicas. Por otro lado, en la parte de resultados teóricos, presentamos la aplicación y estudio sistemático de hilos de sección transversal cuadrada y circular por medio del potencial tipo Yukawa, simplificando con ello el tratamiento de sistemas de muchos cuerpos. Como se verá, este modelo propuesto además de ser más sencillo de tratar que otros modelos encontrados en la literatura, logra reproducir la formación de la molécula de Wigner y facilita el estudio de su dependencia con la densidad de portadores de carga. Los resultados obtenidos son comparados con resultados teóricos y experimentales sobre la cristalización de Wigner en sistemas 1D.

Finalmente, presentamos las conclusiones principales encontradas en el desarrollo de este trabajo y se dan algunas perspectivas y trabajos a futuro que se desprenden de nuestros resultados. Los desarrollos matemáticos de algunos aspectos de los modelos y métodos para abordar su solución son presentados a detalle en los apéndices.

MOTIVACIÓN

Los HCs son sistemas de gran interés por sus propiedades únicas, las cuales tienen gran potencial para su aplicación como dispositivos novedosos o para explorar nuevos fenómenos físicos tales como la formación de líquidos de Luttinger, cristalización de Wigner o transporte balístico en HCs. Entre las potenciales aplicaciones podemos mencionar las siguientes:

1. Aplicaciones fotovoltaicas: Una de las potenciales aplicaciones es en celdas solares, para las cuales se emplean uniones de materiales dopados tipo p, n o i (intrínsecos), ya sean tipo p-n, n-p o p-i-n, esto por medio de hilos tipo core/shell. La configuración más común propuesta para estos dispositivos es el arreglo periódico de hilos cuánticos dopados verticales insertado entre regiones de un material con un dopaje diferente al de los hilos o el vacío (Fig. 1a). Experimentalmente este tipo de arreglos son obtenidos mediante el proceso de auto-ensamble. En un dispositivo de este tipo, la presencia de un gas de electrones 1D a través de la región de unión dará lugar a una colección rápida de los portadores foto generados en la región de los HCs, obteniendo una mejora en las propiedades de absorción asociadas a la presencia de estados cuánticos confinados en los HCs. En la figura 1b se muestra el espectro de absorción de un arreglo de HCs de Si en función de la longitud de onda de iluminación. En la figura 1c se muestran los diferentes patrones de difracción asociados a distintas geometrías en el arreglo de HCs de Si [1,2].

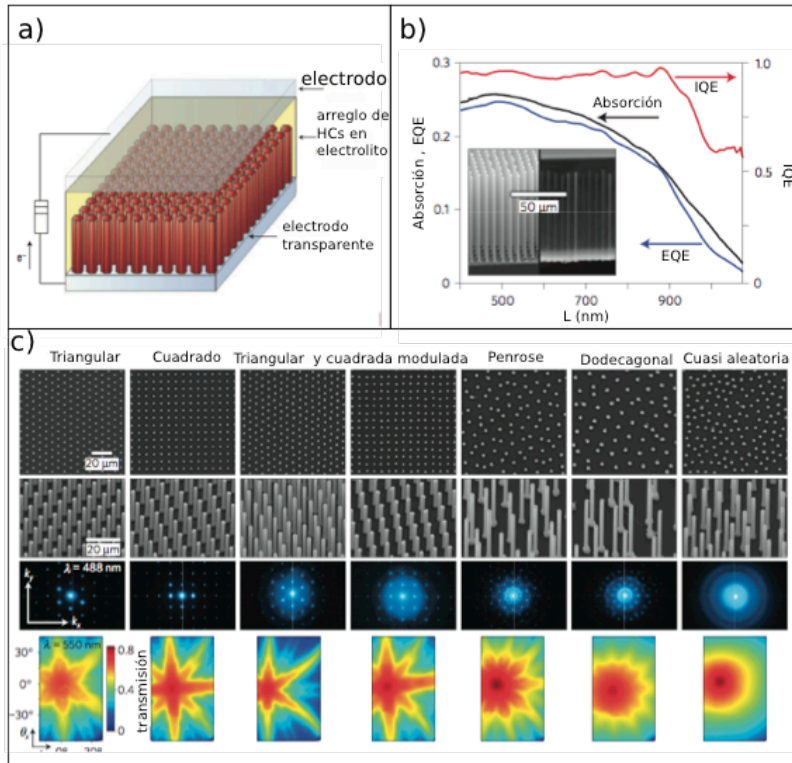


Figura 1.- a) Arreglo vertical de HCs propuesto para su aplicación en celdas solares [1], b) espectro de absorción para un arreglo de HCs verticales de Si en función de la longitud de onda de iluminación, c) patrones de difracción para diferentes arreglos de HCs de Si de la figura b) [2].

2. Aplicaciones fotónicas: La fotónica implica el control de los fotones en el espacio libre o en la materia. La manipulación de los fotones en cristales semiconductores en bulto y películas delgadas, ha dado como resultado avances tales como LEDs y láseres. El éxito continuo de las tecnologías fotónicas se basa en el descubrimiento de nuevos materiales ópticos y la miniaturización de los dispositivos optoelectrónicos que ofrecen un mejor rendimiento, bajo costo y bajo consumo de energía. Para las últimas dos décadas, los esfuerzos de todo el mundo en la investigación de los nanomateriales ha dado lugar a una amplia colección de nanoestructuras donde el tamaño, forma y composición pueden controlarse fácilmente. Muchas de esas nanoestructuras presentan propiedades ópticas interesantes que podrían tener un impacto significativo en el futuro para la tecnología fotónica. El uso de sistemas 1D en dispositivos fotónicos ha sido de gran interés recientemente debido a la potencial capacidad de controlar la propagación de la luz y mejor rendimiento de láseres semiconductores, aprovechando sus propiedades de transporte. Las ventajas potenciales de los láseres de HCs podrían hacerlos ideales para una variedad de aplicaciones que requieren fuentes de luz coherente con bajo consumo de energía y la capacidad de modulación digital de alta velocidad. Las técnicas de fabricación para el crecimiento de heteroestructuras de HCs para su aplicación en láseres, hasta la fecha se han realizado a través de

epitaxia de haces moleculares, micro-fabricación y técnicas de litográfica en materiales como GaAs/InP, AlGaIn/GaN, InAs/InP, InAs/InGaP. Estas técnicas son las más aptas ya que por medio de ellas se tiene un excelente control en la geometría y composición del crecimiento de HCs. Estos sistemas regularmente son arreglos uniformes de HCs por medio de auto-ensamblado o tipo columnar. En la figura 2 se muestran algunos ejemplos de aplicaciones de HCs en láseres [3,4].

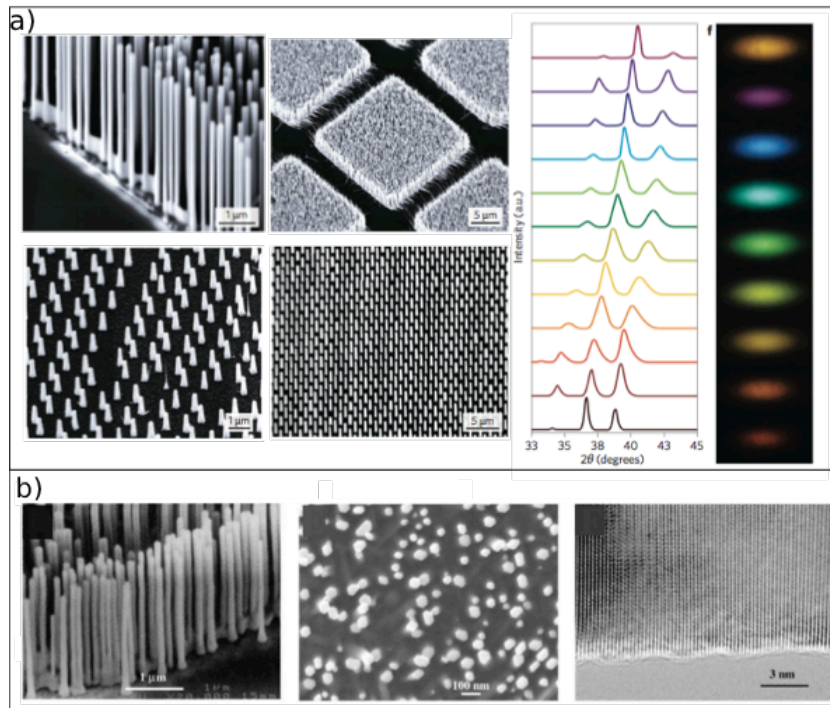


Figura 2.- a) Arreglos periódicos con diferentes concentraciones de HCs visto por medio de SEM para su aplicación en láseres y su respectivo espectro de emisión de luz [3], b) Arreglo periódico de hilos columnares vistos mediante SEM[4].

3. Aplicaciones electrónicas: Otra de las aplicaciones de HCs semiconductores son en la electrónica, que debido a la baja dimensionalidad juegan un papel crítico en la determinación de las propiedades del material. Por ejemplo: la manipulación del camino seguido por los electrones a través de un HC y el efecto en la variación de las dimensiones de éste, el dopaje que es un factor clave para aplicaciones en dispositivos como los transistores de efecto de campo (FET). Recientes estudios han utilizado este tipo de estructuras 1D para el transporte de portadores de carga en sistemas de HCs auto-ensamblados. En la literatura se reportan FETs desarrollados con HCs de materiales como: Si, Ge y GaN. En la figura 3 mostramos algunas de estructuras de HCs que se han utilizado para aplicaciones electrónicas tales como: estructuras homogéneas, heteroestructuras axiales y heteroestructuras radiales para el estudio de diagramas de bandas y su uso como compuertas lógicas [5].

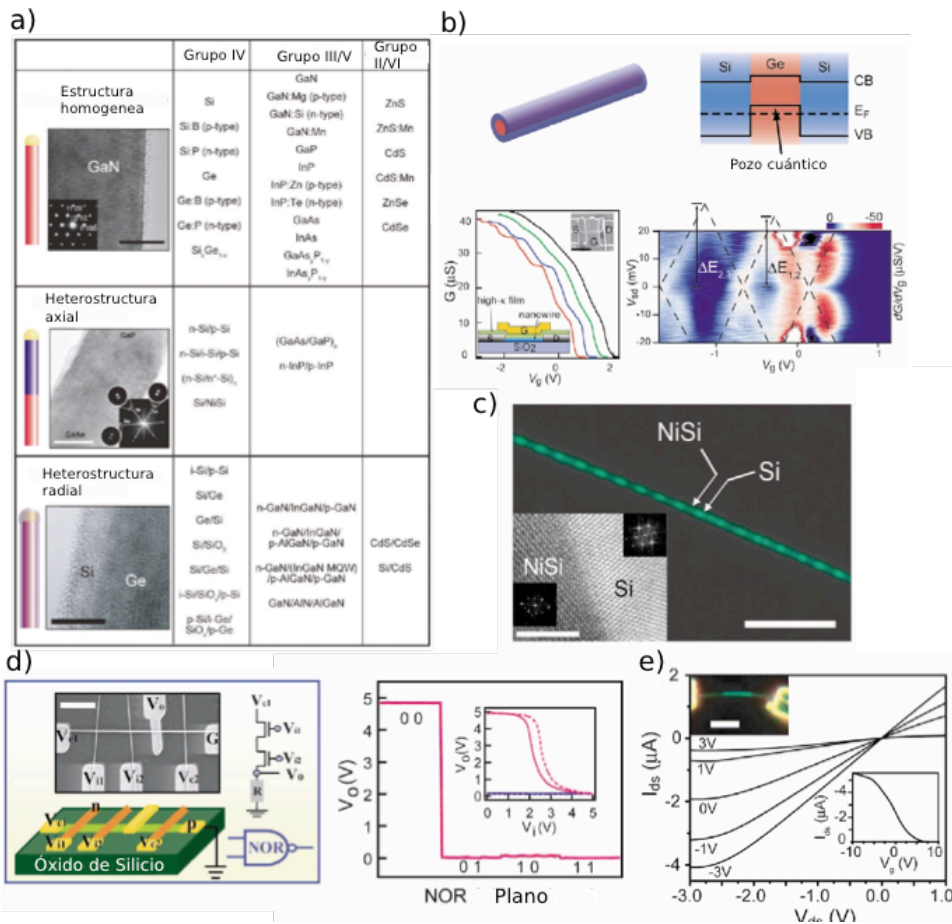


Figura 3.- a) Esquema de la estructura obtenida por TEM de HCs semiconductores homogéneos, axiales y radiales, b) Esquema de HC tipo core/Shell de Ge/Si intrínseco con su correspondiente diagrama de bandas, gráfica G-V en función de la temperatura y transconductancia en función de V_g , c) imagen de un HC de NiSi/Si y una superred de estos HCs, e) curva I-V del sistema mostrado en c), d) Esquema de una compuerta tipo NOR construida por medio de un arreglo de HCs con su respectiva gráfica de voltajes [5].

- Aplicaciones como sensores: Debido a la grande relacione de superficie a volumen y una longitud de Debye comparable a sus dimensiones, los HCs han mostrado un gran potencial para ser utilizados como sensores químicos. Recientemente, se ha informado de la detección de una amplia gama de productos químicos con diferentes configuraciones de sensores de HCs. Un sensor basado en un resistor es uno de los métodos más fáciles para llevar a cabo experimentos de detección química, el cual consiste en medir el cambio de conductancia del elemento de detección en diferentes ambientes. En este tipo de sistemas los HCs son dispersados en un sustrato colocando los electrodos por encima de los HCs dispersos, (Fig. 4a, b) [6]. Estos HCs típicamente son crecidos por VLS, evaporación térmica ablación Laser MBE, entre otras. Algunos ejemplos de HCs como

sensores son:

- El monitoreo de forma intra e inter celular por medio de captación de señales eléctricas (Fig. 4c) [7].
- Su uso como bio-sensores eléctricos para su aplicación en el área médica (Fig. 4d) [8].

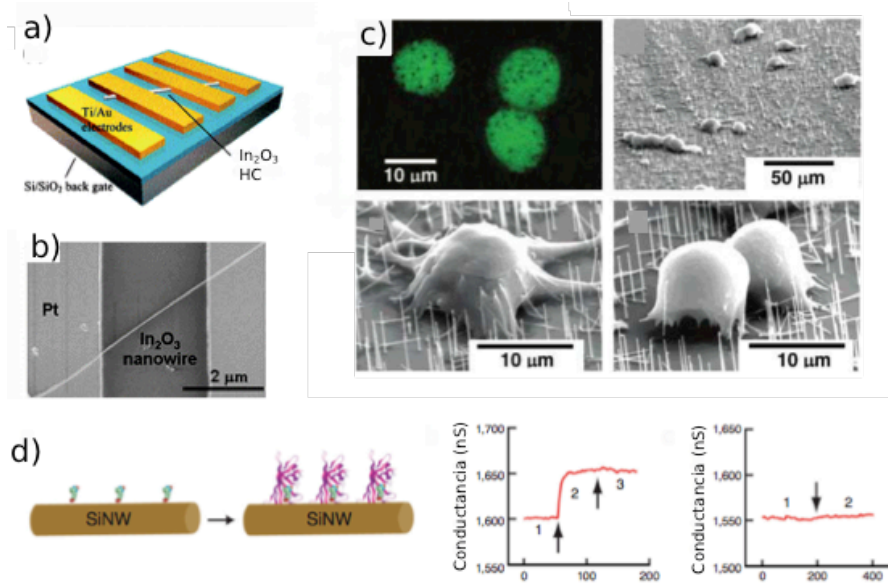


Figura 4.- a) Diagrama esquemático de una estructura de HC para su uso como sensor [6], b) Imagen SEM del dispositivo descrito en el diagrama a), c) HCs usados para el monitoreo de células vivas [7], d) Estructura de HC para su uso como bio-sensor con sus respectivas respuesta de conductancia y señal eléctrica [8].

Así, una de las principales motivaciones de este trabajo es estudiar más a fondo los procesos superficiales en el plano de alto índice (631); lo cual permita establecer parámetros óptimos para la fabricación de arreglos uniformes de HCs potencialmente aplicables en dispositivos como los descritos anteriormente. Además, dado que los modelos teóricos existentes para abordar el problema de muchos electrones aplicados a sistemas 1D son complejos y costosos computacionalmente, es de gran interés desarrollar un modelo que describa de forma sencilla la interacción de un número de electrones tan grande como $10^{18} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en estos sistemas.

OBJETIVOS

El objetivo principal de este trabajo es obtener superficies facetadas uniformes por medio de auto-ensamble en superficies de alto índice para su uso en el crecimiento de hilos cuánticos, los cuales nos sirvan para comprobar los resultados obtenidos por un modelo propio de la interacción de muchos cuerpos en sistemas 1D. Esto conlleva los siguientes objetivos particulares:

1. Encontrar las condiciones experimentales adecuadas que produzcan la formación de facetas uniformes en el MBE de la CIACyT-UASLP y analizar sus respectivos patrones RHEED, los cuales no habían sido obtenidos anteriormente.
2. Estudiar los procesos superficiales en el plano (631) que dan lugar a la formación de facetas uniformes con la finalidad de tener mayor control sobre su morfología final.
3. Realizar un estudio teórico y encontrar un modelo que permita describir la evolución de regiones corrugadas uniformes y no uniformes encontradas por AFM de muestras de GaAs/GaAs(631).
4. Relacionar los resultados obtenidos teóricamente con parámetros involucrados experimentalmente, con la finalidad de desarrollar un análisis teórico predictivo para ser utilizado durante el proceso experimental.
5. Estudiar de forma sistemática los modelos y simulaciones existentes que son aplicados al problema de la interacción de muchos electrones dentro de sistemas de hilos cuánticos.
6. Proponer un modelo que se adecue al problema de interacción de muchos cuerpos que sea simple de tratar, que incorpore parámetros de materiales reales y que permita tratar un número tan alto como 10^{18} electrones por cm^3 , el cual es el número típico de electrones en un material impurificado.

CAPÍTULO I.- ANTECEDENTES

I.1.- Materiales semiconductores e índices de Miller

Los cristales son materiales sólidos, en los que los átomos, moléculas o iones se distribuyen periódicamente, formando una estructura ordenada. Los componentes de un cristal se encuentran unidos mediante enlaces interatómicos de diferentes tipos: enlaces metálicos, iónicos, covalentes, fuerzas de van der Waals, entre otros. Este arreglo ordenado permite la formación de bandas de energía, las cuales a su vez permite diferenciar entre materiales conductores, semiconductores o aislantes. En este trabajo estaremos enfocados en estudiar compuestos semiconductores III-V, en específico, los compuestos GaAs y AlGaAs y el como con ellos se pueden fabricar arreglos de HCs.

I.1.1.- Índices de Miller

Para identificar los planos en los cristales se les asignan 3 números que reciben el nombre de índices de Miller. Estos generalmente se indican con las letras (h k l), que son números enteros, positivos o negativos, y se calculan fácilmente mediante el siguiente procedimiento:

1. Se define un sistema de ejes coordenados de referencia. Usando un sistema de coordenadas de mano derecha, se elige el plano.
2. Se determinan las intersecciones del plano con los ejes, estas intersecciones pueden ser fracciones.
3. Se obtiene el recíproco de las intersecciones.
4. Se simplifican las fracciones por medio de la multiplicación de las coordenadas por el mínimo común denominador.

Históricamente, debido a que los planos de bajo índice de Miller (esto es, los que pueden representarse con combinaciones: $h=k=l=0,1$) poseen alta simetría en su arreglo atómico superficial y, por lo mismo, son energéticamente estables durante el crecimiento (esto es, mantienen su orientación), estos se han utilizado casi exclusivamente para el estudio y fabricación de prácticamente todos los dispositivos semiconductores.

En este trabajo de tesis, nosotros estamos interesados en planos que no son de bajo índice, con el objetivo de aprovechar su inestabilidad para provocar el auto-ensamble de nanoestructuras superficiales.

I.1.2.- Planos de Alto Índice de Miller.

Los planos de altos índice de Miller (AI) son descritos por valores de h, k, l >1 . Estos planos, al contrario de los de bajo índice, presentan arreglos atómicos

superficies complejas y son inestables energéticamente (en el crecimiento, estos planos Al tenderán a formar un arreglo de facetas de bajo índice). Algunos ejemplos de substratos Al son: (7 7 5), (11 5 2) ó (6 3 1) [9]. Este tipo de superficies han sido poco estudiadas y existen relativamente pocos reportes de estudios sobre ellas en la literatura. Adicionalmente, prácticamente todos los planos de Al, utilizados para la formación de arreglos unidimensionales de facetas, se encuentran localizados a lo largo de los bordes del triángulo estereográfico (TE).

En nuestro trabajo de tesis estaremos mas interesados en aquellos planos que, como el GaAs(631), no están sobre los bordes, sino dentro del TE.

I.1.3.- Proyección estereográfica y triángulo estereográfico.

Una proyección estereográfica nos ayuda a representar un sistema 3D en un plano 2D, los ángulos entre las caras de un cristal y las relaciones de simetría entre ellas. Se genera mediante la proyección de planos cristalinos sobre una esfera centrada en el cristal. Las formas cristalinas se proyectan de manera que se conserven las relaciones angulares entre las caras y que la proyección permita ver claramente la simetría del cristal (Fig. I.1.3.1 a). Si trazamos la perpendicular a cada cara del cristal, la intersección de estas líneas con la esfera corresponden a un polo, por lo que las caras se vuelven puntos en la esfera.

Las proyecciones estereográficas tienen las siguientes propiedades: (i) Las circunferencias sobre la superficie de la esfera que pasan por el centro de la proyección se proyectan sobre rectas en el plano de proyección y viceversa. (ii) Las circunferencias sobre la superficie de la esfera que no pasan por el centro de la proyección se proyectan sobre circunferencias en el plano de proyección y viceversa. (iii) Si dos curvas sobre la superficie de la esfera se cortan en un determinado ángulo, sus proyecciones se cortan en el mismo ángulo. (iv) Un cono oblicuo es la figura generada por las rectas trazadas desde un punto (vértice del cono) a una circunferencia (base del cono), donde el vértice no está en el plano de la circunferencia ni en la perpendicular a ese plano por el centro de la circunferencia. Llamamos triángulo axial del cono oblicuo o triángulo estereográfico (TE) a la intersección del cono con el plano perpendicular a la base que pasa por el centro de la base y el vértice del cono (es decir, es la intersección del cono con el plano de simetría, como se muestra en la figura I.1.3.1b, triángulo formado por los puntos ATG)) [10, 11].

En la sección de resultados utilizaremos las proyecciones estereográficas para analizar y discutir la posición que ocupa el plano GaAs(631) en el TE. A partir de este análisis discutiremos uno de los principales resultados de esta tesis: el desarrollo de un criterio para explorar planos de Al dentro del TE para propiciar el auto-ensamble de arreglos de facetas 1D.

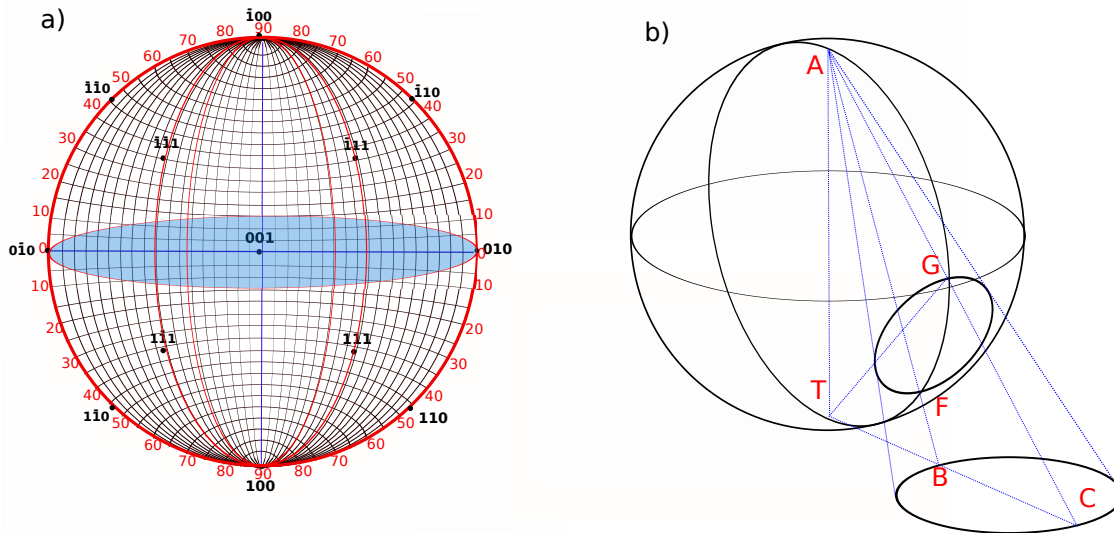


Figura 1.1.3.1.- a) Proyección estereográfica de un cristal centrado en el origen de la esfera, en este se muestran los planos mas comunes y de bajo índice, b) triangulo estereográfico obtenido a partir de la proyección en la esfera mostrada en a), los vértices del triángulo se eligen de tal forma que las direcciones que se deseen estudiar se encuentren dentro o en los lados del mismo.

I.1.4.- Semiconductores III-V.

Un material semiconductor es aquel en el cual existe un ancho de banda prohibida entre sus bandas de conducción y de valencia lo suficientemente pequeño (menor a 7eV) como para poder excitar fácilmente los portadores de carga de la banda de valencia y llevarlos a la banda de conducción. Los materiales semiconductores pueden ser de un solo tipo de átomo (Si, Ge) o compuesto por dos o más tipos de átomos. Entre ellos, los compuestos III-V, compuestos por átomos pertenecientes a las columnas III y V de la tabla periódica, son de los materiales más importantes para aplicación en dispositivos optoelectrónicos. En la figura 1.1.4.1 mostramos una gráfica del ancho de banda (gap) y constante de red para materiales semiconductores compuestos III-V, observamos que el gap es menor a 10 y la constante de red varía entre 4 y 6.5Å .

En este trabajo se consideran los compuestos semiconductores de GaAs y AlGaAs para generar hilos cuánticos (HCs). En la parte de los cálculos teóricos, estos materiales pueden ser fácilmente reemplazados por otras combinaciones.

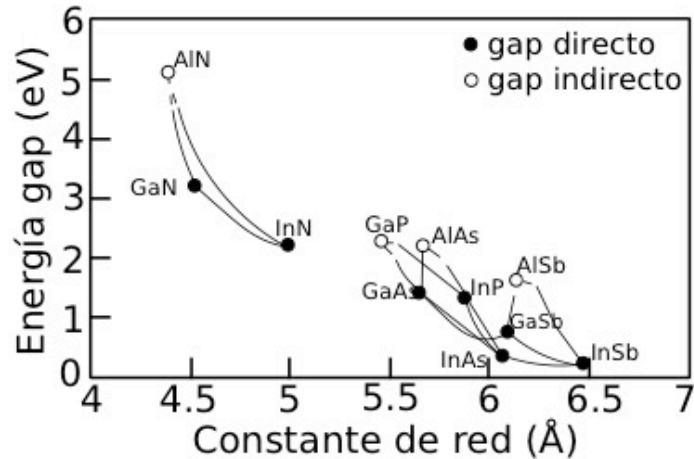


Figura I.1.4.1.- Semiconductores compuestos III-V en función de la constante de red y la energía gap.

I.1.5- Semiconductores intrínsecos y dopados.

Un material semiconductor intrínseco es un semiconductor puro, es decir, aquel que no contiene impurezas. Estos materiales, a temperatura ambiente, se comportan como aislantes eléctricos debido a que tiene pocos electrones libres en sus bandas de conducción, por ejemplo el GaAs, (ver Figura I.1.6.1 a). Para mejorar las propiedades de conducción eléctrica de los materiales semiconductores (necesarias en muchos dispositivos), estos son sometidos a un proceso de impurificación, el cual consiste en introducir átomos de otro elemento con la finalidad de aumentar el número de portadores de carga libres en el material.

El semiconductor que se obtiene mediante este proceso se denomina semiconductor extrínseco y de acuerdo a la impureza existen dos tipos:

(i) Semiconductor tipo p: Es llamado así al material que tiene átomo de impurezas que permiten la formación de huecos sin tener electrones asociados a estos huecos. Al semiconductor tipo p, también se le llama donador de huecos. Para el caso de materiales semiconductores compuesto, por ejemplo el GaAs, se emplean elementos del grupo II como dopantes, que tienen dos electrones de valencia como el Berilio (Be), el cual ocupa sitios de Ga, dejando un hueco por cada átomo de Be en la red del GaAs (Fig. I.1.5.1b).

(ii) Semiconductor tipo n: Un material tipo n tiene impurezas que permiten la aparición de electrones sin huecos asociados a estos. En este caso el elemento diferente aporta electrones, los cuales no se enlazan y por lo tanto se moverán fácilmente por la red y como consecuencia la conductividad aumentara. Análogo al caso anterior, este tipo de semiconductor tipo n también es llamado donador de electrones [12]. En el caso del GaAs, se utilizan elementos del grupo IV como el

Si, éste ocupa el lugar del Ga y debido a que tiene 4 electrones, aparece un electrón por cada átomo de Si en la red sin un hueco asociado (Fig. I.1.6.1c).

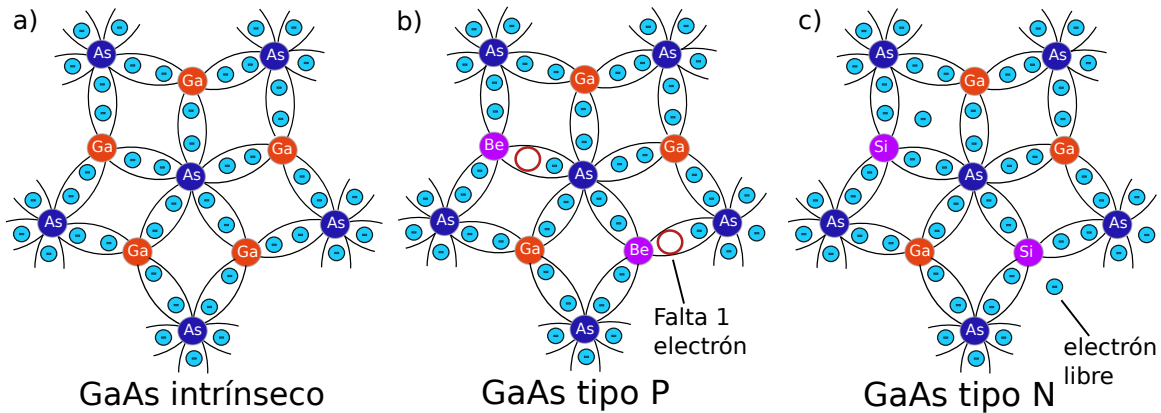


Figura I.1.5.1.- Configuración de electrones de valencia para GaAs: a) intrínseco, b) tipo p y c) tipo n.

Teóricamente el nivel de impurezas tiene un nivel límite, en la figura I.1.5.2, mostramos una gráfica para el límite de impurezas en HCs en función del tamaño de la sección transversal de dopaje tipo n y p para diferentes materiales semiconductores compuestos [13].

El nivel de impurificación es importante en nuestro trabajo debido a las aplicaciones de sistemas 1D, ya que estos por su geometría sirven para transporte de portadores de carga y fotones. Este nivel de impurificación proporciona al sistema portadores que pueden ser movidos fácilmente aplicando un potencial eléctrico externo. Para el caso de materiales semiconductores la densidad de portadores de carga para el material intrínseco es del orden de 10^6 cm^{-3} , al aumentar esta densidad por medio del proceso antes descrito, se puede lograr tener un material dopado (10^{16} - 10^{17} cm^{-3}) hasta llegar a un máximo donde se le considera un material semiconductor degenerado (10^{20} cm^{-3}). Para hilos de GaAs, este límite de dopaje es función del tamaño de la sección transversal, teniendo un límite de $8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (Fig. I.1.5.2). En este trabajo para la parte teórica usaremos densidades electrónicas correspondientes al GaAs intrínseco, dopado (10^{18} cm^{-3}) y altamente dopado 10^{22} cm^{-3} , este último valor experimentalmente no se puede tener, pero para cuestiones de cálculo se uso para observar comportamientos de sistemas 1D en casos de interacciones débiles.

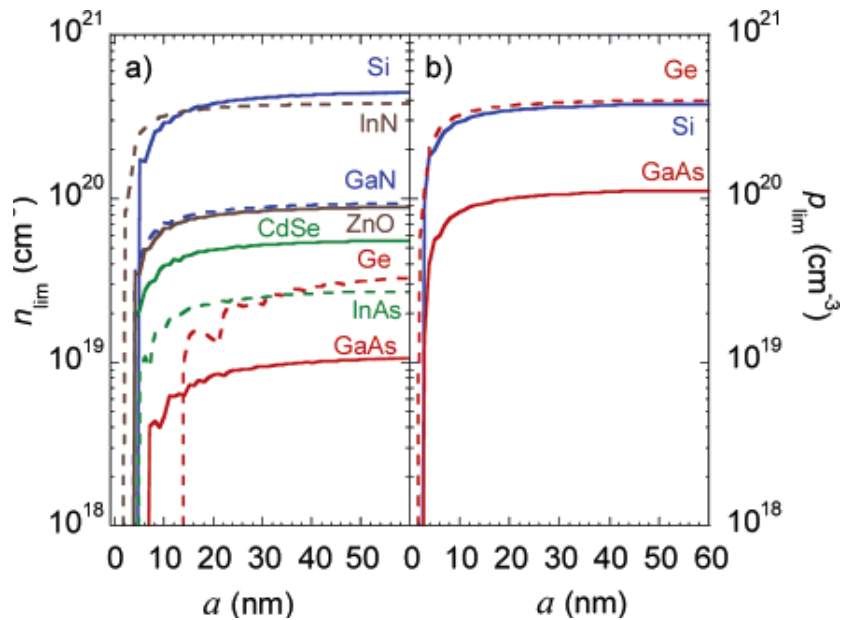


Figura 1.1.5.2.- Límite de dopaje (tipo n lado izquierdo, tipo p lado derecho) para hilos cuánticos semiconductores en función del tamaño de la sección transversal [13].

I.2.- Epitaxia por haces moleculares (MBE).

Existe una gran variedad de técnicas de crecimiento de materiales cristalinos. Entre ellas, las técnicas epitaxiales, las cuales son aquellas en las que el material a crecer copia la estructura cristalina del sustrato, permiten fabricar películas o nanoestructuras cristalinas de gran interés. Las técnicas epitaxiales tales como la Epitaxia por Haces Moleculares (MBE) ha permitido el depósito de materiales cristalinos de gran calidad.

La epitaxia por haces moleculares (MBE) es una técnica que permite fabricar heteroestructuras de diferentes compuestos semiconductores con gran precisión y pureza, debido al ultra alto vacío en el que se trabaja (las presiones base típicas de estos sistemas es del orden de 10^{-11} Torr). En un sistema MBE, los átomos o moléculas de diversos materiales son depositados en forma de capas, por medio de haces moleculares, sobre sustratos cristalinos especialmente diseñados y procesados para tal proceso. Estos se obtienen a partir de la sublimación de los elementos correspondientes, los cuales se encuentran en estado sólido dentro de celdas.

Una de las ventajas del crecimiento epitaxial por MBE es que se puede controlar de forma muy precisa el nivel de impurezas en el semiconductor, ya sea tipo p o tipo n, dependiendo de las aplicaciones para las que se quiera y el control en el espesor de hasta fracciones de monocapas atómicas. En este trabajo empleamos esta técnica de MBE para el crecimiento de películas de GaAs sobre sustratos de GaAs(631) con el fin de encontrar las condiciones necesarias para fabricar

superficies nanoacanaladas altamente uniformes. Adicionalmente, los procesos de dinámica superficial que se discutirán posteriormente (step-bunching, coarsening) son procesos propios del crecimiento por MBE.

En el crecimiento por MBE, cada elemento es depositado en forma de un haz molecular que se hace incidir sobre el sustrato cristalino. La incidencia de cada haz sobre el sustrato es controlado mediante obturadores o una válvulas mientras que el flujo es controlado por la temperatura a la que cada material es sublimado. Aunado a ello, el crecimiento es monitoreado in-situ por medio de un sistema de reflexión de electrones de alta energía difractados (RHEED) cuyo patrón es mostrado en una pantalla [14]. Así, por MBE se tiene un enorme control sobre espesores de capas depositadas, composición y pureza.

Por medio de MBE se pueden producir estructuras complejas conformadas de distintas capas para su aplicación en diferentes tipos de dispositivos ya sea ópticos o electrónicos. En la figura I.2.1.1 a) se muestra una imagen del sistema MBE utilizado en este trabajo, el cual se encuentra en las instalaciones de la CIACyT-UASLP. Un esquema de la cámara de crecimiento a detalle se muestra en el diagrama de la Fig. I.2.1.1 b). Este sistema está equipado con 3 cámaras:

- Cámara de introducción: como su nombre lo dice, en esta cámara se introducen las muestras que se van a crecer y/o las que fueron crecidas para ser extraídas.
- Cámara de transferencia: Aquí son almacenadas las muestras que se van a crecer o ya fueron crecidas.
- Cámara de crecimiento: En esta cámara se ingresan las muestras que se desean crecer, las cuales se encuentran colocadas en una base llamada molyblock.

En la cámara de crecimiento se encuentran integradas las celdas de cada fuente correspondientes a cada material con su respectivo obturador, en nuestro caso se cuenta con 7 materiales: Aluminio (Al), Galio (Ga), Arsénico (As), Berilio (Be), Indio (In), Estaño (Sn) y Silicio (Si). La presión del haz de cada material es controlada por medio de la temperatura en cada celda. También se encuentra el manipulador del sustrato, por medio del cual, se puede rotar y mover el molyblock. Con la finalidad de minimizar la incorporación de impurezas no deseadas en el crecimiento, se hace circular Nitrógeno líquido alrededor de la cámara de crecimiento y entorno a las celdas de efusión de cada material.

Para el presente trabajo de tesis se creció Ga y As a diferentes temperaturas y tiempos de depósito (las cuales se presentan mas adelante en la sección de desarrollo experimental), sobre sustratos de alto índice GaAs(631), con la finalidad de reproducir un arreglo superficial de facetas uniformes. Los crecimientos fueron monitoreados in-situ por medio de RHEED.

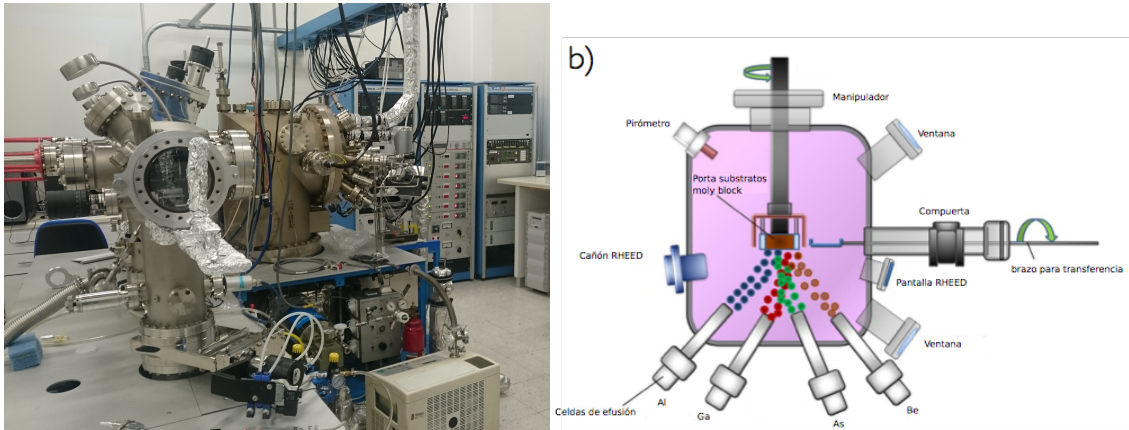


Figura 1.2.1.1.- a) Equipo utilizado para el crecimiento epitaxial por haces moleculares, localizado en la CIACyT-UASLP, b) Diagrama de la cámara de crecimiento por MBE.

I.3.- Estructuras de baja dimensionalidad

Los efectos de confinamiento cuántico en nanoestructuras semiconductoras permiten potencializar los alcances de los compuestos semiconductoras. Cuando los electrones en un material son restringidos a moverse en una región muy pequeña del espacio, se dice que estos se encuentran confinados. Mediante técnicas sofisticadas como MBE es posible realizar nanoestructuras en las cuales los electrones son confinados en un o mas dimensiones; tales sistemas se denominan estructuras de baja dimensionalidad.

I.3.1.- Confinamiento cuántico en heteroestructuras semiconductoras.

Las heteroestructuras semiconductoras son la base de la gran mayoría de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos que existen en la actualidad. Estas heteroestructuras consisten en la deposición alternada de diferentes materiales semiconductoras siguiendo algún orden determinado. La creación de heteroestructuras con capas delgadas epitaxiales de diferentes materiales fue propuesta por primera vez en 1969 por Esaki y Tsu [15]. El uso de diferentes materiales en las heteroestructuras otorgan varias ventajas, por ejemplo, (i) permite controlar las zonas en las cuales se confinan los portadores de carga, (ii) al tener diferente índice de refracción es posible la realización de guías de onda y resonadores ópticos y, (iii) se pueden diseñar partes de la estructura que absorban o emitan luz a las longitudes de onda deseadas al modificar los materiales que lo componen.

Los efectos cuánticos de una estructura empiezan a ser notables cuando se reduce el tamaño de al menos una de sus dimensiones a un espesor del orden de la longitud de onda de De-Broglie del electrón en tal material, que viene dada por la expresión:

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{3m^*k_B T}}$$

donde m^* representa la masa efectiva del portador de carga, T la temperatura y k_B la constante de Boltzmann. Para el caso de un electrón en GaAs, esta longitud es del orden de 24nm a temperatura ambiente ($T = 300K$)

Según el número de dimensiones en las que se confina a los portadores, podremos encontrar tres tipos de nanoestructuras. Si sólo confinamos una de las direcciones de movimiento de los portadores, tendremos una estructura en la cual los portadores son libres de moverse en forma bidimensional (2D). A tal sistema se le denomina pozo cuántico. Confinando el movimiento de los portadores en dos direcciones obtenemos una estructura en la cual los portadores se mueven en forma unidimensional (1D), hilo cuántico, y confinando en las tres direcciones una estructura cero-dimensional (0D), punto cuántico (en la cual los portadores no pueden moverse en ninguna dirección). Esta diferencia en el confinamiento da lugar a cambios sustanciales en la densidad de estados electrónicos permitidos a los portadores de carga. La densidad de estados electrónicos representa el número de estados disponibles por unidad de volumen y energía. Para un semiconductor en bulto o estructura tridimensional, la densidad de estados viene dada por:

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} E^{3/2} = E^{1/2},$$

para un pozo cuántico tenemos la función escalón,

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{\varepsilon_i < E} (E - \varepsilon_i) = \text{cte},$$

para un hilo cuántico tenemos una singularidad,

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{\varepsilon_i < E} (E - \varepsilon_i)^{1/2} = \sum_{\varepsilon_i < E} (E - \varepsilon_i)^{-1/2},$$

y para un punto cuántico tenemos deltas de Dirac,

$$\frac{dN}{dE} \propto \frac{d}{dE} \sum_{\varepsilon_i < E} \Theta(E - \varepsilon_i) = \sum_{\varepsilon_i < E} \delta(E - \varepsilon_i),$$

siendo ε_i los niveles discretos de energía, Θ la función escalón de Heaviside y δ la función delta de Dirac. La figura 5 muestra la representación gráfica de la densidad de estados para un semiconductor en bulto (a) y los tres tipos de nanoestructuras (b-d).

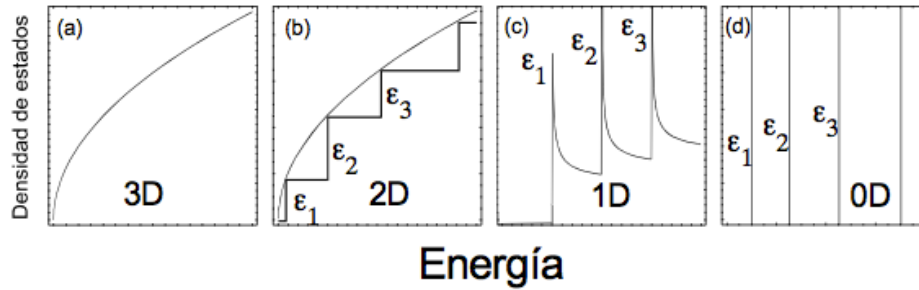


Figura 5.- Densidad de estados en función de la energía en sistemas con diferente dimensionalidad. (a) semiconductor en bulto, (b) pozo cuántico, (c) hilo cuántico y (d) punto cuántica.

I.3.2.- Barreras de potencial de confinamiento.

En las heteroestructuras semiconductoras, el alineamiento de las bandas de conducción y de valencia, mostrado en la Figura I.3.2.1, permite la existencia de barreras de potencial V_e y V_h para los electrones y huecos, respectivamente. En la teoría desarrollada posteriormente para abordar el problema de muchos electrones confinados en un HC, cada una de las direcciones de confinamiento es tratada como barreras parecidas a las mostradas en la Fig. I.3.2.1. El primer caso, es el de un pozo de potencial con barreras infinitas (Fig. I.3.2.1a). Un caso más realista es el de barreras finitas, en cual la altura de las barreras están dadas por parámetros que dependen del material del pozo, y que pueden ser ligados con datos experimentales (Fig. I.3.2.1b). Si la anchura del pozo L es suficientemente pequeña (del orden de decenas de nm) podremos inducir el confinamiento cuántico de los portadores de carga [16]. Generalmente, estos dos tipos de pozos cuánticos se tratan por medio de la ecuación de Schrödinger en una dimensión para obtener los estados confinados estacionarios para electrones y huecos. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger para estos dos sistemas se reportan a detalle en los apéndices A y B.

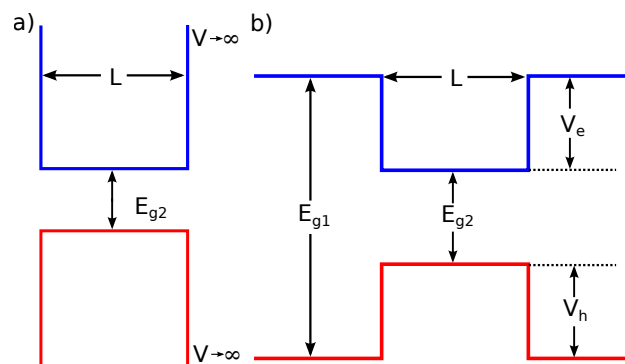


Figura I.3.2.1.- Esquema de las bandas de energía de una heteroestructura del tipo pozo

cuántico. a) Pozo con barreras infinitas, la solución de la ecuación de Schrödinger fuera del pozo es cero, E_{g2} es la banda prohibida del pozo. b) Las energías de la banda prohibida de las barreras y del pozo son E_{g1} y E_{g2} , respectivamente, V_e , V_h son las energías de confinamiento para el electrón y el hueco, respectivamente. L es la anchura del pozo.

I.3.3.- Confinamiento 1D: Hilos cuánticos (HCs).

Un hilo cuántico es una estructura en una dimensión (1D), en la cual la cuantización ocurre en las dos direcciones transversales a la dirección de libre circulación de los portadores de carga.

Dada la forma de los hilos cuánticos, estos pueden ser utilizados como alambres conductores de portadores de carga. Debido al confinamiento en la sección transversal, las energías en este plano están cuantizadas.

Existen diferentes efectos observados o predichos en los sistemas de HCs [16,17]:

- Confinamiento cuántico: restricción de los electrones a moverse en una región limitada.
- Efectos de tunelamiento: Cuando los electrones pasan a través de la barrera de potencial se conoce como efecto túnel. Este efecto ha sido aprovechado para el desarrollo de microscopios de efecto túnel y para el desarrollo de otros dispositivos.
- Bloqueo de Coulomb: Es el efecto del aumento de la resistencia debido a la baja capacitancia.
- Transporte balístico en 1D
- Transiciones de energía bien definidas entre los estados confinados
- Estabilidad térmica de las transiciones ópticas

I.4.- Métodos de fabricación HCs.

Los métodos para fabricar nanoestructuras pueden ser divididos en dos principales grupos: los que parten del material en bulto (top-down) para fabricarlas y los que utilizan interacciones superficiales atómicas propias de los materiales para obtener el auto-ensamble de las nanoestructuras (bottom-up approach). Cada método tiene sus propias ventajas y desventajas. La principal desventaja en el método de autoensamble es la falta de control en el ensamble de las nanoestructuras.

I.4.1- Métodos litográficos (Top-down approach)

Existen diferentes técnicas para obtener hilos cuánticos, una de ellas es por grabado por medio de fotolitografía o litografía por haz de electrones. Este proceso

consiste en grabar franjas libres de material sobre una estructura de pozo cuántico por medio de alguna plantilla, estas franjas pueden ser o no rellenas con algún material (Fig. I.5.1.1). Las desventajas de estos procesos son las imperfecciones asociadas al grabado, las bajas densidades y el tamaño del hilo se limita al tamaño de la plantilla.

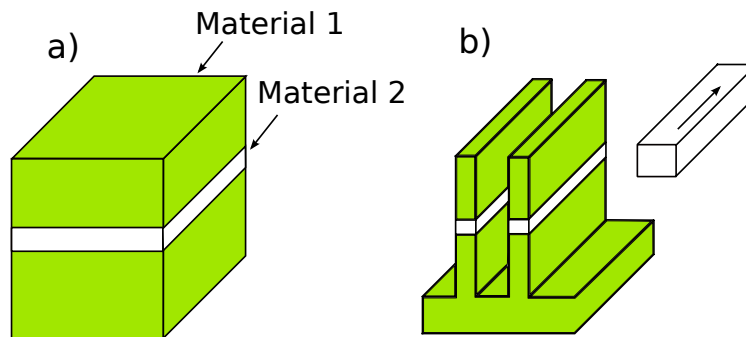


Figura I.5.1.1.- a) Estructura de pozo cuántico obtenida por medio de dos materiales diferentes con la distribución mostrada, b) obtención de hilos cuánticos por medio del grabado de franjas en el pozo cuántico.

I.4.2- Métodos de auto-ensamble (Bottom-up approach)

Como se mencionaba anteriormente, se pueden obtener hilos cuánticos ordenados por litografía, pero son caros y el proceso está limitado en gran parte al tamaño de las plantillas utilizadas para el grabado. Una de las estrategias para obtener hilos cuánticos de forma organizada, con un alto grado de perfección y con tamaños característicos de decenas de nanómetros de tamaño, es por medio de auto-ensamble, el cual es la organización de un sistema por si mismo cuando se le dan las condiciones adecuadas. Uno de los métodos utilizados para el auto-ensamble de hilos cuánticos en MBE es mediante el control de los parámetros de crecimiento y utilizando substratos vecinales (desorientado unos cuantos grados en relación a un plano de bajo índice) o de alto índice [18,19].

I.4.2.1- Método VLS (formación nanocolumnas)

El método VLS es un mecanismo de crecimiento de estructuras cristalinas 1D que es asistida por un catalizador metálico. Por medio de este se pueden crecer estructuras tipo whiskers, barras e hilos. En este mecanismo el crecimiento anisotrópico del cristal es promovido por la presencia de una aleación líquida sobre una superficie sólida. La fase gaseosa está compuesta por las especies que van a formar la estructura 1D. La condensación y disolución de vapor conduce a la formación de una aleación líquida, posteriormente la concentración de vapor aumenta en la aleación y se produce progresivamente la nucleación y crecimiento de las estructuras 1D. Las estructuras obtenidas por medio de este método es de

tipo columnar, la figura I.5.3.1 muestra un esquema del mecanismo de crecimiento. Para el caso de crecimiento de semiconductores por medio de este método se presenta el problema al introducir el catalizador metálico, el cual introduce un grado de contaminación lo que trae como consecuencia variación en las propiedades del material.

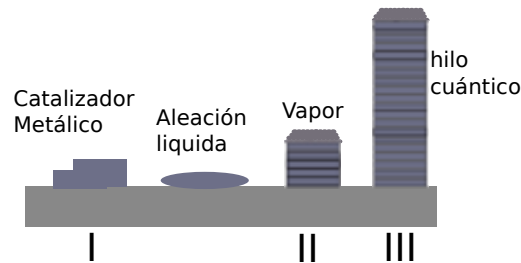


Figura I.5.3.1.- Esquema de crecimiento por medio del método VLS, para la formación de estructuras 1D columnar.

I.4.2.2- Substratos vecinales y substratos de alto índice (HI)

Los substratos vecinales son aquellos que se obtienen mediante el corte en un ángulo relativamente pequeño ($\sim 2^\circ$) de una superficie de bajo índice. Esta nueva superficie resultante consta de terrazas con un arreglo atómico idéntico al correspondiente de bajo índice, separado por escalones monoatómicos (Fig. I.4.4.1).

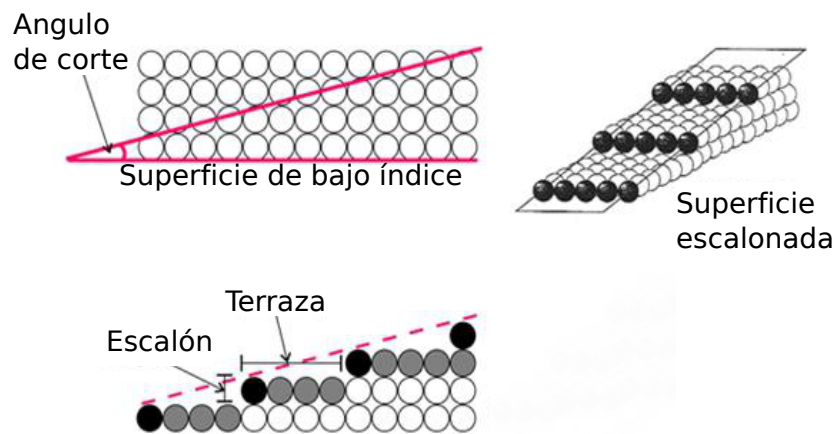


Figura I.4.4.1.- Diagrama atómico que describe la obtención de un substrato vecinal.

En MBE el uso de superficies vecinales y superficies de alto índice de Miller (AI), han mostrado ser muy adecuadas para inducir la formación de arreglos nanométricos 1D, los cuales resultan de la interacción entre la difusión

anisotrópica y la minimización de energía superficial [20-23]. En estudios previos nosotros reportamos el logro de una notable corrugación nanométrica uniforme en capas de GaAs crecidas sobre un sustrato GaAs(631)A [24].

I.5.- Dinámica superficial en el crecimiento de facetas por MBE

Como en MBE el proceso de crecimiento se lleva a cabo en condiciones de no equilibrio, procesos de evolución no lineales, tales como: difusión de átomos que llegan a la superficie hasta fijarse en una terraza de altura monoatómica (step-bunching), inestabilidades serpenteantes y proceso de facetado por desvanecimiento de pequeñas facetas y el aumento de la longitud media de las que quedan (coarsening) producen una muy rica variedad de efectos de superficie de cristal que se deben entender para lograr mejor control tecnológico en la formación y optimización de los dispositivos basados en nanoestructuras semiconductoras.

I.5.1.- Procesos dinámicos: difusión superficial y step-bunching.

Cuando observamos un cristal a pequeñas escalas durante el crecimiento, la primera observación sorprendente es que el crecimiento por lo general procede a través del flujo lateral de escalones monoatómicos. Los átomos que llegan a la superficie, en lugar de pegarse al cristal en el lugar donde han aterrizado, se difunden hasta fijarse en una terraza de altura monoatómica (el cual se denomina proceso de step-bunching), esto conduce a un movimiento de crecimiento de la superficie mediante el movimiento de estos escalones monoatómicos (Fig. I.5.1.1). Como se reporta en el trabajo de Burton, Cabrera y Frank en 1951, el análisis de crecimiento de los cristales, por lo tanto se puede basar en el análisis del movimiento de los escalones [25].

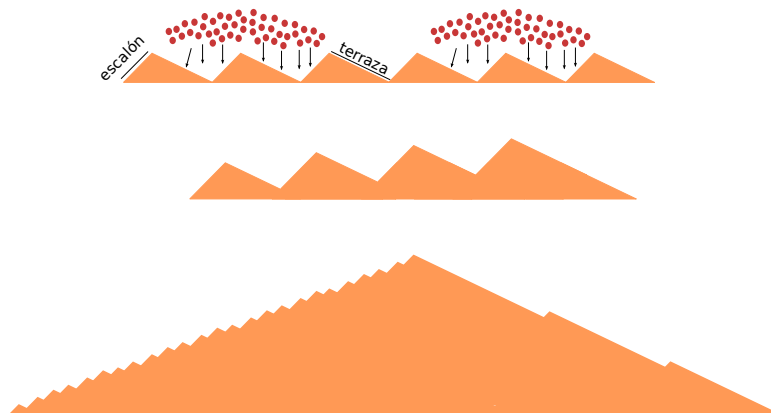


Figura I.5.1.1.- Modelo step-bunching para la formación de facetas durante el crecimiento en una superficie facetada.

Considerando un modelo sencillo donde la velocidad de un escalón V es función sólo del ancho l de las terrazas vecinas mas cercanas:

$$V = f_+(l_+) + f_-(l_-) \quad 1.5.1.1)$$

Donde f es una función que depende del ancho de la terraza vecina y el signo +/- hace referencia a la terraza mas cercana del lado derecho e izquierdo, respectivamente, suponiendo que la terraza de interés se encuentra en el origen. Si la distancia promedio entre escalones es L , la velocidad promedio de escalones es $V = f_+(L) + f_-(L)$. Considerando una pequeña perturbación de la posición del escalón $\zeta = \exp(\omega t + in\phi)$, la posición del n -ésimo escalón es $nl + \zeta_n$. Por lo que tenemos:

$$\omega = (1 - \cos(\phi))\partial_l v + i \sin(\phi)\partial_l V \quad 1.5.1.2)$$

Donde $v = f_-(L)f_+(L)$, las perturbaciones son inestables si la parte real de ω es positiva, es decir, $\partial_l v > 0$; hay estabilidad si $\partial_l v < 0$. Por lo tanto, el origen de la inestabilidad tiende hacia la terraza superior de la sensibilidad de la velocidad de paso a la anchura de las terrazas vecinas, es decir: $\partial_l f_-(L) > \partial_l f_+(L)$ [25, 26].

Esta componente del crecimiento en nanoestructuras es importante al inicio del crecimiento por MBE sobre superficies monoatómicamente planas. Sin embargo, este modelo será discutido mas adelante en la sección de resultados donde se presenten los arreglos de facetas 1D obtenidas en las superficies de GaAs/GaAs(631) bajo distintas condiciones de crecimiento.

1.5.2.- Componente elástica: modelo de Marchenko.

V. I. Marchenko [28] estableció el origen elástico de una superficie facetada periódicamente en el equilibrio como:

$$L = \frac{2\pi c}{\sin(\pi\theta)} \exp\left(1 + \frac{(\pi Y \rho)}{2f^2(1-v^2)}\right) \quad 1.5.2.1)$$

Donde Y y v son el módulo de Young y la razón de Poisson del material, respectivamente, c es la distancia atómica, f es el factor de forma geométrico de la formación de las dos facetas que contiene la influencia del tensor de estrés en la superficie y $\theta = \frac{\tan\alpha}{\tan\alpha + \tan\beta}$ con α, β los ángulos de las facetas formadas con la orientación original.

La aproximación de Marchenko es aplicable cuando el periodo lateral de las facetas excede el parámetro de red en al menos un orden de magnitud y ha sido especialmente exitosa en la descripción de facetamiento superficial de superficies vecinales (SV) y en planos de Al localizados a lo largo de los bordes del triángulo estereográfico (TE). En los SV se cree que la formación de microfacetas con periodos laterales pequeños ($L < 10 a_0$), que se presentan durante las etapas

iniciales, tienen un origen cinético (donde el proceso de step-bunching es el dominante) debido a la difusión anisotrópica sobre los bordes de los escalones. En contraste, para los sustratos de Al la cinética de crecimiento de microfacetamiento no se comprende aún del todo ni tampoco el proceso que haría a estas facetas periódicas o que se extienden a largas distancias. En la parte de resultados planteamos el tipo de procesos que estarían sucediendo en el caso de sustratos de Al (631).

I.5.3.- Procesos no lineales: Coarsening.

Para el caso especial de estructuras facetadas 1D se puede observar el proceso por el cual las facetas van engrosando en su dirección lateral, uniéndose unas con otras, hasta que se obtiene la formación de una superficie uniforme y estable, con facetas del mismo periodo. A este proceso le llamaremos coarsening. Diferentes modelos han sido propuestos en la literatura para describir el proceso de coarsening superficial los cuales son mostrados en la tabla I.5.3.1 [29-35]. Sin embargo, debido al comportamiento complejo intrínseco de este proceso altamente no lineal usualmente estos modelos no son directamente comparados con datos experimentales.

El interés en la dinámica no lineal de una superficie cristalina proviene principalmente de la observación de crecimientos que a menudo presentan inhomogeneidades. La dinámica no lineal resultante de las inestabilidades puede variar grandemente. Bajo este mecanismo, las superficies pueden ir desde el caos espacio-temporal hasta la formación de estructuras estables. El proceso de formación de superficies facetadas por medio del proceso de coarsening, el cual considera las condiciones experimentales del crecimiento por MBE, es descrito por la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky uni-dimensional (KS-1D), dada por [36]:

$$\partial_t u = -g\partial_{xxxx}u - a\partial_{xx}u - bu\partial_x u \quad \text{I.5.3.1)}$$

con u la función que describe el perfil superficial a tratar, a lo largo de la dirección transversal a las facetas. El término $\partial_{xx}u$ en la ecuación 1.5.3.1 es el responsable de la inestabilidad a largo alcance; el término disipativo $\partial_{xxxx}u$ proporciona amortiguamiento a pequeña escala y el término no lineal $u\partial_x u$ es el responsable de la estabilización por transferencia de energía entre larga y pequeña escala [37]. Esta ecuación puede ser resuelta en el espacio de Fourier mas condiciones a la frontera periódicas. Apéndice C.

Modelos teóricos	Ecuación que describe el modelo	Descripción del modelo
.Geometría Hiperbólica – Parabólica PDE.	$\gamma_n = \tilde{r}(\vartheta)\kappa - \varepsilon^2(\partial_x^2 \kappa + \frac{1}{2}\kappa^3) + 1,$	Aplicable a crecimiento isotérmico de cristales nanofacetados. [29]
Sistema dinámico de Coarsening	$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{4}[2x_i - x_{i-1} - x_{i+1}].$	Simulación numérica de la evolución de superficies facetadas. [30]
Modelo de coarsening	$\frac{dz}{dt} = \tan\alpha \frac{l-r}{l+r} \frac{dx}{dt} = C \frac{\tan\alpha(l-r)^2}{(l+r)(l^2+r^2)},$ $\frac{dx}{dt} = C \frac{l-r}{l^2+r^2},$	Uso para camas granulare (partículas de vidrio esféricas), dependiente de vibraciones [31]
Inestabilidad, modelo Step-bunching.	$\lambda = -\frac{2\pi c}{\sin \pi\theta} \exp\left(1 + \frac{\pi E\rho}{2f^2(1-\nu^2)}\right)$	Elección de facetas vecinales para obtener superficies anisotrópicas estresadas. [32]
Teoría del campo medio para coarsening	$\varrho_{0,comp}(l) = \frac{10}{18}\chi_{(1/10,19/10)},$ $\varrho_{0,exp}(l) = \exp(-l),$ $\varrho_{0,poly}(l) = \frac{2}{(1+l)^3}.$	Sistema dinámico de coarsening. Descomposición espinodal. [33]
Facetamiento de superficies crecidas con diferentes orientaciones.	$h_t = \frac{1}{2} \nabla h ^2 +$ $h_{xx}[\mu_{11} + \kappa_{11}h_x + \lambda_{11}h_y + a_{11}h_x^2 + b_{11}h_y^2 + c_{11}h_xh_y] +$ $h_{xy}[\mu_{12} + \kappa_{12}h_x + \lambda_{12}h_y + a_{12}h_x^2 + b_{12}h_y^2 + c_{12}h_xh_y]$ $+ h_{yy}[\mu_{22} + \kappa_{22}h_x + \lambda_{22}h_y + a_{22}h_x^2 + b_{22}h_y^2 + c_{22}h_xh_y]$ $- \nu\nabla^4 h,$	Facetamiento de superficies crecidas por MBE, termodinámicamente inestables en diferentes orientaciones. [34]
Kuramoto-Sivashinsky conservado (CKS)	$\partial_t u = -\partial_y^2 \left[u - \gamma\partial_y u + \partial_y^2 u + \frac{1}{2}(\partial_y u)^2 \right].$	Crecimientos en no equilibrio, MBE. [35]

Tabla I.5.3.1.- Resumen de modelos desarrollados, la ecuación a resolver y descripción de cada modelo, para el estudio de superficies facetadas que presentan estructuras tipo coarsening [29-35].

Este tipo de dinámica superficial puede ser clasificado en 3 categorías:

1. Periodo lateral fijo: No hay presencia de coarsening. La superficie es homogénea, es decir, todas las facetas presentan el mismo periodo o longitud de onda.
2. Coarsening perpetuo: En este caso, el periodo o longitud de onda se incrementa indefinidamente.
3. Coarsening interrumpido: Aquí la longitud de onda aumenta hasta llegar a un máximo antes de disminuir.

Este modelo será utilizado más adelante para compararlas directamente con imágenes AFM de arreglos de facetas superficiales de muestras de GaAs/GaAs(631) crecidas bajo diferentes condiciones de crecimiento por MBE.

CAPÍTULO II.- MARCO TEÓRICO

II.1.- Diferentes modelos teóricos de HC

Para entender a profundidad algunas propiedades, interpretar algunos resultados experimentales y predecir nuevos efectos de los HCs; han surgido diferentes modelos teóricos y técnicas de simulación que abordan el problema de la interacción de electrones en sistemas 1D. A continuación detallaremos algunas de las más utilizados.

II.1.1- Simulación y modelos teóricos aplicados a HC.

Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT por sus siglas en inglés), es una representación de la mecánica cuántica que utiliza a la densidad electrónica, $\rho(r)$, como variable fundamental para describir las propiedades de un sistema, el cual puede ser conformado por electrones, átomo, una molécula o un sólido. El uso de la densidad electrónica como variable se sustenta en los teoremas de Hohenberg y Kohn (HK), las ecuaciones a resolver son la ecuación de Schrödinger y la densidad como función de la función de onda:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}\right]\psi_i = \varepsilon_i\psi_i \quad \text{II.1.1.1)}$$

$$\rho(r) = \sum_i^N \sum_s |\psi_i(\vec{r}, s)|^2 \quad \text{II.1.1.2)}$$

Por medio de DFT se pueden estudiar sistemas 1D tipo hilo cuántico calculando comúnmente la distribución de carga en la sección transversal, la energía de banda prohibida y la estructura de bandas, como se muestra en la figura II.1.1.1 [38,39].

La ventaja de utilizar el método DFT es debido a que las ecuaciones a resolver están en función de la densidad electrónica, es decir, solo en función de 3 variables y no $3N$, donde N es el número de partículas o átomos del sistema a tratar, esto ayuda a que el calculo sea menos costoso computacionalmente hablando.

Sin embargo, una de las desventajas de esta técnica es que solo se puede trabajar con un número pequeño de átomos (del orden de cientos) y por otra parte el cálculo depende de la aproximación del pseudopotencial que se considere, que no siempre suele ser correcto.

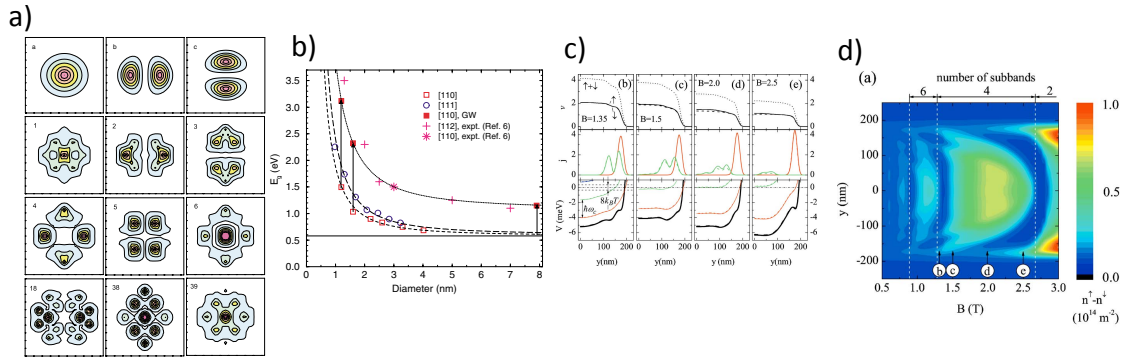


Figura II.1.1.1.- a) Distribución de carga en el plano xy para un hilo de Si en el plano (110) de sección transversal $d=1.2\text{nm}$, b) Cálculo de la energía GAP para hilos en el plano (110), (111) con su respectiva comparación experimental, c) Densidad electrónica de las sub-bandas en función del campo magnético y del espín a $T=1\text{ K}$ para un hilo cuántico [38,39].

Teoría Atomista por Pseudopotencial

En esta técnica el cálculo por pseudopotencial atomista para una nanoestructura está compuesta de una serie de diferentes pasos que se muestran en la figura II.1.1.2a. La geometría de entrada es determinada a partir de consideraciones geométricas y datos experimentales. Las posiciones atómicas son obtenidas por minimización del campo de tensión usando el método campo de fuerza de valencia simple (VFF). Posteriormente, el potencial del sistema es calculado usando una superposición de potenciales atómicos apantallados que son ajustados a la estructura de bandas experimental y las funciones de onda LDA. Posteriormente, se puede calcular el potencial que se necesita para definir la base en la que la ecuación de Schrödinger de la partícula simple puede ser resuelta. Para esto se desarrollan dos métodos diferentes, uno que usa una base de ondas planas con un corte en la energía y el otro que usa combinaciones lineales de tensiones en las bandas del bulto. La ecuación de Schrödinger de la partícula es entonces resuelta como un problema de eigen-valores. Con este tipo de simulación se puede calcular la energía de transición, la densidad de probabilidad, entre otro tipo de observables. La figura II.1.1.2 muestra algunos cálculos aplicados a sistemas cuánticos [40].

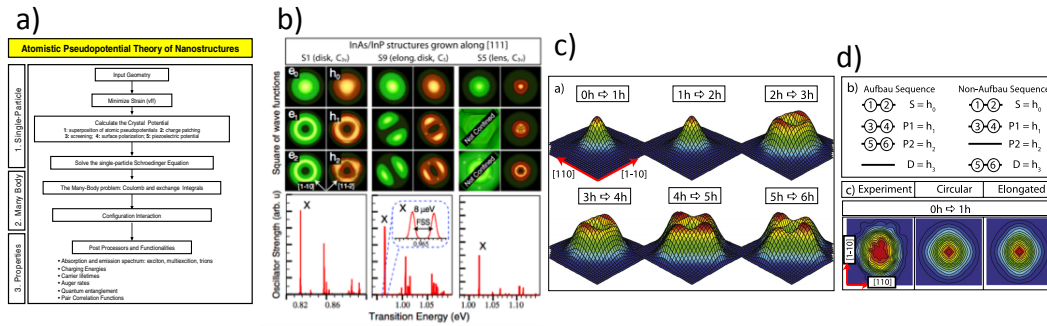


Figura II.1.1.2.- a) Algoritmo de la teoría atomista por pseudopotencial, b) energías de transición y proyecciones para una estructura de InAs/InP, c y d) calculo de la densidad de probabilidad de tunelamiento [40].

Monte Carlo Cuántico Variacional.

Las simulaciones mediante Monte Carlo cuántico variacional, por su parte, constituye una técnica computacional muy útil para describir sistemas de muchas partículas cuánticas. En este método lo que se hace es definir un Hamiltoniano (H), donde, a diferencia de Monte Carlo Clásico, la parte cinética, que involucra al momento, es la contribución mas difícil de tratar. Una vez definido H se propone una función de onda de prueba “ansatz” la cual debe ser elegida cuidadosamente porque de esta depende obtener un buen resultado.

De inicio se propone una configuración inicial, seguido se calcula la función de onda, después se mueve un electrón, esto computacionalmente es menos costoso que mover todos los electrones a la vez, se calcula la nueva función de onda. El criterio ahora para aceptar o rechazar el movimiento se basa en la razón de la nueva función de onda y la anterior. Por medio de Monte Carlo Cuántico se puede calcular el perfil de densidad dependiente del tipo de potencial para un hilo finito, como se muestra en la figura II.1.1.3 [41, 42].

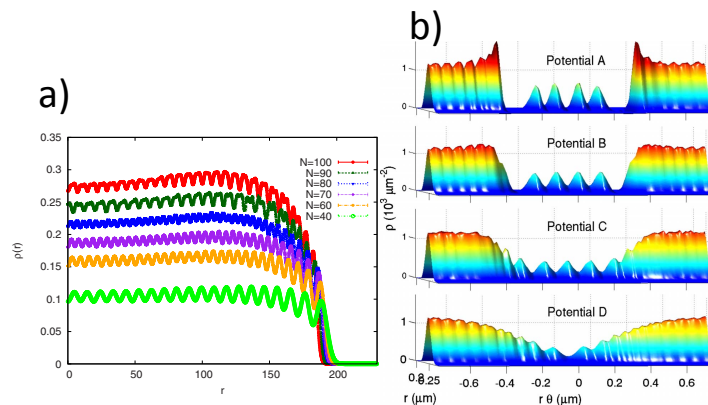


Figura II.1.1.3.- a) Perfil de densidad para electrones dentro de un hilo finito, b) Densidad 2D del estado base para un sistema 1D tipo hilo cuántico en función del tipo de potencial.

La desventaja de Monte Carlo Cuántico variacional es el costo computacional. Si queremos tratar un sistema de muchos cuerpos, este costo computacional aumenta.

Dinámica Molecular.

Este método de simulación ha sido aplicado para describir la dinámica de líquidos. Dado el avance en tecnología computacional y algoritmos, el método de Dinámica Molecular ha sido aplicada en muchas áreas de la física y la química. Este tipo de simulación consiste de soluciones numéricas, paso a paso, de las ecuaciones de movimiento, las cuales para un sistema de átomos pueden ser escritas como:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i \quad \text{II.1.1.3)}$$

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \mathcal{U} \quad \text{II.1.1.4)}$$

donde \mathbf{f}_i son las fuerzas actuando sobre los átomos y usualmente son derivadas de la energía potencial $\mathcal{U}(\mathbf{r}^N)$, con $\mathbf{r}^N = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ representando el conjunto completo de las $3N$ coordenadas atómicas, con N en número total de átomos del sistema en cuestión.

Recientemente este tipo de simulación esta siendo aplicada a sistemas 1D del tipo canal con una energía potencial de Coulomb apantallado. Por medio de este tipo de simulación es posible tratar un sistemas de canales acoplados y calcular la fuerza externa de este en función de la velocidad de las partículas, como se muestra en la figura II.1.1.4 [43]. La desventaja de este tipo de simulaciones es el costo computacional.

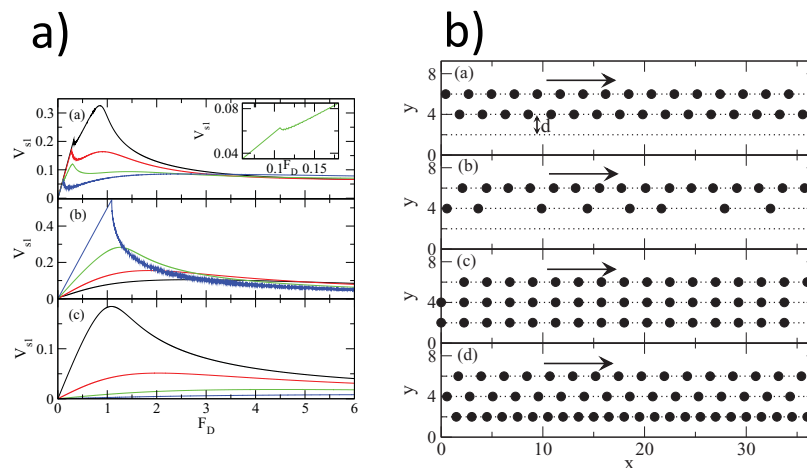


Figura II.1.1.4.- a) velocidad de las partículas en función de la fuerza externa del sistema b) para $d/a=0.67$, con d la distancia entre canales, a la separación entre átomos. b) Configuración de los átomos dentro de cada canal [43].

Método K•P

Otro de los mas populares en simulación es el K•P. Teóricamente para este método se considera el Hamiltoniano de un electrón en una esfera cristalina perfecta en 3D.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad \text{II.1.1.4)}$$

Con $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ un potencial periódico, siendo así, se obtienen las soluciones de la ecuación de Schrödinger para la zona de Brillouin por medio del teorema de Bloch, la función de onda se trata como una función de Bloch, para la banda de conducción y la banda de valencia del sistema a tratar. Finalmente se tiene un problema de matrices de momentos para calcular las energías propias del sistema que son asociadas a las energías entre bandas o energías de transición.

Este modelo es el mas aplicado a sistemas de hilos cuánticos, calculando la energía de transición entre electrones y huecos, involucrando datos experimentales como son: tamaños de pozo, energía GAP, materiales, concentraciones de los materiales y geometrías. En la figura II.1.1.5 se muestra un ejemplo de la aplicación del método K•P a un hilo cuántico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ y el tipo de observables obtenidas [44].

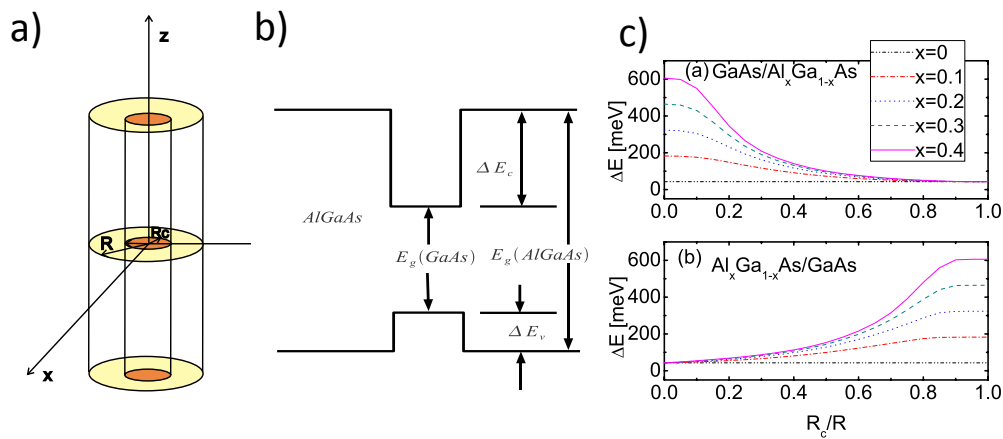


Figura II.1.1.5.- Modelo K•P para un sistema 1D a) hilo cuántico con geometría cilíndrica, b) configuración de bandas c) cambio en la energía de bandas en función de la razón del radio interno y externo y de la concentración de Al [44].

Estos y muchos otros mas modelos y simulaciones son usados para sistemas 1D, aquí describimos los mas usados y populares aplicados a hilos cuánticos con su respectivo sistema de ecuaciones a resolver y el tipo de resultados que se obtienen en cada caso. Cabe mencionar que todos estos métodos son complejos de trabajar, algunos involucran costos computacionales altos y limitación en cuanto a cantidad de partículas involucradas en el sistema a tratar [38-44]. Por lo

que en este trabajo nos dedicamos a explorar otros caminos para tratar con sistemas de muchos cuerpos de una forma mas simple en cuestión de sistemas de ecuaciones a resolver y costos computaciones.

II. 2. - Cristal de Wigner: electrones en 1D.

Un gas de electrones puede “cristalizar” formando con su densidad de electrones una red (similar a la de una red cristalina) si la densidad electrónica se encuentra dentro de cierto rango critico. Esto es debido a que la energía potencial es dominada por la energía cinética a bajas densidades de portadores. Para minimizar la energía los electrones forman una red, parecida a la de un cristal. En el caso 3 dimensional se forma una red del tipo I(=centrada en el cuerpo). Para el caso 2 dimensional, se forma una red triangular y en el caso de 1 dimensión se forma un enrejado 1D espaciado uniformemente.

El cristal de Wigner viene acompañado de la formación de la molécula de Wigner, la cual es una estructura pequeña regular que se forma como consecuencia de reducir al mínimo la repulsión entre electrones, y al estar presente se evidencia la cristalización del gas de electrones. Teóricamente el cristal de Wigner ha sido estudiado mediante modelos complejos para algunas decenas de electrones, tales como la aproximación de Hartree-Fock, el líquido de Luttinger, diagonalización de matrices dependientes del espín, entre otros [45-47]. En la práctica, es difícil de realizar un experimento para observar un fenómeno de este tipo aunque recientemente se ha reportado su observación experimental en estructuras de nanotubos de carbonos y en hilos cuánticos [48,49].

La cristalización de Wigner es un efecto cuántico de muchos cuerpos. Para sistemas 1D, la formación de la molécula de Wigner puede ser investigada a través de su densidad electrónica. Para un incremento en la interacción entre electrones o disminución en la densidad, se da un traslape entre oscilaciones tipo Friedel y Wigner, es decir:

$$\langle \rho(x)\rho(0) \rangle = \frac{A \cos(2 k_f x) \exp(-c_2 \sqrt{\ln x})}{x} + B \cos(4 k_f x) \exp(-4c_2 \sqrt{\ln x}) + \dots, \quad \text{II.2.1}$$

donde A, B son constantes que dependen de la interacción y k_f es el vector de onda de Fermi. De la ecuación 5.1 observamos que el periodo de oscilación $4 k_f$ y $2k_f$ es exactamente el espaciado inter partícula promedio. Asociamos al primer término de esta ecuación con las oscilaciones tipo Friedel y el segundo a las oscilaciones tipo Wigner.

Podemos observar que para $x \rightarrow \infty$ permanece el término de largo alcance que es de tipo Wigner, asociado a un aumento en la interacción entre partículas. Por lo que para densidades bajas de partículas se tiene el régimen de Wigner (formación

de la molécula de Wigner) y para densidades de partículas altas, la molécula de Wigner se destruye, estableciendo el régimen de Friedel [50].

El fenómeno de cristalización de Wigner será retomado después, en la parte de resultados teóricos, como un fenómeno que es capaz de reproducir el modelo propuesto de interacción de electrones 1D mediante un potencial tipo Yukawa.

II.3.- Tratamiento de interacción de muchos cuerpos: Potencial Yukawa

El potencial tipo Yukawa es también conocido como el potencial de Coulomb apantallado, este fue introducido originalmente para aproximar la interacción de protones y neutrones en el núcleo [51]. En particular, el uso de este potencial ha sido direccionado a problemas de muchos cuerpos en diferentes ramas de la física como en Materia Blanda y Física Nuclear [52, 53]. Sorprendentemente, este tipo de potencial no ha sido utilizado en el estudio sistemático de muchos electrones en un hilo cuántico, incluso cuando, al menos cualitativamente, muchos resultados experimentales se pueden reproducir con este modelo, en los cuales se tiene en cuenta un par de partículas puntuales que interactúan a través de un potencial tipo Yukawa.

II.3.1 Potencial Yukawa en cuántica.

La interacción entre dos partículas separadas una cierta distancia, vista clásicamente es debida al potencial de una sobre la otra. Yukawa, en el año de 1934, utilizando conceptos cuánticos, propuso la idea de que la interacción entre partículas es debida al intercambio de bosones entre ellas, que fue explicado por medio del diagrama de Feynman. Por lo que Yukawa introdujo la idea que la interacción nuclear es mediada por el intercambio de una partícula llamada mesón, porque la masa de esta partícula es intermedia entre la del electrón y el protón. Estas ideas dieron lugar a un modelo llamado potencial de intercambio de piones.

Para calcular el potencial de intercambio de un fotón se hace una sencilla analogía con la electrodinámica. El potencial electrostático para una carga q en el origen cumple la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = - \left[\frac{1}{4\pi\epsilon} \right] 4\pi q \delta(\vec{r}) \quad \text{II.3.1.1)}$$

cuya solución es el potencial de Coulomb:

$$V_C(r) = - \left[\frac{1}{4\pi\epsilon} \right] \frac{q}{r} \quad \text{II.3.1.2)}$$

Suponiendo ahora el caso del campo nuclear. Análogamente al caso electrostático la ecuación relativista para el potencial originado por una fuente en el origen esta dado por la ecuación relativista de Klein-Gordon:

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = \left[\frac{mc}{\hbar} \right]^2 \phi(\vec{r}) - g_s \delta(\vec{r}) \quad \text{II.3.1.3)}$$

La cual es válida para partículas de masa m y espín $s = 0$ siendo g_s una constante de acoplamiento. Esta ecuación tiene como solución el potencial de Yukawa:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{g_s e^{-\frac{mc}{\hbar}r}}{4\pi r} \quad \text{II.3.1.4)}$$

que también puede escribirse como:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{g_s e^{-\frac{r}{r_0}}}{4\pi r} \quad \text{II.3.1.5)}$$

siendo $r_0 = \frac{\hbar}{mc}$ la medida del alcance de una fuerza mediada por un bosón de masa m o parámetro de apantallamiento. Podemos observar de acuerdo a la forma funcional de este potencial, que se presentan dos casos límite, para $\frac{1}{r_0} \rightarrow 0$ recuperamos el potencial de Coulomb (Ec. II.3.1.2), para el caso $\frac{1}{r_0} \rightarrow \infty$ obtenemos un sistema tipo partícula libre. En la figura II.3.1.1 se muestra la forma funcional del potencial Yukawa para diferentes parámetros de apantallamiento, incluyendo el caso $\lambda_{ee} = \frac{1}{r_0} = 0$

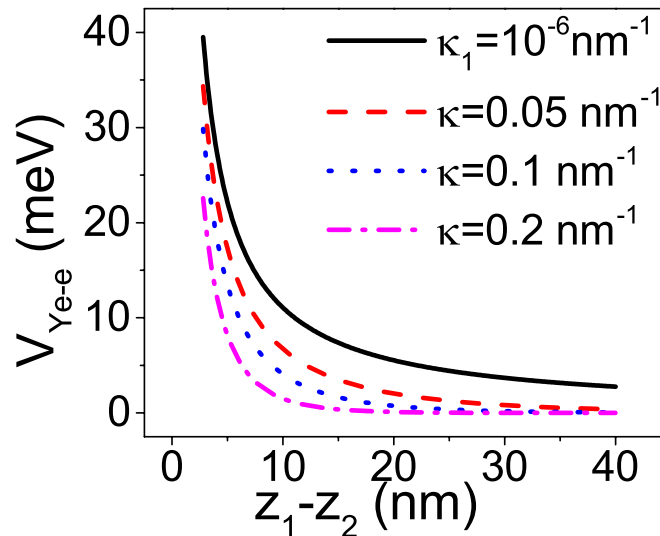


Figura II.3.1.1.- Potencial de Yukawa en función de la distancia entre el par de partículas y la medida de alcance o parámetro de apantallamiento.

II.3.2 Potencial Yukawa en mecánica estadística.

En la mecánica estadística, el potencial de interacción tipo Yukawa a sido usado para modelar líquidos, suspensiones coloidales de partículas cargadas, emulsiones, proteínas en soluciones acuosas, entre otras [54-58]. Debido a que este potencial puede describir interacciones atractivas, repulsivas o combinar ambos tipos y presenta variaciones asociadas al alcance por medio de la manipulación del parámetro de apantallamiento, lo hace muy conveniente para estudiar fluidos complejos para el estudio de difusión de partículas.

Generalmente para teoría de líquidos, el potencial Yukawa se combina con una interacción del tipo esfera dura, con la finalidad de tomar en cuenta la repulsión de corto alcance debida al tamaño de las partículas. Este tipo de modelos y conjunto de ecuaciones aplicadas a estos sistemas, permiten obtener soluciones analíticas de la ecuación de Ornstein-Zernike (OZ), por medio del uso de aproximaciones esféricas.

II.4.- Nuestro modelo: Potencial Yukawa para muchos electrones en un HC

Se propone tratar el problema de dos electrones dentro de un hilo cuántico de sección transversal cuadrada y circular, interactuando efectivamente bajo un potencial tipo Yukawa de la forma:

$$V_{Ye-e}(r) = \frac{e^2 \exp[-\kappa r]}{\epsilon r} \quad \text{II.4.1)}$$

tal que $r = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$. e es la carga del electrón, ϵ la permitividad eléctrica del material y κ el parámetro de apantallamiento en unidades de longitud inversa. Por simplicidad consideramos al par de electrones localizados a lo largo del eje del hilo (eje z), por lo que el potencial Yukawa sólo depende de la distancia relativa entre el par de electrones a lo largo del hilo y r puede ser escrita como $r = \sqrt{(z_1 - z_2)^2}$. (Fig. II.4.1.1)

Por lo que la ecuación de Schrödinger para este sistema esta dado por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi_{12} + (V_{eff}(r) + V_{ext}(x, y)) \psi_{12} = E \psi_{12} \quad \text{II.4.2)}$$

con $\nabla^2 = \nabla_1^2 + \nabla_2^2$, $V_{eff} = V_{p-e}(x, y) + V_{Ye-e}(r)$ es el potencial de interacción total, el cual contiene el potencial de confinamiento de la sección transversal (interacción pared electrón) $V_{p-e}(x, y)$ y el potencial de interacción electrón-electrón (e-e) dado por la Ec. II.4.1., m^* es la masa reducida del electrón. Para resolver la Ec. II.4.2, reescribimos esta de una forma mas simple usando la posición del centro de masa $R = \frac{z_1 + z_2}{2}$ y la masa reducida $\mu = \frac{m^*}{2}$, redefiniendo todos los términos de la Ec.

II.4.2, (deducidos en el Apéndice D), la ecuación resultante es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m^*}\nabla_R^2 + V_{ext}(R)\right]\psi_{12} + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V_{eff}(r)\right]\psi_{12} = E\psi_{12} \quad \text{II.4.3)}$$

La ecuación II.4.3 tiene dos contribuciones: una que depende sólo del centro de masa del sistema conformado por el par de electrones y el otro que sólo es función de la distancia relativa entre electrones. Por medio del método de separación de variables encontramos dos ecuaciones las cuales son independientes entre si.

$$-\frac{\hbar^2}{4m^*}\nabla_R^2 B(R) + V_{ext}(R)B(R) = E_R B(R) \quad \text{II.4.4)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 A(r) + V_{eff}(r)A(r) = E_r A(r) \quad \text{II.4.5)}$$

con $E = E_r + E_R$. La ecuación II.4.4 es resuelta para la sección transversal del hilo, esta parte se tratara mas a fondo en la sección II.4.2. La ecuación II.4.5 tiene solución numérica, en este caso se utilizo el método de diferencias finitas desarrollado en el Apéndice E.

II.4.1- HCs de sección transversal circular y cuadrada

El modelo antes propuesto se aplicó a un sistema 1D tipo hilo cuántico de sección transversal cuadrada y circular, por lo que la ecuación II.4.4, la cual es dependiente del sistema centro de masa, se resolvió para un $V_{ext}(R) = 0$, para el plano x, y se resolvió por separado para cada coordenada, usando coordenadas rectangulares en el caso del hilo cuadrado y coordenadas cilíndricas para el caso del hilo de sección transversal circular. Se trato el problema como un sistema tipo pozo en x y y , para el caso de un sistema con barreras infinitas y barreras finitas, dependiente del tamaño de la sección transversal, los cuales son descritos mas a detalle en la siguiente sección.

En ambos casos para el eje z se resolvió la ecuación II.4.5 numéricamente (la cual es dependiente del sistema relativo a la distancia entre electrones), por medio del método de diferencias finitas, que se describe en el apéndice E, para diferentes longitudes de hilo. Las geometrías de los sistemas a tratar se muestran en la figura II.4.1.1, donde observamos al par de electrones posicionados sobre el eje z .

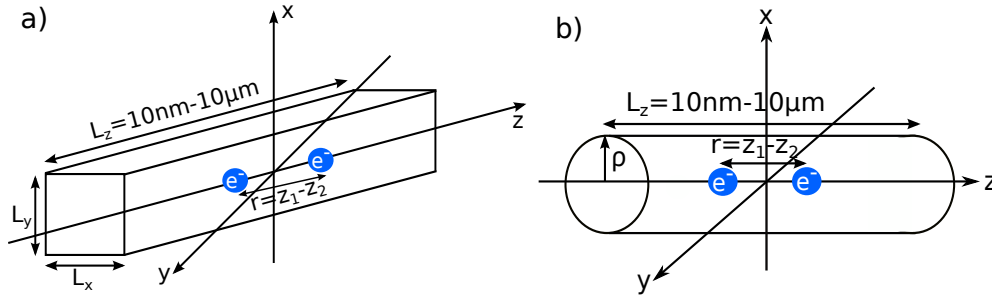


Figura II.4.1.1.- Geometrías utilizada para el sistema de dos electrones localizados dentro de un hilo cuántico a) cuadrado y b) cilíndrico, situados a lo largo del eje z con $x = y = 0$. La misma configuración se utilizó para el hilo cuadrado.

II.4.2- HCs de paredes finitas e infinitas.

Para la sección transversal se utilizaron dos tipos de potencial pared-electrón asociados a:

- Pozo de GaAs con barreras infinitas, por lo que la solución fuera del pozo es cero. La masa $m^* = 0.0665m_e$ con m_e la masa del electrón. Dentro del pozo, tenemos soluciones analíticas, dependientes del tamaño del pozo, para las soluciones a detalle ver el apéndice A.
- Pozo de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, con una concentración de Al $x=0.23$ a una temperatura de 300K, la masa efectiva del pozo definida de la misma forma y la masa en el $Al_xGa_{1-x}As$, dependiente de la concentración, dada su forma funcional en el apéndice B y la solución dada por las ecuaciones trascendentales provenientes de las condiciones a la frontera.

Ambos sistemas se trataron en coordenadas rectangulares y cilíndricas para el hilo cuadrado y cilíndrico, respectivamente. La permitividad eléctrica se tomó como 13 veces la permitividad del vacío [59]. En el mismo apéndice se presenta la deducción del coeficiente de transmisión para el caso del hilo cuadrado.

Por otro lado, de acuerdo a la forma funcional de potencial Yukawa, podemos asociar el parámetro de apantallamiento con la densidad de portadores de carga en el sistema por medio de la longitud de Debye [60]:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2e^2N}{\epsilon k_B T}} \quad \text{II.4.2.1)}$$

para una $T = 300K$, y valores de N en el rango de material intrínseco a altamente dopado. Por lo que los valores del parámetro de apantallamiento de interés son: $\kappa = 10^{-6}nm^{-1} \rightarrow N = 10^6cm^{-3}$, $\kappa = 1nm^{-1} \rightarrow N = 10^{18}cm^{-3}$ y $\kappa = 100nm^{-1} \rightarrow N = 10^{22}cm^{-3}$.

Esto se retomara en la parte de resultados teóricos cuando consideremos el

problema de un hilo cuántico de sección transversal cuadrada y cilíndrica para un potencial de barreras infinitas y el caso real, para un potencial de barreras infinitas.

II.4.3 HCs bajo el efecto de un campo eléctrico externo.

La parte V_{ext} de la ecuación II.4.4 hace referencia a algún potencial extra, como por ejemplo, un campo eléctrico, un campo magnético, etc. En este caso este potencial estará dado por un campo eléctrico a lo largo del eje del hilo e independiente del tiempo, con la finalidad de estudiar transporte en estado estacionario. La mayoría de la literatura reporta efectos de campo eléctrico en la región confinada, es decir, el campo es función de la sección transversal (coordenadas x o y), el cual es llamado efecto Stark cuántico [16], en nuestro caso, tendremos un comportamiento similar pero en el eje a lo largo del hilo, por lo que el potencial externo utilizado en este trabajo esta dado por:

$$V_{ext} = eE_{ext}(z_1 + z_2) = 2ReE_{ext} \quad \text{II.4.3.1)}$$

Esta implementación se realizo para el hilo de barreras finitas en la sección transversal. El campo se tomó en diferentes rangos V/cm a KV/cm. La ecuación II.4.4 resultante de sustituir la Ec. II.4.3.1 se resolvió numéricamente, por medio del procedimiento descrito en el apéndice E.

Un tratamiento análogo se puede realizar si se desea comparar con efecto Stark, se cambiaria la dependencia del campo con respecto a x o y , resolviendo una ecuación similar más el potencial pared-electrón.

Esta parte será retomará en los resultados, cuando se presente la dependencia de las densidades de carga con la magnitud del campo eléctrico externo y para la dependencia de la energía con el campo eléctrico en el sistema centro de masa

II.4.4 HCs acoplados: tunelamiento para un sistema de barreras finitas sin potenciales externos.

Un sistema de dos hilos acoplados esta compuesto de dos pozos acoplados, en los cuales el acoplamiento va a estar dado por la unión de las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las fronteras. Este tipo de sistemas es mas apegado al caso experimental. El acoplamiento de doble pozo se muestra en la figura II.4.4.1, donde el pozo tiene un ancho a y ancho de barrera b . Aquí se espera que las eigenenergías estén definidas sólo para valores menores al de, potencial de la barrera , es decir, para $E < V_0$, en este caso, en el cual tenemos barreras finitas definidas por los materiales a utilizar.

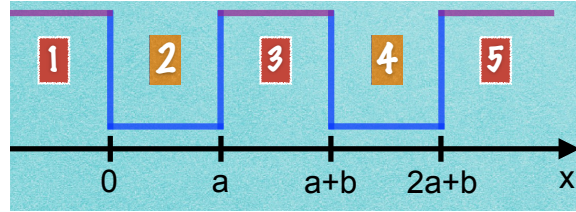


Figura II.4.4.1.- Diagrama de doble pozo en x , con ancho de barrera b y de pozo a .

El sistema de doble hilo se forma a partir del doble pozo, que define el comportamiento del potencial en el eje x . Para el eje y , se tiene un solo pozo, el cual fue definido anteriormente y el eje z se mantiene libre. En este eje, se tiene al par de electrones interactuando bajo un potencial apantallado, potencial Yukawa. La ecuación para z , es la misma que se encontró en el sistema que depende de la distancia relativa entre electrones (Ecuación II.4.5). El sistema final se muestra en la figura II.4.4.2. Este sistema es el caso ideal, en el que no hay interacción entre electrones en el plano $x - y$.

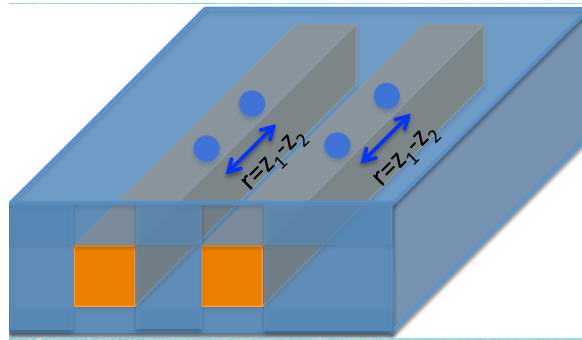


Figura II.4.4.2.- Sistema de dos electrones en cada hilo interactuando idealmente, bajo un potencial Yukawa.

Las soluciones para este sistema están dadas por regiones:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{qx} + B_1 e^{-qx}; \text{ región 1.} \quad \text{II.4.4.1)}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos [px] + B_2 \sin [px]; \text{ región 2.} \quad \text{II.4.4.2)}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{q(x-a)} + B_2 e^{-q(x-a)}; \text{ región 3.} \quad \text{II.4.4.3)}$$

$$\varphi_4(x) = A_4 \cos [p(x-a)] + B_4 \sin [p(x-a)]; \text{ región 4.} \quad \text{II.4.4.4)}$$

$$\varphi_5(x) = A_5 e^{q(x-a-b)} + B_5 e^{-q(x-a-b)}; \text{ región 5.} \quad \text{II.4.4.5)}$$

Con: $q = \sqrt{2 * m_b^* (V_0 - E) / (\hbar^2)}$, $p = \sqrt{2 * m_p^* (E) / (\hbar^2)}$, m_b^* masa reducida en la barrera, m_p^* masa reducida en el pozo y los coeficientes A_i, B_i son encontrados por medio de multiplicación matricial, como se muestra en el apéndice F. En este

mismo se muestra la forma funcional del coeficiente de transmisión y reflexión para el doble pozo.

Para tratar el sistema de hilos cuánticos acoplados, se utilizan las soluciones obtenidas para los pozos acoplados en el eje x , la solución para el pozo de barreras finitas en el eje y y la solución numérica de la ecuación II.4.5 para el eje z . Para el caso real, cuando los electrones interactúan entre hilos, un potencial tipo Coulomb debe ser agregado tipo potencial externo, para la ecuación dependiente de x , en este caso se tendría que unir funciones tipo Airy por medio de las condiciones a la frontera, lo cual resulta un problema con un grado de complejidad mayor. Esto lo retomaremos en la parte final de la sección de resultados para las densidades electrónicas en función de las dimensiones de los pozos y barreras de la sección transversal del sistema.

III.- Desarrollo experimental

En la presente sección explicamos en cierto detalle dos técnicas experimentales, RHEED y AFM, que empleamos en la sección de resultados. Se presentarán además las condiciones de crecimiento detalladas de las muestras que se reportan en esta tesis.

III.1.- Reflexión de electrones de alta energía difractados (RHEED).

RHEED es una técnica que usualmente se encuentra instalada en los sistemas MBE y que es capaz de monitorear *in situ*, en tiempo real, la evolución de la superficie de la muestra en las diferentes fases del proceso de crecimiento. Este sistema consta de un cañón de electrones, los cuales son acelerados en un alto potencial eléctrico de 12 KeV. Para poder analizar la superficie de la muestra, la posición relativa de rayo de electrones al sustrato durante el crecimiento es tal que el ángulo de incidencia que hace la trayectoria de los electrones con la muestra es de aproximadamente 1°. Al final de la trayectoria de los electrones que interaccionan con la superficie de la muestra se encuentra una pantalla fluorescente, en la que se podrá observar su patrón de difracción.

El análisis del patrón RHEED nos permite identificar las distintas reconstrucciones superficiales (esto es, del reordenamiento de los átomos en la superficie) y la morfología misma de la superficie. El área que se monitorea por RHEED es del orden de la longitud de coherencia de los electrones, es decir, de alrededor de varias decenas de nanómetros. En la figura III.1 se muestra un diagrama esquemático de la configuración del sistema RHEED. En la figura, el lado izquierdo muestra la configuración típica entre el cañón de electrones, el sustrato y la pantalla fosforescente. La parte derecha muestra como el patrón RHEED observado en la pantalla se forma a partir de la intersección, en el espacio recíproco, de la esfera de Ewald con los puntos (superficie 3D) o las barras (superficie 2D) del espacio recíproco asociado a la red cristalina superficial de la muestra [61, 62]. Esta representación geométrica equivale a la condición de difracción de Laue dada por:

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}$$

Por lo que las reflexiones pueden ocurrir para todos los \mathbf{k}' conectando al origen de la esfera y a los puntos de la red recíproca sobre la esfera.

Mas adelante abordaremos el como se puede asociar cierto tipo de patrón RHEED a la formación de facetas en el crecimiento de GaAs/GaAs(631).

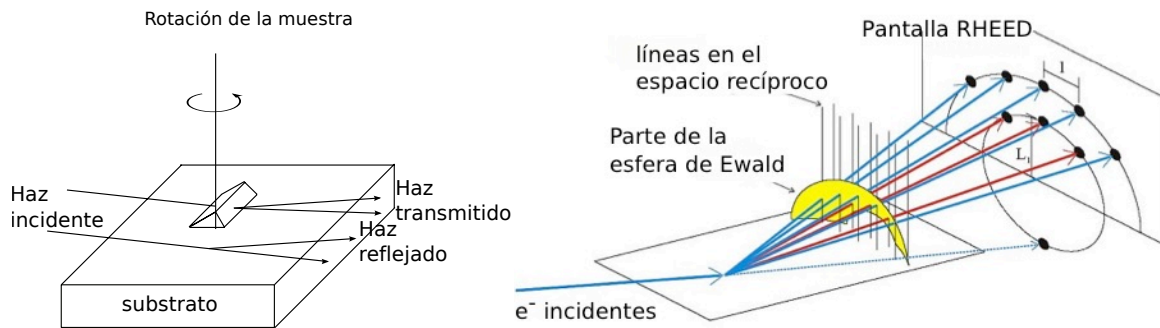


Figura III.1.- Diagrama esquemático del sistema RHEED.

III.2.- Microscopía de Fuerza Atómica.

La Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) es una técnica *ex-situ* con la cual se puede obtener la morfología superficial de la muestra a escalas nanométricas. El sistema AFM consta de una punta de radio de curvatura de 20 a 60 nm que se localiza al final de un cantilever. La fuerza entre la punta y la muestra provocan la deflexión del cantilever (sobre el cual se hace incidir un rayo laser), simultáneamente un detector mide esta deflexión (sensando la posición del rayo laser reflejado por el cantilever) a medida que la punta se desplaza sobre la superficie de la muestra generando una micrografía de la superficie. La fuerza interatómica que contribuye a la deflexión del cantilever es la fuerza de Van der Waals. Un diagrama de un sistema AFM típico se muestra en la figura III.2 [63].

AFM utiliza múltiples modos de operación lo cual permite adaptarlo a las características físicas de la muestra y de las propiedades a medir, algunos de estos modos de operación son:

- *Contacto*: Mide la topografía de la muestra deslizando la punta sobre su superficie.
- *Tapping*: También llamado contacto intermitente, mide la topografía de la muestra tocando intermitentemente su superficie.
- *No Contacto*: Mide la topografía de acuerdo a las fuerzas de Van der Waals que existen entre la superficie de la muestra y la punta.
- *Fuerza Magnética*: Mide el gradiente de fuerza magnética sobre la superficie de la muestra.
- *Fuerza Eléctrica*: Mide el gradiente de fuerza eléctrica sobre la superficie de la muestra.
- *Litografía*: Se emplea una punta especial para generar marcas (líneas, puntos, patrones) sobre la superficie de muestra.

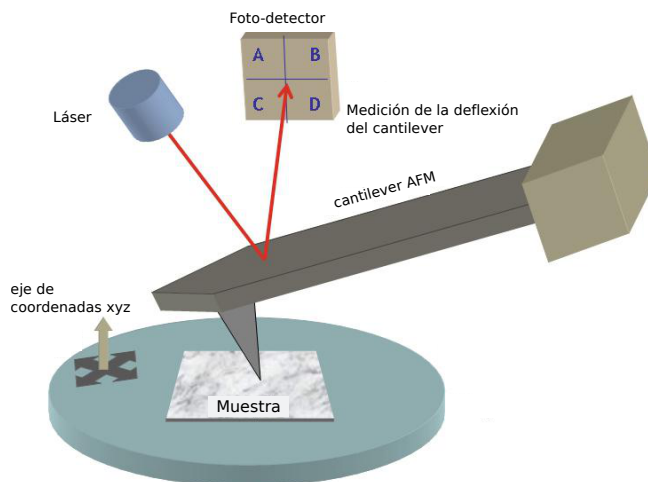


Figura III.2.- Diagrama de un Microscopio de Fuerza Atómica.

En nuestro caso, las imágenes AFM que se muestran en la sección de resultados fueron tomadas poco después de su crecimiento, utilizando un microscopio Nanoscope IIIa multimodo (Digital Instrument, Santa Barbara, CA). Un piezo eléctrico (E-scanner) con un área de escaneo máxima de $15 \times 15 \mu\text{m}^2$. Las imágenes fueron tomadas en modo tapping, utilizando una punta de silicio de $125 \mu\text{m}$ de longitud, con una frecuencia nominal de resonancia de 275-325 KHz y una constante de resorte de 31.18-44.54N/m. Las mediciones fueron tomadas a temperatura ambiente en aire. Las imágenes fueron obtenidas con razones de escaneo típicas de 0.5-1 Hz. Con estos parámetros se obtuvieron imágenes nítidas de las superficies para su posterior análisis en la sección de resultados.

III.3.- Condiciones de crecimiento.

Las muestras que reportamos en este trabajo fueron crecidas con la intención de reproducir las superficies nanoacanaladas altamente uniformes en el equipo MBE instalado en la CIACYT; las cuales habían sido obtenidas anteriormente en un sistema MBE instalado en una universidad japonesa. Logrando este objetivo, se estará en posición de fabricar arreglos de HCs uniformes con los cuales comparar los resultados teóricos obtenidos por nuestro modelo de muchos electrones confinados en sistemas 1D. Para ello, se crecieron películas de GaAs sobre sustratos GaAs(631), siguiendo condiciones de crecimiento similares a las reportadas en la referencia [19]. De forma adicional, para explorar a fondo el proceso de formación de canales, en este trabajo utilizamos una velocidad de crecimiento diferente y exploramos los cambios superficiales con la variación del tiempo de crecimiento.

Antes del crecimiento de la capa de GaAs se utilizó un procedimiento estándar de limpieza [19]. La oblea de GaAs fue desengrasada y cargada en un sistema Riber 32. Una vez transferida a la cámara de crecimiento, se llevó a cabo el proceso de desorción de óxidos a 580°C por 15min, bajo un flujo constante de As_4 . Después,

una capa de 100 nm de espesor de GaAs fue depositada a una presión equivalente del haz (BEP) de Ga, As y a una temperatura de crecimiento de $T_c=600^\circ\text{C}$ tal cual se reporta en la Tabla III.1. Finalmente, la temperatura de crecimiento fue incrementada y las capas finales, de diferente espesores, fueron crecidas a una razón de $0.6\mu\text{m/hr}$, tal como se resume en la Tabla III.1.

En la tabla III.1 se muestran la temperatura de crecimiento (T_c), tiempo de crecimiento (t_c), presiones de As (P_{As}) y Ga (P_{Ga}), velocidad de crecimiento (v_c) y temperatura de desorción de óxidos (T_D), separadas por series.

- En la serie 1 se realizó un cambio en P_{As} manteniendo fija P_{Ga} (muestras M1-M3).
- En la serie 2 se mantuvieron fijas P_{Ga} y P_{As} y se varió T_c (muestras M4-M7).
- En la serie 3 se creció una muestra con los parámetros optimizados extraídos de las series 1 y 2.

Muestra	T_D ($^\circ\text{C}$)	P_{Ga} ($\times 10^{-6}\text{Torr}$)	P_{As} ($\times 10^{-6}\text{Torr}$)	T_C ($^\circ\text{C}$)	t_c (min.)	v_c ($\mu\text{m/hr}$)
Serie 1						
M1 (nws9)	530	0.13	3.5	607	120	0.6
M2 (nws11)	560	0.13	5.5	606	95	0.6
M3 (nws12)	566	0.13	7.6	605	90	0.6
Serie 2						
M4 (nws3)	560	0.13	7	560	65	0.6
M5 (nws8)	530	0.13	7	595	55	0.6
M6 (nws13)	570	0.13	7	600	60	0.6
M7 (nws4)	570	0.13	7	645	100	0.6
Serie 3						
NF1 (nws5)	585	0.13	7	605	50	0.6
NF2	640	0.29	3.4	700	200	0.3

Tabla III.1.- Condiciones de crecimiento para las 8 diferentes muestras crecidas.

IV.- Resultados experimentales

Las superficies cristalinas de alto índice (AI) son energéticamente inestables y, por ello, tienden a generar otras facetas de baja energía libre superficial en el crecimiento por MBE. Lo anterior hace a las AI atractivas para ser utilizadas como plantillas nanométricas con las cuales fabricar arreglos periódicos de HCs [64-66]. Además de este potencial para generar estructuras auto-ensambladas, el crecimiento epitaxial en sustratos de AI permite explorar otras características interesantes que los hacen importantes en la investigación básica y aplicada. Entre ellos podemos enlistar: la naturaleza anfotérica de las impurezas de Si [67, 68], efectos piezoeléctricos atípicos [69], el alto grado de polarización de la luz en arreglos de hilos cuánticos [66], la observación de estados superficiales anisotrópicos topológicos [70, 71] y la mejora de diodos emisores de luz de (In, Ga, Al)P-GaP [72]. Por ello, como parte de los objetivos de esta tesis planteamos el estudiar más a fondo el plano de AI GaAs(631) para obtener conclusiones generales aplicables a otros planos AI.

Por claridad, los resultados los hemos dividido en dos partes: experimentales y teóricos. En la presente sección de resultados experimentales se describen diversos aspectos del proceso de facetamiento obtenidos por medio de RHEED, AFM y análisis de las imágenes de AFM mediante funciones de autocorrelación (ACF). Aunque la idea principal es establecer las condiciones adecuadas para reproducir un arreglo uniforme de facetas 1D (que permitiera la fabricación de los HCs que se estudian en esta tesis de forma teórica), en el desarrollo del trabajo logramos identificar algunas dinámicas del proceso de formación de facetas relacionadas con diferentes fenómenos superficiales. Uno de los principales hallazgos que reportamos aquí es el de que, a partir del análisis minucioso del arreglo atómico del plano de GaAs(631) y otros planos de AI reportados en la literatura, logramos establecer un criterio mediante el cual planos de AI pueden ser escogidos para explorar la formación de nanofacetas 1D. Además, se lograron identificar diversos procesos superficiales que surgen en el facetamiento de la superficie (631), tales como la formación de las estructuras 1x-2x que se describen más adelante.

IV.1 Análisis RHEED: formación de nanofacetas.

Anteriormente, en otros trabajos, se han reportado los patrones RHEED de la superficie de GaAs (631)A [73]. Los patrones reportados se han enfocado en las etapas de desorción de óxidos, en los primeros minutos de crecimiento (donde las facetas aún son demasiado pequeñas para ser observadas por RHEED) y al final del crecimiento (donde las facetas son demasiado grandes para ser observadas por RHEED). Aquí nos enfocaremos en describir justo la etapa importante en que

la formación de facetas pueden ser observadas; esto es, cuando la longitud de la faceta es del orden de la longitud de coherencia de los electrones provenientes del sistema RHEED. Para interpretar correctamente los patrones de difracción del plano de GaAs(631) debemos primero considerar su espacio recíproco asociado. Por medio de las relaciones:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

donde \mathbf{a}_i son los vectores base de la red del cristal y \mathbf{b}_i son los vectores base de la red recíproca. Por medio de estas podemos obtener el espacio recíproco bidimensional asociado al arreglo atómico superficial del plano cristalográfico (631) del GaAs.

En la figura IV.1.1(a, b) mostramos el arreglo atómico del GaAs en el espacio real y el espacio recíproco, respectivamente obtenido por medio de las ecuaciones antes descritas con los vectores de la base de la red real dados por: $\mathbf{a}_1 = a/2(0,1,-3)$, $\mathbf{a}_2 = a(-1,2,0)$ y $\mathbf{a}_3 = a(6,3,1)$, con $a = 5,645\text{\AA}$, la constante de red del GaAs.

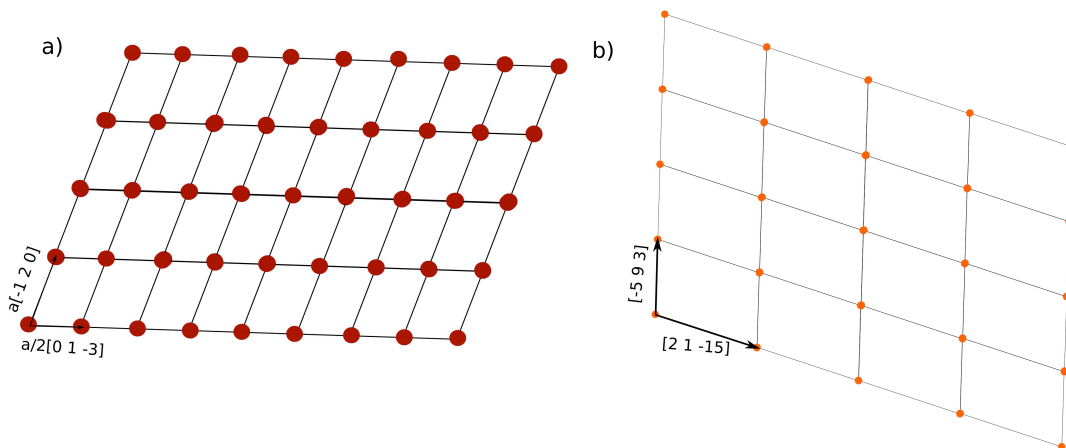


Figura IV.1.1.- Arreglo atómico para GaAs a) en el espacio real con vectores base $\mathbf{a}_1 = a/2(0,1,-3)$, $\mathbf{a}_2 = a(-1,2,0)$ y $\mathbf{a}_3 = a(6,3,1)$, $a=5.645\text{\AA}$, b) en el espacio recíproco.

En la figura IV.1.2 mostramos un esquema de este plano recíproco y varias direcciones azimutales de interés. La roseta de direcciones ilustra las direcciones de alta simetría que deben observarse con mayor claridad en los patrones RHEED del plano (631).

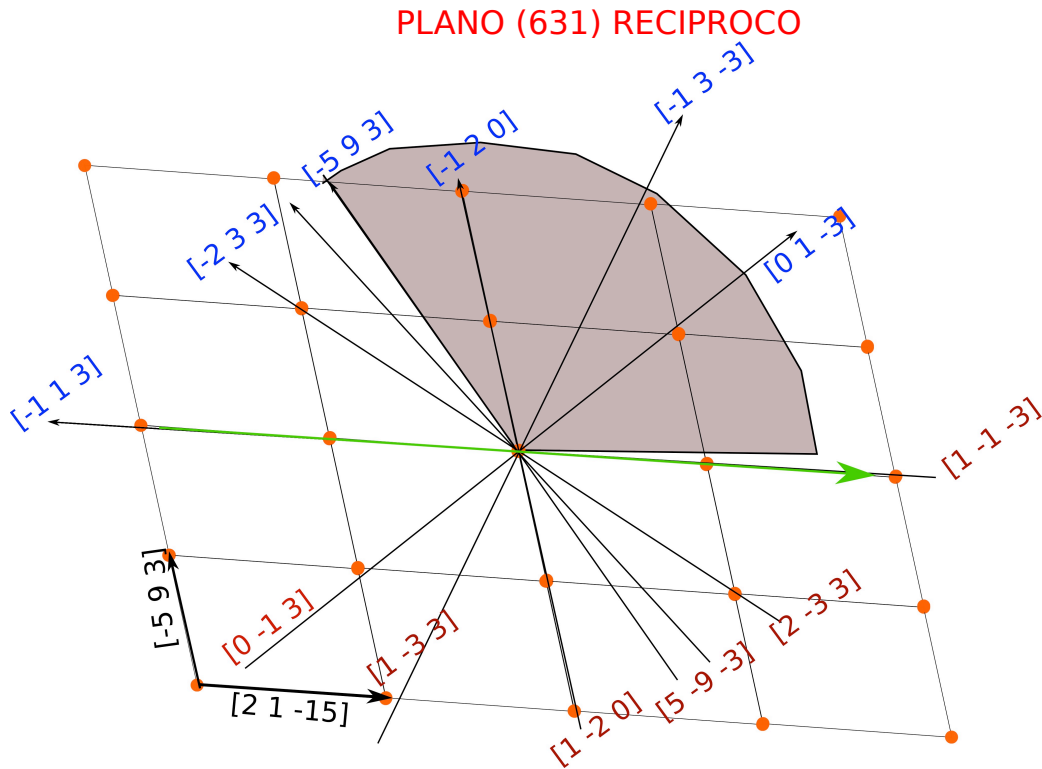


Figura IV.1.2.- Esquema del espacio recíproco asociada a la red superficial del plano de GaAs (631). Los azimuts de alta simetría son marcados por la roseta de direcciones.

La figura IV.1.3 muestra los patrones RHEED de M6 tomados a lo largo de 7 diferentes azimuts ($[-13-3]$, $[0-13]$, $[-113]$, $[-233]$, $[-593]$, $[-120]$) en diferentes etapas del crecimiento: al inicio del crecimiento (fila a), después de 7 minutos (fila b), a 19 minutos (fila c), después de 46min (fila d) y al término de los 46min de crecimiento, con la muestra enfriada a una temperatura de alrededor de $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ (fila e). Por otro lado, en la figura IV.1.4 mostramos los patrones RHEED de la otra región mostrada en la figura IV.1.2, para los azimutales restantes. Aquí los patrones, aunque similares a los de la figura IV.1.3, presentan algunas variaciones importantes.

Como podemos observar de estas figuras, a diferencia de los patrones RHEED de planos de bajo índice, los patrones que se obtiene para el plano (631) en los diferentes estados del crecimiento son muy complejos, reflejando lo intrincado del arreglo atómico de este plano. Aunque un análisis detallado de la evolución del patrón a lo largo de cada azimutal está fuera del alcance de este trabajo, podemos notar algunos comportamientos generales. Observemos primero que los patrones que muestran mejores características, tales como líneas alargadas y la observación del círculo de Laue son los correspondientes a la etapa b), obtenidos

a los 7 minutos de crecimiento. Antes y después de esta etapa los patrones no muestran claramente estas características salvo parcialmente en la etapa final, con la muestra a baja temperatura, donde en ciertas direcciones se vuelve a recuperar la formación de círculos de Laue. Antes y después de esta etapa los patrones son del tipo puntual (contrario a las barras alargadas), que pueden asociarse a una superficie rugosa en la etapa inicial a) y a un crecimiento tridimensional desordenado de la etapas c)-e).

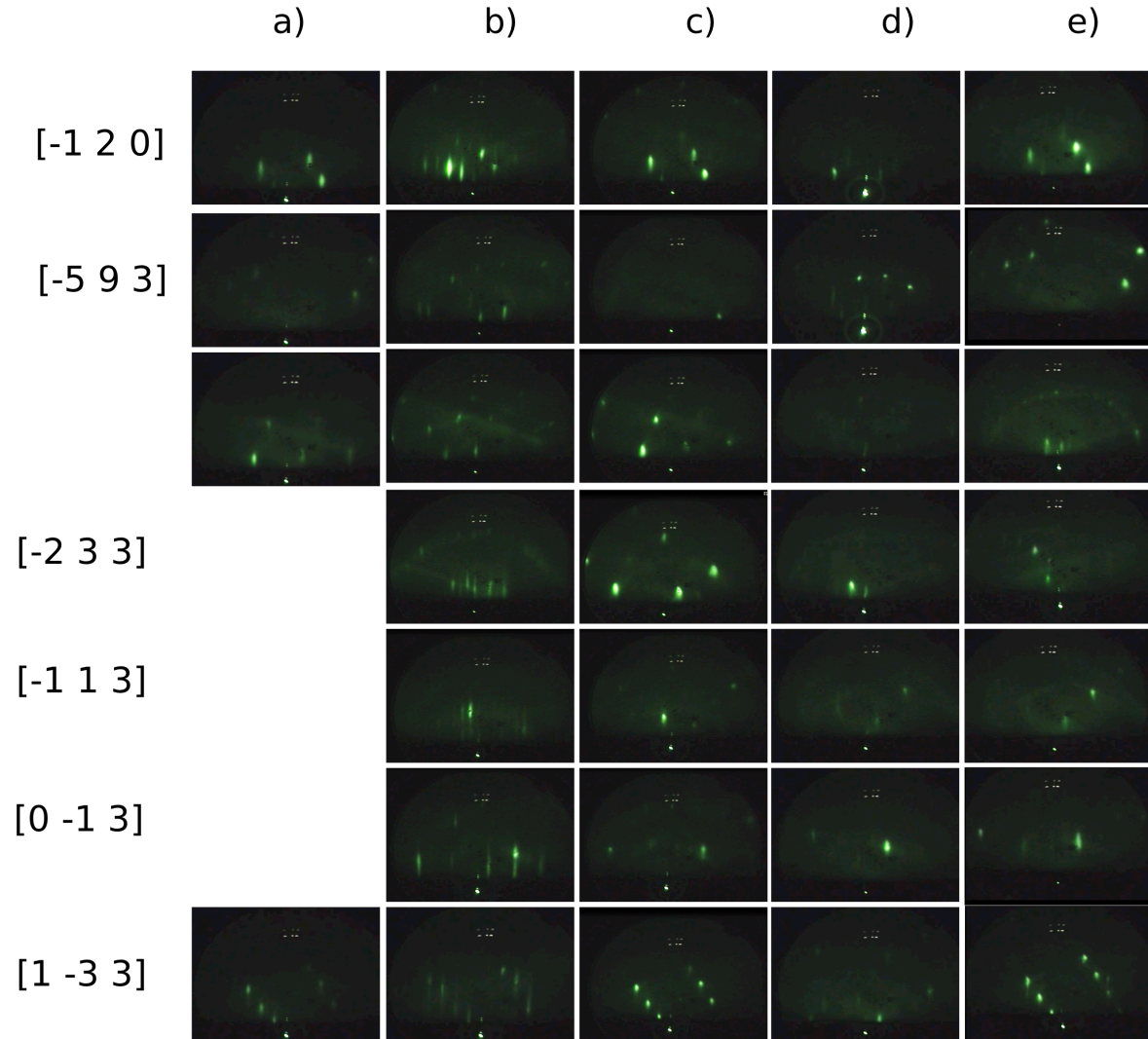


Figura IV.1.3.- Patrones RHEED correspondientes a las direcciones mostradas en la figura 2 para GaAs (631). En a) se presentan los patrones al inicio del crecimiento, b) después de 7 minutos, c) A un tiempo de 19 minutos d) a 46 minutos y e) al final del crecimiento.

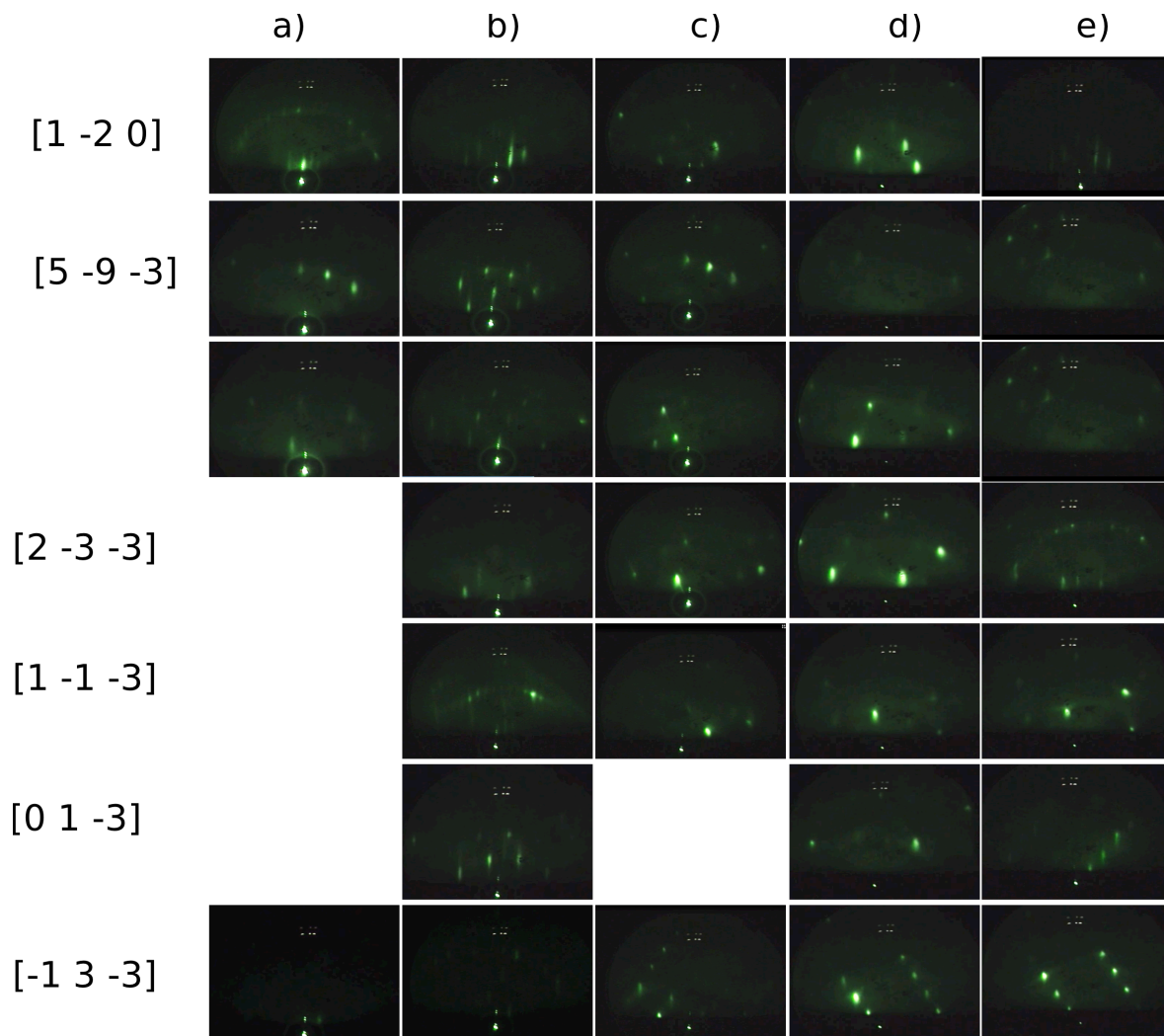


Figura IV.1.4.- Patrones RHEED correspondientes a las direcciones mostradas en la figura IV.1.2 para GaAs (631). En a) se presentan los patrones al inicio del crecimiento, b) después de 7 minutos, c) A un tiempo de 19 minutos d) a 46 minutos y e) al final del crecimiento.

IV.2.- Patrones RHEED y formación de facetas.

Aquí nos enfocamos a analizar los patrones RHEED de la etapa b), en particular los relacionados con la observación de la formación de las facetas. En la figura IV.1.2, podemos observar un patrón de líneas alargadas escalonadas a lo largo del azimut $[-1 -3 3]$ que corresponde a una dirección casi perpendicular a la dirección de alargamiento de las facetas, ($\approx 61^\circ$). Antes y después de esta etapa las líneas alargadas cambian a puntos escalonados y para la figura IV.1.3 en todas las etapas para esta dirección los patrones son puntuales escalonados. Un patrón similar de puntos escalonados también es encontrado en e) en la figura IV.1.2 a lo largo del azimut $[-1 2 0]$, que es otra dirección casi perpendicular a la dirección de alargamiento de las facetas. Este tipo de patrones escalonados puede ser asociado a un arreglo de facetas. Las líneas alargadas indican la formación de facetas uniformes y el cambio a puntos es señal de cierto grado de desorden o rugosidad en las facetas.

Otra dirección de interés es la $[-1 1 3]$, la cual es la dirección de alargamiento de las facetas. De las figuras IV.1.3 y IV.1.4 en la etapa b) obtenemos un patrón de líneas alargadas que nos dicen que la superficie es atómicamente plana.

Los patrones asociados a estos 3 azimuts son compatibles con la formación de facetas orientadas a lo largo de la dirección $[-1 1 3]$ (o $[1 -1 -3]$) (figura IV.2.1).

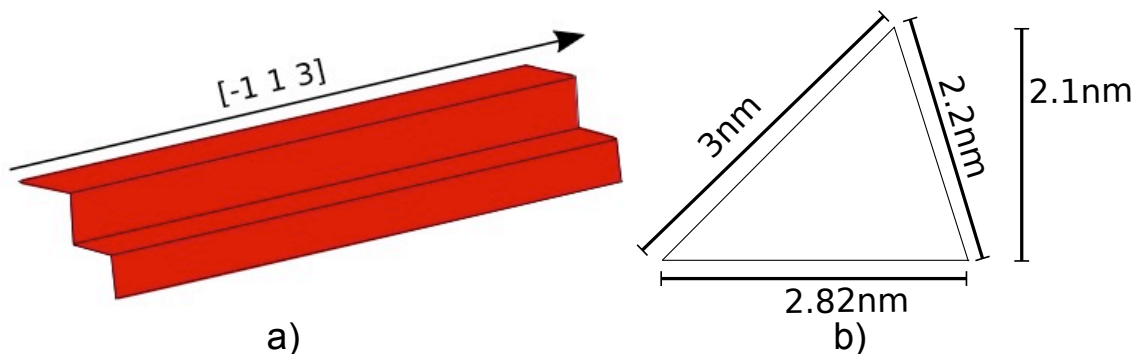


Figura IV.2.1.- Formación y orientación de las facetas de acuerdo a los patrones RHEED encontrados para el depósito de GaAs sobre el sustrato de GaAs(631) a) modelo de faceta a lo largo y b) sección transversal de la faceta.

A este tipo de patrón se le puede asociar un modelo de formación de facetas, como el que se muestra en la figura IV.2.2c [74]. A estas facetas les llamaremos nano-facetas (nF). El alargamiento vertical nos da información sobre la altura de las nFs, $h_{nF}=2.1\pm 0.8\text{ nm}$, la separación entre arreglo de líneas se puede asociar a la constante de red $a_0=0.565\text{ nm}$. De la distancia vertical entre líneas se puede obtener el periodo de las nfs, $L_{nF}=2.82\pm 0.3\text{ nm}$ y del ancho con respecto a la línea inclinada que une el centro de cada línea del arreglo se obtiene un tamaño de escalón de las nfs de $W_{nF}=3\pm 0.8\text{ nm}$ (figura IV.2.1).

A partir de estos datos, podemos asociar un modelo de las nFs como el que se muestra en la figura IV.2.2b. De esta figura también observamos que los escalones de las nFs se encuentran formados por planos del tipo (110) que existen facetas mas pequeñas en este esquema simplificado de planos truncados sin reconstrucción. A estas pequeñas facetas las llamaremos amstrong-facet (ÅF- no las observamos en el patrón RHEED), las cuales tienen dimensiones típicas de $L_{AF}=5.8\text{\AA}$, $W_{AF}=4.9\text{\AA}$ y $h_{AF}=1.6\text{\AA}$. De la figura IV.2.2b, podemos observar que las nFs son aproximadamente 3 veces más grandes que las ÅFs, como lo muestra la línea amarilla de la figura IV.2.2b.

Más adelante retomaremos este modelo de facetas cuando se discuta la morfología superficial de todas las series de muestras y se planteé un modelo de formación de las nanofacetitas con longitudes de terraza mayores a 10 veces la constante de red del GaAs.

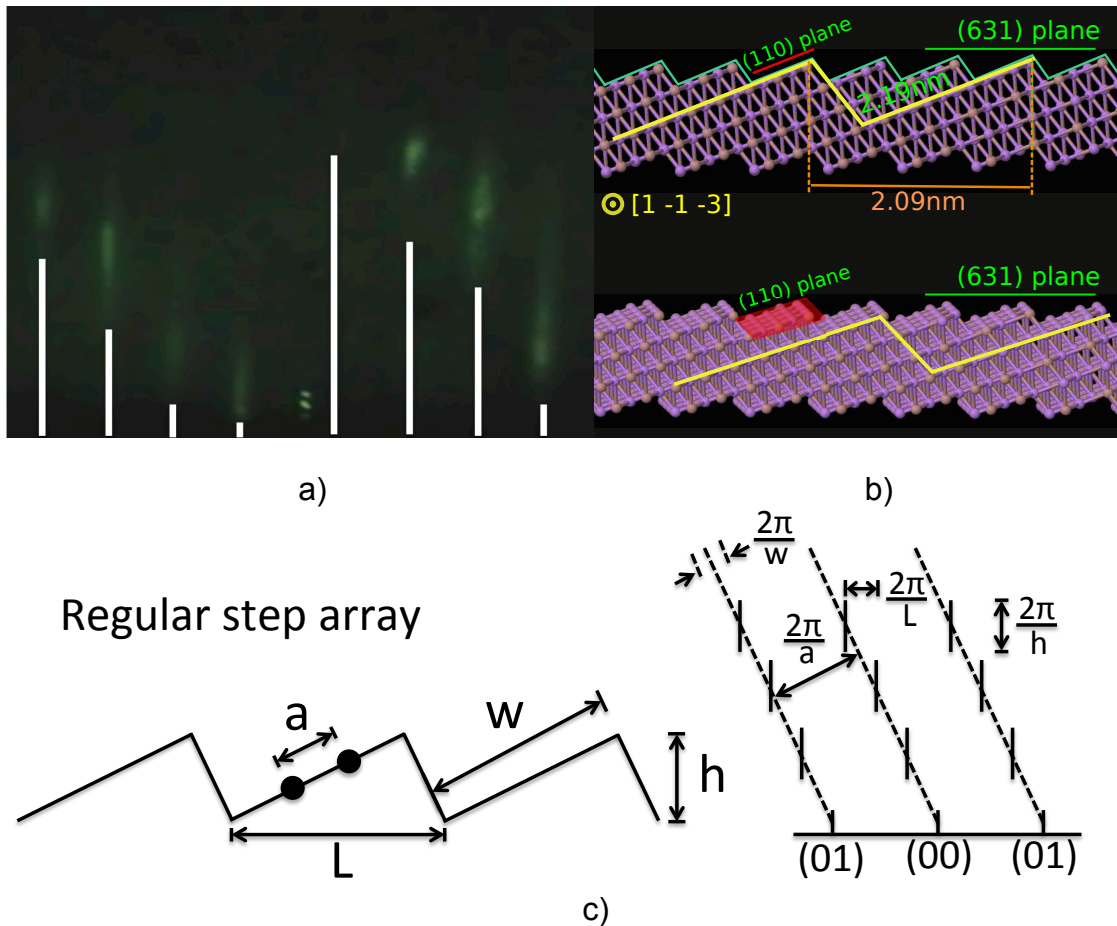


Figura IV.2.2.- a) Patrón RHEED tomado después de los 7 primeros minutos del crecimiento de GaAs sobre el sustrato GaAs (631) en la dirección $[-1 -3 3]$, b) arreglo atómico de las nFs de GaAs auto-ensambladas sobre GaAs (631) visto desde la dirección $[1 -1 3]$ y, c) Modelo de facetas asociado al patrón RHEED de la figura IV.2.2(a).

IV.3 Análisis AFM.

Con el fin de encontrar las condiciones óptimas para la formación de facetas en el equipo MBE instalado en el CIACYT y reproducir las superficies uniformemente nanocorrugadas obtenidas anteriormente en substratos de GaAs(631) crecidas en otros sistemas, realizamos varias series de crecimiento, exploraron cambios en la temperatura de crecimiento (T_c), tiempo de crecimiento (t_c) y presiones de As (P_{As}) y Ga (P_{Ga}) las cuales reportamos en la tabla 1. En las figuras IV.3.1 y IV.3.2 presentamos las imágenes AFM para las series 1 y 2 (descritas en la tabla III.1) mostrando barridos de $1 \times 1 \mu\text{m}$ y a mayores áreas, de $3 \times 3 \mu\text{m}$ ó $5 \times 5 \mu\text{m}$.

Para la serie 1 (muestras M1-M3) observamos de la figura IV.3.1 que para el valor más bajo de $P_{As}=3.5 \times 10^{-6}$ Torr la superficie no muestra la formación de estructuras que se orienten hacia algún lugar específico (muestra M1), aumentando la $P_{As}=5.5 \times 10^{-6}$ Torr (muestra M2) se observa una superficie, que aunque rugosa ($rms=13.45\text{nm}$), ya presenta la formación de estructuras orientadas en cierta dirección. Para una P_{As} de 7.6×10^{-6} Torr (muestra M3) la superficie muestra también estructuras dirigidas en una orientación definidas pero podemos notar que nos alejamos de P_{As} óptima para la formación de las nanofacetas que queremos obtener. Así, concluimos de esta serie que el valor óptimo de P_{As} para la formación de nanofacetas debe estar contenido entre 5.5 y 7.6×10^{-6} Torr.

En la serie 2, cuyas imágenes AFM se muestran en la Fig. IV.3.2, fijamos las presiones de Ga y As, variando T_c desde 560 hasta 645 °C (muestras M4-M9). Observamos que la temperatura es un factor importante para activar la formación de las nanofacetas. A la temperatura más baja de 560 °C (Muestra M4) el facetamiento 1D no es muy claro pero se define mejor al incrementar la temperatura alrededor de 600 °C (Muestras M5-M6). Sin embargo, bajo estas condiciones de crecimiento, si aumentamos la temperatura hasta 645 °C (muestra M7) se pierde la estructura 1D del arreglo de facetas superficiales. Del análisis de las imágenes AFM de la serie 2 podemos concluir que el facetamiento debe presentarse para una para T_c alrededor de 600 °C.

La tercer serie, que sólo contempla la muestra NF1, la cual fue crecida con los parámetros óptimos deducidos de las series 1 y 2, mostramos sus imágenes AFM en la figura IV.3.3, donde podemos observar la formación del arreglo de facetas casi perfectamente uniformes en áreas de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$.

Como podemos observar de la imagen AFM de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, existen regiones donde las facetas se junta lateralmente (proceso que llamaremos coarsening), lo cual será estudiado a detalle mas adelante mediante el análisis de diferentes zonas de esta misma muestra NF1.

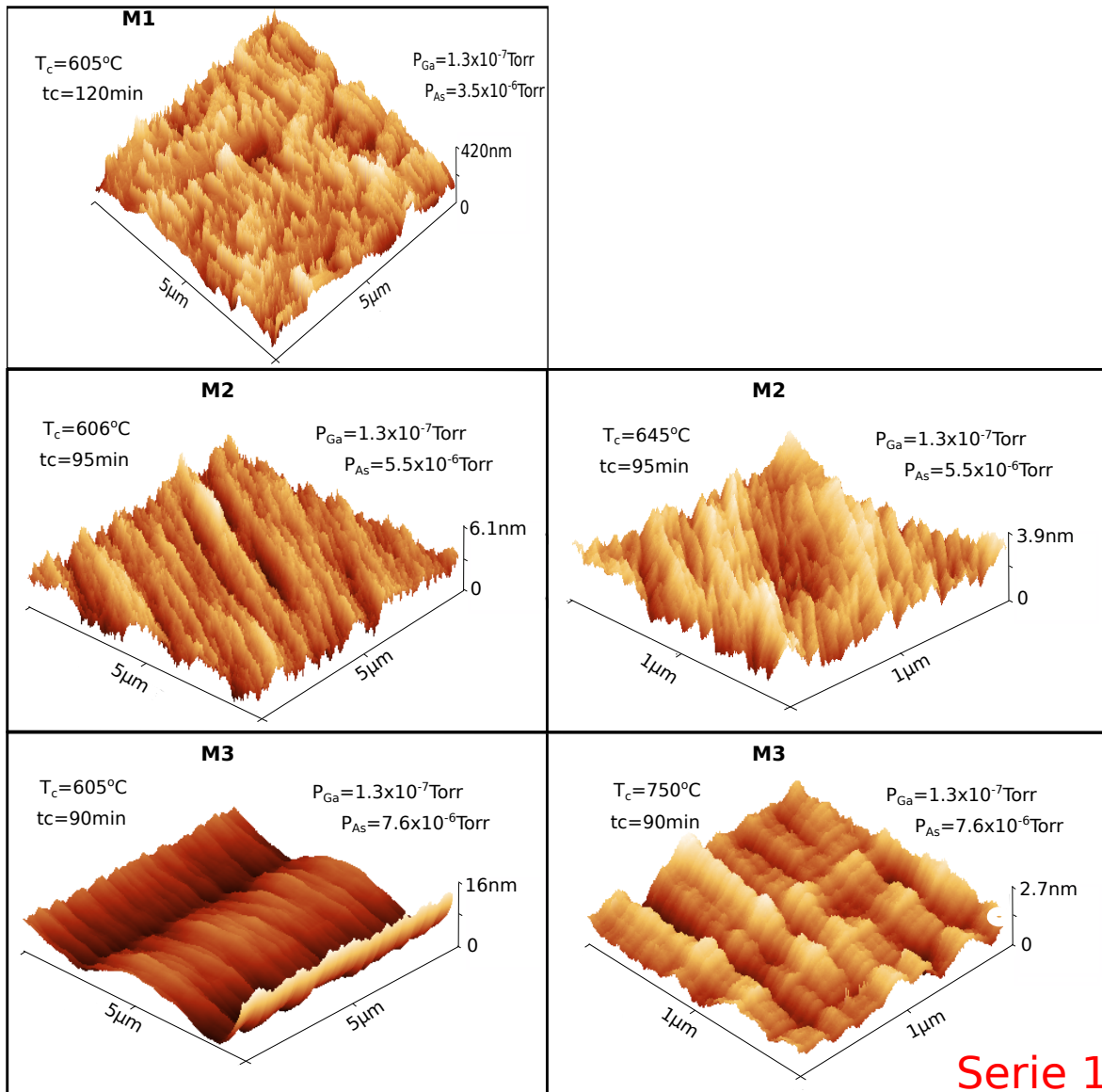


Figura IV.3.1.- Imágenes AFM de las muestras de la serie 1 bajo dos diferentes áreas de barrido. En las imágenes se muestran sus principales parámetros de crecimiento.

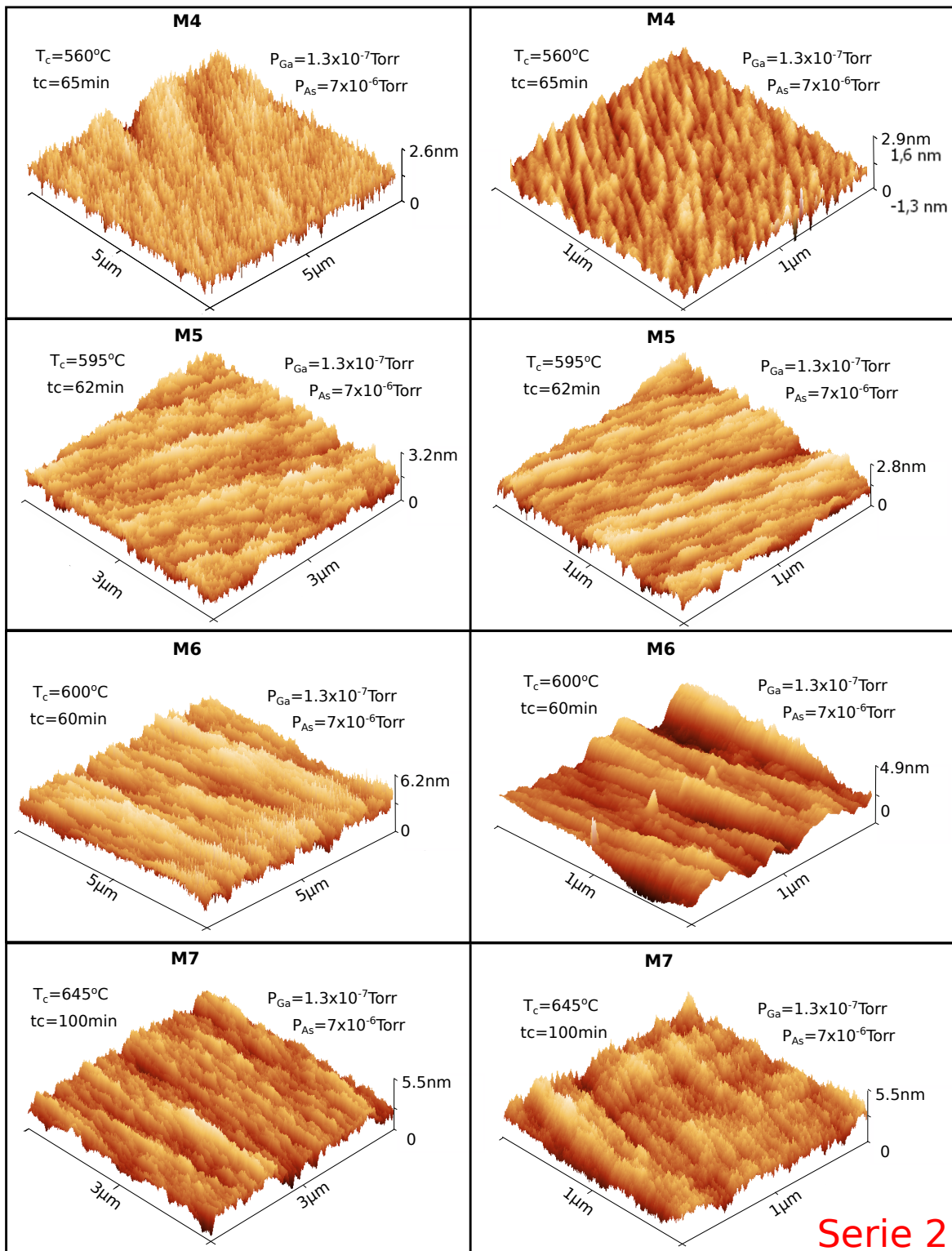


Figura IV.3.2.- Imágenes AFM de las muestras de la serie 2 bajo dos diferentes áreas de barrido. En las imágenes se muestran sus principales parámetros de crecimiento.

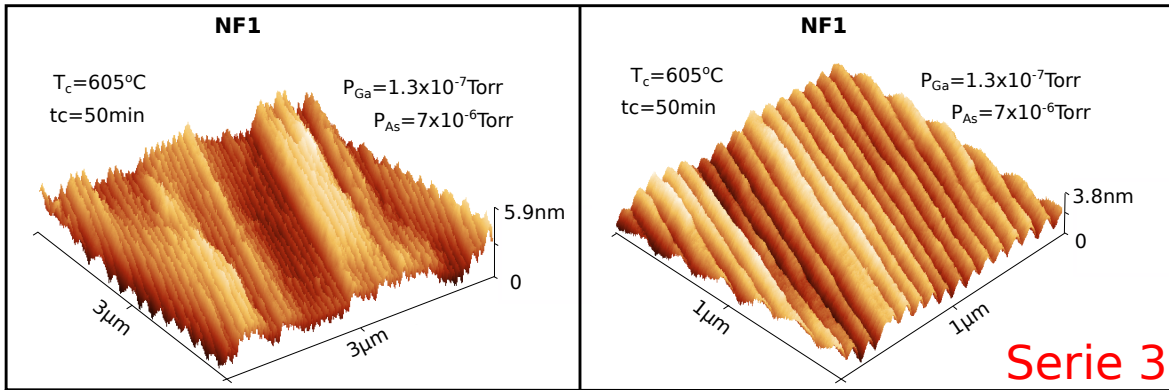


Figura IV.3.3.- Imágenes AFM de la muestra NF1 para dos diferentes áreas de barrido. En las imágenes se muestran sus principales parámetros de crecimiento.

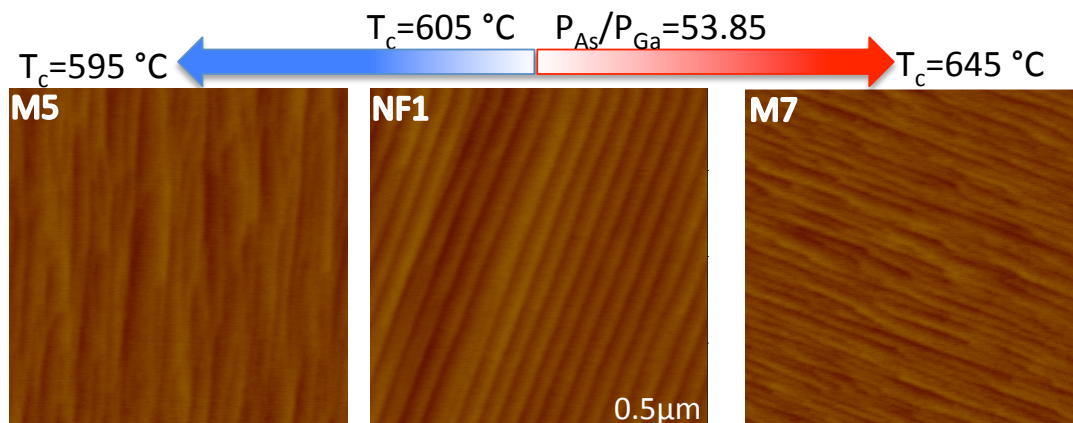


Figura IV.3.4.- Imágenes AFM para la evolución de la superficie al variar la temperatura y tiempo de crecimiento.

En resumen, encontramos que las condiciones óptimas para reproducir el autoensamblado de facetas uniformes, en el sistema MBE instalado en la CIACYT, son: $P_{Ga}=1.3 \times 10^{-7}$ Torr, $P_{As}=7 \times 10^{-6}$ Torr, $T_c=605$ °C y $t_c \geq 100$ min. En la figura IV.3.4 mostramos un resumen de los efectos más importantes de las condiciones de crecimiento en relación con la formación de las nanofacetas. Estos resultados serán retomados posteriormente, cuando discutamos más a fondo los procesos detrás de la formación de estos arreglos de facetas.

IV.4 Plano (631) en el triángulo estereográfico

En esta sección describimos el proceso que se siguió durante la búsqueda de planos de AI dentro del triángulo estereográfico, mediante las proyecciones estereográficas, para encontrar un criterio de exploración de otros planos de AI aparte del (631) con potencial para fabricar arreglos de nanofacetas.

Las proyecciones de los planos de bajo índice (BI los cuales son energéticamente estables) son las más conocidas y encontradas en la literatura, por lo que son usadas como vértices para la formación de los triángulos estereográficos (TEs). En este trabajo iniciamos proyectando estos planos (positivos). Posteriormente se buscaron diferentes direcciones de AI, por ejemplo: las reportadas en la literatura para la formación de nanofacetas (775), (331), (551), (411), (311), etc.

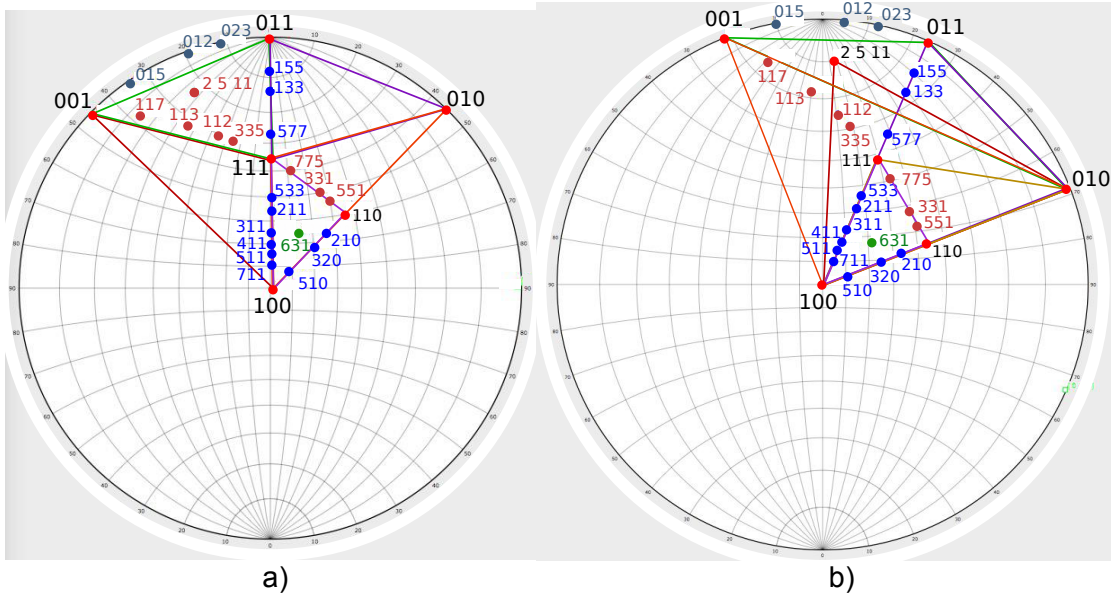
De la figura IV.4.1a podemos observar las proyecciones de los planos de bajo índice: (001), (011), (010), (110), (100), (111) y algunos planos AI proyectados. Formando 5 triángulos estereográficos diferentes por medio de los planos energéticamente estables de bajo índice, observamos que 9 direcciones AI están sobre la línea que pasa por los planos (100), (111) y (011), los AI que se encuentran sobre la línea formada por (100) y (111) son del tipo $(i_1 j_1 j_1)$ con $i_1 = 2, 3, 7$ y $j_1 = 1, 3$. Para las direcciones sobre la línea formada por los planos (111) y (011) estos planos son de la forma $(i_2 j_2 j_2)$ con $i_2 = 5, 1$ y $j_2 = 3, 5, 7$.

Observando otra línea formada por las direcciones (100) y (110), los planos AI que se encuentran sobre ésta son del tipo $(i_3 j_3 0)$ en donde $i_3 = 2, 3, 5$ y $j_3 = 1, 2$.

Para la línea formada por los planos (111) y (110) se muestran 4 direcciones AI de la forma $(i_4 i_4 j_4)$ con $i_4 = 3, 7, 5$ y $j_4 = 1, 5$. Formando los TEs por medio de los planos estables BI y proyectando la dirección (631) de interés observamos que esta se encuentra dentro del TE formado por (100), (111), (010) y el TE (111), (100), (010).

En la figura IV.4.1b mostramos otros TEs que se pueden obtener de los planos mostrados en IV.4.1a, las diferencias aquí son:

- ❖ El sistema está rotado casi 25° en sentido de las manecillas del reloj.
- ❖ Se observan los TEs de vértices (001), (010), (100)- (001), (011), (010) y (2 5 11), (010), (100), en este último uno de los vértices es un plano AI que fue elegido porque es un plano estable, igual que los planos BI.



IV.4.1 Proyecciones estereográficas de planos BI y AI a) TE_s formados a partir de planos estables BI, b) Rotación de 25° de a) con la presencia de el TE formado con un plano estables AI y dos TE_s diferentes.

De la figura IV.4.1, nos damos cuenta que el plano (631) se encuentra dentro del triángulo de vértices (100), (110), (111) y que la dirección (2 5 11) se encuentra dentro del triángulo (001),(011),(111), lo que nos da una pista, ya que estos planos reflejados son los que forman el triángulo que contiene al plano (631) por lo que en la figura IV.4.2, mostramos las mismas proyecciones que en IV.5.1 más la del plano (11 5 2).

En la figura IV.4.2 observamos que la proyección del plano estable (11 5 2) se encuentra cerca de la del plano (631) y que además, podemos formar un nuevo triángulo por medio de los planos estables (100), (11 5 2), (110) y que el plano (631) se encuentra sobre la línea que une a los planos (11 5 2) y (110). Este triángulo 3D formado por 3 planos BI y un plano AI será utilizado mas adelante.

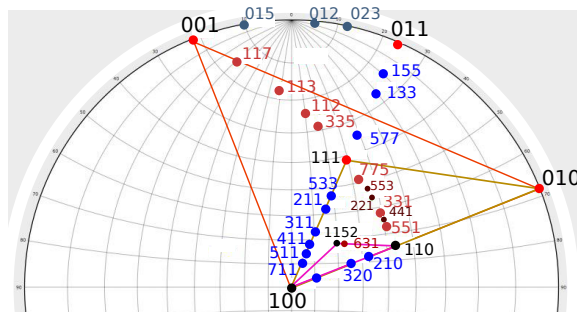


Figura IV.4.2.- Proyecciones estereográficas de planos BI y AI para el estudio de la dirección (631).

Con la finalidad de observar la estructura atómica y localización de estos planos que fueron proyectados para encontrar al plano (631) en el TE, mostramos en la figura IV.4.3 los arreglos atómicos de GaAs truncados en diferentes direcciones.

De la figura IV.4.3a observamos que los planos (133) y (577) están localizados entre los planos BI (011) y (111), los planos (211) y (311) se encuentran entre los planos (111) y (001), lo cual es consistente con lo que se mostro por medio de las proyecciones.

En la figura IV.4.3b mostramos otra perspectiva del arreglo atómico de GaAs para otros planos AI, los planos que se encuentran entre las direcciones (110) y (-3 3 - 2) son: (10 7 1), (631), (11 5 2), (521) y (410), todas de AI.

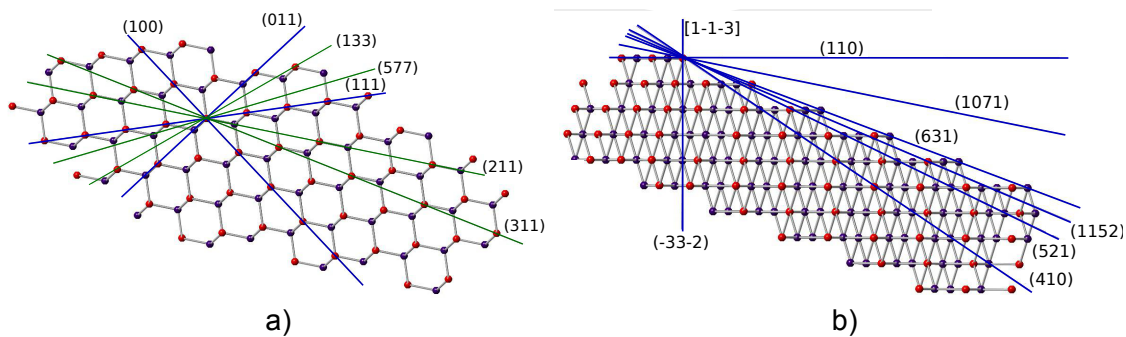


Figura IV.4.3.- Arreglos atómicos de GaAs truncados con algunos planos encontrados en las proyecciones estereográficas.

Esto da una idea, la cual, por medio de un estudio similar se pueden encontrar más direcciones AI dentro del TE que den lugar a la formación de nanofacetas y que aun no han sido estudiadas.

IV.5.- Nuevas direcciones de facetamiento 1D en sustratos AI dentro del triángulo estereográfico

Por razones históricas, los sustratos de alto índice (AI) y superficies vecinales (SV) son elegidos de forma tal que su orientación se encuentra localizada a lo largo de los bordes del triángulo estereográfico (TE), cuyas esquinas son los planos de bajo índice (BI) (100), (110) y (111). Tal elección de orientaciones de AI y SV se debe a la idea generalmente aceptada de que sólo las esquinas del TE pueden formar reconstrucciones de baja energía superficial y que, por lo tanto, los AI o SV en cualquiera de los bordes deben decaer en facetas compuestas de combinaciones de dos de los planos de la esquinas, formando así el arreglo de facetas 1D deseado para la formación de HCs. Aunado a ello, se piensa que los planos de AI dentro del TE deberían generar superficies muy complejas, porque deberían evolucionar a combinaciones de los 3 planos BI, sin formar los arreglos de facetas 1D. Por ello, históricamente han sido muy poco estudiados los planos

Al que se encuentran dentro del TE, y los pocos que se han explorado han sido elegidos sin seguir un criterio específico para buscar la formación de facetas 1D. Recientemente, utilizando el plano GaAs (631)A, que es un plano Al localizado dentro del TE, se han encontrado condiciones que inducen la formación de arreglos periódicos uniformes unidimensionales (1DPA) con notoria uniformidad [57]. La factibilidad de formación de estos arreglos nos lleva a considerar los mecanismos de formación y preguntarnos si existen criterios a seguir para explorar nuevas orientaciones Al dentro del TE.

Mediante el análisis cuidadoso del mecanismo de formación de las facetas 1D en el crecimiento homoepitaxial sobre GaAs(631)A por MBE, logramos encontrar un criterio para explorar auto-ensamble de facetas 1D en superficies Al dentro del TE no exploradas hasta ahora. Como se detallará más adelante, encontramos que existen familias de planos, pertenecientes a direcciones localizadas a lo largo de las líneas que conectan al plano de Al de GaAs(11 5 2), energéticamente estable y localizando dentro del TE, con los planos (100) (110) y (111) en los vértices del triángulo. Tal disposición de los planos en el TE es mostrada en la figura IV.5.1.

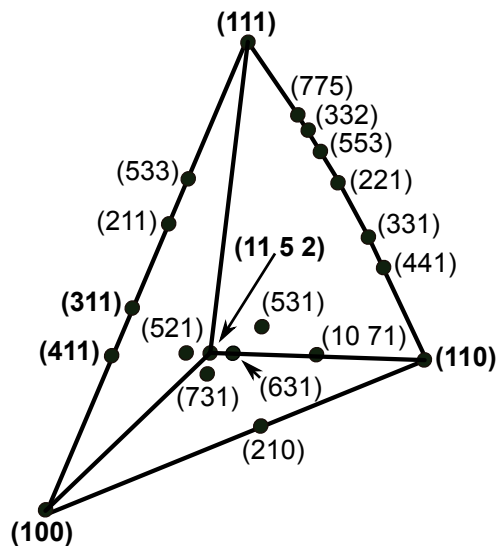


Figura IV.5.1.- Triángulo estereográfico que muestra las orientaciones para el GaAs reportadas en la literatura y las líneas conectando a las esquinas del TE con el plano energéticamente estable (11 5 2), sobre la cual se encuentran las potenciales nuevas direcciones para explorar el facetamiento 1D. Los planos estables se encuentran etiquetadas con texto en negrita.

Recordando, las superficies vecinales (SV) son aquellas que están ligeramente desviadas con respecto a un plano de bajo índice y en dirección a otro plano de bajo índice. Por ejemplo, un plano vecinal al plano (110) desorientado $\sim 1^\circ$ hacia el plano (100). Estas SV consisten de escalones monoatómicos con terrazas y bordes orientados en direcciones específicas. En la exploración de auto-ensamble de 1DPA en planos de Al de GaAs, históricamente se han elegido aquellos localizados en la línea que conecta las esquinas (110) y (111) del TE, tales como

los planos (775), (332), (553), (221) y (331) [64, 20, 21, 75, 70, 76, 74]. Como resultado, en todos los reportes previos sobre la formación de 1DPA en SVs y sustratos de Al GaAs, las facetas se encuentran alineadas a lo largo de la dirección $[0, 1, -1]$ y consisten de terrazas (001) y escalones (111), como se muestra esquemáticamente en la figura IV.5.2 a).

Debido a que estas superficies Al dentro del TE tienen un arreglo atómico complejo, sólo unos pocos de estos planos de GaAs han sido estudiados para la formación 1DPA: esto son los planos (631), (731) y (531) [19, 77, 78]. Debido a esta complejidad, también es bastante notable que algunos autores han encontrado superficies energéticamente estables dentro del TE en cristales como Si, Ge y GaAs [79, 80]. Para los compuestos semiconductores, el único plano estable dentro del TE reportado hasta ahora es el de GaAs (11 5 2)_A, lo cual fue determinado por microscopía de efecto túnel y mediante cálculos de primeros principios [80].

Como se ha podido probar que el plano de GaAs (631) A puede inducir facetamiento 1D altamente uniforme, lo cual nos lleva a preguntarnos si existirán otros planos de Al dentro del TE que aún no han sido explorados para formar facetamiento 1D. La figura IV.5.2b muestra de forma esquemática el plano GaAs (631) y planos Al relacionados. Al igual que con otras superficies Al, el plano (631)_A presenta un arreglo complejo de enlaces libres en su superficie [24]. Sin embargo, cuando esta superficie es observada a lo largo de la dirección $[1, -1, -3]$, lo que surge es un perfil sorprendentemente simple, formado por microfacetas de planos (110) (de longitud aproximada 0.6 nm) separados por escalones monoatómicos del plano (2, -1, 1), tal como se muestra en la fig. IV.5.2b).

Ahora analizaremos los otros dos planos de GaAs reportados de Al dentro del TE, es decir, los planos (731) y (531) [77, 78]. Como se muestra en la Fig. IV.5.1, los planos (731) y (531) no pertenecen a ninguna de las líneas que conectan a cualquiera dos de los planos energéticamente estables. Al parecer, la ausencia de este par de facetas estables que cuadren geométricamente para generar un arreglo de facetas 1D es la razón por la cual estas direcciones cristalográficas no han producido generar estos arreglos 1D.

Por otro lado, el plano (521) es un caso diferente e interesante. Como se muestra en la Fig. IV.5.1, este plano está situado en la línea que conecta dos superficies estables Al: el plano (411), sobre el borde del TE, y el plano (11 5 2), dentro del TE. Aunque no se ha reportado la formación de facetas 1D sobre este plano, parece un candidato importante para explorar un tercer caso adicional en la formación de este tipo de arreglos.

Una resultado importante que podemos concluir de la discusión anterior es la posibilidad de producir arreglos de facetas 1D en nuevas familias de planos que aún no han sido explorados hasta ahora. Entre ellas se encuentran: (i) las orientaciones entre los planos (11 5 2) y (111), incluyendo las orientaciones (421), (953), (532), (643), (754), y (10 8 7) que se espera formen facetas 1D alineadas a lo largo de la dirección $[1, -3, 2]$ dirección; (ii) las orientaciones localizadas entre

los planos (11 5 2) y (100), como los planos (13 5 2) o (20 5 2), que podrían formar facetas 1D a lo largo de la dirección [0 2 -5] y, (iii) en otras orientaciones aparte de la (631), entre los planos (11 5 2) y (110), tales como el plano (10 7 1), que se espera forme facetas alineadas a lo largo de la dirección [1, -1, -3]. Adicionalmente, se podrían explorar incluso orientaciones situados en la línea que conecta el plano (11 5 2) con sustratos estables HI situados sobre los bordes del TE, tales como (411) y (311), que podría ser de interés para la formación de facetas 1D.

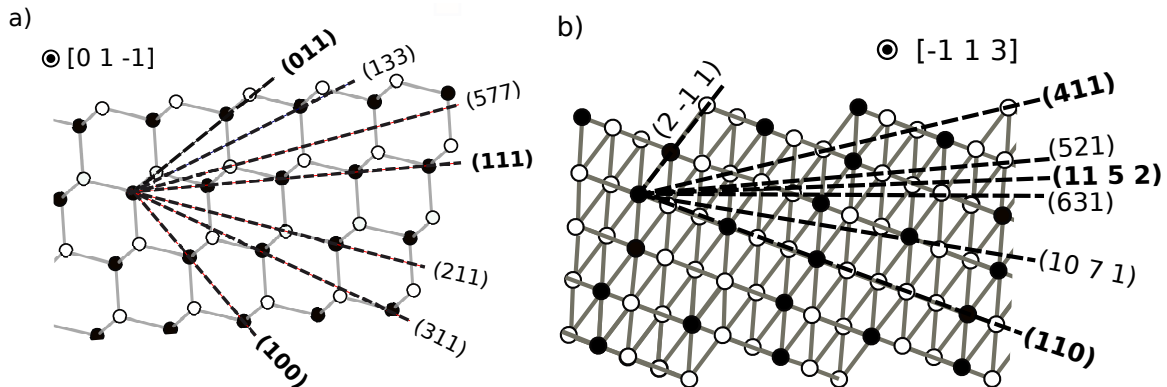


Figura IV.5.2.- a) Sección transversal del GaAs en bulto vista a lo largo de la dirección [0 1 -1]. b) Sección transversal del GaAs en bulto vista a lo largo de la dirección [-1 1 3]. Se indican algunos planos reportados en la literatura (texto en negrita).

IV. 6.- Evolución del facetamiento 1D en el plano (631)

Como se discutió anteriormente, la superficie (631) vista a lo largo de la dirección [1, -1, -3] se compone de microfacetas (110) escalones monoatómicos bien definidos. Considerando: (i) el arreglo atómico inicial de la superficie, (ii) la aparición de microfacetas observadas por RHEED en los primeros minutos de crecimiento y, (iii) la topografía final observada por AFM; es razonable suponer que la formación de facetas 1D está mediada por procesos similares a los que ocurren en planos de Al situados entre los planos (110) y (111) y las SV. Esto es, mediante un proceso inicial tipo step-bunching y la posterior interacción elástica para minimizar la energía superficial promueven la formación de las facetas siguiendo un mecanismo como el propuesto en la Fig. IV.6.1. Así, mediante un mecanismo análogo a que siguen los planos Al localizadas a lo largo de los lados del TE, podemos explicar como un arreglo uniforme de facetas 1D puede ser producida en los planos Al dentro del TE. Este modelo se describe mas a detalle a continuación.

Bajo condiciones de crecimiento adecuadas, el arreglo atómico inicial (superficie truncada (631)) evolucionará por medio del proceso cinético de step-bunching hacia facetas (110) con un periodo lateral cada vez mayor y escalones (2, -1, 1). Posteriormente, cuando las facetas crezcan lo suficiente (periodo lateral $>10a_0$) entraran en juego las interacciones elásticas descritas por el formalismo de Marchenko (ecuación 1.5.2.1). Conforme el sistema sigue evolucionando, las interacciones elásticas provocaran la formación de arreglos ordenados de facetas 1D. La estructura final típicamente tiene las siguientes dimensiones: una altura de 2 nm, un período lateral de 60 nm, una longitud de coherencia de hasta $5\mu\text{m}$ y una longitud de correlación característica mayor a $1,6\ \mu\text{m}$ [19]. La Figura IV.6.1 muestra un esquema de esta formación de facetas y su evolución.

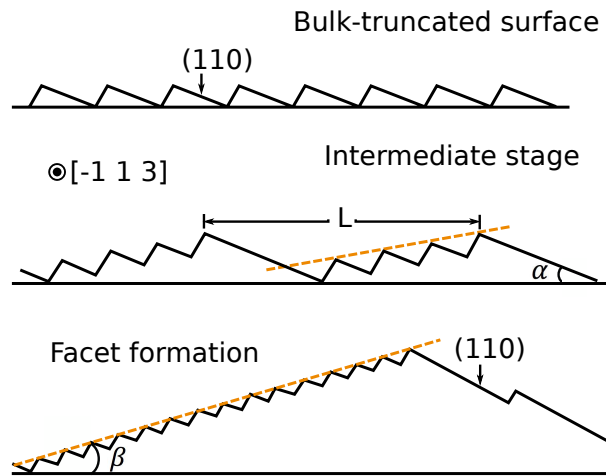


Figura IV.6.1.- Mecanismo de facetamiento durante crecimiento homoepitaxial sobre GaAs (631) visto a lo largo de la dirección $[-1\ 1\ 3]$.

IV.6.1.- Análisis de perfiles AFM

Por medio de los perfiles de las imágenes AFM para las superficies facetas (muestras NF1 y NF2) obtenemos evidencia de la formación de facetas. De la figura IV.6.1.1 (a,b) podemos observar que las facetas para las muestras NF2 y NF1 están compuestas de terrazas formadas por agrupamientos de facetas, para la muestra NF2 esto es mas evidente, ya en este caso las facetas están compuestas por mas nFs en comparación con el perfil obtenido para la muestra NF1. Haciendo un acercamiento en el perfil de la muestra NF2, esto es mas notorio, por lo que asignamos un modelo para la formación de facetas, el cual se muestra en la figura IV.6.1.1d). Podemos observar que el proceso de formación de facetas en el plano Al (631) es similar al proceso de step-bunching descrito en la figura IV.6.1.

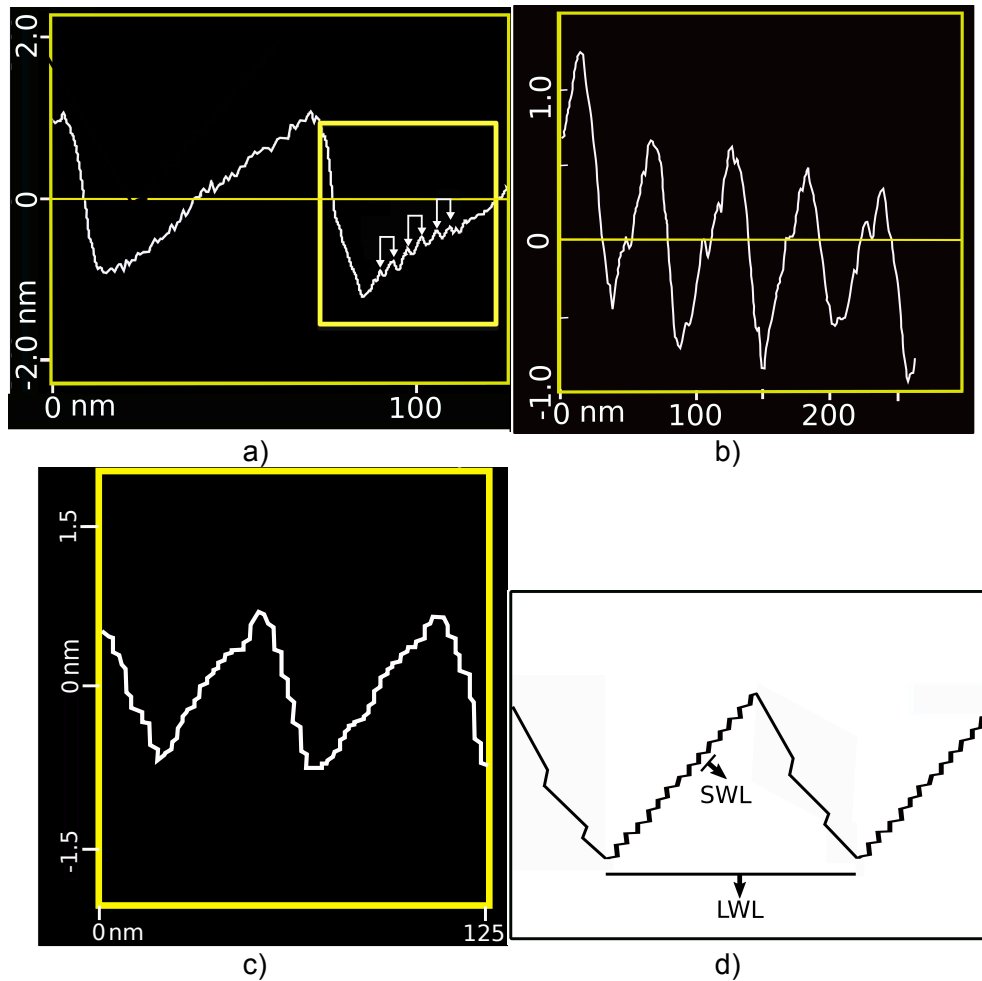


Figura IV.6.1.1- Perfil de las imágenes AFM para a) la muestra NF2, b)NF1, c) acercamiento del perfil mostrado en a) y d) modelo propuesto para la formación de facetas a partir del agrupamiento de nFs.

IV.7.- Coarsening en superficies GaAs de alto índice

Anteriormente, se demostró la formación de casi perfecta corrugación superficial en áreas de hasta $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ y una alta homogeneidad en áreas de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ presentando longitudes de coherencia de hasta $3.6 \mu\text{m}^2$, en las capas homoepitaxiales de $1 \mu\text{m}$ de espesor sobre GaAs (631)A crecidas por MBE. Para el plano GaAs (631) bajo lenta tasa de crecimiento de $0.3 \mu\text{m/hr}$ y una alta T_c de 700°C , las condiciones de crecimiento óptimas para la mejora de la difusión de adátomos y mediante el uso de un tiempo de crecimiento grande para el crecimiento de una capa gruesa, un estado cuasi-estacionario para ambas interacciones elástica y el proceso de coarsening pueden ser establecidas. Sin embargo, para aplicaciones practicas las homogeneidades en las áreas escaneadas por medio de AFM mayores que $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ pueden ser evitadas. En lo

que sigue nos vamos a centrar en los fenómenos superficiales que desencadenan la formación de estas imperfecciones a grandes áreas. Para ello, las capas de GaAs de una serie de espesores se crecieron por MBE en GaAs (631) a una tasa de crecimiento de $0.6\mu\text{m/hr}$.

IV.7.1.- Inhomogeneidades en áreas mayores a $1\mu\text{m}^2$: estructuras 1x-2x.

En la figura IV.7.1.1, presentamos un área de $4\times 3\mu\text{m}^2$ de una imagen AFM, de la muestra obtenida bajo las condiciones de la Ref. [], la cual llamaremos muestra NF2. Dos típicas situaciones son observadas para estas áreas grandes: 1) hay regiones que contienen casi perfectos arreglos de canales, corriendo paralelos sobre distancias de hasta $5\mu\text{m}$ (región dentro del rectángulo) y 2) se puede observar la formación de estructuras “1x-2x” las cuales en un extremo están compuestas de un simple canal y del otro extremo esta compuestas de un doble canal, ambas conservando la misma orientación que los canales en las regiones uniformes. Estas estructuras 1x-2x son el principal factor de pérdida de uniformidad, que se pueden notar en las zonas mas grandes que $1\mu\text{m}^2$.

IV.7.2.- Interacciones elásticas 2D: Estructuras 1x-2x.

En la figura IV.7.1.1, etiquetamos los lados 1x y 2x de las estructuras 1x-2x. Como se observa, la distribución de las estructuras 1x-2x sigue un patrón alternado. En la dirección paralela, se puede establecer una región que define las zonas de transición 1x-2x y 2x-1x. Podemos hacer una estimación de la longitud máxima promedio de un canal simple uniforme antes de su partición para convertirse en un doble canal. Por medio del conteo del número de estructuras 1x-2x y canales perfectos 1x corriendo de lado a lado en un área de $5\times 5\mu\text{m}^2$. En una muestra de $1\mu\text{m}$ de espesor encontramos una razón 6:1 entre canales simples perfectamente uniformes (1x) corriendo de lado a lado y canales dobles perfectamente uniformes (2x) en las estructuras 1x-2x. Esto es, en un área de $5\times 5\mu\text{m}^2$, hay en promedio 6 canales perfectos 1x por cada estructura 1x-2x. Extrapolando este resultado podemos estimar que, si asumimos que cada canal 1x en alguna región puede volverse una estructura 2x, entonces cada estructura 1x-2x tendrá una extensión de $35\mu\text{m}$, esto es, en promedio, para una capa de GaAs de $1\mu\text{m}$ de espesor hay canales uniformes 1x corriendo perfectamente uniformes distancias de hasta $17.5\mu\text{m}$. Esta es una extensión de alambre bastante notable para la fabricación de sistemas coherentes 1D y potenciales aplicaciones 1D.

Los patrones alternos pueden ser entendidos como un mecanismo del sistema para minimizar la energía elástica superficial en toda la superficie, esto es, en ambas direcciones, longitudinal y transversal. Para la etapa avanzada de formación de facetas de muestras de $1\mu\text{m}$ de espesor (donde el factor dinámico no tiene gran importancia), dos principales factores son los responsables de la evolución de la faceta, a saber, las interacciones elásticas y el proceso de

coarsening. Usualmente estos dos mecanismos son estudiados considerando solo la dirección transversal relativa a la dirección de elongación del canal. Para la componente elástica, el modelo de Marchenko 1D [28] exitosamente describe el facetamiento en superficies vecinales.

En el estado cuasi-estacionario de la muestra NF2, ambas interacciones: las elásticas descritas por Marchenko y las de tipo coarsening, tratan de inducir la formación de arreglo de facetas de un periodo simple transversal (fijo), el cual es consistente con los perfiles transversales que pueden ser observados de la imagen AFM mostrada en la figura IV.7.1.1.

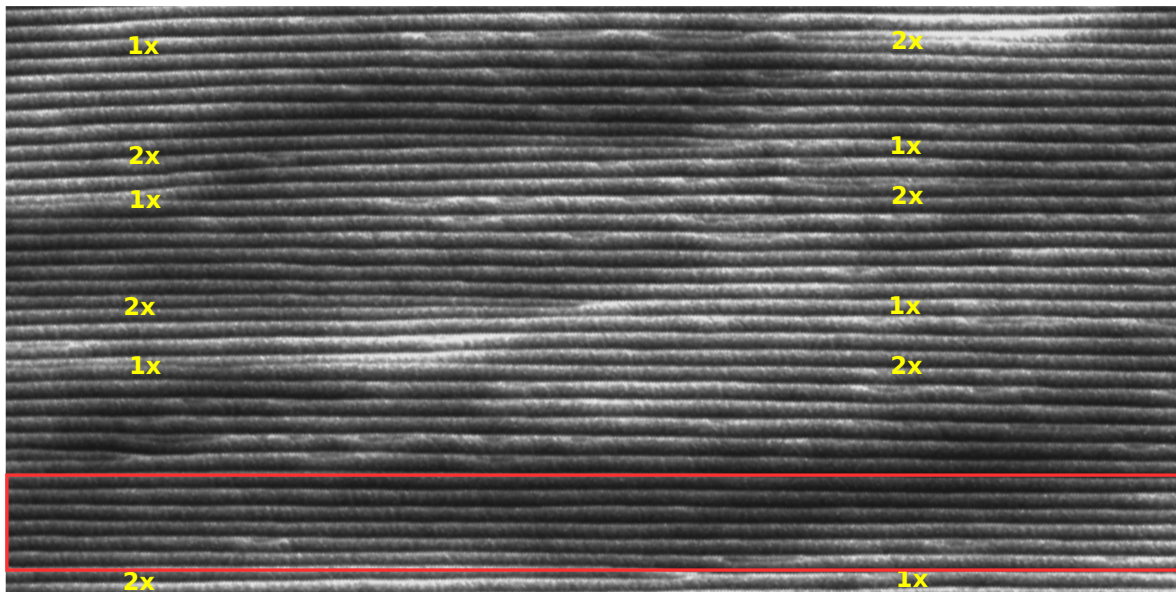


Figura IV.7.1.1.- Zona de un área de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ para la muestra NF2, el rectángulo rojo muestra la región uniforme entre las estructuras 1x-2x y los patrones alternos para esta distribución (Letras amarillas).

Por otro lado, se puede deducir del patrón alternado de estructuras 1x-2x y 2x-1x, que existe algún mecanismo el cual induce una modificación a lo largo de la dirección paralela al arreglo de canales. Aun mas, como en la dirección transversal estos patrones alternos además aparecen, parece que la interacción de largo alcance se presenta en orden de establecer un balance elástico a lo largo de ambas direcciones del canal paralela y perpendicular. Esto es, mientras en la dirección transversal ambos mecanismos de coarsening e interacciones elásticas han alcanzado un estado estacionario en el cual el coarsening entre canales adyacentes es principalmente controlado por interacciones elásticas, en la dirección paralela, también aparece otra componente elástica, que a su vez, en orden de minimizar la energía superficial, desencadena la formación de un arreglo alternativo 1x-2x. Esta interacción elástica de largo alcance la cual es muy diferente a

la descrita por el modelo de Marchenko, hasta donde sabemos, no ha sido reportada antes.

Con la finalidad de corroborar el efecto de las interacciones elásticas de largo alcance se estudio un área de $2.47 \times 1 \mu\text{m}^2$ de la muestra NF1, la cual presenta facetamiento uniforme (figura IV.7.1.2), observamos que esta también presenta el tipo de estructuras alternadas 1x-2x entre regiones con facetamiento uniforme de hasta $2.47 \mu\text{m}$ de longitud de coherencia.

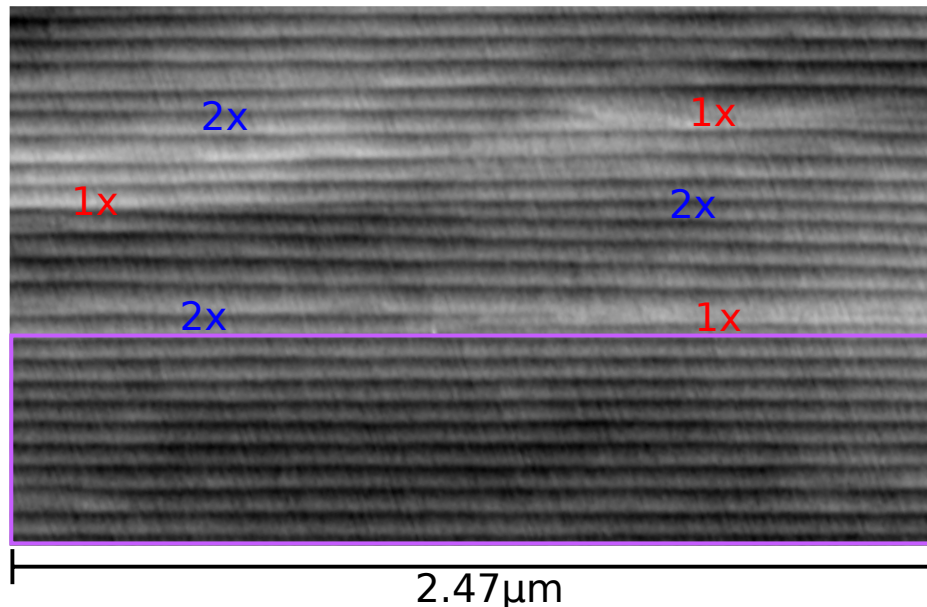


Figura IV.7.1.2.- Zona de un área de $2.47 \times 1 \mu\text{m}^2$ para la muestra NF1, el rectángulo morado muestra la región uniforme entre las estructuras 1x-2x y los patrones alternos para esta distribución (Letras rojas y azules).

Vale la pena tener en cuenta que aun cuando la formación de estructuras 1x-2x podría considerarse como defectos para aplicaciones QWR, donde podría ser preferible un arreglo perfectamente uniforme, estas estructuras 1x-2x muy alargadas podrían ser útiles para explorar interesantes efectos electrónicos 1D. Por ejemplo, la exploración de transporte electrónico a lo largo de estructuras 1x-2x, podría dar información valiosa acerca de lo que sucede cuando dos gases de electrones independientes 1D se mueven a lo largo del lado 2x se ven obligados a juntarse en un solo canal electrónico 1D. Inversamente, también podría ser posible obtener información valiosa de la forma en que una fracción de gas electrónico 1D en dos gases electrónicos 1D. En efecto, tales experimentos podrían utilizarse para obtener información sobre fenómenos 1D fundamentales.

Como mostramos en la sección 1.6.3, una serie de modelos se han propuesto en orden de describir el proceso de coarsening. Todos estos modelos muestran una característica en común: El coarsening ocurre desde las etapas iniciales. Por otro lado, para MBE la ecuación de Kuramoto Sivashinsky (KS) (ecuación 1.5.3.1)

puede describir el proceso de coarsening tomando en cuenta las condiciones experimentales del crecimiento.

Esta ecuación, para $b > 0$, es resuelta en el espacio de Fourier usando condiciones a la frontera periódicas, el método se detalla en el apéndice C. La ecuación KS, es exitosamente usada para generar información valiosa la de evolución del tiempo del perfil transversal de las facetas y los parámetros b, a, g comúnmente son la unidad.

En este trabajo hemos variado dos de estos parámetros, el relacionado con las interacciones de largo alcance a y el asociado al coeficiente de difusión g . Si este último parámetro es relacionado con la ecuación de Arrhenius que tiene la forma $g_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)$ con g_0 una constante, E_a la energía de activación, k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura. De acuerdo con la forma funcional de esta última ecuación, al aumentar la temperatura, el coeficiente de difusión aumenta. De acuerdo a esto, en las figuras IV.7.1.3-5 mostramos la soluciones a la ecuación KS para diferentes valores del coeficiente de difusión y la interacción de largo alcance, con la finalidad de ver los efectos que producen estos parámetros en la componente a lo largo de la faceta.

Observamos que el aumento en el parámetro de largo alcance a se ve reflejado en el desorden de las facetas, imperfecciones debidas a alineación y la aparición de estructuras tipo 1x-2x (Figuras IV.7.1.3-5) Para $a = 0.8$ y $g = 0.75$ se presentan 3 estructuras 2x-1x y las facetas intermedias están alineadas siendo del tipo 2x (Figura IV.7.1.3), al aumentar $g = 0.8$ las 2 estructuras 2x-1x que anteriormente se veían acopladas en la parte superior izquierda, se desacoplan quedando sólo una y las facetas de la esquina superior derecha se empiezan a acoplar. Para $g = 0.85$ se presentan 2 estructuras 2x-1x y las facetas restantes se ven mas definidas. Para $g = 0.9$ el cambio es mas notorio, ya que las facetas intermedias del tipo 2x comienzan a juntarse y las estructuras 2x-1x empiezan a desaparecer. Para $g = 0.95$ se observa un acoplamiento entre facetas 2x muy similar a $g = 0.9$ pero en esta etapa es mas notorio. Para $g = 1$ el efecto es aun mas notorio. Finalmente para $g = 1.5$ se obtienen facetas uniformes formadas a partir de dos facetas mas pequeñas que se tenían al principio.

Para $a = 0.9$ (Figura IV.7.1.4), se tiene un comportamiento similar con el coeficiente de difusión, el aumento en el parámetro de largo alcance se ve reflejado en el parámetro de difusión para el cual se obtiene facetamiento uniforme, en este caso se obtiene a $g = 1.7$.

Aumentando el largo alcance a $a = 0.9$ (Figura IV.7.1.5), observamos la formación de facetas de la forma antes descrita con un parámetro de difusión para la formación de facetamiento uniforme de $g = 1.9$.

Por lo que podemos observar, el parámetro de largo alcance nos da la formación de estructuras tipo 2x-1x y el coeficiente de difusión al aumentar va cambiando la superficie hasta llegar a formar un arreglo de facetas uniformes. Este aumento en el coeficiente de difusión, experimentalmente puede ser relacionado con el aumento en la temperatura de crecimiento y presión de los haces moleculares. Por

ejemplo, para el caso de la temperatura, como se definió antes, se puede relacionar por medio de la ecuación de Arrhenius. De la figura IV.7.1.4 podemos observar la dependencia del coeficiente de difusión con la temperatura que en este caso esta dada como $1000/T$. Asociando los valores del coeficiente de difusión utilizados en las figuras IV.7.3.3-5, observamos que el facetamiento uniforme lo encontramos para entre 1.63 a 1.65, que corresponden a una temperatura de crecimiento en el rango de 613 - 606°C.

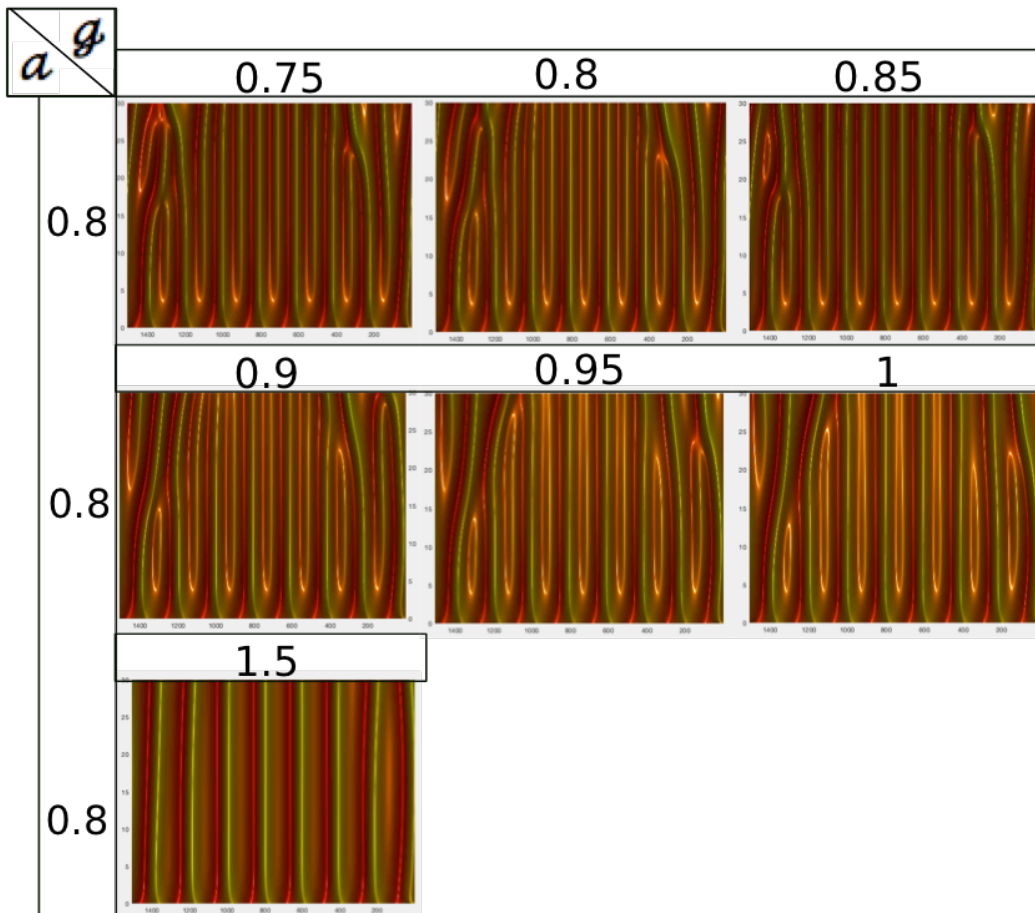


Figura IV.7.1.3.- Imágenes obtenidas mediante la solución de la ecuación I.6.3.1 KS para un perfil ondulatorio por medio de transformadas de Fourier y condiciones a la frontera, para diferentes valores del coeficiente de difusión $\phi = 0.75, 0.85 \dots 1$ y 1.5 y un parámetro de largo alcance de $a = 0.8$.

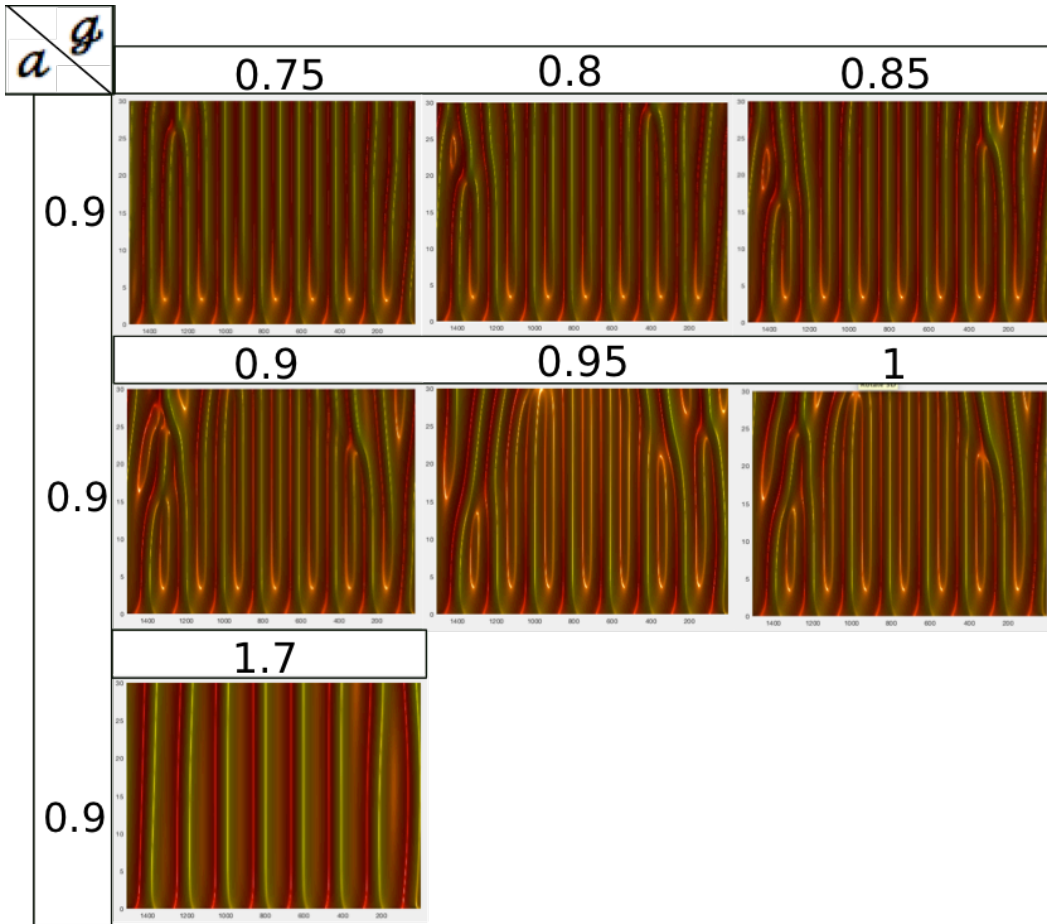


Figura IV.7.1.4.- Imágenes obtenidas mediante la solución de la ecuación I.6.3.1 KS para un perfil ondulatorio por medio de transformadas de Fourier y condiciones a la frontera, para diferentes valores del coeficiente de difusión $\varphi = 0.75, 0.85 \dots 1$ y 1.7 y un parámetro de largo alcance de $a = 0.9$.

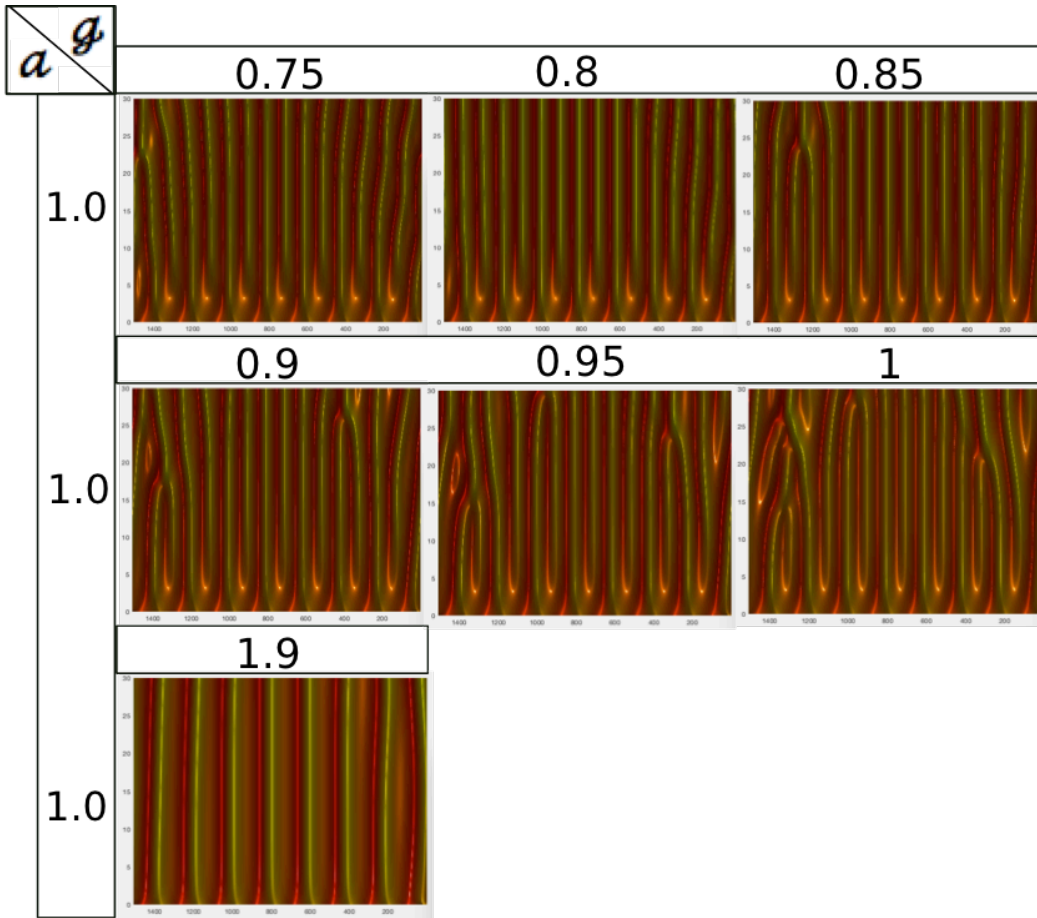


Figura IV.7.1.5.- Imágenes obtenidas mediante la solución de la ecuación I.6.3.1 KS para un perfil ondulatorio por medio de transformadas de Fourier y condiciones a la frontera, para diferentes valores del coeficiente de difusión $\phi = 0.75, 0.85 \dots 1$ y 1.9 y un parámetro de largo alcance de $a = 1.0$.

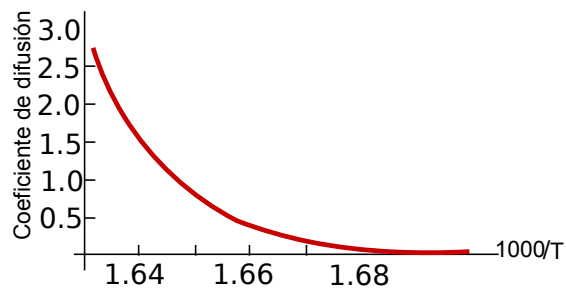


Figura IV.7.1.6.- Dependencia del coeficiente de difusión con la variación de la temperatura dada por la ecuación de Arrhenius para una energía de activación.

IV.7.3 Análisis ACF: Periodicidad de alto orden.

En la figura IV.7.3.1a mostramos una imagen AFM de $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ correspondiente a la muestra NF1, de 500 nm de espesor. Se observa que, similar a la muestra NF2, la superficie resultante esta compuesta de regiones corrugadas uniformes y no uniformes. Sin embargo, en contraste a NF2, en NF1 las regiones coarsening están compuestas de mas de dos canales. Estas regiones aparecen en la base más o menos regular, sugiriendo la existencia de primeras etapas de estructuras $1 \times 2 \times$ que son observadas cuando se lleva a cabo la estabilización.

Las regiones uniformes muestran la formación de canales altamente uniformes de periodo lateral entre 65 y 70nm y un alto entre 1.5-2nm. Para esta muestra, casi perfectos canales corren distancias de hasta $3 \mu\text{m}$, que es significativamente mas corta que la de la muestra de $1 \mu\text{m}$ de espesor (NF2).

Con la finalidad de analizar a fondo la morfología superficial, empleamos la función de autocorrelación (ACF) para analizar las imágenes AFM. Por medio del análisis ACF podemos obtener cualitativa y cuantitativamente información sobre los diferentes grados de uniformidad en la estructura superficial de la muestra. La figura IV.7.3.1 b muestra la imagen ACF de la imagen AFM de la figura IV.7.3.1a. Se puede observar incluso que algunas de las características de alargamiento corriendo a lo largo también están presentes en la imagen ACF, la coherencia casi se pierde en esta área grande. En contraste, tomando la ACF de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ en una región uniforme de la superficie, la ACF muestra un alto patrón coherente, presentado en la figura IV.7.3.1 c. El análisis ACF es también usado para estudiar los defectos relacionados con superficies coarsening.

Las imperfecciones coarsening en el arreglo de canales puede ser detectado por medio del ajuste del perfil ACF con una función ondulatoria amortiguada. Para un área uniforme de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, el perfil ACF puede ser ajustado a una función del tipo:

$$A \sin\left(\frac{\pi(x-x_c)}{\omega}\right) \exp\left(-\frac{x}{t_0}\right) \quad \text{IV.7.3.1}$$

La cual es mostrada en la figura IV.7.3.2a.

Para el caso del perfil ACF de una región uniforme (Fig. IV.7.3.2 c), se obtiene una constante de amortiguamiento $t_0 = 130 \text{nm}$ y un periodo lateral $D = 66 \text{nm}$. En contraste, para un área no uniforme de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$, la ACF ya no es tan coherente como se muestra en la figura IV.7.3.2 a. El perfil ACF de la figura IV.8.3.1b de la sección transversal es ajustado por dos funciones senoidales con periodos $D_1 = 60 \text{nm}$ y $D_2 = 130 \text{nm}$. Claramente las oscilaciones con D_1 son generadas por el ancho promedio de los canales simples, el segundo orden de oscilaciones con D_2 puede ser relacionado al coarsening de dos canales simples. Para este perfil se obtiene un baja constante de decaimiento de $t_0 = 36 \text{nm}$ reflejando la perdida de coherencia.

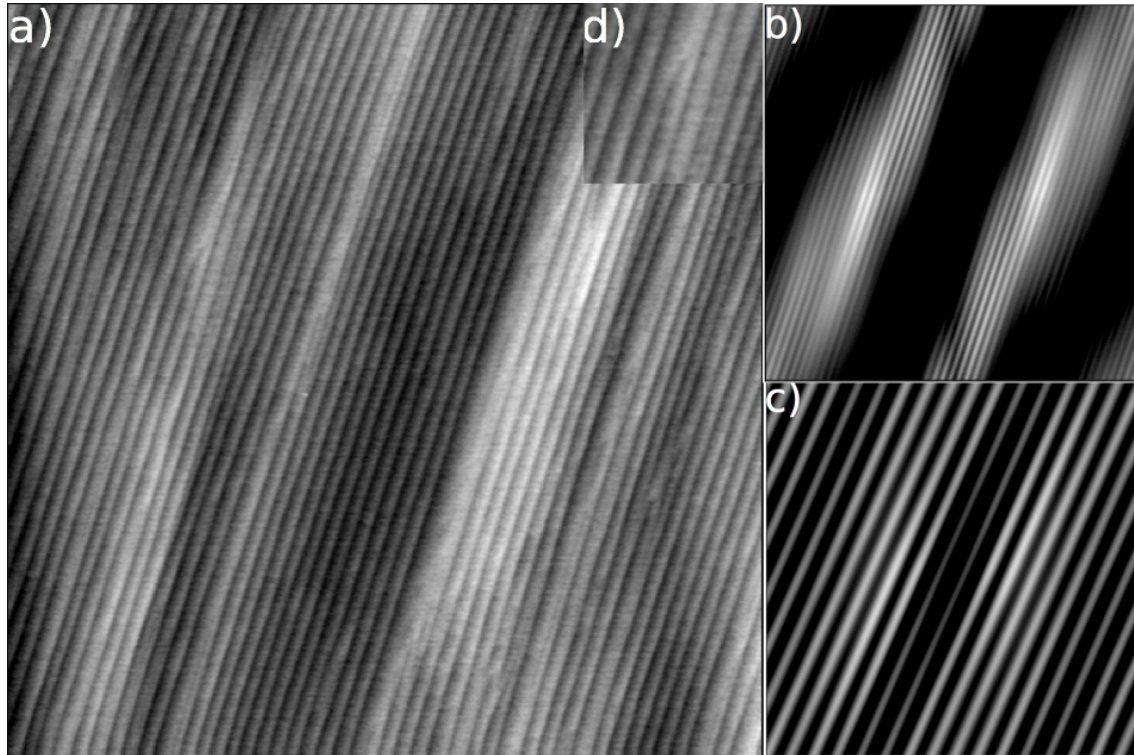


Figura.- IV.7.3.1 a) imagen AFM de área $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ para la muestra NF1, b) ACF de la imagen AFM a), c) ACF para la región uniforme de la imagen AFM a) y d) acercamiento en región de la imagen a) donde mostramos la interfase entre estructuras 1x-2x .

Para un área mas grande de AFM $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ (figura IV.7.3.1 a) la ACF muestra un patrón bastante diferente, (Figura IV.7.3.2 c), para esta área grande, el perfil de la sección transversal, puede ser ajustado también a dos funciones senoidales, con periodos $D_1 = 695 \text{nm}$ y $D_2 = 62 \text{nm}$, y una constante de amortiguamiento más baja $t_0 = 16 \text{nm}$, como en el caso anterior D_2 puede ser asignado al periodo de la faceta simple (la cual también toma en cuenta el periodo $2D_2$ de las estructuras 2x). Sin embargo, D_1 representa una tercera oscilación que puede ser asignado a las regiones alternadas de coarsening y regiones de canales uniformes. En figura IV.7.3.4 mostramos una imagen AFM de $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ de otra región de la muestra NF1 de la cual observamos mas claramente la tercera oscilación que da lugar a una corrugación de segundo orden de periodo lateral alrededor de 700nm.

En la figura IV.7.3.3a se presenta la imagen AFM de otra región de la muestra NF1, en donde la influencia del proceso de coarsening puede ser observado en sus primeras etapas. En este caso los canales que presentan coarsening están casi en una proporción de 2 simples canales por cada estructura coarsening 1x-2x.

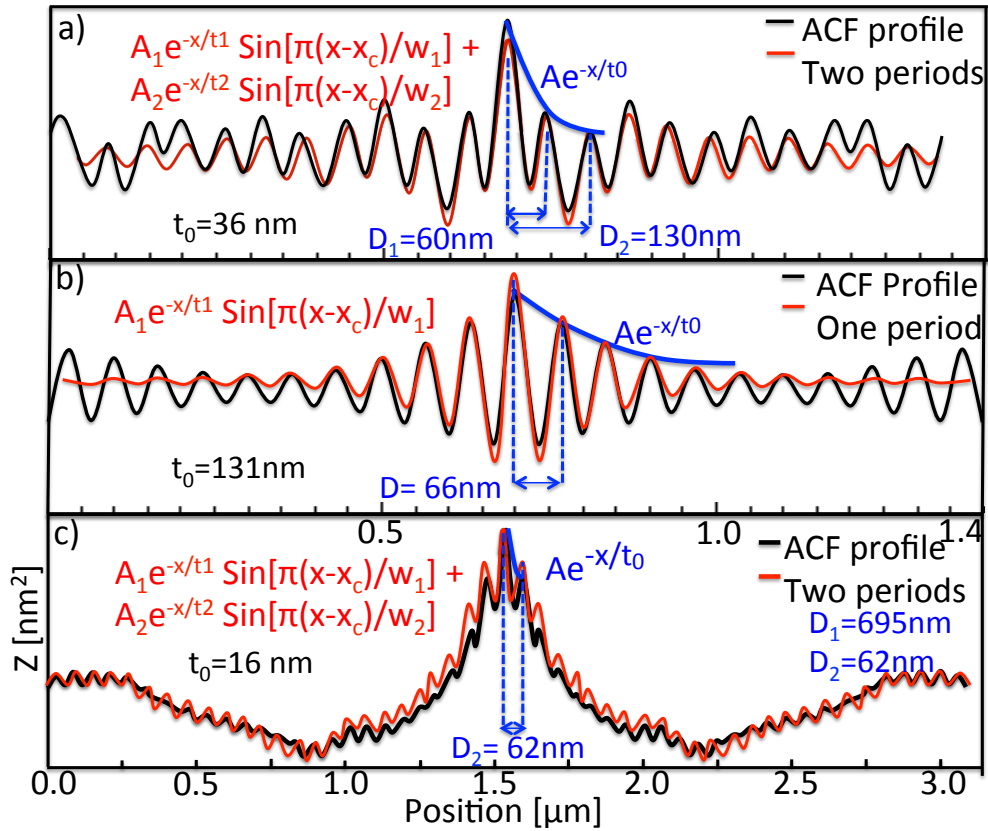


Figura IV.7.3.2.- Perfil ACF (línea negra) ajustado por medio de la ecuación IV.7.3.1 (línea roja) a) a dos periodos para la región no uniforme de la figura IV.8.3.1 a), b) un periodo de la región uniforme de la figura IV.7.3.1c y c) dos periodos para $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ figura IV.7.3.1b

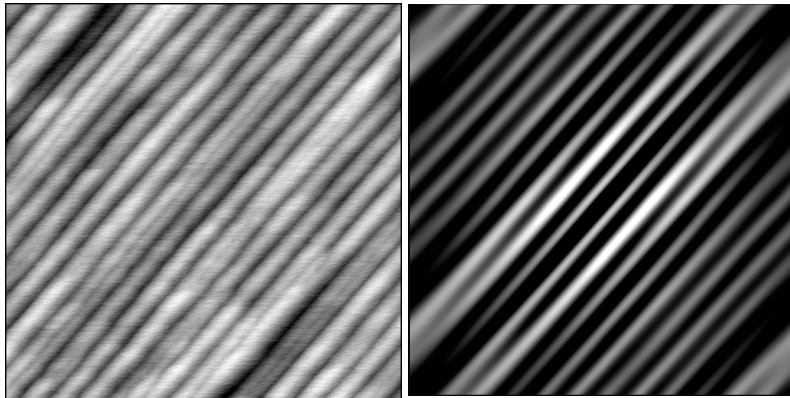


Figura IV.7.3.3.- a) Imagen AFM de $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ de área para la muestra NF1, b) ACF de la imagen a).

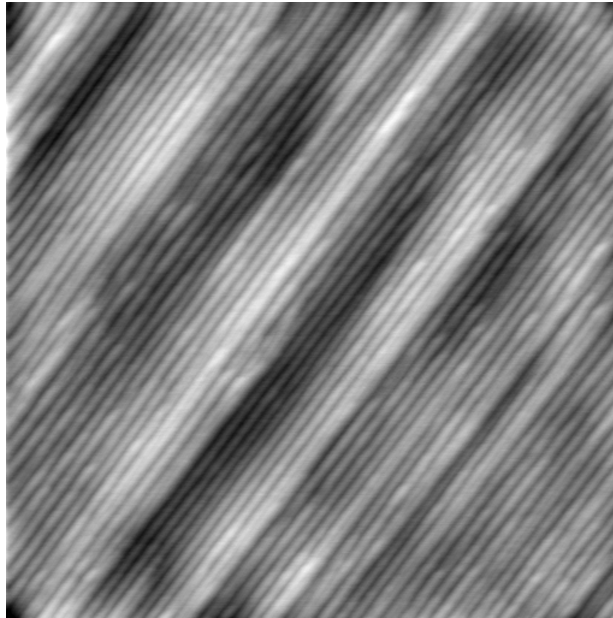


Figura.- IV.7.3.4 imagen AFM de área $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ para una región diferente de la muestra NF2 con regiones tipo coarsening entre regiones uniformes de facetas.

IV.7.4 Coarsening en las primeras etapas: difusión a lo largo de los canales.

En la figura IV.7.3.3a se revela un mecanismo extra coarsening, el cual trabaja a lo largo de la dirección del eje del hilo. Podemos deducir de la figura IV.7.3.3a que un mecanismo parecido al cierre (zipper) de una camisa, es bastante importante para el proceso que convierte dos canales (2x) a uno (1x) por medio de su unión en dirección transversal. Podemos decir que este mecanismo tipo-cierre es similar a step-bunching, pero en lugar de que los átomos se adhieran sobre un escalón de las terrazas, los átomos que se difunden a lo largo de los canales prefieren adherirse en los bordes de las estructuras 1x-2x de una manera tal que las estructuras 1x son formadas a partir de estructuras 2x.

Adicionalmente, para esta primera etapa, el mecanismo descrito por las ecuaciones I.6.2.1 y I.6.3.1 aún no ha alcanzado un estado estacionario, por lo que no hay una fuerte tendencia a formar canales individuales de un ancho único. Por lo que cuando se produce una estructura 1x-2x o 1x-3x, el canal tipo 2x o 3x tiende a formar un nuevo canal de ancho 2W o 3W, respectivamente, lo cual es contrario al caso de NF2, en donde cada canal tiende a tener un mismo ancho W.

V.- Resultados Teóricos: Muchos electrones dentro de hilos cuánticos.

En esta sección presentamos los resultados teóricos que se desprenden de utilizar un potencial tipo Yukawa para abordar el problema de muchos electrones, interactuando dentro de hilos cuántico de sección transversal cuadrada y circular. Se abordan dos casos, con paredes finitas (lo cual nos permite introducir parámetros de sistemas reales y observar fenómenos de tunelamiento) e infinitas. Finalmente, se abordan también el caso en que existe un campo eléctrico externo afectando a los electrones dentro del hilo. Como resultado relevante, mostraremos que nuestro modelo sencillo puede describir la formación de un cristal de Wigner, el cual es uno de los efectos más relevantes presentes en los HCs. En donde fue posible, utilizamos parámetros de materiales semiconductores y se compararon con resultados experimentales reportados en la literatura.

V.1.- Implementación del Potencial Yukawa a un sistema de 2 electrones en HCs cilíndricos y cuadrados con barreras infinitas.

Primero describiremos el caso de HCs de sección transversal circular y de sección transversal cuadrada, ambos de GaAs y con barreras infinitas. Para este caso, se debe resolver la Ec. II.V.5, esto se hizo numéricamente mediante el método de diferencias finitas, el cual es descrito en detalle en el Apéndice E.

V.1.1 El límite $\kappa \rightarrow \infty$: electrón libre o material en bulto

Para probar la validez de nuestro algoritmo, calculamos la función de onda de un par de electrones interactuando con el potencial Yukawa dado por la Ec. II.4.1, para el caso de material en bulto. Para el estado base, el primer y segundo estado excitado, resolvimos la Ec. II.4.5 en coordenadas esféricas y tomamos el caso límite $\kappa \rightarrow \infty$, con lo cual se recupera el caso de electrones libres (equivalente al caso de material en bulto). Los resultados obtenidos fueron comparados con los reportados en la referencia [88], donde calculan estas mismas funciones de onda utilizando un método numérico, el método WKB y el método de diferencias de Gauss-Jackson. En la figura V.1.1 se comparan los resultados de nuestro algoritmo con los datos reportados. Como puede observarse, nuestro algoritmo reproduce perfectamente las funciones de onda del par de electrones en el límite de material en bulto.

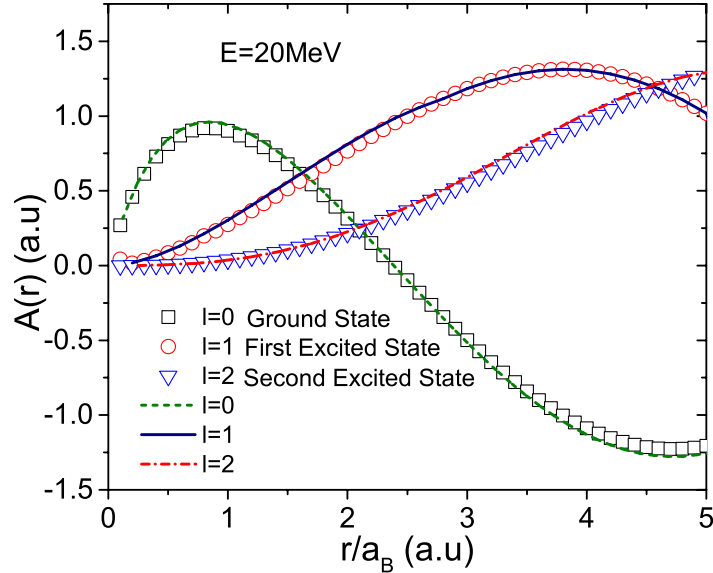


Figura V.1.1.- Función de onda del bulto en función de la distancia electrón-electrón para el estado base, primer y segundo estado excitado. Las líneas son obtenidas mediante la solución numérica de la Ec. II.4.5 por medio del método de diferencias finitas para el caso de partícula libre usando los parámetros reportados en [81] con $E=20\text{MeV}$. Los símbolos representan los datos numéricos reportados en [81].

V.1.2 El límite $\kappa \rightarrow 0$: Interacción tipo Coulomb

En la figura V.1.2 mostramos la energía total del sistema de dos electrones interactuando con el potencial Yukawa en función de la separación de los electrones (z_1-z_2). Para este caso, la longitud del hilo se varió entre 20 y 520nm. Estos datos son obtenidos al resolver numéricamente la ecuación II.4.5 y encontrar las eigen-energías del sistema.

Para generar esta figura utilizamos parámetros de apantallamiento κ asociados a densidades efectivas de portadores en el rango de 10^6 a 10^{22} cm^{-3} , los cuales abarcan el rango de los materiales semiconductores intrínseco hasta altamente dopados. De la figura V.1.2 observamos que la energía de interacción electrón-electrón (e-e) es menor cuando la densidad de portadores incrementa. Este comportamiento es consecuencia del efecto de apantallamiento entre electrones, el cual disminuye la fuerza de interacción entre pares de electrones. Este efecto es más notorio a distancias e-e grandes, mayores a 50nm. Por ejemplo, para una distancia e-e pequeña de 10nm, el cambio en la energía entre κ_1 y κ_3 es del orden de 56.5meV mientras que para una distancia e-e mayor a 200 nm este cambio en energía es prácticamente nulo. Esto es, para distancias e-e mayores a 200nm, y para densidades electrónicas de sistemas realistas, la interacción e-e es independiente del parámetro de apantallamiento.

En el recuadro de la figura V.1.2 mostramos la forma funcional del potencial Yukawa, para 4 diferentes parámetros de apantallamiento. Para $\kappa \rightarrow 0$, el segundo caso límite, nuestro algoritmo debe recuperar la interacción del tipo Coulomb. En

nuestro caso, este limite se obtiene para $\kappa_1 = 10^{-6} \text{ nm}^{-1}$, el cual es representado por la línea negra del recuadro de la figura V.1.2. Cuando el valor de κ aumenta, el apantallamiento electrónico tiene el efecto de reducir la energía total de interacción del sistema e-e. Podemos observar que a distancias e-e menores el efecto de apantallamiento es mas notorio y disminuye a distancias e-e grandes hasta el punto de volverse casi independiente de éste para distancias mayores a 200 nm. Así, observamos que nuestro algoritmo también describe adecuadamente el límite en el que dos electrones interactúan mediante un potencial electrostático de tipo Coulomb.

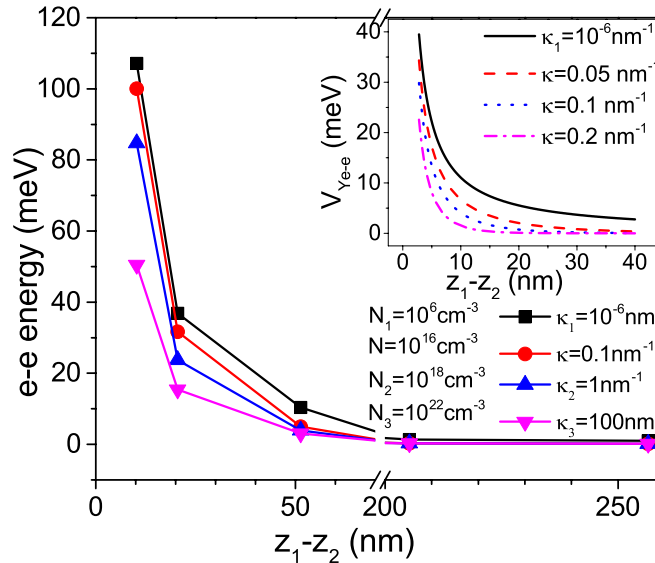


Figura V.1.2.- Energía del sistema electrón-electrón en función de la separación entre electrones. El recuadro muestra la dependencia del potencial Yukawa con la distancia electrón-electrón para 4 diferentes densidades electrónicas.

V.1.3 Densidades electrónicas para los primeros estados confinados: sección transversal

En la figura V.1.3 mostramos las gráficas de contornos de la sección trasversal (plano confinado), en dos dimensiones (2D), de la densidad de carga del hilo cilíndrico y cuadrado. Estas gráficas son generadas resolviendo la Ec. II.V.4, la cual tiene la solución analítica detallada en el Apéndice B. Nos enfocaremos en los dos primeros estados confinados. El estado base será representado por $C_{0,1}$ ($=2.4048$, el primer cero de la función Bessel) para el hilo cilíndrico y $n_x = n_y = 1$ para el hilo cuadrado (figuras V.1.3a y V.1.3c, respectivamente). Por otro lado, el primer estado excitado será representado por $C_{0,2} = 5.52$, (el segundo cero de la función Bessel) para el caso del hilo cilíndrico y $n_x = 2, n_y = 1$ para el hilo cuadrado (figuras V.1.3b y V.1.3d, respectivamente). En los cálculos, consideramos para la sección transversal $x=y=2p=8\text{nm}$, un largo de hilo de 10nm y una densidad de carga $|A(z)|^2$ normalizada a la unidad.

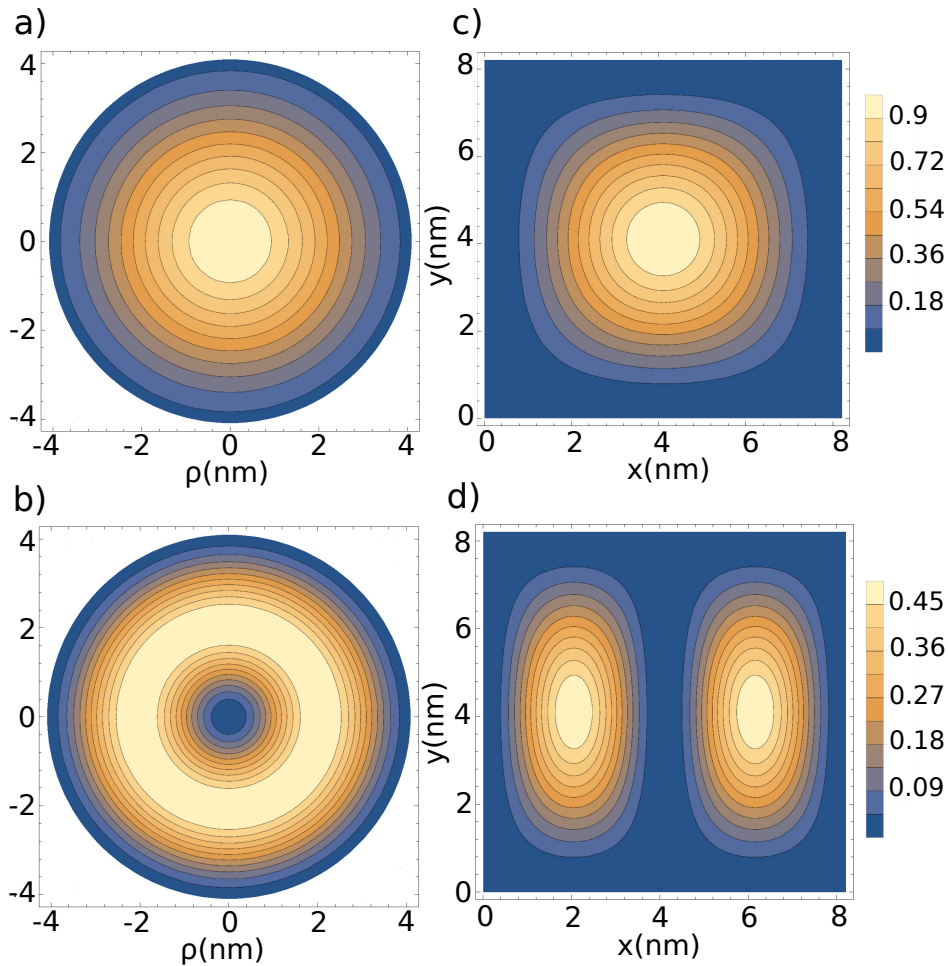


Figura V.1.3.- Gráfica de contornos en 2D para la probabilidad de densidad del estado base (a, c) y primer estado excitado (c, d) en la sección transversal del hilo cuadrado (c, d) y cilíndrico (a, b).

Como podemos observar, la Ec. II.4.4 es independiente del parámetro de apantallamiento, por lo tanto, estas distribuciones de carga son independientes de κ . Esta independencia con el parámetro de apantallamiento es de esperarse, debido a que en el sistema propuesto el par de electrones están localizados a lo largo del eje del hilo (eje z).

En la figura V.1.3 observamos que el estado base presenta una distribución de carga simétrica radial concentrada en el centro del hilo. Para el caso del hilo cilíndrico (figura V.1.3a) más del 90% del total de la carga está concentrada en la región circular central del hilo de radio $\rho < 1\text{nm}$. Para el primer estado excitado (figura V.1.3 b) la densidad de carga presenta una distribución toroidal, en la cual la mayoría de los portadores de carga están concentrados en un toroide con sección transversal de ancho $\sim 1\text{nm}$. La distribución de carga para el estado base en el hilo cuadrado es similar a la del hilo cilíndrico, la densidad de carga es más

compacta en el centro y los contornos tienden a tomar la forma de la barrera cuadrada entre más cercanos estén al borde. El primer estado excitado presenta un forma muy diferente a la del hilo cilíndrico, en este caso la carga es distribuida simétricamente con respecto el centro en dos elipsoides.

Los resultados anteriores pueden ser comparados directamente con resultados reportados en otros lados [16], con los cuales concuerda, pues no difiere del tratamiento típico que se le da a sistemas confinados en 2D. El nuevo planteamiento que proponemos para el problema de muchos electrones en un HC arrojará resultados novedosos cuando analicemos el comportamiento de los portadores a lo largo del hilo, visto a lo largo de la sección longitudinal.

V.1.4 Densidades electrónicas para los primeros estados confinados: sección longitudinal

Utilizando el mismo procedimiento, pero ahora a lo largo del eje del hilo, calculamos las proyecciones en 2D por medio de la solución analítica de la ecuación II.4.4 y la solución numérica de la ecuación II.4.5. Para esta parte trabajamos los dos primeros estados de la sección transversal confinada del hilo, definidos anteriormente y el estado base en el eje z. En la figura V.1.4 mostramos el estado base ($n_x = n_y = 1$) (figura V.1.4(a-c)) y el primer estado excitado ($n_x = 2, n_y = 1$) del hilo cuadrado. En este caso si tenemos dependencia con el parámetro de apantallamiento, por lo cual se tomaron valores relevantes en la parte experimental de 10^6 cm^{-3} (material intrínseco), 10^{18} cm^{-3} (material dopado) y 10^{22} cm^{-3} (material altamente dopado). La proyecciones del estado base para el hilo cilíndrico son similares a las del hilo cuadrado, es por eso que sólo mostramos las del hilo cuadrado. Para este caso utilizamos un hilo de longitud de 10nm, por lo que vamos a tener un confinamiento de un hilo corto, similar a un punto cuántico alargado. Las proyecciones 3D, en las cuales se pueden observar más detalles en la distribución electrónica, se encuentran debajo de cada proyección 2D que le corresponde.

Por otro lado, para el caso del primer estado excitado $C_{0,2} = 5.52$, (el segundo cero de la función Bessel) para el caso del hilo cilíndrico y $n_x = 2, n_y = 1$ para el hilo cuadrado, encontramos diferencias en las distribuciones de carga para las dos diferentes geometrías de hilo, teniendo elipsoides simétricas con respecto al centro para el hilo cuadrado y toroides para el hilo cilíndrico.

Observamos que para una densidad de electrones más baja (10^6 cm^{-3}) las distribuciones en el centro se traslapan, para ambos estados, aunque a pesar de este traslape las distribuciones se ven bien definidas. Al aumentar la densidad de portadores (10^{22} cm^{-3}) el traslape entre distribuciones es mayor, tal que no se logra distinguir una con respecto de la otra. Esto es, al aumentar la densidad de carga ésta se redistribuye y el cambio en las distribuciones es más notorio en el centro del hilo.

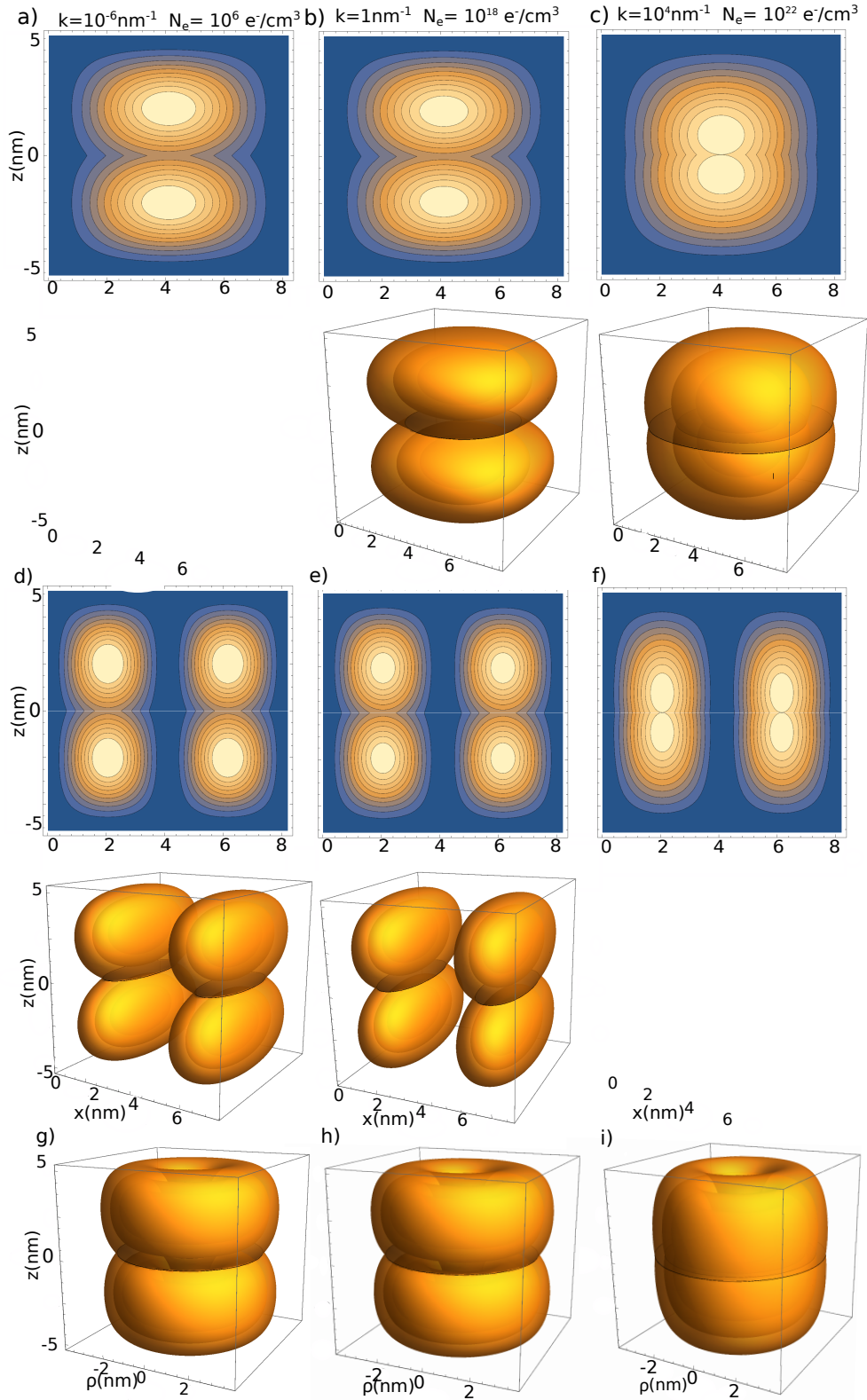


Figura v.1.4.- Proyecciones 2D y 3D del estado base para el hilo cuadrado en el plano x-z (a-c) y primer estado excitado para el hilo cuadrado (d-f) y cilíndrico (g-i) de longitud

$L=10\text{nm}$, dependientes del parámetro de apantallamiento, para (a, d, g) $N=10^6\text{ cm}^{-3}$, (b, e, h) 10^{18} cm^{-3} y (c, f, i) 10^{22} cm^{-3} .

V.1.5 Potencial Yukawa y formación de cristal de Wigner en una dimensión

El anterior efecto de redistribución de carga es parecido al proceso característico de la formación del cristal de Wigner descrito en la sección II.2. Con el objeto de investigar más a fondo si nuestro modelo es capaz de predecir la formación de este cristal se analizaron diferentes escenarios. En la figura V.1.5 mostramos los perfiles de la densidad electrónica $|A(z)|^2$ tomados a lo largo del eje z para sistemas en los cuales la distancia e-e se varió en el régimen de interacción de potencial de corto (Fig. V.1.5(a), $r=5\text{ nm}$), intermedio (Fig. V.1.5(b), $r=15\text{ nm}$) y largo alcance (Fig. V.1.5(c-f), $r=200, 500, 1000$ y 5000 nm). Adicionalmente la densidad electrónica fue variada en el rango de 10^6 a 10^{22} cm^{-3} , el cual está dentro de los valores de concentraciones electrónicas experimentales. Una concentración de 10^{24} cm^{-3} - experimentalmente demasiado alta- fue considerada con la finalidad de explorar efectos extremos en un sistema 1D.

Para facilitar la comparación con datos teóricos y experimentales reportados en la literatura, realizamos un cálculo estimado de la densidad de carga adicionada para cada parámetro de apantallamiento en función de la longitud del hilo. Para κ_1 la carga agregada es prácticamente nula para todas las longitudes del hilo mostradas en la figura V.1.5. Esto es, para κ_1 los dos electrones interactúan mediante un potencial repulsivo Coulómbico. Para este caso, observamos que la distribución electrónica es tal que los dos electrones tienden a estar lo más separadamente posible. Este comportamiento se observa mejor en la figura V.1.6, en el cual graficamos la posición del centro de cada pico de la densidad electrónica en función de la longitud del hilo. Podemos observar que si existen sólo 2 electrones interactuando sin carga adicional, el espaciado interpartícula incrementa progresivamente, este efecto no cambia al tener un cambio en la longitud del hilo, pasando de confinamiento tipo punto cuántico ($L/2 < 15\text{ nm}$) al régimen de hilo cuántico ($L/2 > 15\text{ nm}$).

Para κ_2 ya se tiene carga adicional considerable. El número de electrones es dependiente de la longitud del hilo, lo cual se indica para todos los parámetros de apantallamiento en la figura V.1.6. Para el régimen de fuerte confinamiento (10 nm de longitud de hilo) la carga extra produce un efecto de apantallamiento que provoca que la densidad electrónica se distribuya al centro del hilo. Cuando la longitud del hilo es de 30nm la distribución electrónica empieza a generar dos distribuciones de carga bien definidas, que se empiezan a alejar del centro del hilo; al aumentar la longitud y pasar al régimen de hilo (mayor a 200 nm), esta distribución electrónica presenta dos máximos bien diferenciados entre si, espaciados simétricamente a lo largo del hilo. Esta distribución se mantiene para distancias de 400nm o mayores, estableciendo dos distribuciones perfectamente independientes que guardan siempre una distribución simétrica a lo largo del hilo, lo cual es una característica que define la formación de un cristal de Wigner [89-

92]. Además, el rango de densidad electrónica en el cual se establece la molécula de Wigner, para κ_2 , es consistente con resultados previos teóricos y experimentales [82-84].

Para κ_3 la carga electrónica adicionada es de 10^3 cm^{-3} para una longitud de 10 nm a 10^6 para $10 \mu\text{m}$. Para una longitud de 10 nm la interacción e-e es completamente apantallada, por lo que los dos electrones se encuentran en el centro del punto cuántico. Cuando se incrementa la longitud la distribución de carga tiende a alejarse del centro y separarse, parecido al caso de κ_2 , encontrando la formación de la molécula de Wigner en una longitud de $10 \mu\text{m}$. Finalmente para la concentración más alta, dada por κ_4 la interacción e-e es completamente apantallada y la molécula de Wigner es destruida, dando lugar a una distribución de carga centrada en el origen y siendo independiente de la longitud del hilo.

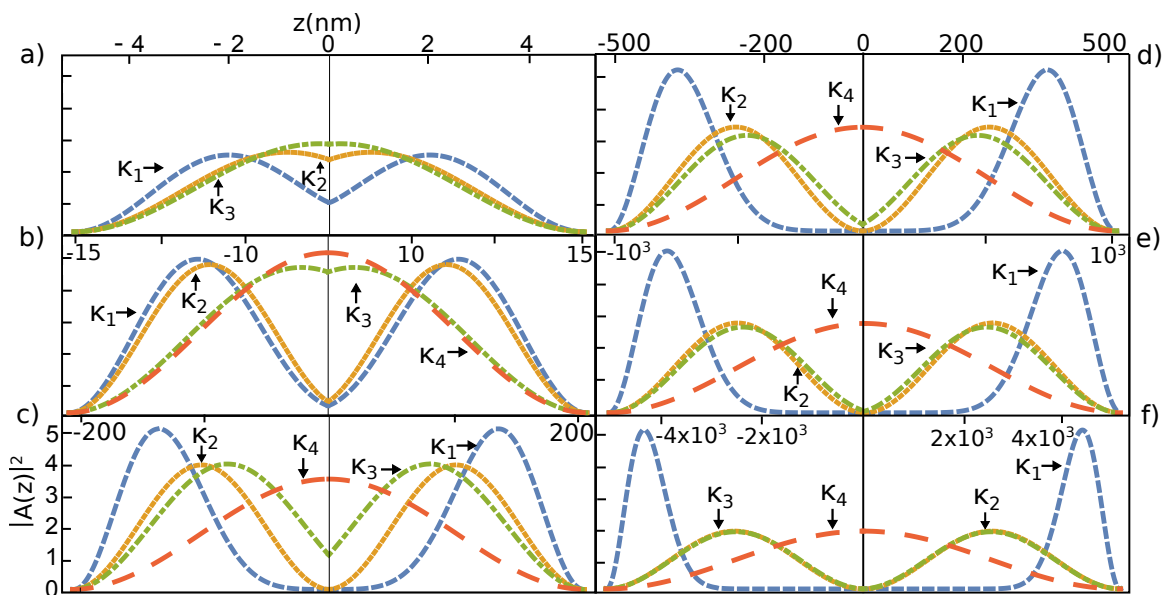


Figura V.1.5.- Densidad de carga $|A(z)|^2$, para $\kappa_1 = 10^{-6} \text{ nm}^{-1}$, $\kappa_2 = 1 \text{ nm}^{-1}$, $\kappa_3 = 100 \text{ nm}^{-1}$ y $\kappa_4 = 5000 \text{ nm}^{-1}$, para longitudes de hilo de a) 10 nm (punto cuántico), b) 30 nm (límite hilo-punto), c) 400 nm (hilo), d) 1000 nm , e) 2000 nm y f) 10000 nm .

De la figura V.1.6 observamos que la densidad electrónica óptima para que el sistema en el régimen de hilo cuántico cristalice, dando lugar a la formación de la molécula de Wigner, es dada por κ_2 . Para valores mayores a este, la cristalización se presenta para longitudes más grandes, por otro lado, existe un límite, tal que si la densidad de electrones es mayor, como en el caso de κ_4 no se logra la cristalización a pesar de que la longitud sea muy grande, que es consistente con lo reportado. Cuando la densidad es menor, κ_1 , sólo se obtiene una interacción repulsiva entre el par de electrones en un sistema sin cristalizar, independiente de la longitud del hilo.

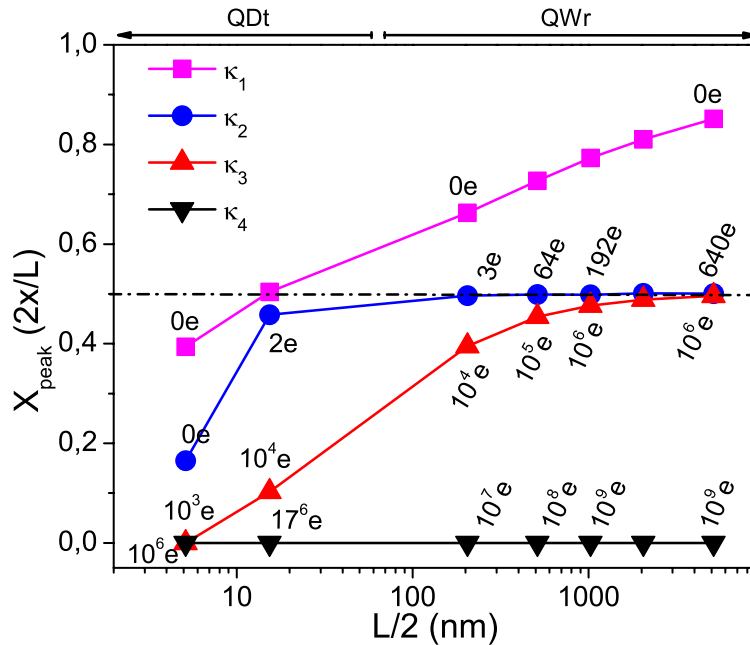


Figura V.1.6.- Dependencia de la posición del valor máximo del perfil de densidad con las longitudes del hilo mostradas en la figura 17 para $\kappa_1 = 10^{-6} \text{ nm}^{-1}$, $\kappa_2 = 1 \text{ nm}^{-1}$, $\kappa_3 = 100 \text{ nm}^{-1}$ y $\kappa_4 = 5000 \text{ nm}^{-1}$. La carga adicionada por medio de κ , en unidades de la carga del electrón, es presentada en algunas longitudes representativas.

En conclusión, nuestro modelo aún cuando es muy sencillo, es capaz de reproducir la formación de la molécula de Wigner de la misma forma que lo hacen otros modelos mucho más sofisticados. Además, lo sencillo del modelo permite analizar el sistema 1D de muchos cuerpos bajo diferentes escenarios de una forma más fácil en cuanto a la manipulación en la distancia e-e, la densidad electrónica y el rango de interacción en el potencial.

V.2 Implementación del Potencial Yukawa en un sistema de 2 electrones dentro de un Hilo cuántico cilíndrico y cuadrado con barreras finitas.

Para este sistema resolvimos la Ec. II.4.5 para los planos x-z (hilo cuadrado) y ρ -z (hilo circular) de forma numérica. A su vez, para la sección transversal resolvimos las ecuaciones b.23, b.25 y b.36 trascendentales asociadas, mediante el procedimiento descrito en el apéndice B. El modelo considera un hilo de GaAs, de sección transversal cuadrada y circular, embebido en una matriz de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, para una concentración de Aluminio $x=0.23$. La longitud de la sección transversal fue variada dependiendo del estado, para el estado base $x=y=2\rho=4 \text{ nm}$ y para el primer estado excitado $x=y=2\rho=10 \text{ nm}$. Estos últimos valores fueron elegidos debido a que para secciones de menor tamaño no existe primer estado excitado, sólo estado base.

V.2.1 Barreras finitas: sección transversal.

En la figura V.2.1 mostramos las gráficas de contorno de la distribución de carga en la sección transversal para el estado base con $x = y = 2\rho = 4$ (Fig. V.2.1(a, b)) y del primer estado excitado (Fig. V.2.1 (e, f)) para $x = y = 2\rho = 10$ nm, en el hilo cilíndrico (Fig. V.2.1 (a, e)) y cuadrado (Fig. (b, f)). Similar al caso de barreras infinitas, estas son independientes del parámetro de apantallamiento, para el estado base la mayor parte de la carga se encuentra en el centro del hilo, la diferencia se da en el borde, para ambas geometrías de hilo, la carga total ya no esta distribuida dentro del hilo, también tenemos carga fuera, lo cual es debido al tunelamiento electrónico. Por otro lado, la densidad de carga en los bordes toma la forma de la sección del hilo: para el caso cuadrado observamos contornos que inician circulares y se van haciendo cuadrados en la frontera del hilo. Por otro lado, para el cilíndrico los contornos inician y terminan circulares. Para el primer estado excitado tenemos la misma similitud en la distribución de carga mostrados en los resultados de barreras infinitas más los efectos de tunelamiento encontrados en el estado base.

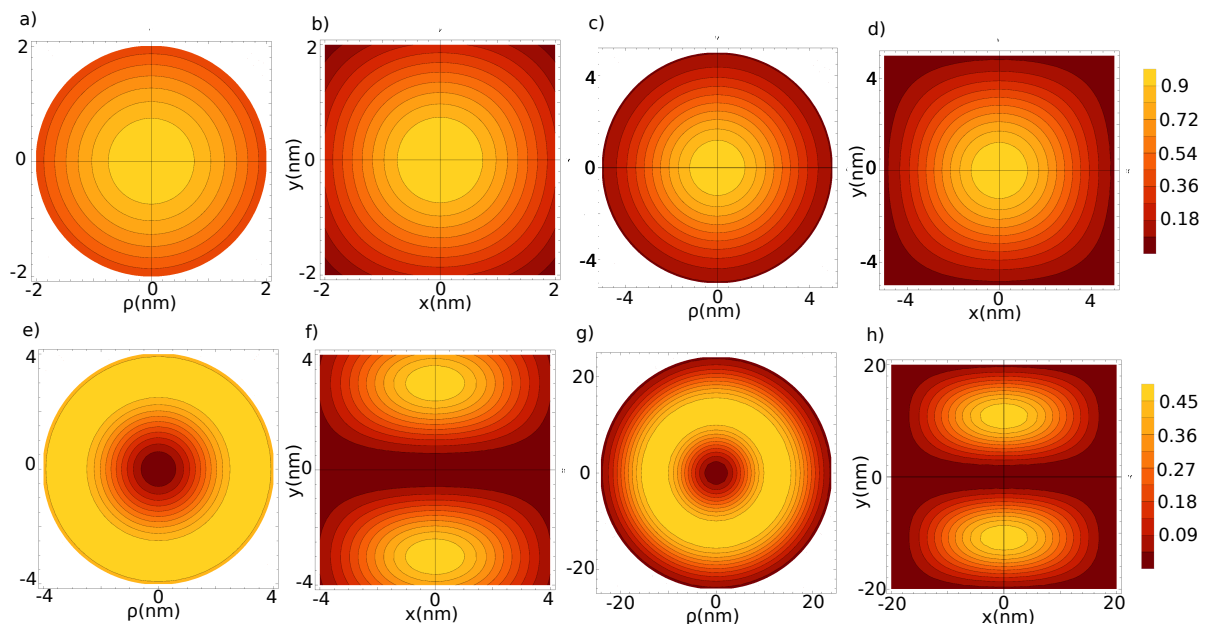


Figura V.2.1.- Gráficas de contorno para la densidad de carga en la sección transversal para el estado base (a-d) y el primer estado excitado (e-h). Para $x = y = 2\rho = 4$ nm (a, b), $x = y = 2\rho = 8$ nm (e, f), se presentan efectos de tunelamiento en el estado base y el primer estado excitado, respectivamente. Para $x = y = 2\rho = 10$ nm (c, d), $x = y = 2\rho = 24, 20$ nm (hilo cilíndrico y cuadrado, respectivamente) (g, h), se recupera el caso de barreras infinitas (estado base y primer estado excitado, respectivamente).

Con la finalidad de corroborar consistencia en este modelo, cambiamos el tamaño de la sección transversal hasta perder el efecto de tunelamiento, lo cual nos debería arrojar resultados similares al caso anterior de barreras infinitas. En la

figura V.2.1 presentamos las gráficas de contorno de la sección transversal para el estado base (Fig. V.2.1 (c, d)) y primer estado excitado (Fig. V.2.1 (g, h)), del hilo cilíndrico (Fig. V.2.1 (c, g)) y del hilo cuadrado (Fig. V.2.1 (d, h)). Observamos que para el estado base, en ambos hilos el efecto de barreras infinitas se presenta para secciones transversales $x, y, 2\rho \geq 10$ nm. Para el primer estado excitado, este efecto se encuentra para $x=y=20$ nm, en el caso del hilo cuadrado y $2\rho=24$ nm para el hilo cilíndrico. Para el primer estado excitado el tamaño de la sección transversal depende de la geometría del hilo, debido a los efectos de borde y a que la distribución de carga no es mayor en el centro, como en el caso del estado base.

V.2.2 Sección transversal: tunelamiento electrónico.

En la figura V.2.2 presentamos la gráfica obtenida para los coeficientes de transmisión y reflexión electrónicos (Ec. b.26 y b.27) para un hilo cuadrado con las mismas secciones transversales utilizadas en las figuras V.2.1 (d, b, h). Observamos que para valores mayores a V_{p-e} (donde V_{p-e} es el potencial asociado a la barrera, definido en la ecuación b.3 del apéndice B) hay una transmisión casi total de electrones que se aproximan al 100% con el incremento de la energía y lo contrario para la reflexión. Para valores menores a V_{p-e} la transmisión de los electrones desciende y la reflexión aumenta, lo que es señal de que los electrones son atrapados dentro del pozo. De la Ec. b.26, si el término senoidal es cero, el potencial se vuelve invisible para los electrones incidentes, por lo que para que esto ocurra se debe cumplir la condición de que:

$$\frac{L}{\hbar} \sqrt{2m^*(V_{p-e} + E)} = n\pi$$

Donde E_n son las energías en las cuales hay una transmisión total de electrones, que en la figura V.2.2 a) son los puntos de las curvas que tocan la línea horizontal $T=1$ y el caso contrario para la reflexión $R=0$. Si despejamos esta energía, observamos que obtenemos la fórmula de las eigenenergías para un pozo de potencial infinito, reportadas en el apéndice del sistema anterior para el plano confinado.

Al aumentar el tamaño de la sección transversal aparecen más oscilaciones en las regiones menores a V_{p-e} en el coeficiente de transmisión y reflexión. Ya que estos puntos máximos están asociados a eigenenergías en un pozo de barreras infinitas, vemos que para $L=4$ nm sólo tenemos el estado base, que es consistente con lo calculado para barreras finitas. Para $L=10$ nm aparecen dos máximos, el primero en la región de energía menor a V_{p-e} y el segundo en la región mayor a V_{p-e} , por lo que en el estado base la transmisión es menor que en el primer estado excitado, lo cual es consistente con los contornos obtenidos para la

sección transversal mostrados en la figura V.2.1 d) y además la energía del estado base calculada para barreras finitas $E_{1f} = 0.083$ eV es muy parecida a la de barreras infinitas $E_{1i} = 0.088$ eV. Para $L=20$ nm encontramos 7 oscilaciones, los dos primeros máximos, asociados al estado base y primer estado excitado se encuentran en la región $0-V_0$, presentando una transmisión menor a 1, coincidiendo nuevamente con la figura V.2.1 h) y teniendo una energía para el sistema de barreras finitas $E_{1f} = 0.053$ eV, $E_{2f} = 0.013$ eV y para barreras infinitas $E_{1i} = 0.056$, $E_{1i} = 0.014$.

Para el coeficiente de reflexión tenemos un comportamiento similar en cuanto a la presencia de oscilaciones y un caso contrario, cuando la transmisión es menor, la reflexión mayor y viceversa. Para transmisión total no hay reflexión, ahora los mínimos en las oscilaciones se asocian a eigenenergías en el pozo de potencial con barreras infinitas.

En conclusión, en esta sección estudiamos el efecto de tunelamiento presente en el plano $x - y$ para un hilo de sección transversal cuadrada de GaAs embebido en una matriz de $Al_cGa_{1-c}As$. Para tamaños de sección transversal $L=4$ nm sólo tenemos el estado base por lo que la mayoría de los electrones traspasan la barrera. Al aumentar L , aparecen mas estados y como consecuencia se encuentran más electrones confinados, disminuyendo la probabilidad de tunelamiento. En este plano no observamos efectos con el parámetro de apantallamiento, ya que, recordando la forma funcional de este sistema, es independiente del potencial Yukawa.

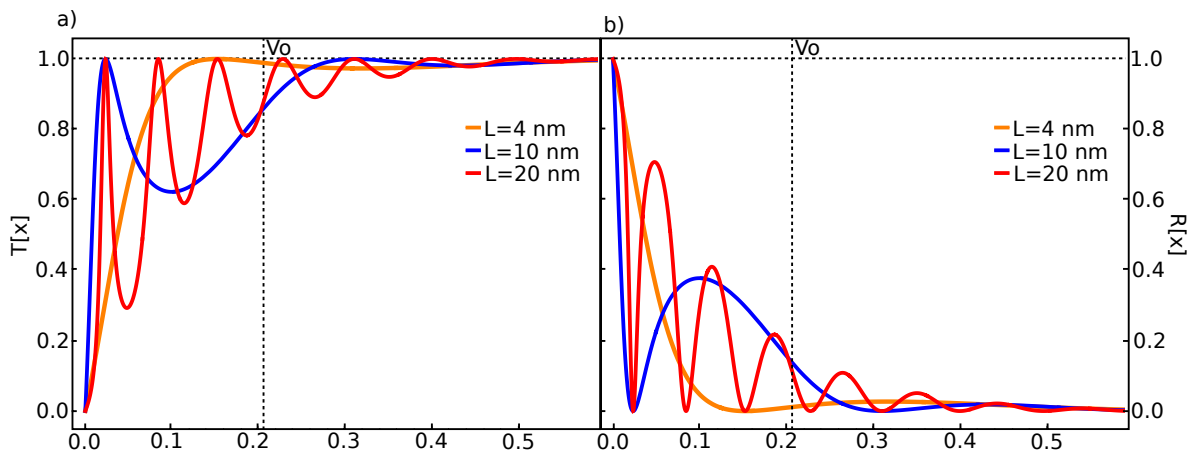


Figura V.2.2.- Coeficiente de a) transmisión y b) reflexión para el hilo cuadrado de sección transversal $x=y=4, 10$ y 20 nm.

V.2.3 Barreras finitas: sección longitudinal.

En la figura V.2.3 presentamos las proyecciones 2D y 3D del plano x-z, a lo largo del hilo, para el estado base y primer estado excitado para el hilo cuadrado (Fig. V.2.3 a-d), e-h)) y para el hilo cilíndrico (Fig. V.2.3 i-l)) para diferentes valores del parámetro de apantallamiento. Estas fueron calculadas por medio de la solución numérica de la ecuación II.4.5 y la solución de las ecuaciones trascendentales en la sección transversal (Ec. b.23, b.24 y b.36), considerando hilos cortos de longitud $z=10\text{nm}$. Para la sección transversal utilizando los mismos valores considerados para generar la figura V.2.1, al caso asociado al caso a tunelamiento (Fig. V.2.3 a-c, e-g, i-k)) y el caso limite donde se reproducen contornos similares al sistema con barreras infinitas (Fig. V.2.3 d, h, l). Los valores utilizados para el parámetro de apantallamiento se adecuaron para encajar con los niveles de impurezas en materiales semiconductor intrínsecos (N_1), dopados (N_2) y altamente dopados (N_3).

De las Figuras V.2.3 a-c podemos observar que para el estado base, debido al tunelamiento de electrones, el hilo cuadrado presenta distribuciones de forma elipsoidal incompletas. El efecto de apantallamiento es notorio en el centro del hilo, al aumentar la densidad electrónica las elipsoides se van traslapando. El efecto de tunelamiento desaparece al aumentar el tamaño de la sección transversal a $L=10\text{nm}$ como se muestra en la figura V.2.3 d). Para el hilo cilíndrico se obtienen proyecciones similares a las del hilo cuadrado en el estado base, por tal motivo no se muestran en la figura V.2.3. La única diferencia se observa cerca del borde del hilo, donde las distribuciones toman la forma de la barrera y el efecto de tunelamiento se pierde en este caso para $\rho \geq 5\text{nm}$.

En el primer estado excitado, para el hilo cuadrado tenemos 2 distribuciones elipsoidales incompletas, asociado al tunelamiento, que muestran un efecto similar en el centro del hilo al del estado base con el aumento en la densidad de portadores. Aumentando el tamaño de la sección transversal, obtenemos distribuciones elipsoidales completas, para un tamaño $L \geq 20\text{nm}$.

En el caso del hilo cilíndrico, el primer estado excitado presenta distribuciones toroidales con efectos de tunelamiento. Este efecto desaparece para radios $\rho \geq 25\text{nm}$. El efecto de apantallamiento es notorio en el centro del hilo, al aumentar la densidad electrónica, los toroides se traslapan.

Para el primer estado excitado, el efecto de tunelamiento desaparece para diferentes valores de L y ρ debido a los efectos de borde, como es de esperarse, para el hilo cilíndrico este debe ser de sección mayor que el cilíndrico. Por lo que los efectos geométricos son notorios en el primer estado excitado. En el estado base la geometría casi no afecta las proyecciones.

Similar al caso del hilo con barreras infinitas, el efecto de traslape de las distribuciones de carga en el centro del hilo se atribuye a la formación de la molécula de Wigner. Para este sistema las figuras V.1.5 y V.1.6 permanecen invariables, por lo que el valor óptimo de densidad de carga para un hilo esta dado por K_2 .

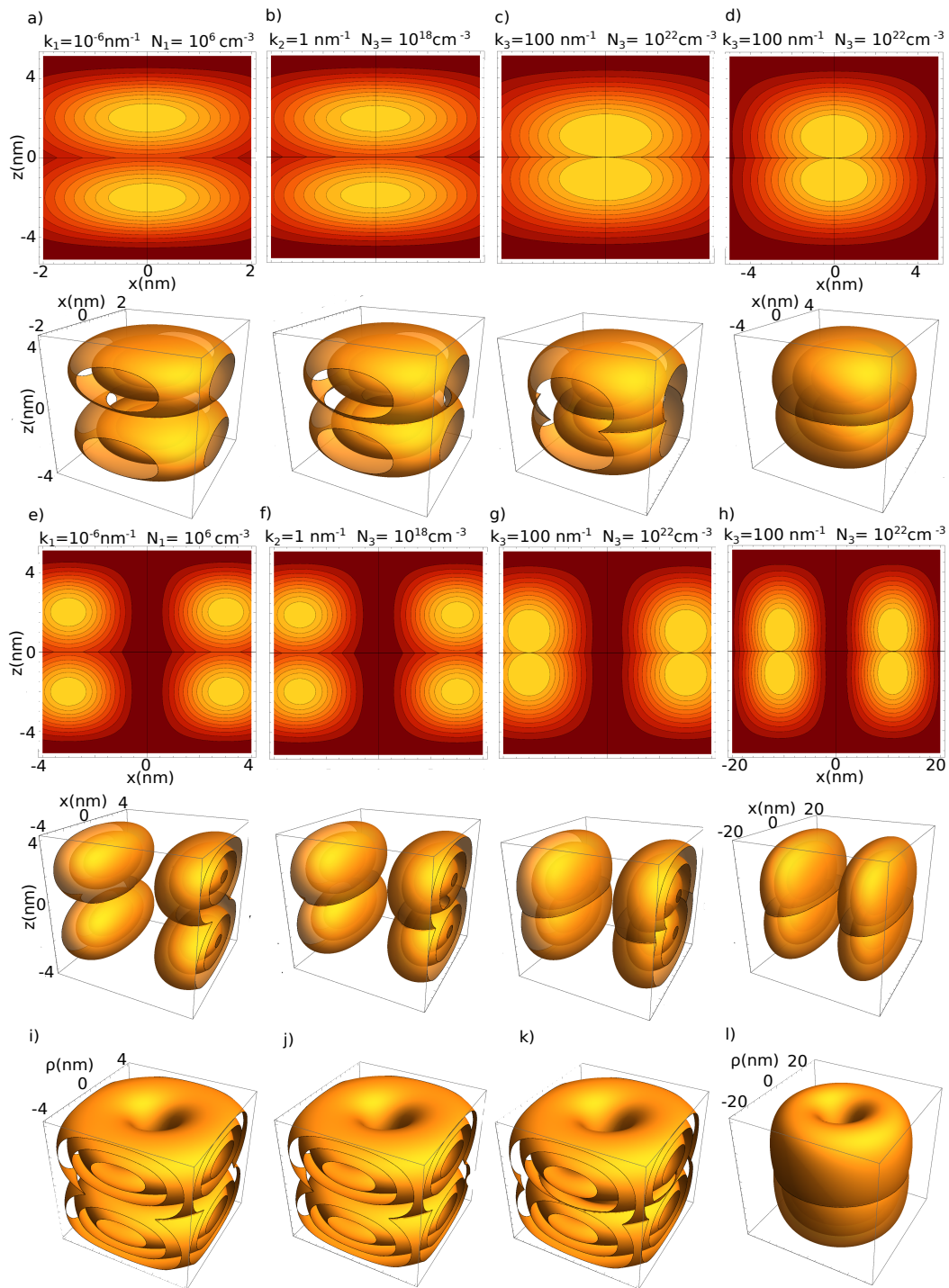


Figura V.2.3.- Proyecciones 2D y 3D del estado base para el hilo cuadrado en el plano x - z -2D y x - y - z -3D (a-d) y primer estado excitado para el hilo cuadrado (e-h) y cilíndrico (i-l) de sección transversal $x=y= 2\rho=4, 8\text{nm}$ (Estado base y primer estado excitado, respectivamente), $x=y=2\rho=10/20,24\text{nm}$ (Estado base/ primer estado excitado hilo cuadrado y cilíndrico, respectivamente), caso límite- barreras infinitas, dependientes del

parámetro de apantallamiento, para (a, e, i) $N_1=10^6$, (b, f, j) $N_2=10^{18}$ y (c, d, g, h, k, l) $N_3=10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Concluimos de esta sección que el efecto de la formación de la molécula de Wigner se mantiene y es independiente de las barreras finitas y del tamaño de la sección transversal, por lo que el valor óptimo para la formación del cristal de Wigner esta dado por κ_2 para el caso de ambas geometrías y en un comportamiento similar al reportado en la sección V.1.5.

V.3 Barreras finitas: efecto de un campo eléctrico externo.

Habiendo integrado parámetros experimentales a nuestro modelo, propusimos añadir el efecto de un campo externo, con la finalidad de estudiar efectos de transporte en estado estacionario. Para esto resolvimos numéricamente la ecuación II.4.4, que representa al par de electrones en el sistema centro de masa y que de acuerdo a su forma funcional es independiente del parámetro de apantallamiento y de la forma de la sección transversal. Para este caso se tomaron longitudes de hilo de 10nm, 100nm y 1 μm con campos eléctricos para cada longitud en el rango de 0- $\pm 150 \text{ KV/cm}$, 0- $\pm 150 \text{ V/cm}$ y 0- $\pm 0.1 \text{ V/cm}$, respectivamente.

En la figura V.3.1 a) mostramos la densidad electrónica, $|B(R)|^2$, normalizada a la unidad. Utilizamos el sistema de centro de masa, un hilo de 10nm de longitud con y 3 diferentes valores de campo eléctrico. Observamos que para $E_{\text{ext}}=0 \text{ KV/cm}$ la distribución de carga presenta un máximo en $R=0 \text{ nm}$, lo cual es consistente con lo reportado anteriormente del sistema sin campo eléctrico. Esto es, para este caso reproducimos al par de electrones acoplados en el centro del hilo. En este caso, la distribución de un solo máximo representa al par de electrones. Al aumentar el campo a $E_{\text{ext}}=80 \text{ KV/cm}$ observamos un corrimiento del máximo en sentido contrario al campo, el máximo esta vez se encuentra en $R=1.54 \text{ nm}$ y la forma del pico cambia, la densidad se va aproximando más rápido a cero en la parte positiva de R , perdiendo la simetría con respecto al centro del hilo y del pico. Para $E_{\text{ext}}=150 \text{ KV/cm}$, encontramos un corrimiento mayor de $R=2.1 \text{ nm}$, análogo al caso anterior, la simetría se pierde con respecto al centro del hilo y del pico. Para un $E_{\text{ext}}<0$, los corrimientos son hacia la parte positiva de R y se encuentran los mismos efectos al variar el campo.

El efecto del campo externo se ve reflejado en el cambio de la energía del sistema centro de masa, el cual se muestra en las figuras V.3.1 b-d). Al aumentar el campo se presenta un corrimiento a energías menores. Se presenta un valor límite de E_{ext} que es dependiente del tamaño de la longitud del hilo, para campos mayores a este ya no se pueden recuperar las condiciones a la frontera para los extremos del hilo. Observamos que para valores de campo 0, debemos obtener un valor de energía igual al de una partícula de masa $2m^*$ en un pozo de potencial infinito ($\hbar^2\pi^2/((2m^*)8L_z^2)$). Para el caso de un hilo de 10nm y un campo nulo, la energía

$E_R=29\text{meV}$, el cual coincide con el de barreras infinitas, (régimen punto cuántico), el campo es del orden de KV/cm , con un límite de $\pm 150\text{KV/cm}$ (Fig. V.3.1 b)). Al aumentar la longitud a 100nm para un campo de 0 $E_R=.29\text{meV}$, la escala para el campo cambia a V/cm con un E_{ext} máximo de $\pm 150\text{V/cm}$ (Fig. V.3.1c)). Para $L_z=1\mu\text{m}$, el campo externo esta entre 0 y $\pm 0.1\text{V/cm}$ (Fig. V.3.1 d)) y $E_R=0.0029\text{meV}$ para un campo 0 . Para las 3 longitudes observamos una dependencia de la energía con E_{ext} similar, tipo parabólico. Este rango de valores encontrados para campo eléctrico son comparables con los reportados experimentalmente en la literatura, para puntos e hilos cuánticos [85-87].

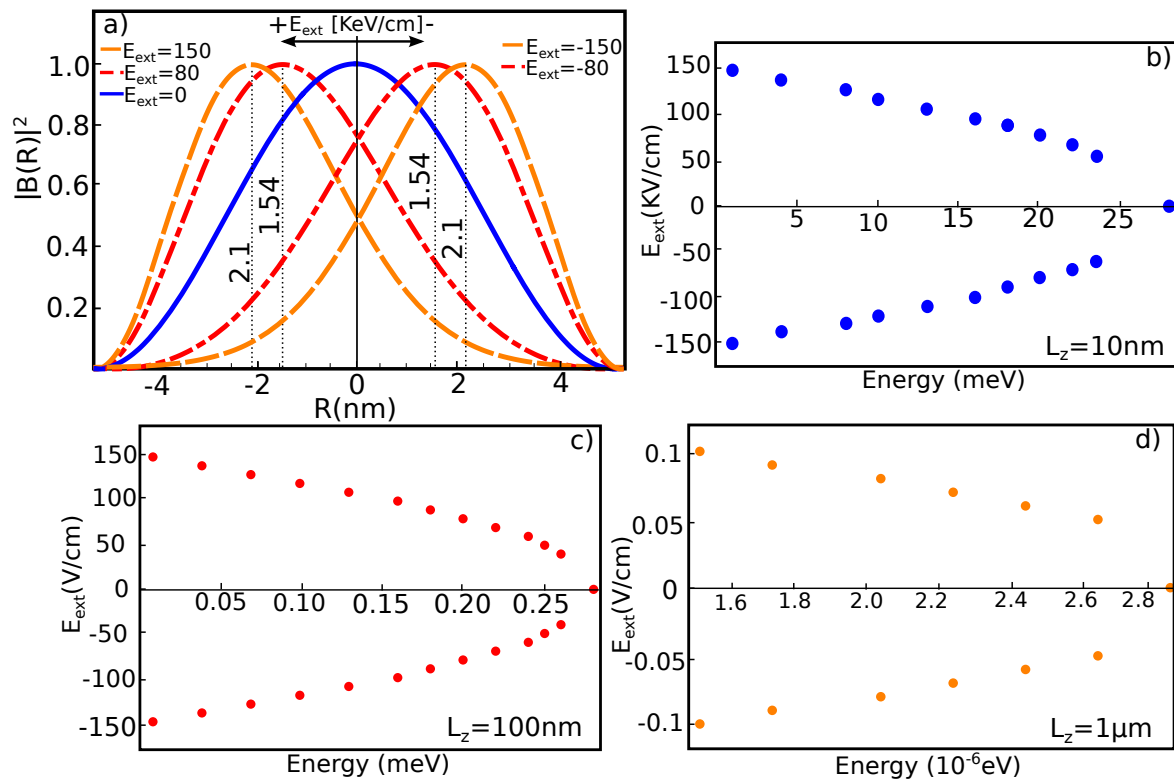


Figura V.3.1.- a) Densidad de probabilidad para 3 diferentes valores de campo eléctrico ($E_{\text{ext}}=0, 80$ y 150 KV/cm), b) Dependencia de la energía con la variación del campo eléctrico externo de 0 a ± 150 KV/cm para un hilo de longitud $L_z=10\text{nm}$, c) E_{ext} de 0 a $\pm 150\text{V/cm}$ para $L_z=100\text{nm}$ y d) E_{ext} de 0 a $\pm 0.1\text{V/cm}$ para $L_z=1\mu\text{m}$

En la figura V.3.2 (a-d) presentamos las proyecciones 3D para el estado base del hilo cuadrado de los planos x - y - R de longitud $L_z=100\text{nm}$, tamaño de sección transversal $x=y=4\text{nm}$ y su dependencia con el campo externo para 3 valores $0, 80$ y 150 V/cm. La forma de las distribuciones son similares a las encontradas para el modelo del hilo con barreras finitas (sección anterior), de forma elipsoidal, esto es debido a que para la sección transversal resolvimos las mismas ecuaciones

trascendentales que en el apartado anterior. El corrimiento encontrado en la densidad de probabilidad de la figura V.3.1 a) se refleja en el desplazamiento de la elipsoide hacia la parte negativa de R, debido a que, en este caso, el campo es positivo. Análogo a los casos anteriores, el estado base para el hilo cilíndrico es similar al del hilo cuadrado.

La Fig. V.3.2 (e-h)) muestra la proyección 3D del primer estado excitado para el hilo cuadrado de dimensiones $x=y=8\text{nm}$, $L_z=100\text{nm}$ dependiente de la magnitud y dirección del campo externo. La distribución electrónica consta de dos elipsoides, para el caso del hilo cilíndrico la distribución cambia, teniendo forma toroidal (Fig. V.3.2 (i-l)), con un tamaño de sección transversal $\rho=4\text{nm}$, igual a los resultados presentados para barreras finitas e infinitas. Similar al estado base, el efecto del campo se asocia al desplazamiento de las distribuciones electrónicas en sentido contrario al campo. El desplazamiento para un $E_{\text{ext}}=80\text{V/cm}$ es de $R=15.44\text{nm}$. El máximo desplazamiento obtenido $R=20.57\text{nm}$ está dado por un valor de campo externo de 150V/cm , de ambas geometrías de hilo y estados confinados presentados. Para los tamaños de sección transversal elegidos en este caso, tenemos efectos de tunelamiento, que se observan en las distribuciones de electrones incompletas mostrados desde una mejor perspectiva en las figuras V.3.2(a, e, i). Podemos observar el cambio de las distribuciones en función del aumento del campo, obtenemos formas que se van comprimiendo conforme aumenta este.

En conclusión en esta sección estudiamos el efecto de un campo eléctrico externo en un sistema tipo HC de sección transversal cuadrada y circular y su dependencia con la longitud del HC, estudiando el régimen en el que el HC es considerado un punto cuántico en donde el E_{ext} es del orden de KV/cm para $L_z < 30\text{nm}$ y el caso de HC $L_z > 30\text{nm}$ para un E_{ext} del orden de V/cm , lo cual es consistente con lo reportado en trabajos experimentales [88].

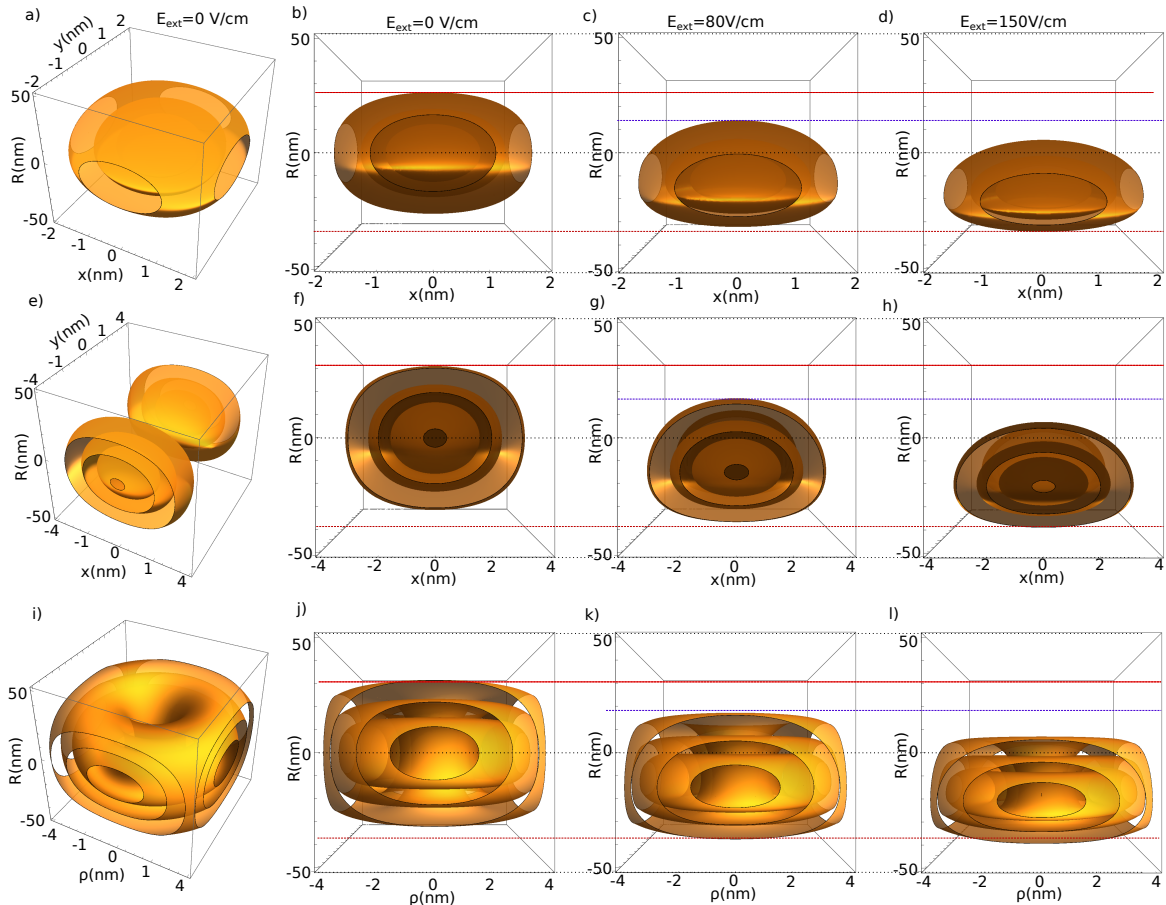


Figura V.3.2.- Proyecciones 3D del estado base para el hilo cuadrado en el plano x - y - R (a-d) y primer estado excitado para el hilo cuadrado (e-h) y cilíndrico (plano ρ - R) (i-l) de sección transversal $x=y=2\rho=4\text{nm}$ y $x=y=2\rho=8\text{nm}$ (Estado base y primer estado excitado, respectivamente) y longitud $L_z=100\text{nm}$, para (a, b, e, f, i, j) $E_{\text{ext}}=0$, (c, g, k) 80 y (d, h, l) 150V/cm.

V.4 Dos hilos cuadrados paralelos con barreras finitas.

Continuando con el estudio sistemático de modelado para hilos cuánticos propusimos un sistema de dos hilos acoplados con sección transversal cuadrada conteniendo un par de electrones cada uno, para un sistema ideal, en el cual el par de electrones en un hilo no interactúa con el par de electrones del segundo hilo. En esta caso resolvimos la ecuación II.4.4 para un sistema tipo pozo finito en el eje y , esto es debido a que en un sistema real se pueden crecer capas de hilos apiladas con separaciones entre capas de 100nm o mas, para estas dimensiones, los hilos vecinos entre capas ya no interactúan o también se puede crecer una sola capa de hilos. Para el eje x resolvimos un sistema de matrices como se muestra en el apéndice F, para el eje a lo largo del hilo resolvimos la ecuación 6.5 por medio del método de diferencias finitas (apéndice E), en sistemas reales, los hilos en el eje x se encuentran separados aproximadamente a 55nm, a estas

distancias existe interacción entre hilos vecinos de electrones que atraviesan la barrera. Para este caso los dos pozos tienen el mismo tamaño y las barreras son del mismo tamaño, Nuevamente, consideramos que el pozo es de GaAs y las barreras de $\text{Al}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$, para una concentración $c=0.3$, por lo que el potencial de la barrera estará definido por la ecuación b.4 para V_{p-e} .

Para el caso del eje y trabajamos con el estado base, para el eje x con la primera configuración de tamaños utilizamos todos los estados encontrados y para la segunda configuración sólo presentamos el estado base, en todos los casos usamos una longitud de hilo de 10nm (región de punto cuántico), con la finalidad de observar y comparar los efectos de cristalización de electrones de las secciones anteriores.

En la figura V.4.1 mostramos las proyecciones 2D del plano $x-z$ y 3D de la densidad de carga. En el caso 3D, los planos que cortan las distribuciones son asociados al inicio y final del pozo. Para este caso vemos que la forma de las distribuciones son similares a las encontradas en la sección de barreras finitas, tenemos distribuciones elípticas, Aquí tenemos pozos de 8nm con barreras de 1nm.

Para el caso del estado base, las distribuciones se encuentran totalmente acopladas dentro del pozo para tamaños de pozo y barrera de $a=8\text{nm}$ y $b=1\text{nm}$, respectivamente (figura V.4.1 a-c)), podemos observar que los planos cortan las elipsoides, esa fracción es correspondiente a la probabilidad de tunelamiento para ambos pozos.

El primer estado excitado presenta un desacople en la barrera, teniendo así, distribuciones bien definidas en cada pozo. La distribución se muestra incompleta en el eje y , esto es debido a que para el pozo en esa coordenada existe tunelamiento ($x=y=8\text{nm}$, Figura V.4.1 e-g)), el cual es equivalente al del eje x ya que los pozos tienen el mismo tamaño por ser un hilo de sección transversal cuadrada.

Para el segundo estado excitado encontramos 3 distribuciones elípticas en el eje x , con un acoplamiento dentro del pozo casi total de las elipses centrales (Figura V.4.1 i-k)), por lo que casi la tercera parte de la densidad de carga atraviesa la barrera.

Para estas dimensiones sólo tenemos estos 3 niveles de energía, si el tamaño de los pozos disminuye, desaparecen niveles, en el caso contrario, si aumentamos el tamaño del pozo, observaremos la presencia de más niveles de energía.

Para la dependencia con el parámetro de apantallamiento, usando los mismos valores para obtener densidades electrónicas en el rango intrínseco- dopado y altamente dopado, podemos ver que el efecto en cada hilo es similar al obtenido en las secciones anteriores, para densidades bajas (figura V.4.1 a,d,e,h,i,l)) observamos la formación de la molécula de Wigner. Al aumentar el parámetro de apantallamiento la redistribución de carga hace que se vaya perdiendo la cristalización de electrones.

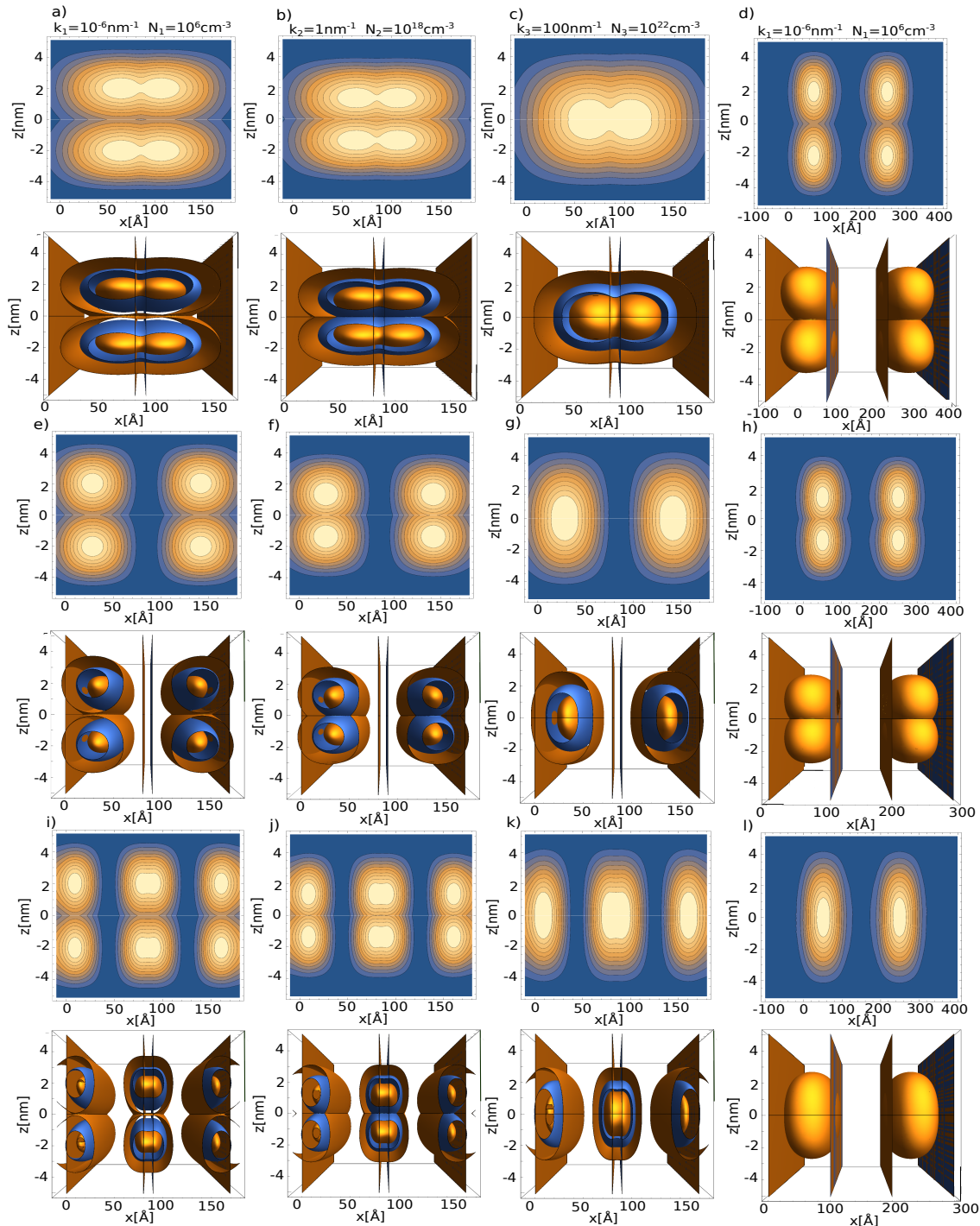


Figura V.4.1.- Proyecciones 2D y 3D para dos hilos cuadrados acoplados con dos electrones dentro de cada uno, las columnas corresponden al estado base y primer y segundo estado excitado encontrados para esta geometría, las 3 primeras filas el tamaño de los pozos es de 8nm y barreras de 1nm, la última fila es para un pozo de 10nm y barreras de 10nm, las proyecciones son dependientes del parámetro de apantallamiento, la primer y última fila corresponde a $N_1=10^6$, la segunda fila a $N_2=10^{18}$ y la última fila a $N_3=10^{22} \text{ cm}^{-3}$. La longitud del hilo es de 10nm.

Para ver que ocurría en el límite dado en la sección de barreras finitas, para no encontrar efectos de tunelamiento, aumentamos el tamaño del pozo y de la barrera hasta $a=b=10\text{nm}$, observamos de la figura V.4.1 a,h,l) que se recupera la forma esperada, se pierde el acoplamiento entre pozos, coincidiendo el valor con el reportado para el caso de barreras finitas cuando se exploraron los casos límite del tunelamiento, por lo que se recuperaron las distribuciones elípticas completas. Las densidades electrónicas en esta fila se calcularon para un parámetro de apantallamiento $N_1=10^6\text{cm}^{-3}$ el caso en el que tenemos cristalización de electrones.

En esta sección iniciamos los estudios de sistemas de hilos acoplados para observar y encontrar los límites de acoplamiento entre pozos y barreras. Este tipo de sistemas experimentalmente son de gran interés, ya que por medio de MBE y el auto-ensamblado obtenido en este trabajo se pueden crecer hilos cuánticos con separaciones menores al periodo de facetamiento, por lo que el modelo propuesto puede ser aplicado para observar efectos de muchos cuerpos en sistemas reales. El implementar más hilos al modelo y código que realizamos en este trabajo no es muy complejo, teniendo en cuenta el trabajo realizado.

Conclusiones y perspectivas

En conclusión, en la búsqueda de las condiciones óptimas para el auto-ensamblado de superficies facetadas las cuales pueden ser utilizadas como plantilla para la fabricación de HCs, realizamos diferentes series de crecimiento homoepitaxial sobre superficies de Al-GaAs(631) por MBE y, apoyados con diversos modelos que describen el facetamiento en superficies vecinales, podemos concluir lo siguiente:

I.- A partir de los modelos descritos por las ecuaciones 1.5.2.1 y 1.5.3.1, concluimos que para obtener superficies acanaladas uniformes debíamos establecer condiciones de crecimiento tales que: (i) los átomos que arriben a la superficie de la muestra tengan una alta difusión superficial (esto mediante el aumento de T_C y/o la razón III/V), (ii) el tiempo de depósito sea lo suficientemente largo como para que se establezcan las condiciones de equilibrio de las interacciones superficiales asociadas al campo elástico superficial y al proceso de coarsening, (iii) que existen etapas del crecimiento en las cuales los procesos cinéticos, elásticos y de coarsening tienen pesos específicos diferentes: al inicio los procesos cinéticos son los importantes, en tiempos intermedios (alrededor de 50 minutos, creciendo a 0.6 micras/hora) inestabilidades de las contribuciones elástica y de coarsening son las importantes y, para tiempos mayores (alrededor de 100 minutos, creciendo a 0.6 micras/hora), el estado estacionario de las contribuciones elásticas y de coarsening son las que dominan, estableciendo la formación de arreglos facetados de un único periodo lateral.

Bajo las condiciones exploradas en esta tesis, encontramos que las condiciones óptimas para reproducir el auto-ensamblado de facetas uniformes, en el sistema MBE instalado en la CIACYT, son: $P_{Ga}=1.3 \times 10^{-7}$ Torr, $P_{As}=7 \times 10^{-6}$ Torr, $T_C=650$ °C y $t_c \geq 50$ min.

Como perspectiva proponemos explorar mayores tiempos de crecimiento y hacer series de crecimiento en la que logremos diferenciar la mejora de la difusión superficial al variar T_C y la razón III-V por separado. Esto nos permitirá fijar valores para los parámetros de la ecuación 1.5.3.1 y relacionados directamente con condiciones experimentales.

II.- Propusimos un modelo que describe el proceso de facetamiento en el substrato de Al-GaAs(631), que es un plano de Al localizado dentro del TE. El modelo propuesto (fundamentado por RHEED y AFM) es similar a los que se han propuesto para describir el facetamiento en orientaciones Al sobre los bordes del TE y para los SV. Como perspectiva, planteamos crecer una serie de muestras crecidas bajo las condiciones óptimas de crecimiento en la cual variemos t_c . Esto nos servirá para validar nuestro modelo de forma más sólida y para explorar otros efectos involucrados en la formación de las superficies facetadas.

III.- Desarrollamos un nuevo criterio para explorar facetamiento en planos Al dentro del TE y encontrando potenciales nuevas direcciones dentro de él para generar el facetamiento 1D. Estas nuevas direcciones se encuentran sobre la línea que une un a un plano estable de bajo índice sobre el TE con el plano estable de alto índice (11 5 2), el cual se encuentra dentro del TE. Esta nueva estrategia puede dar lugar a nuevas posibilidades en auto-ensamblado de estructuras 1D y manipulación de las propiedades físicas relacionadas a la impurificación, efectos piezoeléctricos, polarización de la luz, entre otras, que a su vez pueden dar lugar a nuevos experimentos y la fabricación de dispositivos 1D basados en HI. Como perspectiva, proponemos realizar crecimientos homoepitaxiales sobre algunos de estos planos.

IV.- Del análisis de los patrones alternados de las estructuras tipo 1x-2x descritas en la tesis, concluimos que los modelos existentes (que sólo consideran la dirección transversal a las facetas) no son capaces de describir este tipo de arreglos alternados de estructuras 1x-2x-1x-.... Proponemos a futuro desarrollar modelos de energía superficial elástica y de coarsening que consideren ambas direcciones (transversal y longitudinal) de las facetas.

V.- Mediante la implementación de un potencial tipo Yukawa, abordamos el problema de muchos electrones dentro de un hilo cuántico a través de la manipulación del parámetro de apantallamiento. Encontramos que nuestro modelo es capaz de reproducir de forma consistente la cristalización de Wigner. Se estableció la dependencia del parámetro de apantallamiento con la aparición de la molécula de Wigner y encontramos que su formación depende de una densidad crítica de portadores. En nuestro caso, para un hilo de GaAs, la molécula de Wigner es encontrada para $N_2=10^{18}\text{cm}^{-3}$ en hilos cuántico de longitudes desde 30nm hasta 5 μm . Encontramos que para densidades mayores y menores a este valor la cristalización de Wigner no se produce. El valor de densidad que encontramos concuerda con otros cálculos y datos experimentales reportados en la literatura.

Como perspectiva planteamos mejorar nuestro modelo incluyendo factores adicionales tales como la interacción entre los spines de los electrones.

VI.- Mediante nuestro modelo de potencial tipo Yukawa, estudiamos el efecto de un campo eléctrico externo en un sistema tipo HC de sección transversal cuadrada y circular y su dependencia con la longitud del HC. Analizamos el régimen en el que el HC es considerado un punto cuántico, encontrando que los efectos de campo son notorios para E_{ext} del orden de KV/cm para $L_z<30\text{nm}$ y en el caso de HC ($L_z>30\text{nm}$) el E_{ext} del orden de V/cm, lo cual es consistente con lo reportado en la literatura. Como perspectiva, proponemos estudiar el efecto de un campo externo sobre HCs crecidos con nuestras muestras para compararlo con nuestro modelo. Además, planteamos modificar este modelo para que sea capaz de describir transporte electrónico en los HCs.

VI.- Finalmente, mediante nuestro modelo de potencial tipo Yukawa, estudiamos los efectos al manipular el tamaño de pozo y barrera de los HCs acoplados, i. e., separados por barreras finitas y por distancias suficientemente pequeñas. Reportamos los efectos de tunelamiento y los estados de energía acoplados como función de los tamaños de los pozos y de las barreras.

Apéndice A

Solución de la ecuación de Schrödinger para un pozo cuántico de barreras infinitas.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para una partícula que se mueve en un potencial esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad \text{a.1)}$$

Donde V es el potencial y ψ es la función de onda. Para un electrón que se encuentra dentro de un pozo de potencial de barreras infinitas, el potencial esta definido por regiones (Fig. a1) tal que:

$$V = \begin{cases} \infty & \text{para } x < -\frac{a}{2} \\ 0 & \text{para } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \infty & \text{para } x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad \text{a.2)}$$

Por lo que la ecuación a.1 para este sistema la utilizamos en una sola dimensión:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{a.3)}$$

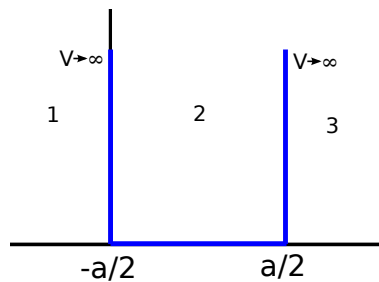


Figura a1.- Pozo de potencial de barreras infinitas

La función de onda se define por partes. En las regiones donde el potencial es infinito las soluciones son cero, para evitar divergencias, por lo tanto tendremos una solución discontinua definida dentro del pozo como:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m^*}{\hbar^2} (E)\psi(x) = -q^2\psi(x) \quad \text{a.4)}$$

$$\psi(x) = C \sin[qx] + D \cos[qx] \quad \text{a.5)}$$

Con $q = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$. Por condiciones a la frontera, las cuales están definidas por la barrera, en $x = \pm a$, encontramos las eigenenergías del sistema para las soluciones pares e impares:

$$\text{Impares} \Rightarrow C = 0 \Rightarrow \psi(\pm a) = D \cos[q(\pm a)] = D \cos[qa] = 0 \quad \text{a.6)}$$

$$qa = \frac{(2n+1)\pi}{2} \Rightarrow q = \frac{(2n+1)\pi}{2a} \quad \text{a.7)}$$

$$\sqrt{\frac{2m^*(E)}{\hbar^2}} = \frac{(2n+1)\pi}{2a} \Rightarrow E_{2n+1} = \frac{(2n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8m^*} \quad \text{a.8)}$$

$$\text{Pares} \Rightarrow D = 0 \Rightarrow \psi(\pm a) = C \sin[q(\pm a)] = 0 \quad \text{a.9)}$$

$$qa = (2n)\pi \Rightarrow q = \frac{(2n)\pi}{a} \quad \text{a.10)}$$

$$\sqrt{\frac{2m^*(E)}{\hbar^2}} = \frac{(2n)\pi}{a} \Rightarrow E_{2n} = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^*} \quad \text{a.11)}$$

Con $n=0,1,2, \dots$, las constantes de normalización C y D se encuentran de la siguiente forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{par/impair}|^2 dx = 1 \Rightarrow |C|^2 = a; |D|^2 = a \quad \text{a.12)}$$

por lo tanto la soluciones son [10]:

$$\psi_{impar}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left[\frac{(2n)\pi}{a}x\right] \quad \text{a.13)}$$

$$\psi_{par}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left[\frac{(2n+1)\pi}{a}x\right] \quad \text{a.14)}$$

Solución de la ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas para un pozo cuántico de barreras infinitas.

Para el caso del hilo cilíndrico, el tratamiento es similar. La diferencia se ve reflejada en la parte cinética de la ecuación de Schrödinger ya que cambiamos de sistema de coordenadas, aquí trabajaremos en coordenadas cilíndricas, la coordenada de interés es la radial, debido a que la parte en z esta descrita de otra forma, porque en ese eje tenemos al par de electrones. La coordenada radial será ρ , por lo que la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad \text{a.15)}$$

con:

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{a.16)}$$

Por medio de separación de variables obtenemos la ecuación de la parte radial para la función F que sólo depende de ρ , la cual esta dada por:

$$\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} F(\rho) \right) - \ell^2 F(\rho) = \begin{cases} -(q)\rho^2 F(\rho) & \text{para } \rho \leq \rho_0 \\ 0 & \text{para } \rho \geq \rho_0 \end{cases} \quad \text{a.17)}$$

con ρ_0 el radio de la sección transversal del hilo. La Ec. a.14 es la ecuación de Bessel y la solución de esta ecuación es:

$$D_1 J_l(q\rho) \quad \rho \leq \rho_0 \quad \text{a.18)}$$

Con $J_l(q_b\rho)$ la función de Bessel de primer especie.

Por medio de la condición a la frontera $\rho = \rho_0$ encontramos las energías propias del sistema [16]:

$$J_l(q\rho_0) = 0 \quad \text{a.19)}$$

$$C_{o,l} = q\rho_0 = \sqrt{\frac{2m^*(E)}{\hbar^2}} \rho_0 \quad \text{a.20)}$$

$$C_{o,l} = E = \frac{C_{o,l}^2 \hbar^2}{2m^* \rho_0^2} \quad \text{a.21)}$$

Con $C_{o,l}$ el l -ésimo cero de la función Bessel.

Apéndice B

Solución de la ecuación de Schrödinger para un pozo cuántico de barreras finitas.

Debido a que estamos interesados en el estudio de hilos cuánticos semiconductores de GaAs embebidos en una matriz de $Al_cGa_{1-c}As$ con c la concentración de Aluminio, se propone tratar un sistema de una partícula tipo pozo de barreras finitas. Estas barreras estarán definidas por un potencial V_{p-e} dado en función de las energías de la banda prohibida de los materiales involucrados.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión, para una partícula que se mueve en un potencial esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{b.1)}$$

Con

$$V = \begin{cases} 0 & \text{para } x \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \\ V_{p-e} & \text{para } x \notin (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \end{cases} \quad \text{b.2)}$$

$$V_{p-e} = 0.65(E_{GAP}[Al_cGa_{1-c}As] - E_{GAP}[GaAs]) \quad \text{b.3)}$$

y

$$E_{GAP}[Al_xGa_{1-x}As] = (1.424 + 1.155x + 0.37x^2)eV \quad \text{b.4)}$$

$$E_{GAP}[GaAs] = \frac{(1.519 - 5.405 \cdot 10^{-4} T^2)}{T + 204} eV \quad \text{b.5)}$$

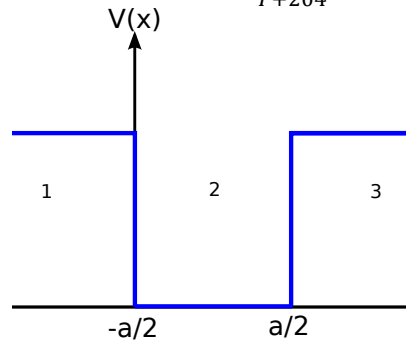


Figura b1.- Pozo de potencial de barreras finitas

La soluciones serán diferentes en cada región, para las barreras (regiones 1 y 3, Fig. b1):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m_b^*}{\hbar^2} (V_{p-e} - |E|)\psi(x) = q_b^2\psi(x) \quad \text{b.6)}$$

y para el pozo:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = -\frac{2m_p^*}{\hbar^2}(|E|)\psi_2(x) = -q_p^2\psi_2(x) \quad \text{b.7)}$$

Con $m_b^* = (0.0665 + 0.0835c)c * m_e$ la masa efectiva del electrón en el material que conforma la matriz, m_p^* la masa efectiva del electrón en el material del pozo y m_e la masa del electrón.

En nuestro caso $q_b > 0 \Rightarrow E < V_{p-e}$, por lo que la energía del electrón es menor que la altura de la barrera y la solución de la ecuación b.6 es real dada como:

$$\psi = C_1 \exp(q_b x) + C_2 \exp(-q_b x) \quad \text{b.8)}$$

Separando la solución para la región 1 y 3 tenemos:

$$\psi_1 = C_1 \exp(q_b x) \quad \text{b.9)}$$

$$\psi_3 = C_2 \exp(-q_b x) \quad \text{b.10)}$$

La solución para el pozo es:

$$\psi_2 = C_3 \sin(q_p x) + C_4 \cos(q_p x) \quad \text{b.11)}$$

Aplicando condiciones a la frontera, para obtener la continuidad en las soluciones a través de las barreras y el pozo, tenemos:

$$\psi_1 \Big|_{-\frac{a}{2}} = \psi_2 \Big|_{-\frac{a}{2}} \quad \text{b.12)}$$

$$\psi_2 \Big|_{\frac{a}{2}} = \psi_3 \Big|_{\frac{a}{2}} \quad \text{b.13)}$$

$$\frac{1}{m_b} \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{-\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_p} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{-\frac{a}{2}} \quad \text{b.14)}$$

$$\frac{1}{m_p} \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_b} \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{\frac{a}{2}} \quad \text{b.15)}$$

Por lo tanto tenemos:

$$C_1 \exp\left(-\frac{q_b a}{2}\right) = -C_3 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) + C_4 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \quad \text{b.16)}$$

$$C_2 \exp\left(-\frac{q_b a}{2}\right) = -C_3 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) + C_4 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \quad \text{b.17)}$$

$$\frac{q_b}{m_b^*} C_1 \exp\left(-\frac{q_b a}{2}\right) = \frac{q_p}{m_p^*} \left(C_3 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) + C_4 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.18)}$$

$$\frac{q_b}{m_p^*} C_1 \exp\left(-\frac{q_b a}{2}\right) = \frac{q_p}{m_b^*} \left(C_3 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) - C_4 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.19)}$$

Sustituyendo la ecuación b.16 en b.18 y b.17 en b.19 obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{q_b}{m_b^*} \left(-C_3 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) + C_4 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) = \frac{q_p}{m_p^*} \left(C_3 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) + C_4 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.20}$$

$$\frac{q_b}{m_p^*} \left(-C_3 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) - C_4 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) = \frac{q_p}{m_p^*} \left(C_3 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) - C_4 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.21}$$

De las ecuaciones b.20 y b.21 debe cumplirse que $C_3 C_4 = 0$, por lo que alguno de estos dos coeficientes debe tomarse como 0: Si hacemos $C_3 = 0$ las soluciones a la ecuación de Schrödinger para la región del pozo se reducen a funciones pares, $\psi_2 = C_4 \cos(q_p x)$. Para el otro caso en que $C_4 = 0$, las soluciones dentro del pozo son funciones impares, $\psi_2 = C_3 \sin(q_p x)$, por lo tanto tenemos dos tipos de soluciones pares e impares. Con esto encontramos las energías pares del sistema, es decir, hacemos $C_3 = 0$ en la ecuación b.20:

$$\frac{q_b}{m_b^*} \left(C_4 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) = \frac{q_p}{m_p^*} \left(C_4 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.22}$$

$$\frac{q_b}{m_b^*} = \frac{q_p}{m_p^*} \left(\tan\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.23}$$

Para las soluciones impares, hacemos $C_4 = 0$ en la ecuación b.21:

$$\frac{q_b}{m_p^*} \left(-C_3 \sin\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) = \frac{q_p}{m_b^*} \left(C_3 \cos\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.24}$$

$$-\frac{q_b}{m_p^*} = \frac{q_p}{m_b^*} \left(\cot\left(\frac{q_p a}{2}\right) \right) \quad \text{b.25}$$

Para encontrar las eigenenergías en cada caso se resuelven las ecuaciones trascendentales b.23 y b.25. La figura b2 muestra la solución gráfica de estas ecuaciones para un caso particular en el que $\frac{q_p a}{2} = 15$, de la figura observamos que para estos valores, hay 5 energías, las cuales son representadas por las intersecciones entre la grafica obtenida por la parte izquierda de la igualdad de las ecuaciones (línea roja) y la parte derecha de estas, dadas por los puntos naranjas. Las líneas azul, morado, verde y naranja claro representan las funciones tangente y cotangente, la línea naranja fuerte para energías positivas es dada por la parte izquierda de la ecuación b.25 y la que se encuentra en la región de energías negativas se asocia a la parte izquierda de la ecuación b.23.

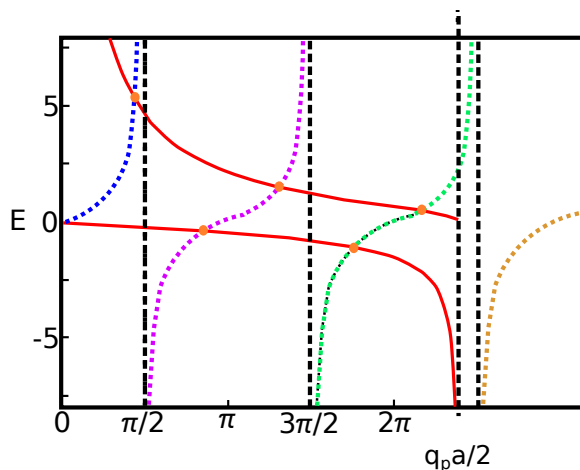


Figura b2.- Solución gráfica de las ecuaciones b.23 y b.25, para $\frac{q_p a}{2} = 15$. Los puntos que se encuentran en las intersecciones representan las soluciones del sistema.

Por otro lado, el coeficiente de Transmisión CT y reflexión CR esta dado por la razón entre las partículas que inciden por la barrera en la región 1 y las que salen por la barrera 2, es decir $T = \left| \frac{c_1}{c_3} \right|^2$, despejando estas constantes del sistema de ecuaciones b.16-b.19 obtenemos este coeficiente [16]:

$$CT = \left| \frac{c_1}{c_3} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_b - q_p}{q_b} \right)^2 \sin^2(q_b a)} \quad \text{b.26)}$$

$$CR = 1 - T = 1 - \left| \frac{c_1}{c_3} \right|^2 = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_b - q_p}{q_b} \right)^2 \sin^2(q_b a)} \quad \text{b.27)}$$

Solución de la ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas para un pozo cuántico de barreras finitas.

Para el caso del hilo cilíndrico, el tratamiento es similar. Vamos a tener las mismas ecuaciones para el potencial (Ec. b.2-b.5). La diferencia esta en el cambio de coordenadas, aquí trabajaremos en coordenadas cilíndricas con la coordenada radial, a la cual llamaremos ρ , por lo que la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad \text{b.28)}$$

con:

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{b.29)}$$

Por medio de separación de variables obtenemos la ecuación de la parte radial para la función F que sólo depende de ρ , la cual esta dada por:

$$\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} F(\rho) \right) - \ell^2 F(\rho) = \begin{cases} -(q_b^2) \rho^2 F(\rho) & \text{para } \rho \leq \rho_0 \\ (q_p^2) \rho^2 F(\rho) & \text{para } \rho \geq \rho_0 \end{cases} \quad \text{b.30}$$

La Ec. b.30 es la ecuación de Bessel y las soluciones para los casos dados en esta ecuación son:

$$D_1 J_\ell(q_b \rho) \quad \rho \leq \rho_0 \quad \text{b.31}$$

$$D_2 K_\ell(q_p \rho) \quad \rho \geq \rho_0 \quad \text{b.32}$$

Con $J_\ell(q_b \rho)$ y $K_\ell(q_p \rho)$ las funciones de Bessel de primer y segunda especie.

Aplicando condiciones a la frontera para $\rho = \rho_0$ para la continuidad de la función de onda:

$$D_1 J_\ell(q_b \rho_0) = D_2 K_\ell(q_p \rho_0) \quad \text{b.33}$$

$$\frac{D_1}{m_b^*} \frac{d}{d\rho} J_\ell(q_b \rho) \Big|_{\rho_0} = \frac{D_2}{m_p^*} \frac{d}{d\rho} K_\ell(q_p \rho) \Big|_{\rho_0} \quad \text{b.34}$$

Reescribiendo la ecuación b.34, tenemos:

$$\frac{D_1}{m_b^*} q_b J'_\ell(q_b \rho) = \frac{D_2}{m_p^*} q_p K'_\ell(q_p \rho) \quad \text{b.35}$$

Por lo que la ecuación trascendental resulta de la mezcla de la ecuación b.33 y b.35:

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{K_\ell(q_p \rho_0)}{J_\ell(q_b \rho_0)} = \frac{m_b^* q_p K'_\ell(q_p \rho)}{m_p^* q_b J'_\ell(q_b \rho)} \quad \text{b.36}$$

Esta ecuación se resuelve gráficamente de la misma forma que el caso del pozo cuadrado finito.

Apéndice C

Una modificación del método de cuarto orden de Runge-Kutta tiempo-diferenciación exponencial.

Sea una ecuación diferencial no lineal dependiente del tiempo, podemos escribir esta de la forma:

$$u_t = \mathcal{L}u + \mathfrak{N}(u, t) \quad \text{c.1)}$$

Donde $\mathcal{L}, \mathfrak{N}$ son operadores lineales y no lineales, respectivamente. Podemos discretizar la parte espacial tal que:

$$u_t = Lu + N(u, t) \quad \text{c.2)}$$

con L, N matrices asociadas a los operadores lineales y no lineales, respectivamente. Multiplicando c.2 por un factor de integración e^{Lh} e integrando la ecuación sobre pasos de tiempo que van de $t = t_n$ a $t = t_{n+1} = t_n + h$, tenemos:

$$u_{n+1} = e^{Lh}u_n + e^{Lh} \int_0^h e^{-L\tau} N(u(t_n + \tau), t_n + \tau) d\tau \quad \text{c.3)}$$

Proponemos una formula del tipo:

$$u_{n+1} = e^{Lh}u_n + h \sum_{m=0}^{s-1} g_m \sum_{j=0}^m (-1)^k \binom{m}{j} N_{n-j} \quad \text{c.4)}$$

$$Lhg_0 = e^{Lh} - I \quad \text{c.5)}$$

$$Lhg_{m+1} + I = g_m + \frac{1}{2}g_{m-1} + \frac{1}{3}g_{m-2} + \dots + \frac{g_0}{m+1} \quad m \geq 0 \quad \text{a.6)}$$

De acuerdo a las ecuaciones anteriores, definiendo funciones extra, la forma final de c.4 será [89]:

$$a_n = e^{\frac{Lh}{2}}u_n + L^{-1} \left(e^{\frac{Lh}{2}} - I \right) N(u_n, t_n) \quad \text{c.7)}$$

$$b_n = e^{\frac{Lh}{2}}u_n + L^{-1} \left(e^{\frac{Lh}{2}} - I \right) N \left(u_n, t_n + \frac{h}{2} \right) \quad \text{c.8)}$$

$$c_n = e^{\frac{Lh}{2}}a_n + L^{-1} \left(e^{\frac{Lh}{2}} - I \right) \left(2N \left(b_n, t_n + \frac{h}{2} \right) - N(u_n, t_n) \right) \quad \text{c.9)}$$

$$u_{n+1} = e^{Lh}u_n + h^{-2}L^{-3} \left\{ [-4 - Lh + e^{Lh}(4 - 3Lh + (Lh)^2)]N(u_n, t_n) + 2[2 + Lh + e^{Lh}(-2 + Lh)] \left(N \left(a_n, t_n + \frac{h}{2} \right) + N \left(b_n, t_n + \frac{h}{2} \right) \right) + [-4 - 3Lh - (Lh)^2 + e^{Lh}(4 - Lh)]N(c_n, t_n + h) \right\} \quad \text{c.10)}$$

La ecuación c.10 se resuelve por medio de una función propuesta estacionaria u_n , el paso para el tiempo h , la matriz N se asocia al termino cuadrado que resulta de realizar la transformada de Fourier a las derivadas de la ecuación a resolver, que son del tipo uu_x , no lineales. La matriz L esta conformada por los términos restantes que surgen de la transformada de Fourier de las derivadas restantes, del tipo $u_{xxxx}, u_{xx}, u_{xxx}$. En este trabajo se realizo un código para resolver la ecuación de interés.

Apéndice D

Ecuación de Schrödinger para dos partículas

La ecuación de Schrödinger normalmente es utilizada para una sola partícula que se mueve en un potencial. Para extender esta a un sistema multipartículas, necesitamos hacer la función de onda ψ y el potencial funciones de la posición de todas las partículas, por lo que esta ecuación independiente del tiempo, para un sistema de n partículas, esta dada como:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \quad \text{d.1)}$$

En el caso de dos partículas de masa m_1 y m_2 , si el potencial V sólo es dependiente de la separación entre las dos partículas $r \equiv r_1 - r_2$, podemos jugar con él un poco y producir una forma más simple. Primero definimos el centro de masa como:

$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \quad \text{d.2)}$$

Introduciendo la masa reducida:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{d.3)}$$

tenemos entonces:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{\mu}{m_1} \mathbf{r} \quad \text{d.4)}$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{\mu}{m_2} \mathbf{r} \quad \text{d.5)}$$

Los gradientes pueden ser obtenidos en función de las coordenadas \mathbf{R} y \mathbf{r} . Considerando la componente x y la regla de la cadena obtenemos las siguientes derivadas:

$$\frac{\partial f}{\partial r_{1x}} = \frac{\partial f}{\partial r_x} \frac{\partial r_x}{\partial r_{1x}} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{\partial R_x}{\partial r_{1x}} = \frac{\partial f}{\partial r_x} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{m_1}{m_1 + m_2} \quad \text{d.6)}$$

$$= \frac{\partial f}{\partial r_x} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{\mu}{m_2} \quad \text{d.7)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial r_{2x}} = \frac{\partial f}{\partial r_x} \frac{\partial r_x}{\partial r_{2x}} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{\partial R_x}{\partial r_{2x}} = \frac{\partial f}{\partial r_x} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{d.8)}$$

$$= -\frac{\partial f}{\partial r_x} + \frac{\partial f}{\partial R_x} \frac{\mu}{m_1} \quad \text{d.9)}$$

La relación para las otras dos componentes es similar, cambiando la derivada de la función f por el gradiente, tenemos:

$$\nabla_1 = \nabla_r + \frac{\mu}{m_2} \nabla_R \quad \text{d.10)}$$

$$\nabla_2 = -\nabla_r + \frac{\mu}{m_1} \nabla_R \quad \text{d.11)}$$

Diferenciando con respecto a x las derivadas obtenidas, para encontrar la forma del operador Laplaciano obtenemos:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r_{1x}^2} = \left(\frac{\partial}{\partial r_x} + \frac{\mu}{m_2} \frac{\partial}{\partial R_x} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial r_x} + \frac{\mu}{m_2} \frac{\partial f}{\partial R_x} \right) \quad \text{d.12)}$$

$$= \frac{\partial^2 f}{\partial r_x^2} + \frac{\partial f}{\partial r_x \partial R_x} \frac{2m_1}{m_1+m_2} + \frac{\partial^2 f}{\partial R_x^2} \left(\frac{\mu}{m_2} \right)^2 \quad \text{d.13)}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r_{2x}^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial r_x^2} + \frac{\partial f}{\partial r_x \partial R_x} \frac{2m_2}{m_1+m_2} + \frac{\partial^2 f}{\partial R_x^2} \left(\frac{\mu}{m_1} \right)^2 \quad \text{d.14)}$$

La combinación de estas dos expresiones que aparecen en la ecuación de Schrödinger es, después de cancelar términos y poner en términos de comunes denominadores da como resultado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2 f}{\partial r_{1x}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2 f}{\partial r_{2x}^2} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)} \frac{\partial^2 f}{\partial R_x^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 f}{\partial r_x^2} \quad \text{d.15)}$$

El cálculo para las otras dos componentes es similar. El resultado final es [90]:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)} \nabla_R^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi \quad \text{d.16)}$$

Apéndice E

Diferencias finitas.

El método de diferencias finitas permite resolver ecuaciones diferencias en derivadas parciales de forma aproximada por medio de discretización.

El primer paso para la aplicación del método consiste en discretizar el intervalo (x_a, x_b) del plano o eje en el que se quiere resolver la ecuación, es decir, crear una malla, en la cual los puntos de esta están separados una distancia h .

Sea la función $O(x)$ definida en el intervalo (x_a, x_b) , que tiene derivada k -ésima, entonces la expansión de $O(x)$ usando series de Taylor alrededor del punto x_i , contenido en el intervalo (x_a, x_b) será:

$$O(x) = O(x_i) + \frac{x-x_i}{1!} \frac{dO}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{(x-x_i)^2}{2!} \frac{d^2O}{dx^2} \Big|_{x_i} + \dots + \frac{(x-x_i)^k}{k!} \frac{d^kO}{dx^k} \Big|_{\xi} \quad \text{e.1}$$

donde $\xi = x_i + \theta(x - x_i)$ y $0 < \theta < 1$.

Existen diferentes formas de generar la aproximación a la primer derivada: Diferencias regresivas, diferencias progresivas y diferencias centradas. En este trabajo se utilizó la diferencia centrada obtenida mediante el siguiente procedimiento. (Para detalles sobre los otros tipos de aproximaciones revisar la ref. 91).

Considerando la ecuación e.1 con $k = 3$ y escribiendo $O(x)$ en $x = x_i + \Delta x$ y $x = x_i - \Delta x$, tenemos:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2f}{dx^2} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3} \Big|_{\xi_p} \quad \text{e.2}$$

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2f}{dx^2} \Big|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3} \Big|_{\xi_r} \quad \text{e.3}$$

Restando ambas ecuaciones:

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2\Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left[\frac{d^3f}{dx^3} \Big|_{\xi_p} + \frac{d^3f}{dx^3} \Big|_{\xi_r} \right] \quad \text{e.4}$$

Despejando la deriva:

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + \chi(\Delta x^2) \quad \text{e.5}$$

Con un error debido al truncamiento de segundo orden dado por $\chi(\Delta x^2)$.

Ya que en este trabajo se resolvió la ecuación de Schrödinger, es necesario obtener una expresión para la segunda derivada, la cual se construye de forma análoga.

Partimos del desarrollo en serie de Taylor para $x = x_i + \Delta x$ y $x = x_i - \Delta x$:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^4}{4!} \left. \frac{d^4 f}{dx^4} \right|_{\xi_p} \quad \text{e.6)}$$

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^4}{4!} \left. \frac{d^4 f}{dx^4} \right|_{\xi_r} \quad \text{e.7)}$$

En este caso para obtener el término que involucra la segunda derivada, sumamos las ecuaciones anteriores y despejamos [99]:

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12!} \left. \frac{d^4 f}{dx^4} \right|_{\xi_c} \quad \text{e.8)}$$

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} \quad \text{e.9)}$$

Los resultados mostrados en este trabajo, para el caso del par de electrones colocados a lo largo del hilo cuadrado y cilíndrico fueron resueltos con una discretización de 10^6 particiones en el eje z .

Para el caso del par de electrones dentro del hilo cuadrado y cilíndrico en presencia de un campo eléctrico externo, la ecuación que involucra al campo, que representa al sistema centro de masa, se discretizó de la misma forma.

Apéndice F

Solución de la ecuación de Schrödinger dos pozos cuánticos de barreras finitas acoplados.

La ecuación de Schrödinger en una dimensión para una partícula bajo efecto de un potencial esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{f.1)}$$

con:

$$V = \begin{cases} V_{p-e} & \text{para } x < 0 \\ 0 & \text{para } 0 < x < a \\ V_{p-e} & \text{para } a < x < a + b \\ 0 & \text{para } a + b < x < 2a + b \\ V_{p-e} & \text{para } x > 2a + b \end{cases} \quad \text{f.2)}$$

Con V_{p-e} definido en la ecuación b.3 del apéndice B para barreras dependientes de la energía de banda prohibida de los materiales.

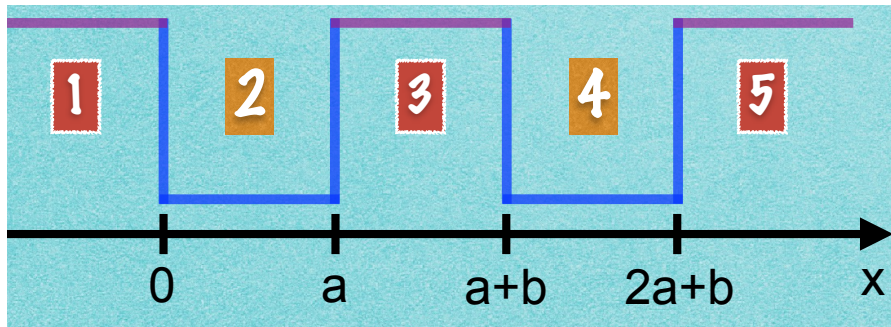


Figura f1.- Sistema de doble pozo acoplado, definido por regiones, con barreras de ancho b y pozos de ancho a.

De acuerdo a la figura f1, Las soluciones en las barreras son:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m_b^*}{\hbar^2} (V_{p-e} - |E|)\psi(x) = q_b^2\psi(x) \quad \text{f.3)}$$

$$\psi_{1,3,5} = C_{1,3,5} \exp(q_b x) + C_{2,4,6} \exp(-q_b x) \quad \text{f.4)}$$

y las soluciones en los pozos están dadas como:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m_p^*}{\hbar^2} (|E|)\psi(x) = -q_p^2\psi(x) \quad \text{f.5)}$$

$$\psi_{2,4} = D_{1,3} \exp(iq_p x) + D_{2,4} \exp(-iq_p x) \quad \text{f.6)}$$

Separando las soluciones y por medio de las condiciones a la frontera para hacer continua la función de onda, tenemos:

$$\psi_1|_0 = \psi_2|_0 \quad \text{f.7)}$$

$$\psi_2|_a = \psi_3|_a \quad \text{f.8)}$$

$$\psi_3|_{a+b} = \psi_4|_{a+b} \quad \text{f.9)}$$

$$\psi_4|_{2a+b} = \psi_5|_{2a+b} \quad \text{f.10)}$$

$$\psi_1(x = 0) = C_1 + C_2 = D_1 + D_2 = \psi_2(x = 0) \quad \text{f.11)}$$

$$\begin{aligned} \psi_2(x = a) &= D_1 \exp(iq_p a) + D_2 \exp(-iq_p a) \\ &= C_3 \exp(q_b a) + C_4 \exp(-q_b a) = \psi_3(x = a) \end{aligned} \quad \text{f.12)}$$

$$\begin{aligned} \psi_3(x = a + b) &= C_3 \exp(q_b(a + b)) + C_4 \exp(-q_b(a + b)) \\ &= D_3 \exp(iq_p(a + b)) + D_4 \exp(-iq_p(a + b)) = \psi_4(x = a + b) \end{aligned} \quad \text{f.13)}$$

$$\begin{aligned} \psi_4(x = 2a + b) &= D_3 \exp(iq_p(2a + b)) + D_4 \exp(-iq_p(2a + b)) \\ &= C_5 \exp(q_b(2a + b)) + C_6 \exp(-q_b(2a + b)) = \psi_5(x = 2a + b) \end{aligned} \quad \text{f.14)}$$

Una forma sencilla de tratar con este problema es por medio de matrices como se muestra a continuación.

De la ecuación f.11, obtenemos la siguiente matriz de 2x2:

$$\begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2q_p} \begin{pmatrix} q_p - iq_b & q_p + iq_b \\ q_p + iq_b & q_p - iq_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.15)}$$

Similar al caso anterior la segunda matriz asociada a la ecuación f.12 es:

$$\begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix} = \frac{1}{2q_b} \begin{pmatrix} q_b + iq_p & q_b - iq_p \\ q_b - iq_p & q_b + iq_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 \exp(iq_p a) \\ D_2 \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} \quad \text{f.16)}$$

y

$$\begin{pmatrix} D_1 \exp(iq_p a) \\ D_2 \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(iq_p a) & 0 \\ 0 & \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \end{pmatrix} \quad \text{e.17)}$$

Sustituyendo f.15 en f.17 tenemos:

$$\begin{pmatrix} D_1 \exp(iq_p a) \\ D_2 \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(iq_p a) & 0 \\ 0 & \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} \frac{1}{2q_p} \begin{pmatrix} q_p - iq_b & q_p + iq_b \\ q_p + iq_b & q_p - iq_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.18)}$$

Sustituimos f.18 en f.16:

$$\begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix} = \frac{1}{4q_p q_b} \begin{pmatrix} q_b + iq_p & q_b - iq_p \\ q_b - iq_p & q_b + iq_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(iq_p a) & 0 \\ 0 & \exp(-iq_p a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_p - iq_b & q_p + iq_b \\ q_p + iq_b & q_p - iq_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.19}$$

Realizando la multiplicación de matrices de la ecuación f.19 y reduciendo términos, la matriz resultante es:

$$\begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(q_p a) + \frac{q_b^2 - q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) & -\frac{q_b^2 + q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) \\ \frac{q_b^2 + q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) & \cos(q_p a) - \frac{q_b^2 - q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.20}$$

Para usar una notación compacta:

$$\begin{aligned} M_1 &= \begin{pmatrix} \cos(q_p a) + \frac{q_b^2 - q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) & -\frac{q_b^2 + q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) \\ \frac{q_b^2 + q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) & \cos(q_p a) - \frac{q_b^2 - q_p^2}{2q_p q_b} \sin(q_p a) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \text{f.21}$$

Por lo tanto:

$$\begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.22}$$

Para la unión de la siguiente región dada por la ecuación f.13, se procede de la misma forma:

$$\begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b(a+b)) \\ C_4 \exp(-q_b(a+b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(q_b b) & 0 \\ 0 & \exp(-q_b b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix} \quad \text{f.23}$$

Para el pozo de la ecuación f.13:

$$\begin{pmatrix} D_3 \exp(iq_p(a+b)) \\ D_4 \exp(-iq_p(a+b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(q_b b) & 0 \\ 0 & \exp(-q_b b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b a) \\ C_4 \exp(-q_b a) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \exp(q_b b) & 0 \\ 0 & \exp(-q_b b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.24)}$$

Para la región final tenemos entonces:

$$\begin{pmatrix} C_5 \exp(q_b(2a + b)) \\ C_6 \exp(-q_b(2a + b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_3 \exp(q_b(a + b)) \\ C_4 \exp(-q_b(a + b)) \end{pmatrix} \quad \text{f.25)}$$

sustituyendo f.22 en f.23 y el resultado en f.25:

$$\begin{pmatrix} C_5 \exp(q_b(2a + b)) \\ C_6 \exp(-q_b(2a + b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(q_b b) & 0 \\ 0 & \exp(-q_b b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.26)}$$

multiplicando las matrices del lado derecho de la igualdad:

$$\begin{pmatrix} C_5 \exp(q_b(2a + b)) \\ C_6 \exp(-q_b(2a + b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \\ -\alpha_2 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad \text{f.27)}$$

con:

$$\alpha_1 = M_1^2 \exp(q_b b) - M_2^2 \exp(-q_b b) \quad \text{f.28)}$$

$$\alpha_2 = M_1 M_2 \exp(q_b b) + M_2 M_3 \exp(-q_b b) \quad \text{f.29)}$$

$$\alpha_3 = -M_2^2 \exp(q_b b) + M_3^2 \exp(-q_b b) \quad \text{f.30)}$$

Para el cálculo de las eigenenergías hacemos $C_2 = C_5 = 0$, por lo que la matriz f.27 queda:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ C_6 \exp(-q_b(2a + b)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \\ -\alpha_2 & \alpha_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{f.31)}$$

Lo que significa que:

$$\alpha_1 = 0 \quad \text{f.32)}$$

$$C_6 = -C_1 \alpha_2 \exp(q_b(2a + b)) \quad \text{f.33)}$$

La ecuación f.32 es la de eigenenergías y de la ecuación f.33 se obtiene el coeficiente de transmisión y reflexión. [16]

Referencias

- [1] M. Law, L. E. Greene, J. C. Johnson, R. Saykally y P. Yang, *Nature Materials* **4**, 455 (2005).
- [2] M. D. Kelzenberg, S. W. Boettcher, J. A. Petykiewicz, D. B. Turner-Evans, M. C. Putnam, E. L. Warren, J. M. Spurgeon, R. M. Briggs, N. S. Lewis y H. A. Atwater, *Nature Material* **9**, 239 (2010).
- [3] R. Yan, D. Gargas y P. Yang, *Nature Photonics*, **3**, 569 (2009).
- [4] M. H. Huang, S. Mao, H. Feick, H. Yan, Y. Wu, H. Kind, E. Weber, R. Russo y P. Yang, *Science* **292**, 1897 (2001).
- [5] Y. Li, F. Qian, J. Xiang y C. M. Lieber, *Materialstoday* **9**, 10, 18 (2006).
- [6] D. Shang, Z. Liu, C. Li, T. Tang, X. Liu, S. H, B. Lei y C. Zhou, *Nano Lett.* **4**, 10, 1917 (2004).
- [7] W. Kim, J. K. Ng, M. E. Kunitake, B. R. Conklin y P. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 7228 (2007).
- [8] P. Alivisatos, *Nature Biotechnology* **22**, 1, 47 (2004).
- [9] Ashcroft, Neil W. y N. David Mermin, *Solid State Physics*. Harcourt: New York, 1976.
- [10] W. A. Wooster, *A Text-Book on Crystal Physics*, Cambridge University Press, 1938, First ed.
- [11] F.C. Philips, *An Introduction to Crystallography* Third Edition, Longmans, 1963.
- [12] E. F. Schubert, *Doping in III-V semiconductors*, Cambridge University Press, 1993.
- [13] D. R. Khanal, J. W. L. Yim, W. Walukiewicz y J. Wu. *Nano Lett.* **7**, 5, 1189 (2007).
- [14] Jeffrey Y. Tsao, *Materials fundamentals of Molecular Beam Epitaxy*, Academic Press Inc, Aburquerque, New Mexico, 1993.
- [15] L. Esaky, R. Tsu: IBM. Res. Note RC-2418 (1969).
- [16] H. Paul, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, John Wiley and Sons, England, 2006, 2nd ed., ISBN 9780470010792.

- [17] M. H Devoret and H Grabert, Single Charge Tunneling: Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures, Plenum Press, New York, 1992.
- [18] D. K. Goswami, B. Satpati, P. V. Satyam and B. N. Dev, Current Science, **84**,7 (2003).
- [19] E. Cruz-Hernández, S. Shimomura and V. H. Méndez- García, Applied Physics Letters, **101**(2012).
- [20] D. Litvinov, A. Rosenauer, D. Gerthsen, N. N. Ledentsov, D. Bimberg, G. G. Ljubas, V. V. Bolotov, V. A. Volodin, M. D. Efremov, V. V. Preobrazhenskii, B. R. Semyagin and I. P. Soshnikov, Appl. Phys. Lett. **81**, 1080 (2002).
- [21] M. Yamamoto, M. Higashiwaki, S. Shimomura, N. Sano and S. Hiyamizu, Jpn. J. Appl. Phys. **36**, 6285 (1997).
- [22] Alberto D. Verga, Phys. Rev. B, **80** 174115 (2009).
- [23] G. Danker, O. Pierre-Louis, K. Kassner, and C. Misbah, Phys. Rev. Lett. **18**, 93, 185504-1 (2004).
- [24] V. H. Méndez-García, F. J. Ramirez-Arenas, A. Lastras-Martínez, E. Cruz-Hernández, A. Pulzara-Mora, J. S. Rojas-Ramirez and M. López-López, Applied Surface Science, **252**, 5530 (2006).
- [25] W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A **243**, 199 1951 .
- [26] O. Pierre- Louis, C. R. Physique **6**, 11 (2005).
- [27] Stephen J. Watson, Felix Otto, Boris Y. Rubinstein and Stephen H. Davis, Physica D, **178**, 127 (2003).
- [28] V. I. Marchenko, Sov. Phys. JETP, **54**, 3, 605 (1981).
- [29] S: J. Watson, Proc. R. Soc. A, **471** (2014).
- [30] S. A. Norris, S. Tweedie, LCP, **237** (2009).
- [31] H. J. Van Gerner, et al. Phys, Rev, Lett. **103** (2009)
- [32] J. J Métois, A. Saúl and P. Müller, Nature Materials, **4** (2005)
- [33] S. A. Norris, Phys. Rev. E, **85** (2012)
- [34] A: A. Golovin and S. H. Davis, Phys. Rev. E, **54** (1999)
- [35] M. Guedda, et al. Phys. Rev. B, **81** (2010).

- [36] Y. Kuramoto, Suppl. Prog. Theor. Phys, **64**, 346 (1978).
- [37] Paolo Politi and Daniel ben- Avraham, Physica D, **238**, 156 (2009).
- [38] Y. M. Blanter, F. W. J. Hekking and M. Büttiker, Phys. REv. Lett. **81**, 9, 1925 (1998)
- [39] X. Zhao, C. M. Wei, L. Yang and M. Y. Chou, Phys. Rev. LEtt. **92**, 23, 236805-1 (2004).
- [40] G. Bester, J. Phys. : Condens. Matter **21**, 023202 (2009).
- [41] L. Shulenburger, M. Casula, G. Senatore and R. M. Martin, Phys. REv. B. **78**, 165303 (2008).
- [42] A. D. Güçlü, C. J. Umrigar, H. Jiang and H. U. Baranger. Phys. REv. B. **80**, 201302(R) (2009).
- [43] C. Reichhardt, C. Bairnsfather and C. J. Olson Reichhardt, Phys. Rev. E. **83**, 061404 (2011).
- [44] V. V. Ravi Kishore, B. Partoens and F. M. Peeters, Phys. Rev. B. **82**, 235425 (2010).
- [45] N. T. Ziani, F. Cavaliere, and M. Sasseti, New Journal of Physics **15**, 063002 (2013).
- [46] G. A. Fiete, J. Qian, Y. Tserkovnyak, and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **72**, 045315 (2005).
- [47] K. Jauregui, W. Haüsler, and B. Kramer, Europhys. Lett **24**, 581 (1993).
- [48] B. Hua, J. Motohisa, Y. Kobayashi, S. Hara, and T. Fukui, Nano Letters **9**, 112 (2009).
- [49] V. D. Vikram and B. Marc, Nature Physics **4**, 314 (2008).
- [50] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **71**, 1864 (1993).
- [51] H. Yukawa, Proc. Phys. Math. Soc. Japan **17** 48 (1935).
- [52] S. Winberg, Phys. Lett. B **251**, 2, 288 (1990).
- [53] K. A. Dawson, Current Opinion in Colloid &Interface Science **7**, 218 (2002).
- [54] M. González-Melchor, A. Trokhymchuk y J. Alexandre, J. Chem. Phys. **115** 3864 (2001).
- [55] V. J. Anderson y H. N. W. Lekkerkerker, Nature **416** 811(2002).

- [56] P. Cicuta y A. M. Donald, *Soft Matter* **3** 1449 (2007).
- [57] C. Rey y L.J. Gallego, *J. Chem. Phys.* **96** 6984 (1992).
- [58] K. P. Shukla, *J. Chem. Phys.* **112** 10358 (2000).
- [59] M. Levinshtein, S. Rumyantsev and M. Shur, *Handbook series on Semiconductor parameters*, World Scientific, Singapore, 2000.
- [60] S. M. Sze and K. Ng. Kwok, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley and Sons, INC. Third Edition, San Jose, California, 2007.
- [61] A. S. Arrot, *Introduction to RHEED*, Springer, 1994.
- [62] A. Ichimiya and P. I. Cohen, *Reflection High- Energy Electron Diffraction*, Cmbridge University Press, 2004.
- [63] G. Binnig, Ch. Gerber and C. F. Quate, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 9, 930 (1986)
- [64] M. Higashiwaki, M. Yamamoto, T. Higuchi, S. Shimomura, A. Adachi, Y. Okamoto, N. Sano and S. Hiyamizu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**, 5B, L606 (1996).
- [65] Z. Gong, Z. Niu and Z. Fang, *Nanotechnology*, **17**,1140 (2006).
- [66] E. Cruz-Hernández, D. Vázquez-Cortés, A. Cisneros-de-la-Rosa, E. López-Luna, V. H. Méndez-García and S. Shimomura, *J. Vac. Sci. Technol. B.* **30**, 2, 02B111 (2012).
- [67] W. I. Wang, E. E. Mendez, T. T. Kuan and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 826 (1985).
- [68] E. Cruz-Hernández, D. Vázquez-Cortés, S. Shimomura, V. H. Méndez-García and M.López-López, *Phys. Status Solidi C*, **8**, 2, 282 (2011).
- [69] D. I. Lubyshev, P. P. González-Borrero, E. Marega Jr., E. Petitprez and P. Basmaji, *J. Vac. Sci. Technol. B.* **14**, 2212 (1996).
- [70] Z. Xu, X. Gou, M. Yao, H. He, L. Miao, L. Jiao, H. Liu, J. Wang, D. Qian, J. Jia, W. Ho and M. Xie, *Adv. Mater.* **25**, 1557 (2013).
- [71] G. Bester, X. Wu, D. Vanderbilt and A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 187602 (2006).
- [72] N. N. Ledentsov, V. A. Shchukin, J. Lyttikinen, O. Okhot- nikov, Yu. M. Shernyakov, A. S. Payusov, N. Yu. Gordeev, M. V. Maximov, S. Schlichting, F. Nippert, and A. Hoff mann, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 181902 (2013).
- [73] E. Cruz-Hernández, J. S. Rojas-Ramírez, C. Vázquez-López, and M. López-

- López, J. Vac. Sci. Technol. B **24**, 3,1568 (2006).
- [74] R. Notzel, L. Daweritz, and K. Ploog, Phys. Rev. B. **46**, 8, 4736 (1992).
- [75] V. R. Yazdanpanah, Z. M. Wang and G. J. Salamo, Appl. Phys. Lett. **82**, 1766 (2003).
- [76] T. Nitta, Y. Ohno, S. Shimomura, and S. Hiyamizu, , J. Vac. Sci. Technol. B. **19**, 1824 (2001).
- [77] Y. Z. Xie, V. P. Kunets, Z. M. Wang, V. Dorogan, Y. I. Mazur, J. Wu and G. J. Salamo, Nano-micro Lett. **1**, 1(2009).
- [78] T. Suzuki, Y. Temko, M.C. Xu, K. Jacobi, Surface Science, 548, 333 (2004).
- [79] Z. Gai, R. G. Zhao, W. Li, Y. Fujikawa, T. Sakurai and W. S. Yang, Phys. Rev. B. **64**,125201 (2001).
- [80] L. Geelhaar, J. Márquez, P. Kratzer, and K. Jacobi, Phys. Rev. Lett. **86**, 17, 3815 (2001).
- [81] W. Fetterman, E. Osborne, and D. S. Saxon, Journal of Research of the National Bureau of Standards 52, 259 (1953).
- [82] S. A. Söffing, M. Bortz, I. Schneider, A. Struck, M. Fleischhauer, and S. Eggert, Phys. Rev. B 79, 195114 (2009).
- [83] S. M. Julia and K. A. Matveev, J. Phys: Condens. Matter 21 (2009).
- [84] L. H. Kristinsdóttir, J. C. Cremon, H. A. Nilsson, H. Q. Xu, L. Samuelson, H. Linke, A. Wacker, and S. M. Reimann (Nanometer Structure Consortium, nmC@LU), Phys. Rev. B 83, 041101 (2011).
- [85] G.W.Men, J.Y.lin, and H.X.Jiang, Phys. Rev. B, **52**, 8, 5913 (1995)
- [86] E. Kasapoglua, H. Sari, M. Bursal, I. Sökmenb, Physica E, **16**, 237 (2003)
- [87] S. Wu and S. Tomic, J. Appl. Phys. **112**, 033715 (2012).
- [88] S. A. Emedocles, M. G. Bawendi, Science **278** 19. 5346 (1997).
- [89] K. Aly-Kham and N. T. Lloyd, SIAM. J. SCI. COMPUT, **26**, 4, 1214 (2005).
- [90] D. J. Griffiths, Introduction to quantum mechanics, Pearson Prentice Hall, London, 2nd ed. (2005).
- [91] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, Numerical Recipes in C (2Nd Ed.): The Art of Scientific Computing (Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1992), ISBN 0-521-43108-5.