



# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

INSTITUTO DE INGENIERÍA

MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA

***“ESTUDIO DE LA ABSORCIÓN DE FOTONES EN PUNTOS CUÁNTICOS DE CdS/CdTe”***

***(Aplicación en celdas solares fotovoltaicas)***

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

***DOCTOR EN CIENCIAS***

PRESENTA:

***FRANCISCO JAVIER GUAYANTE SANTACRUZ***

DIRECTOR DE TESIS:

***DR. CARLOS VILLA ANGULO***

*Mexicali, B. C.*

*Junio del 2018*

*Dedicatoria*

### *Agradecimientos*

Al Doctor Carlos Villa Angulo por haberme dado la oportunidad de poder ver al mundo desde una perspectiva completamente diferente. Por demostrar y compartir conmigo y los demás su pasión por la ciencia.

A la Universidad Autónoma de Baja California y al Instituto de Ingeniería, así como a sus cuerpos académicos, por acogerme y brindarme un espacio y las facilidades para el desarrollo de este proyecto.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo económico que me brindaron durante estos cuatro años, lo cual me permitió completar el proceso doctorado.

## Contenido

Capítulo I: Introducción .....	6
Objetivos.....	7
Objetivos Específicos .....	7
Descripción de la tesis .....	9
Antecedentes.....	10
Mecánica Cuántica.....	12
Valencia y Estructuras Cristalinas .....	14
Teoría de Bandas .....	16
Materiales tipo P y tipo N .....	20
Justificación.....	23
Nivel de Fermi .....	24
Densidad de Estados .....	25
Hetero-estructuras .....	25
Relación de Planck.....	28
Capítulo II: Hetero-estructuras de baja dimensión.....	33
Pozo Cuántico .....	35
Hilos Cuánticos.....	36
Puntos Cuánticos.....	36
Capítulo III: Solución de la Ecuación de Schrödinger .....	38
Pozo Cuántico Infinito .....	40
Pozo Cuántico Finito .....	44
Región I.....	46
Región II.....	48

Región III .....	49
Punto Cuántico Esférico .....	55
Ecuación angular .....	58
Ecuación azimutal .....	59
Ecuación polar .....	60
Momento angular .....	65
Capítulo IV: Coeficiente de Absorción .....	70
Densidad de Estados para un Punto Cuántico .....	74
Densidad de estados efectiva .....	76
Capítulo V: Conclusiones y trabajo futuro .....	78
Referencias .....	79
Índice de ilustraciones .....	82
Índice de tablas .....	84

## Capítulo I: Introducción

En el régimen dimensional nanométrico de los materiales las propiedades de estos son regidas por principios de mecánica cuántica, lo que ha originado una nueva orientación de análisis y diseño. Esta nueva orientación ha llevado a encontrar excelentes oportunidades en el desempeño fotoeléctrico y fototérmico de los materiales.

Dispositivos fotónicos y optoelectrónicos dedicados a la conversión de energía solar a energía eléctrica tales como detectores y celdas solares, son actualmente fabricados con materiales hetero-estructurados de baja dimensión con confinamiento en una, dos o tres dimensiones. Los efectos cuánticos dominan el comportamiento de la hetero-estructura cuando las dimensiones alcanzan el orden de los nanómetros. Hetero-uniones de materiales semiconductores tales como GaAs/InGaAs, CdS/CdTe y GaSb/AlSb se han utilizado para la fabricación de dichos dispositivos. En especial la hetero-unión CdS/CdTe es considerada ideal para este propósito debido a que el semiconductor CdS tipo n con una banda prohibida de 2.52 eV es un excelente material ventana que permite a gran parte del espectro solar alcanzar la capa activa de la estructura absorbente. De igual manera, el semiconductor CdTe tipo p con una banda prohibida directa de 1.43 eV es un material ideal para fabricar las capas activas de absorción

## Objetivos

El objetivo general de este trabajo es estudiar la absorción de fotones en hetero-estructuras de CdS/CdTe de baja dimensión con enfoque en el desarrollo celdas solares fotovoltaicas. Considerando específicamente puntos cuánticos para formar películas nanoestructuradas multicapa y estudiar la dependencia del coeficiente de absorción de fotones ( $\alpha$ ) con el tamaño de la estructura de CdS/CdTe en dichas estructuras. De la misma manera estudiar el efecto de la integración de los puntos cuánticos en el cálculo de los parámetros fundamentales de diseño de dispositivos de baja dimensión. Para dicho estudio, los parámetros de diseño a considerar son los niveles de energía en los puntos cuánticos, la posición del nivel de Fermi, el valor efectivo de la banda prohibida, la longitud de onda de transición efectiva, la posición de los niveles quasi-Fermi y el coeficiente de absorción de fotones.

### Objetivos Específicos

Para el logro del objetivo general de este trabajo se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Estudiar la absorción de fotones en hetero-estructuras de CdS/CdTe confinadas en una sola dimensión (Pozos cuánticos).
- Desarrollar el modelado matemático de los fenómenos de absorción de fotones en hetero-estructuras de CdS/CdTe confinadas en dos dimensiones y tres dimensiones.
- Realizar un estudio comparativo de la absorción de fotones entre los absorbentes propuestos utilizando diferentes criterios de selección de momento.
- Definir el dimensionamiento óptimo de los absorbentes propuestos, para obtener un máximo de absorción de fotones basado en el espectro de irradiación solar.
- Estudiar el efecto de la integración de los nano-cable y nano-puntos en el cálculo de los siguientes parámetros fundamentales de diseño de dispositivos fotónicos:
  - Niveles estáticos de energía las películas delgadas cuando se integran cables y puntos cuánticos.
  - Posición del nivel de Fermi
  - Banda prohibida efectiva

- Longitud de onda de transición efectiva
  - Posición de los niveles quasi-Fermi
  - Coeficiente de absorción de fotones
- Desarrollar una base teórica para el diseño de celdas solares fotovoltaicas con base a películas delgadas con nano-cales y nano-puntos de CdS/CdTe confinadas en dos y tres dimensiones

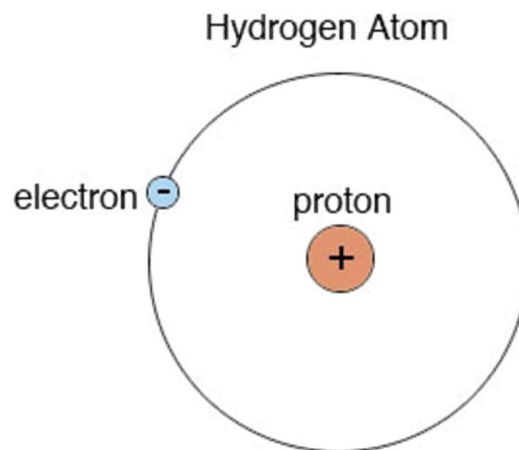
## Descripción de la tesis

En este trabajo se presenta el análisis teórico necesario para el estudio de un punto cuántico y sus interacciones eléctricas y ópticas. Para realizar este análisis se utilizarán principios de física cuántica y de semiconductores. Se iniciará con el entendimiento de los fenómenos y procesos foto-ópticos y fototérmicos en las capas activas de absorción. Después se abordará en la obtención de los niveles de Energía para estas estructuras mediante el desarrollo y soluciones de la ecuación de Schrödinger para películas delgadas y pozos cuánticos, esto con el fin de realizar una comparación entre ambos problemas y facilitar la comprensión del último. Posteriormente se discutirá sobre la importancia de la geometría y dimensiones de la estructura al controlar sus propiedades. Para terminar se emplearán las técnicas presentadas para determinar las propiedades de absorción de un punto cuántico de CdS/CdTe, analizar los resultados y motivar el trabajo a futuro.

## Antecedentes

Una parte importante en el diseño y fabricación de dispositivos fotónicos es la estrecha relación existente entre la electricidad y la luz. Estas interacciones dependen principalmente de las propiedades físicas de los materiales. Siendo más específicos se habla de la física cuántica, cuyo estudio y aplicación en la rama de los semiconductores ha permitido que estos tengan un desarrollo impresionante en los últimos años.

El primer acercamiento para entender esta compleja relación entre la electricidad, la luz y la física cuántica es entender al átomo, Ilustración 1:



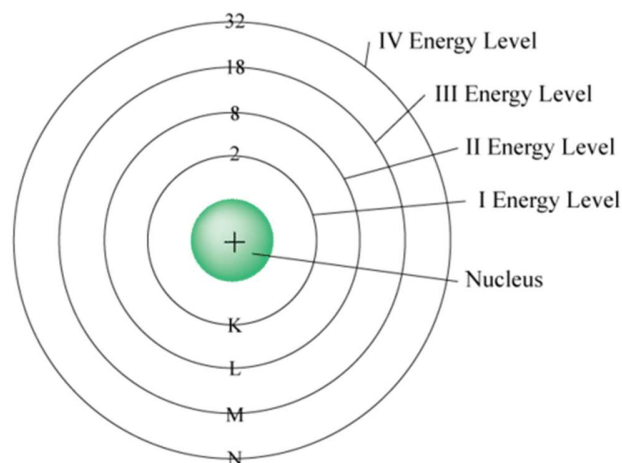
*Ilustración 1: Modelo atómico de Hidrógeno. El primer elemento de la tabla periódica es la estructura atómica más básica.*

El átomo se compone de un núcleo que a su vez está compuesto de partículas llamadas protones y neutrones, este núcleo tiene una carga positiva gracias a la presencia de los protones. En la naturaleza debe existir un equilibrio, en los átomos, este equilibrio es provisto por la presencia de partículas con carga negativa que orbitan alrededor del núcleo, estas partículas son conocidas como electrones.

Este modelo, que puede considerarse como una analogía del Sistema Solar fue propuesto por Ernest Rutherford en 1911 después de haber desarrollado su famoso experimento de “La lámina de oro”, no explica lo que realmente ocurre de forma precisa.

Rutherford hacía mención sobre una fuerza “centrífuga” ejercida por el núcleo que mantenía a los electrones en órbita con respecto a este, lo que implica que los electrones llevan una aceleración al desplazarse a lo largo de una órbita que a su vez provocaría que estos emitieran una radiación de forma constante lo que traería como consecuencia que estas órbitas colapsaran sobre el mismo núcleo, cosa que no ocurre con los átomos pues sus “órbitas” se consideran estables a pesar de cualquier condición presente [1].

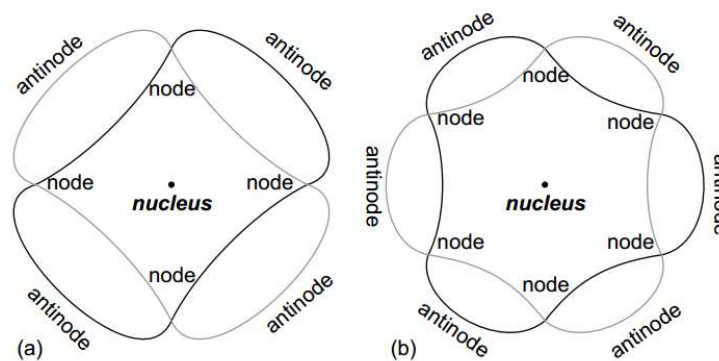
Unos meses después de que Rutherford presentara sus resultados, Niels Bohr, en 1912 llegó a la conclusión de que cada electrón tiene una cantidad de energía específica y que los orbitales que se encuentran alrededor del núcleo se encuentran cuantizados, es decir, los electrones se encuentran restringidos a ciertos valores discretos de energía, Ilustración 2.



*Ilustración 2: Modelo atómico de Bohr.*

A pesar de que el trabajo de Bohr trajera consigo la idea de que los electrones se encontraban en estados cuantizados alrededor del núcleo no explicaba la razón de este comportamiento. Aproximadamente diez años más tarde llegaría Louis de Broglie para responder esta cuestión

De Broglie propuso que los electrones a pesar de considerados como partículas, su comportamiento puede analizarse como si se tratase de ondas estacionarias.



*Ilustración 3: Los electrones "orbitan" alrededor del núcleo como ondas estacionarias. a) Se tienen dos ciclos por órbita y b) 3 Ciclos por órbita*

Para explicar el concepto de una onda estacionaria vale la pena revisar la siguiente definición: La forma en la que una onda puede acomodarse alrededor del núcleo y que tenga sentido es solo si la longitud de onda se ajusta a la "circunferencia" una cantidad entera de veces, Ilustración 3. Estas ondas estacionarias, funcionan como estados o posiciones que corresponden a los niveles de energía de los electrones [2].

Esta explicación le valió a De Broglie un premio Nobel en Física y estableció las bases del concepto de la dualidad de la partícula que de forma breve dice que si la luz se puede comportar como una partícula entonces una partícula puede exhibir propiedades propias de una onda.

Años más tarde, las conclusiones a las que había llegado De Broglie fueron complementadas por los esfuerzos de los físicos Werner Heisenberg y Erwin Schrödinger, quienes de forma individual ayudaron a sentar las bases de lo que se conoce como Mecánica Cuántica.

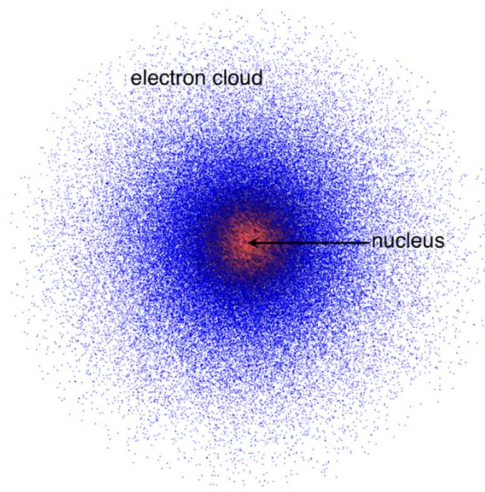
## Mecánica Cuántica

Entre los principales conceptos que introdujo la mecánica cuántica y que le dieron un giro característico al reino de las partículas subatómicas fue la incertidumbre. De acuerdo con la

teoría cuántica, es imposible determinar la posición y momento exacto de una partícula al mismo tiempo.

Este principio de incertidumbre dice que al tratar de medir de forma precisa la posición de un electrón, esto interfiere directamente con su momento por lo cual no se sabrá qué valor tenía antes de ser medido y viceversa. Esto implica que no es posible conocer la posición y momento precisos de una partícula, sino que debe existir un balance entre estas de tal forma que la incertidumbre presente no sea menor de un valor mínimo determinado.

Este valor de incertidumbre mínimo representado tanto por Heisenberg como por Schrödinger habla de cómo los orbitales de los electrones no existen como fragmentos de materia, de hecho, ni siquiera el considerarlos como una onda estacionaria no es correcto por completo. Puede decirse que los orbitales son nubes de distribuciones de probabilidad (Ilustración 4), donde los electrones se encuentran dispersos a lo largo de un rango de posiciones y momentos alrededor del núcleo [3].



*Ilustración 4: Representación visual de un átomo donde la posición del electrón se representa como una nube de probabilidades.*

Por lo tanto, se puede decir que el comportamiento cuantizado de los electrones no depende realmente de valores definidos en cuanto a posición y momento respecta. Sino realmente depende de otras propiedades discretas conocidas como números cuánticos.

Cada electrón en un átomo es descrito por cuatro números cuánticos, los cuales serán descritos brevemente:

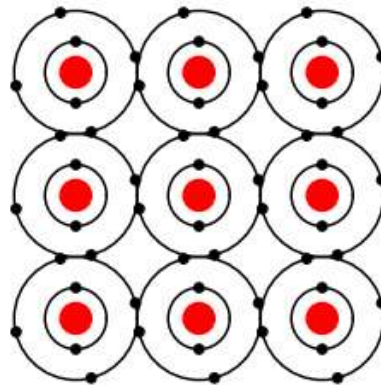
- **Principal:** Es el nivel energético en el que se puede encontrar a los electrones y también se utiliza para indicar la distancia entre el electrón y el núcleo. Se representa por la letra **n**, donde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , es decir, cualquier número positivo entero. Además, es inversamente proporcional a la probabilidad de que el electrón se encuentre en ese nivel y directamente proporcional a la energía requerida por el electrón para encontrarse en ese nivel. Es decir, para un número  $n=1$ , la probabilidad de que un electrón se encuentre en ese nivel es mayor que para cualquier nivel subsecuente, sin embargo, la energía que ocupa ese electrón es la mínima.
- **Momento angular:** Describe la forma geométrica del orbital y los subniveles que se encuentran dentro de cada nivel. Representado por la letra **l**, este número depende del número cuántico principal tomando valores desde  **$l=0$**  hasta  **$l=n-1$** .
- **Magnético:** Indican la dirección de los subniveles en el espacio. Se representa por la letra **m**, donde **m** puede tomar valores desde  **$-l$**  hasta  **$l$** .
- **Spin:** Es el sentido de rotación del electrón con respecto a su propio eje mientras se mueve dentro de un orbital. Únicamente puede tomar dos valores  **$s = 1/2$**  o  **$s = -1/2$** .

Estos números describen el comportamiento de un electrón alrededor de un núcleo. Como se mencionó anteriormente, estos estados son cuantizados y a pesar de ser una referencia en el estudio de los átomos, son de gran interés en el estudio de las estructuras de baja dimensión.

## Valencia y Estructuras Cristalinas

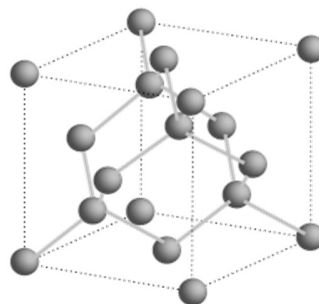
Continuando con la estructura del átomo, a los electrones que se encuentran en nivel de energía más alejado del núcleo se les conoce como electrones de valencia y estos son los medios por los cuales se da la interacción química entre átomos. Un ejemplo de estas

interacciones es cuando se forman enlaces entre átomos, estos últimos siempre buscan la forma en que la cantidad de electrones presentes en su nivel de valencia sean ocho, esto lo logra al ceder o aceptar electrones. Cuando un átomo comparte electrones con otro átomo para completar el nivel de valencia ocurre un enlace covalente, esto da como resultado la formación de moléculas, Ilustración 5.



*Ilustración 5: Algunos átomos comparten sus electrones para completar sus niveles de valencia.:*

Específicamente hablando de materiales inorgánicos, la manera en que estos se forman es a través de átomos ordenados por medio de arreglos con estructura periódica y simetría definida y son conocidos como cristales, el Silicio es el ejemplo muy común de una estructura de este tipo, Ilustración 6. En esta estructura rígida, los electrones de valencia se mueven libremente a través de la red cristalina lo que provoca la conducción de electricidad.



*Ilustración 6: Red cristalina de Silicio.*

En los semiconductores, una vez que se libera un electrón, se genera un espacio vacío con carga positiva que toma el nombre de **huevo**, se dice que los huecos viajan en sentido contrario que los electrones, además los electrones pueden ocupar los huecos dejados por otros electrones contribuyendo al proceso de conducción eléctrica. Los semiconductores se construyen a partir de cristales.

### Teoría de Bandas

Como se mencionó anteriormente, los números cuánticos describen los estados permitidos que pueden tomar los electrones en un átomo. Esto no significa que los electrones no puedan cambiar de estado, es decir, que un electrón se mueva de un nivel a otro. Este salto requiere de transferencia de energía. Si se considera que entre más cerca del núcleo el electrón requiere menos energía, dar un salto de un nivel inferior a un nivel superior implica que el electrón gane la suficiente energía de una fuente externa para realizar el salto. De forma contraria para que se realice un salto de un nivel superior a un nivel inferior el electrón necesita perder energía, esta energía puede manifestarse como luz, sonido o calor.

Cuando dos átomos iguales se juntan, sus niveles de energía son iguales y se consideran como niveles de energía degenerados, estos niveles, debido a la interacción atómica se mezclan creando dos niveles de energía diferentes. Entonces si una cantidad muy grande de átomos se juntan hasta que están lo suficientemente cerca, a una distancia conocida como la distancia de equilibrio interatómico, se crean múltiples niveles de energía con una separación tan pequeña entre ellos que se consideran como una banda continua de estados de energía permitidos. Las bandas de energía más altas del material son la banda de valencia y la banda de conducción, Ilustración 7.

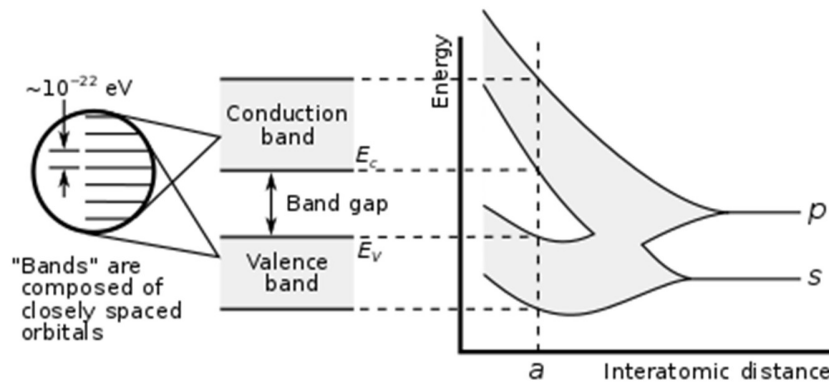


Ilustración 7: Formación de bandas continuas de energía.

Estas bandas continuas se encuentran separadas por un rango de energías que ningún electrón puede ocupar, esta zona se conoce como **banda prohibida o band gap**  $E_g$ . El band gap es considerada como la energía que tiene que ganar un electrón para brincar de la banda de valencia a la banda de conducción y considerarse como un electrón libre la cual consiste como la diferencia de energía entre la energía máxima de la banda de valencia  $E_v$  y la energía mínima de la banda de conducción  $E_c$  (Ilustración 8).

$$E_g = E_c - E_v$$

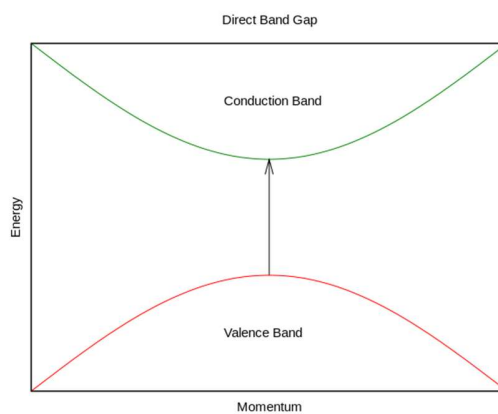


Ilustración 8: Representación gráfica de las bandas de energía.

Esta energía se puede medir en electrón-volt (eV), el cual representa la cantidad de energía ganada o perdida por la carga de un solo electrón al moverse a través de una diferencia de potencial eléctrica de un volt (V). Es decir, 1V, el cual es equivalente a 1 joule por coulomb (1 J/C), multiplicado por la carga elemental de un electrón ( $1.60218 \times 10^{-19} C$ ).

$$1eV = 1 \frac{J}{C} \cdot 1.60218 \times 10^{-19} C = 1.60218 \times 10^{-19} J$$

$$1eV = 1.60218 \times 10^{-19} J$$

El ancho del band gap representa la capacidad de que los electrones viajen libremente. Existen tres tipos diferentes de materiales de acuerdo con las características de esta banda prohibida:

- **Aislantes:** Son materiales que poseen un band gap muy grande, generalmente mayor a los 9 eV. Los enlaces covalentes son difíciles de romper al aplicar calor o en la presencia de campos eléctricos. Ya que el electrón requiere mucha energía para atravesar esta zona, no hay conducción de corriente eléctrica.
- **Conductores:** La banda de conducción y de valencia están parcialmente llenas de electrones o están sobre encimadas, la energía para brincar de una banda a otra es casi nula por lo que siempre existen cargas listas para la conducción eléctrica. Los metales son excelentes conductores.
- **Semiconductores:** Materiales que cuentan con un band gap moderado. Al ser sujetos a vibraciones térmicas o campos eléctricos, los electrones en la banda de valencia, así como los huecos en la banda de conducción pueden ganar la suficiente energía cinética para atravesar la banda prohibida y se presente conducción eléctrica.



Ilustración 9: Diagramas de bandas de energía.

Observando la Ilustración 9, a la izquierda se encuentra un material aislante con una banda prohibida lo suficientemente grande entre ambas bandas. Al centro un semiconductor con un band gap lo suficientemente pequeño para que la excitación de electrones pueda permitir el salto. A la derecha un conductor, donde las bandas están sobrepuestas una sobre la otra lo que facilita la conducción [4].

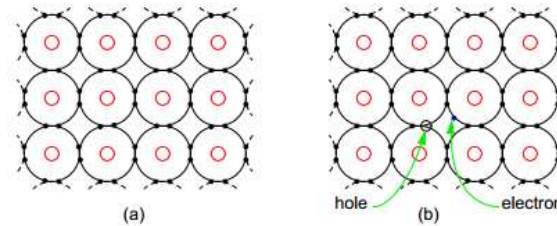
Como se vio anteriormente, un semiconductor no es un buen aislante y mucho menos un buen conductor. Pero la posibilidad de manipular estas características es lo que los hace tan atractivos en sus aplicaciones diarias.

En los materiales semiconductores como se puede observar en la Ilustración 7 e Ilustración 9, la banda de valencia se representa como la banda de abajo. Esta banda se encuentra llena de electrones. Como su nombre lo indica, esta región se encuentra conformada por los estados de los electrones de valencia compartidos por los átomos agrupados en una red cristalina gracias a los enlaces covalentes. En la parte superior, más allá de la banda prohibida se encuentra la banda de conducción, la cual se encuentra libre de electrones. En esta región se encuentran los estados de electrones excitados los cuales son ocupados por electrones que fueron promovidos de sus estados fijos por los enlaces covalentes en estados extendidos en el cuerpo del cristal [5]. Estos electrones ya fueron afectados por un campo eléctrico y son los que contribuyen al flujo de corriente.

Dentro de este tipo de materiales se encuentra a dos tipos: Los intrínsecos (materiales semiconductores puros), los cuales deben de contar con máximo un átomo de impurezas en 10 000 000 000 de átomos.

Al tratarse un material puro los átomos se encuentran ordenados en una red cristalina compartiendo sus electrones de valencia, los cuales no son libres de moverse a lo largo de la red. De vez en cuando, la energía térmica puede liberar a un electrón dejando un hueco en el lugar vacío, como se mencionó anteriormente, los huecos también son libres de moverse. Cuando un electrón ocupa un hueco ocurre un fenómeno conocido como **recombinación**.

En presencia de un campo eléctrico, los electrones y huecos se moverán en direcciones opuestas, al incrementar la temperatura incrementaría el número de electrones y huecos libres. La cantidad de electrones y huecos en un material intrínseco es igual pero la movilidad no es la misma para ambas partículas, Ilustración 10.



*Ilustración 10: En un semiconductor intrínseco a bajas temperaturas no hay conducción eléctrica. Al aplicar un incremento de temperatura se liberan electrones pero no los suficientes como para ser considerado un buen conductor.*

### Materiales tipo P y tipo N

Es difícil encontrar un semiconductor que no contenga ninguna impureza y realmente no tienen muchas aplicaciones.

Por otra parte, otro tipo de materiales semiconductores son los materiales extrínsecos, los cuales contienen impurezas, tienen mejores propiedades conductivas. Llevar a un material a un grado de impureza deseado requiere un proceso llamado dopado.

Este proceso de dopado permite tener control sobre el tipo de portadores en mayoría del material. Es decir, al dopar un material semiconductor con un material como Fósforo, es posible incrementar el número de portadores negativos dentro de la red cristalina. Este tipo de materiales “donadores” de electrones son conocidos como donadores tipo N y se pueden encontrar en la tabla periódica en el grupo VA; el fósforo, el arsénico y el galio son materiales donadores que se utilizan para dopar el silicio.

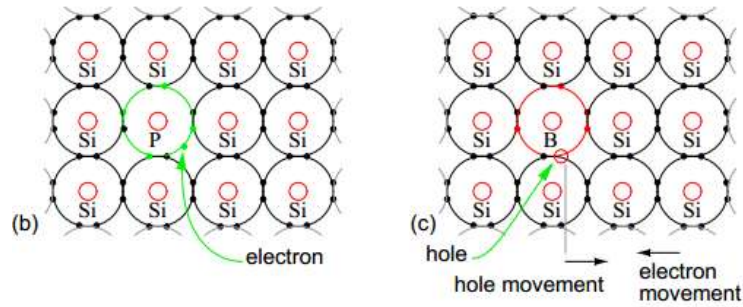


Ilustración 11: b) Un material donador tipo N, como el fósforo, al ser introducido a un material intrínseco como el Silicio crea electrones libres. c) Un material aceptor tipo P como el boro, al estar en contacto con el silicio crea un hueco.

En la Ilustración 11, en la figura b) un material donador tipo N, como el fósforo, al ser introducido a un material intrínseco como el Silicio crea electrones libres. c) Un material aceptor tipo P como el boro, al estar en contacto con el silicio crea un hueco.

También se puede incrementar el número de portadores positivos (huecos) por medio de materiales tipo P llamado aceptores. Los materiales tipo P pertenecen al grupo IIIA, al que pertenecen el boro, aluminio, galio e indio.

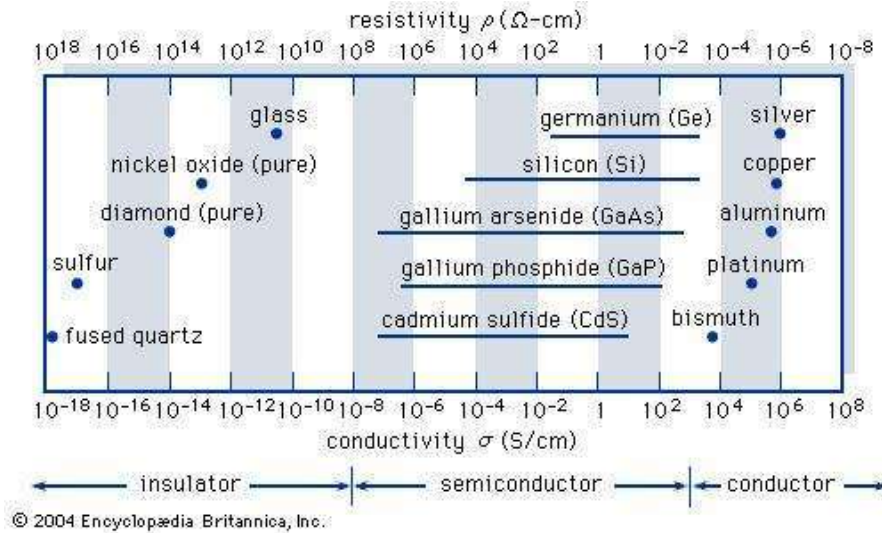


Ilustración 12: Entre los materiales semiconductores se encuentran el silicio y el germanio [6].

En la Ilustración 12 se puede encontrar que materiales pertenecen a qué tipo de acuerdo con sus propiedades para conducir. Entre los semiconductores elementales se encuentran el silicio (SI), el germanio (Ge) y el estaño (Sn) los cuales pertenecen al grupo

IV de la tabla periódica. También es posible encontrar semiconductores compuestos de dos o más elementos de estos mismos grupos. Hay materiales binarios como el Arsenuro de Galio (GaAs), materiales ternarios como el Indio-Galio-Arsénico (InGaAs) e incluso materiales cuaternarios como Aluminio-Galio-Arsénico-Indio (AlGaAsIn), en la Tabla 1 se pueden observar los grupos y elementos empleados en la fabricación de semiconductores.

	Columna				
Periodo	II	III	IV	V	VI
2		Boro (B)	Carbón (C)	Nitrógeno (N)	
3	Magnesio (Mg)	Aluminio (Al)	Silicio (Si)	Fósforo (P)	Sulfuro (S)
4	Zinc (Zn)	Galio (Ga)	Germanio (Ge)	Arsénico (As)	Selenio (Se)
5	Cadmio (Cd)	Indio (In)	Estaño (Sn)	Antimonio (Sb)	Teluro (Te)
6	Mercurio (Hg)		Plomo (Pb)		

*Tabla 1: Fragmento de la tabla periódica*

El silicio es el semiconductor más utilizado en la industria electrónica debido a que es el segundo elemento de la tabla periódica más abundante en el planeta y es sumamente económico comparado con el resto de los materiales semiconductores.

Un semiconductor con exceso de portadores negativos es llamado semiconductor tipo N y uno con exceso de portadores positivos es llamado semiconductor tipo P. Ahora cuando un semiconductor fabricado a partir de un material tipo p de un lado y tipo n del otro. El

material tipo p tiene una mayoría de portadores con carga positiva los cuales son libres de moverse en la red. Mientras que el material tipo N tiene una cantidad mayor de electrones. En la unión de ambos materiales, hay una zona difusa en la que los electrones del material tipo N se combinan con los huecos del material tipo P, esto provoca que la región del material tipo p cerca de la unión toma una carga negativa por los electrones atraídos que a su vez deja una mayoría de huecos en la región tipo n cerca de la unión tomando una carga positiva.

La capa que aparece en medio de estas cargas ha sido despojada de portadores mayoritarios y se le conoce como zona de depleción. Esta zona es un material semiconductor intrínseco no conductiva, llegando a ser considerada como casi un aislante, Ilustración 13.

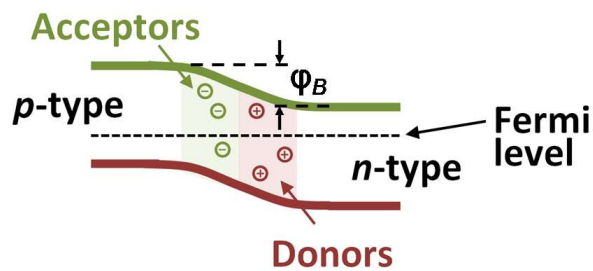


Ilustración 13: Zona de depleción.

Esta separación de cargas presente en la unión PN se considera como una barrera de potencial, la cual debe ser vencida por medio de una fuente energética externa para que exista conducción en la unión. La magnitud de esta barrera de potencial depende del material.

## Justificación

Los semiconductores en el momento de su introducción en la década de los 50s se convirtieron en una parte fundamental de la industria reemplazando a los tubos de vacío. Principalmente por la reducción de tamaño, consumo de energía y costo con respecto a los dispositivos que le precedían, además de mayor durabilidad y confiabilidad. Estos dispositivos revolucionaron la industria de las telecomunicaciones, computación y almacenamiento

El diodo es el dispositivo semiconductor fundamental, su estructura consiste en una unión tipo PN y entre sus aplicaciones se encuentra la rectificación, la cual consiste en la conversión de corriente alterna a corriente continua. Estructuras menos sencillas que las del diodo tienen múltiples aplicaciones, entre ellas se encuentra la fabricación de celdas solares, dispositivos que convierten la energía luminosa en energía eléctrica y los diodos emisores de luz (LED) que como su nombre lo dice emiten luz.

### Nivel de Fermi

Un concepto importante para poder entender las propiedades eléctricas de ciertos materiales es el nivel de Fermi. De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, Dos electrones no pueden ocupar exactamente el mismo estado energético al mismo tiempo, debido a este principio los electrones están posicionados en diferentes niveles energéticos. Esto implica que, a bajas temperaturas, todos los estados disponibles en el cristal hasta un determinado nivel energético estarán ocupados por dos electrones. Este nivel energético se conoce como nivel de Fermi.

La probabilidad de que los electrones ocupen cierto nivel de energía a cierta temperatura es proporcionado por la función de distribución de Fermi-Dirac [7]:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \quad (0.1)$$

Donde  $k$  es la constante Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23}$  Joules sobre Kelvin),  $T$  es la temperatura en grados Kelvin,  $E_F$  es el nivel de Fermi de un material determinado y  $E$  es el estado energético para el cual se quiere calcular la probabilidad. De acuerdo con la ecuación, conforme incrementa la temperatura, será más común encontrar a los electrones en los niveles más altos. Cuando la temperatura se encuentra cercano al cero absoluto, la probabilidad es 1, es decir, casi todos los electrones se encuentran bajo el nivel de Fermi (Ilustración 14). A temperaturas altas, los niveles de energía de la banda de conducción tienen una mayor probabilidad de estar ocupados mientras que la banda de valencia tendería a estar vacía.

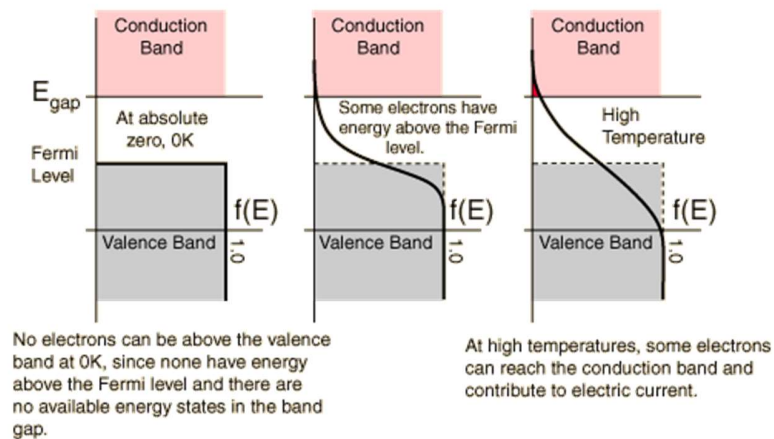


Ilustración 14: Niveles de Fermi

En los materiales semiconductores, el nivel de Fermi se encuentra en el band gap y la banda de valencia se encuentra llena de electrones. Al incrementar la temperatura estos materiales conducen, ya que ahora se pueden encontrar más electrones excitados en los niveles más altos.

### Densidad de Estados

Una parte importante en los procesos de análisis de los dispositivos semiconductores es el uso de estadística para describir las probabilidades de que un conjunto de estados electrónicos se encuentre disponibles u ocupados. Estos estados incluyen estados locales de impurezas, así como estados deslocalizados de conducción o de valencia. Los estados en las bandas y su respectiva dependencia de la energía pueden ser descritos por la densidad de estados [8], es decir, representa la densidad de energías disponibles por unidad de volumen.

### Hetero-estructuras

Se considera como hetero-estructura a la unión de materiales semiconductores distintos, de manera que la composición química del sistema en conjunto cambie con la posición. La forma más simple de hetero-estructura es la unión de dos semiconductores diferentes en lo que es conocido como una hetero-unión. La mayoría de los dispositivos contienen

combinaciones de múltiples hetero-uniones, por lo que el uso del término hetero-estructura es más conveniente [9].

Para construir una hetero-estructura se necesita llegar a un equilibrio eléctrico entre ambos semiconductores, generando un flujo de portadores de carga que alinee los niveles de la energía de Fermi de cada uno y que finalmente den lugar a un desalineamiento por parte de las bandas de conducción y de valencia de los semiconductores. Este desalineamiento provoca que la energía de los portadores en la orilla de la banda cambie al momento de pasar a través de la unión por lo que en la mayoría de las veces se presentará una discontinuidad en la banda de conducción y de valencia. Este comportamiento es visible al comparar las energías de ambas bandas con respecto a la posición tal y como se puede ver en la Ilustración 13 e Ilustración 15.

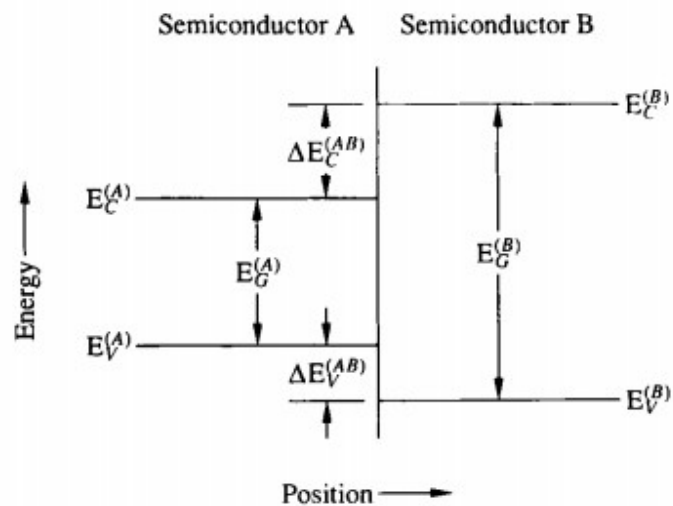


Ilustración 15: Energía de la banda de valencia y conducción de dos semiconductores contra posición.

Un ejemplo de una hetero-estructura es el transistor bipolar (BJT), el cual se compone de un material tipo-p (GaAs) rodeado de dos materiales tipo-n (AlGaAs y GaAs dopado con un material tipo-n), Ilustración 16.

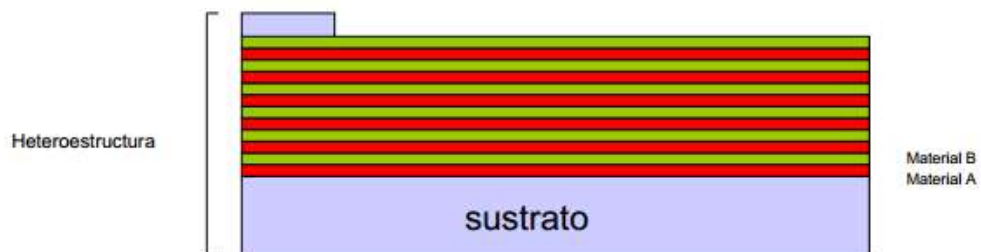


*Ilustración 16: Ejemplo de una hetero-estructura, un transistor bipolar BJT.*

Esta diferencia energética entre band gaps crea una diferencia de energía potencial entre los materiales lo que permite confinar las cargas en el material con el band gap más angosto. Este control sobre los estados y movimiento de los portadores en los semiconductores hace a las hetero-estructuras muy útiles en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos.

Cuando se dan procesos electrónicos en estructuras de dimensiones en el orden de los centímetros o incluso micrones, los fenómenos pueden ser descritos en forma continua, es decir, se aplica la mecánica clásica. Cuando las dimensiones físicas del sistema se vuelven mucho más pequeñas, estos fenómenos son cuantizables, por lo cual la mecánica cuántica, tal y como se mencionó anteriormente toma relevancia.

Los electrones y huecos en estructuras de dimensiones muy pequeñas exhiben propiedades ópticas y de transporte remarcables, las cuales pueden ser controladas al manipular las dimensiones de la estructura (Ilustración 17).



*Ilustración 17: Hetero-estructura.*

## Relación de Planck

Teniendo una noción básica de una hetero-estructura ahora revisemos la relación entre la electricidad y la luz y su aplicación en dispositivos emisores y absorbedores de luz.

Como es bien conocido, la electrónica estudia y emplea sistemas cuyo funcionamiento se basa en la conducción y el control del flujo de los electrones u otras partículas cargadas eléctricamente.

Por otra parte, la fotónica estudia la generación, control y detección de fotones, en particular en el espectro visible e infrarrojo cercano, pero que también incluye ultravioleta, infrarrojo de onda larga e infrarrojo lejano.

Retomando el concepto del modelo atómico de Bohr, donde se mencionó que el cambio de estado energético de un electrón involucraba ganar o perder energía. Esta energía no solamente se presenta en forma de calor o sonido, sino también en forma de luz. Es decir, un electrón gana la energía requerida para saltar a un nivel energético superior energía al absorber luz. Si el electrón salta de un nivel superior a uno inferior debe perder cierta energía... es decir emitiendo luz (Ilustración 18). Ya sea al absorber o emitir luz, esta también se presenta en forma de paquetes discretos llamados fotones y cada fotón tiene una energía definida

Un fotón se define como la cantidad mínima de luz que conserva las propiedades y características de la fuente de origen. Así como el electrón es el elemento básico más pequeño en la electrónica, el fotón es el elemento básico más pequeño en la óptica. El fotón, además tiene una masa invariante cero, y viaja en el vacío con una velocidad constante  $c$ .

A pesar de que el fotón no tiene masa, la relación entre ambas partículas está bien definida gracias al concepto de la dualidad de la partícula. A escalas macroscópicas se puede observar la diferencia entre una partícula y una onda; pero al igual que en muchos aspectos mencionados en este documento, cuando se ve a través de la perspectiva de la mecánica cuántica, las reglas son diferentes. Un electrón, es considerado como una partícula, pero un

grupo muy grande de estos moviéndose a una determinada velocidad puede comportarse como una onda con todas las propiedades y atributos que le corresponde, es decir: puede reflejarse, refractarse y difractarse.

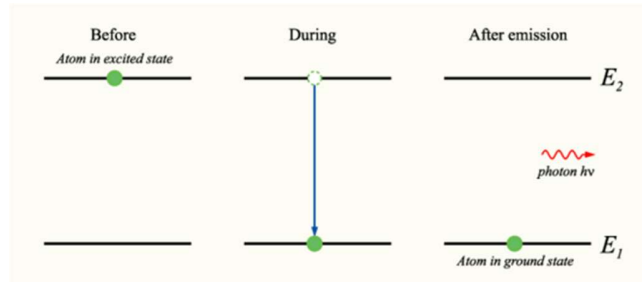


Ilustración 18: Proceso de emisión de un fotón [10].

De la misma forma, un rayo de luz puede, en determinadas circunstancias, comportarse como un chorro de partículas con una cantidad de movimiento bien definida.

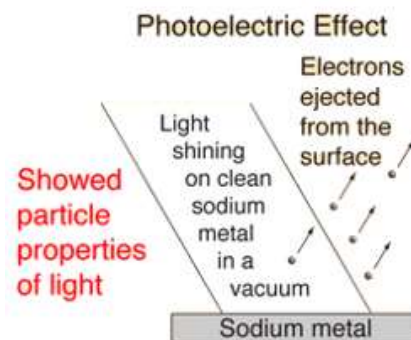


Ilustración 19: Efecto fotoeléctrico.

Según De Broglie, cada partícula en movimiento se asocia a una onda. Es decir: una partícula de masa  $m$  que se mueva a una velocidad  $v$  puede, en condiciones experimentales adecuadas, presentarse y comportarse como una onda de longitud de onda,  $\lambda$ .

$$mv = p = \frac{h}{\lambda} \quad (0.2)$$

Donde  $h$  es la constante de Planck, conocida también como la constante de acción cuántica y su valor es  $h = 4.135 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$

Evidencia de la dualidad de la partícula puede observarse cuando un haz de luz incide sobre una superficie metálica, como consecuencia esta libera electrones, este fenómeno es conocido como efecto fotoeléctrico (Ilustración 19). La energía de los electrones liberados era proporcional a la frecuencia de la luz incidente. Por lo cual se llegó a la conclusión de que esta fuerza u objeto que estaba presente en la luz tenía una energía proporcional a la frecuencia. Otro dato importante es que esta energía era independiente de la energía total de la iluminación por lo cual quedó demostrado que había partículas en el haz de luz que le dio esa energía al electrón [11]. La energía de estos electrones depende de la frecuencia de la luz incidente y de las propiedades del metal.

Recordemos que la energía de los electrones viene dada por valores discretos, lo que significa que la energía de un fotón también viene en paquetes discretos de energía proporcionales a la frecuencia. Esto concuerda con la relación de Planck:

$$\begin{aligned} E &= h\nu \\ o \\ E &= \frac{hc}{\lambda} \end{aligned} \tag{0.3}$$

Considerando que la velocidad de la luz es constante, la ecuación (0.3) puede escribirse como:

$$E = \frac{1.24}{\lambda} \tag{0.4}$$

Donde la energía ( $E$ ) se mide en eV para una longitud de onda dada en micrómetros ( $\mu\text{m}$ ).

Entonces tanto los campos electromagnéticos y fotones son capaces de excitar a un electrón y en la transición de una banda a otra se emite o genera energía dependiendo del tipo de salto. Esta energía se presenta en forma de luz, en el caso de la emisión, esta solamente se da en ciertas frecuencias discretas características de cada átomo y molécula. Correspondientemente, al hablar de absorción, los átomos absorben solamente un rango limitado de frecuencias y longitudes de onda del espectro electromagnético y reflejan todas las demás [12], estas frecuencias reflejadas son usualmente la luz o color del objeto observado.

El espectro electromagnético es un rango continuo de frecuencias o longitudes de onda de la radiación electromagnética. Este espectro generalmente se divide en regiones de ondas de radio, microondas, radiación infrarroja, luz visible, rayos ultravioletas, rayos x y rayos gamma.

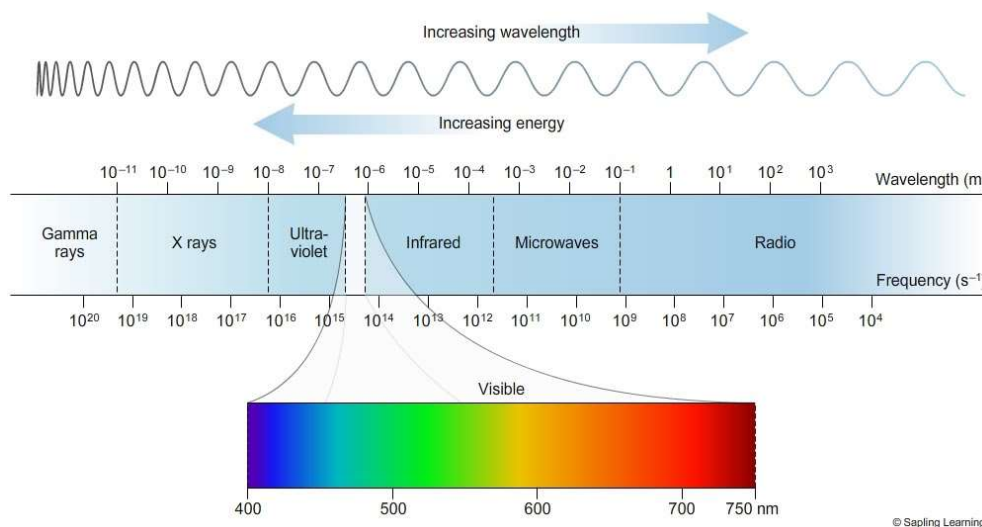


Ilustración 20: Espectro electromagnético [13].

Como se puede observar en la Ilustración 20 y de acuerdo con la relación de Planck, la energía es inversamente proporcional a la longitud de onda. El espectro de luz visible se encuentra entre los 400 y 750 nanómetros; siendo la energía del color azul mayor que la del color rojo, por ejemplo, en el proceso de emisión de luz, si se deseara emitir un fotón de

color azul, cerca de los 400 nm por medio de la relación de Planck, se determina que la energía necesaria para producir este color es necesario generar un fotón con una energía de 3.1eV.

## Capítulo II: Hetero-estructuras de baja dimensión

El uso de hetero-estructuras permite tener control sobre las propiedades ópticas y eléctricas del material; pero cuando una o más dimensiones de un sólido se reducen considerablemente, las características fisicoquímicas del material ya no son las de un material macroscópico. Con la reducción de tamaño, se introducen nuevas y remarcables propiedades eléctricas, mecánicas, químicas, magnéticas y ópticas, Esta estructura se conoce como hetero-estructura o sistema de baja dimensión [14].

Considerando una hetero-estructura donde un material en la cual se concatenan materiales semiconductores con diferentes band gaps si el ancho del material con el band gap más angosto es lo suficientemente pequeño se genera una especie de pozo tanto en la banda de valencia como de conducción: una barrera de potencial que permite confinar a las partículas portadoras, haciendo más fácil el salto entre ambas bandas. Si el ancho del material envuelto se encuentra cerca de la longitud de onda de De Broglie (0.2), en estos pozos se presentan niveles de energía discretos [11].

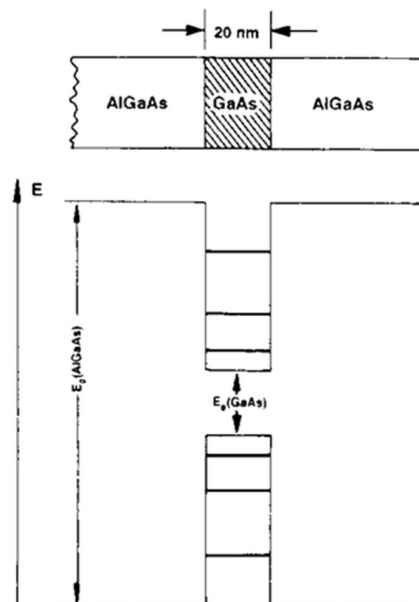


Ilustración 21: Pozo cuántico.

Este fenómeno de confinamiento se conoce como pozo cuántico y de la misma forma que en el análisis del átomo, materiales de estas dimensiones exhiben propiedades cuánticas. Se ha demostrado que estas estructuras de baja dimensión ofrecen un mayor control sobre las propiedades ópticas y eléctricas del material, en el caso de los emisores de luz consumen menos energía y para los detectores de luz, el rango de absorción puede llegar a ser mucho mayor sin degradarse por efectos de la temperatura, Ilustración 21.

Los pozos cuánticos no son las únicas estructuras de baja dimensión, en general, estas se clasifican de acuerdo con la cantidad de dimensiones reducidas; esta característica dimensional se refiere a los grados de libertad del momento de la partícula. Tomando en cuenta la dimensionalidad del material se determinaron las siguientes categorías (Ilustración 22):

- Estructura tridimensional (3D) o estructura burda: No existe la cuantización del movimiento de la partícula, es decir, la partícula es libre de moverse. A pesar de ser un material finito, las dimensiones son tan grandes comparadas con los electrones y átomos que se considera que el material se encuentra confinado en un espacio “infinito”.
- Estructura bidimensional (2D) o pozo cuántico: La partícula se encuentra confinada en solo una dimensión por lo cual la cuantización de su movimiento solo está presente a lo largo de un único eje, es decir, la partícula es libre de moverse únicamente a lo largo de los otros dos ejes.
- Estructura unidimensional (1D) o cable cuántico: La partícula se encuentra confinada en dos dimensiones, la partícula es libre de moverse en solo una dirección.
- Estructura adimensional (0D) o punto cuántico: La cuantización ocurre en las tres dimensiones.

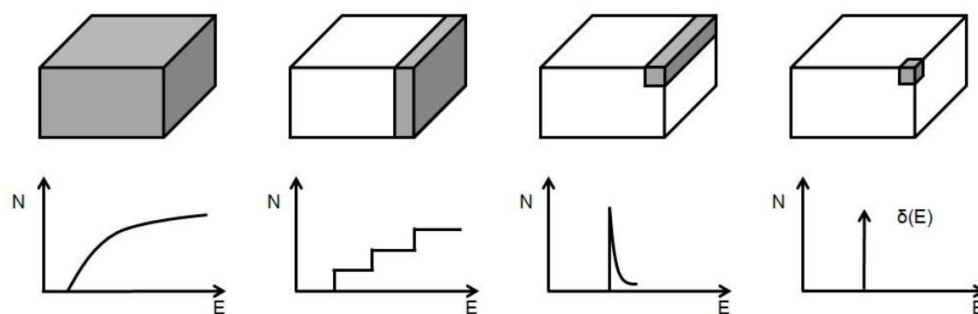


Ilustración 22: Esquemas geométricos de las estructuras de baja dimensión compara contra la energía [15].

### Pozo Cuántico

Un pozo cuántico es una hetero-estructura en la cual una capa delgada, considerada como el pozo se encuentra rodeada por dos capas barreras en los extremos, Ilustración 21. Los electrones y huecos son atraídos por las energías más bajas en el pozo, las cuales hacen más fácil que puedan atravesar la banda prohibida. El pozo, es tan Delgado (generalmente entre 100 Å) que los portadores empiezan a exhibir propiedades de una onda [16].

Los pozos cuánticos están presentes en la mayoría de los dispositivos láser que utilizamos cada día, su aplicación ha creado dispositivos cada vez más eficientes. Los láseres de pozos cuánticos cuentan con la capacidad de variar la longitud de onda con tan solo manipular el ancho del pozo. Además de que proporcionan mayor ganancia por carga lo que trae como beneficio, umbrales de corriente más bajos que los láseres convencionales. Dentro del diseño de un láser de pozo cuántico se puede observar como sus características dependen de la manipulación de la estructura de baja dimensión.

Hablando de celdas fotovoltaicas, la eficiencia de la conversión de energía en un material semiconductor burdo se encuentra limitada por el calentamiento de los portadores fotogenerados en la red cristalina; esto se debe al exceso de fotones con energías más grandes que el band gap óptico lo cual se convierte en dispersión térmica de los portadores. Por esta razón la eficiencia teórica máxima de una celda solar inorgánica sencilla está limitada al 30% [17]. Los niveles energéticos en las estructuras de baja dimensión mitigan la dispersión térmica y permiten controlar el rango de absorción de la luz.

## Hilos Cuánticos

El confinamiento en más de una dimensión convierte a la solución de este sistema en algo mucho más complejo. Sin embargo, en un hilo los efectos cuánticos son más aparentes. Ha sido demostrado que las propiedades físicas de esta estructura pueden ser manipuladas por campos eléctricos o magnéticos externos [18]. Este tipo de estructura es muy popular en la fabricación de transistores y diodos laser [19], estos últimos principalmente ya que es posible obtener umbrales más bajos que con materiales de dimensiones mayores [20].

## Puntos Cuánticos

El confinamiento adicional de cargas provee a estas estructuras con propiedades electrónicas superiores. Sin embargo, producirlos con la calidad requerida para que se manifiesten los beneficios requiere de forma considerable más control sobre el proceso de fabricación que el requerido para un pozo cuántico.

Estas estructuras pueden considerarse como moléculas artificiales, con un band gap y niveles energéticos dependientes del radio. La energía del band gap incrementa con el tamaño del punto cuántico. Cuando un punto cuántico se aproxima al tamaño del radio de Bohr de un excitón, el efecto del confinamiento cuántico se vuelve prominente y los niveles de energía del electrón se consideran como niveles discretos [21].

En celdas solares formadas por estructuras convencionales los fotones con energía menor a los del band gap del semiconductor no son aprovechadas mientras que los fotones con energía son más grandes que el band gap producen portadores calientes y al momento de enfriarse, la energía excesiva se desperdicia como calor. El uso de puntos cuánticos ofrece la alternativa de manipular el band gap con el fin de sintonizarse a la distribución del espectro de la luz solar evitando calentamiento de estos dispositivos.

Además, se ha demostrado que los puntos cuánticos pueden emitir hasta tres electrones por fotón, a diferencia de las celdas solares estándar de Silicio. Teóricamente, esto representa un incremento en la eficiencia de un 20% hasta un 65% [22].

La energía de una partícula en un punto cuántico representa a la energía total de esa partícula, esto debido al confinamiento en tres dimensiones, en contraste con los pozos e hilos, en los cuales los estados energéticos se asocian con un confinamiento transversal [14].

Otra aplicación común de este tipo de sistema es en la investigación biológica. Se han inyectado puntos cuánticos en tejido vivo para usarse como marcadores, estos son excitados utilizando luz con una longitud de onda corta y pueden ser observados al emitir luz fluorescente [23]

## Capítulo III: Solución de la Ecuación de Schrödinger

En la mecánica clásica, para caracterizar el movimiento de una partícula se requiere de dos parámetros: posición y velocidad; la segunda ley de Newton es una ecuación que emplea estas magnitudes para describir el comportamiento. En la mecánica cuántica, recordando el concepto de la incertidumbre, para caracterizar el movimiento de una partícula se emplea la función de onda. Esta función de onda trata de predecir el estado de movimiento de acuerdo con el pasar del tiempo y la respuesta se obtiene a través de una ecuación de movimiento.

En la mecánica cuántica tenemos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)=E\psi(\mathbf{r},t) \quad (0.5)$$

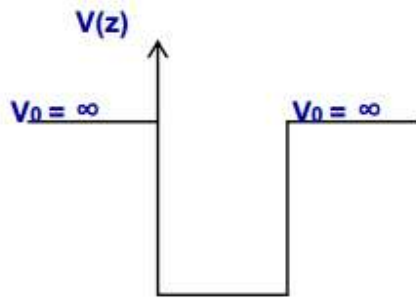
Esta ecuación desarrollada por Erwin Schrödinger en 1925 describe la evolución temporal de una partícula masiva no relativista en un medio determinado bajo la influencia de un potencial.

La ecuación se compone de tres elementos. El primero de ellos, de izquierda a derecha, es la energía cinética de la partícula, donde  $\hbar$  es la constante de Planck reducida y

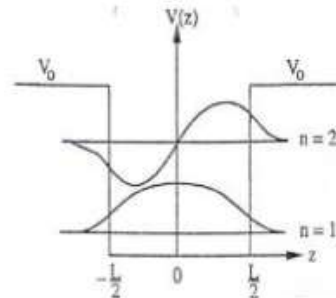
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$m$  es la masa de la partícula,  $\psi$  es la función de onda y  $\nabla^2$  es el Laplaciano de la función. El siguiente término es el Hamiltoniano de la ecuación donde  $V$  es la energía potencial (Ilustración 23). Por último, el término a la derecha de la igualdad es la energía total del sistema.

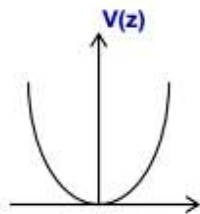
La función de onda es la solución de esta ecuación diferencial y es la que se encarga de describir el movimiento de la partícula. Esta solución depende de la forma que toma el Hamiltoniano.



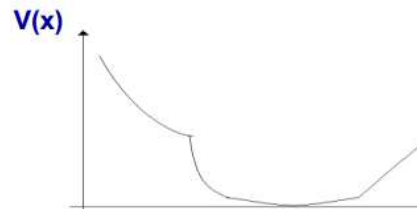
Potencial cuadrado infinito



Potencial cuadrado finito



Potencial parabólico regular



Potencial irregular

*Ilustración 23: Diferentes tipos de potencial.*

Al ser una ecuación diferencial parcial no lineal, sus soluciones no son analíticas por lo cual se llegan a emplear diferentes técnicas de solución, algunos de ellos son por separación de variables, métodos gráficos, diferencias finitas, método aproximación de Wentel-Kramers-Brillouin.

En el caso de un pozo cuántico, debido a la cuantización de los estados energéticos, la onda que describe el movimiento de la partícula se considera como una onda estacionaria por lo que se dice que el sistema es invariante en el tiempo. Por lo que se usa la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para describir una partícula confinada en una estructura de baja dimensión.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+V(r)\psi(r)=E\psi(r) \quad (0.6)$$

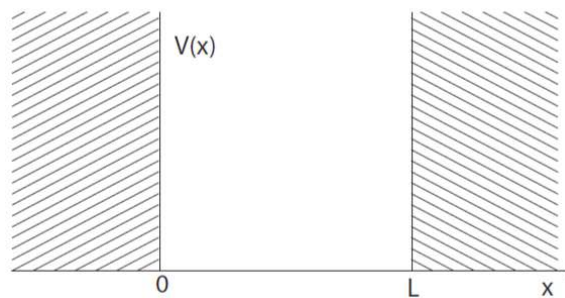
### Pozo Cuántico Infinito

Al hablar de partículas confinadas dentro de un potencial se consideran que las soluciones a estos sistemas son un conjunto discreto de posibles valores de energía. El caso más sencillo es la partícula confinada en una caja, la partícula está atorada dentro del pozo y no puede salir nunca [16]. Para poder confinar la partícula debe existir una fuerza infinita en las fronteras que repele a la partícula y la fuerza a permanecer en el pozo. Es decir, existe un potencial infinito en las barreras del pozo [24].

$$V(x) = \infty \text{ para } x < 0 \text{ y } x > a$$

$$V(x) = 0 \text{ para } 0 \leq x \leq a$$

Donde  $a$  es el ancho del pozo, Ilustración 24.



*Ilustración 24: Pozo cuántico infinito.*

Debido a que el potencial es 0 dentro del pozo y después de reacomodar los términos la ecuación (0.6) se vuelve:

$$E\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)$$

Agrupando las constantes:

$$-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(r) = \nabla^2\psi(r)$$

Como se mencionó anteriormente, la función de onda describe el movimiento de una partícula a lo largo de las tres dimensiones, sin embargo, al tratarse de un pozo cuántico, la partícula se encuentra confinada a lo largo de un solo eje. Por lo que la ecuación de Schrödinger ahora depende solamente de una dimensión: el ancho del pozo. Por lo cual se transforma a una Ecuación diferencial ordinaria:

$$-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

Para simplificar la ecuación, las constantes agrupadas se reemplazan por una única constante k:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (0.7)$$

Por lo tanto

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (0.8)$$

Al sustituirlo en la ecuación:

$$-k^2\psi(x) = \frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

La cual tiene como solución:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Para determinar los valores de los coeficientes se emplean las condiciones de frontera para un potencial infinito. Más allá del pozo, debido a que el potencial es infinito y la partícula no debe escapar, la función de onda fuera del pozo es  $\psi(x) = 0$ . Esto significa que en los bordes del pozo la función de onda debe ser 0.

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(a) = 0$$

Para el primer caso:

$$A \sin(0) + B \cos(0) = 0$$

La única solución no trivial para esta ecuación es que  $B = 0$ . Por lo tanto, la función de onda es:

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

Al aplicar la segunda condición de frontera:

$$A \sin(ka) = 0$$

La única solución no trivial se da cuando  $ka = n\pi$ . Al sustituir el valor de  $k$  en (0.8) se obtiene:

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (0.9)$$

Donde  $n$  es el nivel o estado donde se puede encontrar la partícula y debido a lo mencionado anteriormente, los valores que adquiere  $n$  son discretos y enteros, es decir,  $n = 1, 2, 3, \dots$

Para determinar el valor de  $A$ , se emplea la interpretación estadística de Born, la cual dice que el cuadrado de la amplitud total de la función de onda  $\psi$  se encuentra relacionada a la probabilidad de encontrar la partícula en el pozo cuadrado [25]:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (0.10)$$

Al sustituir la función de onda:

$$A^2 \int_0^a \sin^2 kx dx = 1$$

Y simplificando por medio de sustitución trigonométrica:

$$\frac{A^2}{2} \int_0^a [1 - \cos(2kx)] dx = 1$$

Cuya solución es:

$$\frac{A^2}{2} \left[ x - \frac{1}{2k} \sin(2kx) \right]_0^a = 1$$

Al evaluar el resultado de la integral:

$$\frac{A^2 a}{2} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Ignorando la raíz negativa, la función de onda queda de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (0.11)$$

Al final del procedimiento obtenemos dos expresiones, la energía de la partícula (0.9) y la función de onda (0.11). Ambas nos muestran el comportamiento de las partículas dentro del pozo tal y como se puede observar en la Ilustración 25, se observan los niveles de energía donde el primer nivel tiene una energía  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ , el segundo nivel  $E_2 = 4 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$  y así sucesivamente. Existe una cantidad infinita de niveles discretos de energía que corresponden a los valores que puede adquirir  $n$ .

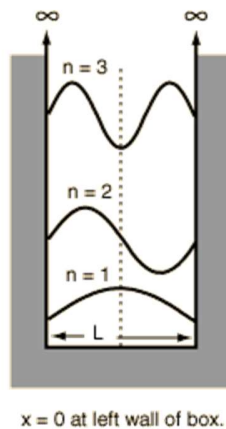


Ilustración 25: Niveles de energía para un pozo infinito.

### Pozo Cuántico Finito

El problema de la partícula en la caja o pozo cuántico infinito es solo un caso ideal donde se asume que las energías y funciones de onda son funciones analíticas [26]. Realmente no existe un potencial lo suficientemente grande para evitar que la partícula salga del pozo, pero la implementación de esta situación teórica tiene como objetivo conocer el comportamiento general de la partícula.

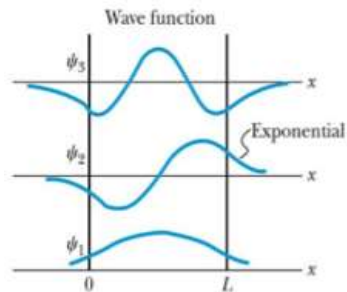


Ilustración 26: Pozo cuántico finito.

El problema del pozo finito es una caja donde se confina la partícula la cual solo puede salir del confinamiento hasta que adquiera la suficiente energía, la cual es definida por el potencial de las barreras. El incremento de energía potencial en las barreras es abrupto, pero a final de cuentas es finito a diferencia del caso ideal [27].

Al ser potencial finito, la función de onda de la partícula atraviesa la barrera de potencial en forma de ondas evanescentes, Ilustración 26. Por lo que ahora no solo se analiza el comportamiento dentro del pozo sino también fuera de él, para lo cual el análisis se hace a través de la segmentación de tres regiones.

- Region I:  $(-\infty, -a]$
- Región II:  $[-a, a]$
- Región III:  $[a, \infty)$

Por conveniencia al resolver la ecuación se invierten los potenciales. Es decir, dentro del pozo se emplea el potencial de la barrera, pero con signo negativo mientras que, en las barreras, el potencial se considerará como cero, Ilustración 27. Al representar una onda que va más allá del pozo, las condiciones de frontera se aplican de forma distinta, primero, las soluciones deben existir para cualquier punto de la función de onda y la función y su

respectiva derivada deben ser continuas en las intersecciones,  $x = \pm a$ , donde  $a = \frac{L}{2}$ , siendo

L el grosor del material.

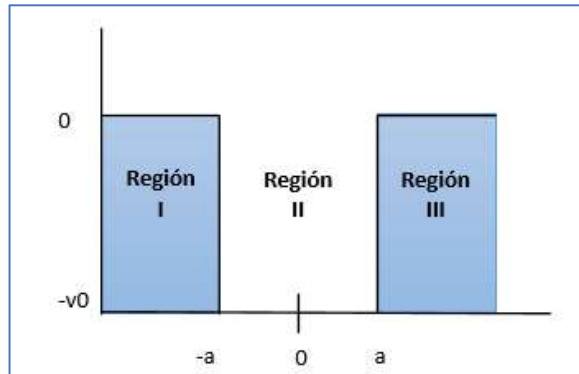


Ilustración 27: Pozo cuántico finito sencillo.

Región I

Debido a la inversión del pozo, fuera de este el potencial de confinamiento  $V(x) = 0$ . Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger (0.6) queda como (Ilustración 28):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Al ser un confinamiento en una dimensión

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \rightarrow -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

y tomando en cuenta que se invirtieron los potenciales, la energía E es negativa

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

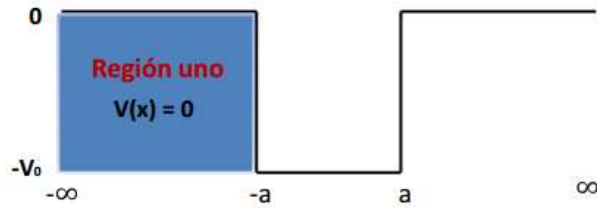


Ilustración 28: Región I.

Siguiendo el mismo planteamiento que en el pozo infinito donde se introduce una constante

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

por lo cual la energía sería una función dependiente de k

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0$$

Que tiene como solución:

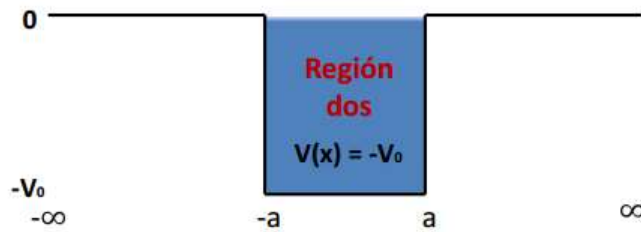
$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

Debido a que la función es continua, debe existir para  $x = -\infty$ , por lo tanto,  $B = 0$ . Entonces la función de onda fuera del pozo en la región I es:

$$\psi(x) = Ae^{kx} \quad (0.12)$$

Región II

En la región II (Ilustración 29), el potencial de confinamiento es  $V(x) = -V_0$ .



*Ilustración 29: Potencial de confinamiento en la región II.*

En esta región es importante considerar el potencial:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\psi(x) = 0 \quad (0.13)$$

Agrupando constantes y reemplazándolas por otra constante  $k_{II}$ .

$$k_{II}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$$

Es decir, la energía dentro del pozo es una función que depende de  $k_{II}$ .

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)} \quad (0.14)$$

Sustituyendo en la ecuación (0.13)

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_{II}^2\psi(x) = 0$$

Que tiene como solución:

$$\psi(x) = C \sin(k_{II}x) + D \cos(k_{II}x) \quad (0.15)$$

Región III

Para la región III (Ilustración 30), el análisis es similar a la región I, con la diferencia de que la función debe de existir para  $x = +\infty$

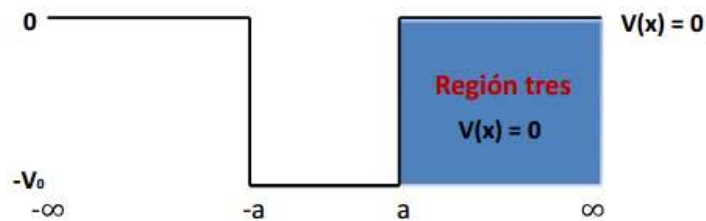


Ilustración 30: Región III

Por lo que la función de onda es:

$$\psi(x) = Be^{-kx} \quad (0.16)$$

Ya que se tienen las soluciones para cada una de las regiones, el siguiente paso es aplicar la segunda condición de frontera: las funciones y sus derivadas son continuas en las interfaces.

En  $x = -a$ , igualamos las soluciones y sus respectivas derivadas para conservar la continuidad:

$$\begin{aligned}
Ae^{kx} &= C \sin(k_{II}x) + D \cos(k_{II}x) \\
Ake^{kx} &= Ck_{II} \cos(k_{II}x) - Dk_{II} \sin(k_{II}x)
\end{aligned}
\tag{0.17}$$

En  $x = a$ , se realiza el mismo procedimiento:

$$\begin{aligned}
Be^{-kx} &= C \sin(k_{II}x) + D \cos(k_{II}x) \\
Bke^{-kx} &= Ck_{II} \cos(k_{II}x) - Dk_{II} \sin(k_{II}x)
\end{aligned}
\tag{0.18}$$

Con este sistema de ecuaciones, además de considerar el valor de  $x = \pm a$ , se reescribe el sistema de soluciones como una matriz para encontrar los valores de las constantes

$$\begin{bmatrix}
-\sin(k_{II}a) & \cos(k_{II}a) & e^{-ka} & 0 \\
\sin(k_{II}a) & \cos(k_{II}a) & 0 & -e^{-ka} \\
k_{II} \cos(k_{II}a) & -k_{II} \sin(k_{II}a) & -ke^{-ka} & 0 \\
k_{II} \cos(k_{II}a) & -k_{II} \sin(k_{II}a) & 0 & ke^{-ka}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
A \\
B \\
C \\
D
\end{bmatrix} = 0$$

Aplicando la propiedad de determinantes que especifica que la constante que multiplica a una columna puede salir de la matriz para multiplicar al determinante

$$e^{-ka} \begin{bmatrix}
-\sin(k_{II}a) & \cos(k_{II}a) & -1 & 0 \\
\sin(k_{II}a) & \cos(k_{II}a) & 0 & 1 \\
k_{II} \cos(k_{II}a) & -k_{II} \sin(k_{II}a) & -k & 0 \\
k_{II} \cos(k_{II}a) & -k_{II} \sin(k_{II}a) & 0 & k
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
A \\
B \\
C \\
D
\end{bmatrix} = 0$$

Resolviendo el determinante tomando como referencia la columna 4:

$$|M| = -C_{24} + kC_{44}$$

Donde:

$$C_{24} = 2k_{II}^2 \cos(k_{II}a) \sin(k_{II}a) + kk_{II} \sin^2(k_{II}a) - kk_{II} \cos^2(k_{II}a)$$

y

$$C_{44} = 2k_{II} \sin(k_{II}a) \cos(k_{II}a) + k_{II} \cos^2(k_{II}a) - k_{II} \sin^2(k_{II}a)$$

Sustituyendo en  $|M|$

$$|M| = -2k_{II}^2 \cos(k_{II}a) \sin(k_{II}a) - 2kk_{II} \sin^2(k_{II}a) + 2kk_{II} \cos^2(k_{II}a) + 2k^2 \sin(k_{II}a) \cos(k_{II}a)$$

Igualando a cero, eliminando los coeficientes y multiplicando por un signo negativo:

$$k_{II}^2 \cos(k_{II}a) \sin(k_{II}a) + kk_{II} \sin^2(k_{II}a) - kk_{II} \cos^2(k_{II}a) - k^2 \sin(k_{II}a) \cos(k_{II}a) = 0$$

Dividiendo entre  $\cos^2(k_{II}a)$

$$k_{II}^2 \tan(k_{II}a) + kk_{II} \tan^2(k_{II}a) - kk_{II} - k^2 \tan(k_{II}a) = 0$$

Factorizando:

$$(k \tan(k_{II}a) + k_{II})(k_{II} \tan(k_{II}a) - k) = 0 \quad (0.19)$$

Recurriendo a las ecuaciones (0.7) y (0.14) y multiplicando por  $a^2$ :

$$(ka)^2 = -\frac{a^2 2mE}{\hbar^2}$$

y

$$(k_{II}a)^2 = \frac{a^2 2mE}{\hbar^2} + \frac{a^2 2mV_0}{\hbar^2}$$

Por medio del método de reducción para un sistema de ecuaciones:

$$(ka)^2 + (k_{II}a)^2 = -\frac{a^2 2mE}{\hbar^2} + \frac{a^2 2mE}{\hbar^2} + \frac{a^2 2mV_0}{\hbar^2}$$

Por lo tanto

$$(ka)^2 + (k_{II}a)^2 = \frac{2a^2 mV_0}{\hbar^2} \quad (0.20)$$

Tomando el factor de la izquierda de la ecuación (0.19).

$$k \tan(k_{II}a) + k_{II} = 0$$

Despejando k:

$$k = \frac{-k_{II}}{\tan(k_{II}a)} = -k_{II} \cot(k_{II}a) \quad (0.21)$$

Ahora continuando con el factor de la derecha de la ecuación (0.19).

$$k_{II} \tan(k_{II}a) - k = 0$$

Despejando k:

$$k = k_{II} \tan(k_{II}a) \quad (0.22)$$

Introduciendo dos nuevas constantes

$$\eta = ka \text{ y } \xi = k_{II}a$$

(0.20), (0.21) y (0.22) se convierten en:

$$\eta^2 + \xi^2 = \frac{2a^2mV_0}{\hbar^2} \quad (0.23)$$

$$\eta = -\xi \cot \xi \quad (0.24)$$

$$\eta = \xi \tan \xi \quad (0.25)$$

Con estas expresiones es posible determinar los niveles de energía, sin embargo no pueden resolverse de forma analítica, por lo que una forma de resolverlas es por medio del método gráfico [28]. (0.24) representa los niveles energéticos impares, es decir, valores de  $n = 1, 3, 5, \dots$  (Ilustración 31) mientras que (0.25) proporcionará los niveles energéticos pares  $n = 2, 4, 6, \dots$  (Ilustración 32).

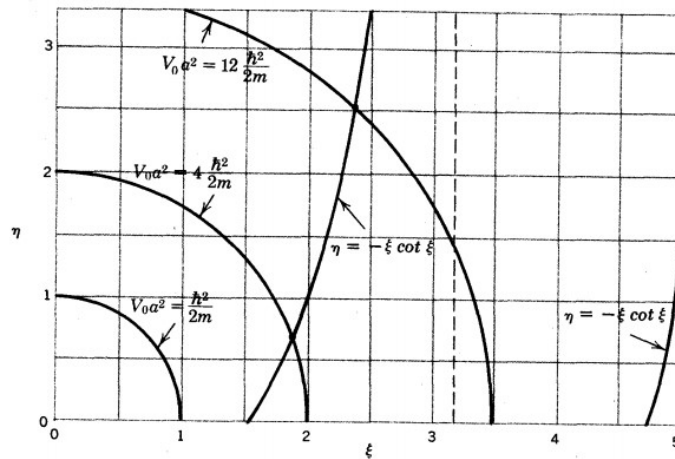


Ilustración 31: Método gráfico para encontrar los niveles de energía impares de un pozo cuántico finito.

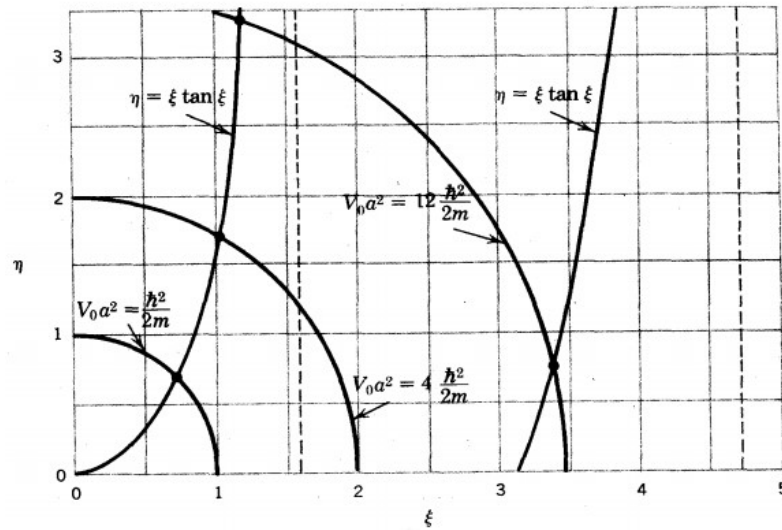


Ilustración 32: Método gráfico para encontrar los niveles de energía pares de un pozo cuántico finito.

Al graficar la ecuación (0.23) contra la (0.25), hay que identificar los valores de  $\xi$  y  $\eta$  para los cuales hay puntos de intersección ignorando las asíntotas verticales de la función tangente. Estas intersecciones proporcionan los valores que se sustituirán en la ecuación de la energía:

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Donde sabemos que  $k = \frac{\eta}{a}$

Como se puede observar, las únicas variables de las que depende la energía son del ancho del material donde se forma el pozo ( $a$ ) y del potencial de confinamiento ( $V_0$ ) a través de su combinación  $V_0 a^2$ . Lo que permite concluir que las propiedades del material dependen del ancho del pozo cuántico.

Otra cosa que se puede observar es que para un valor de  $V_0 a^2$  entre cero y  $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$ , aparece solo un nivel energético. Si este valor crece aparecerán más niveles.

Al aplicar la solución impar uno se puede percatar que hay un tamaño mínimo (grosor) del pozo de potencial para soportar los estados. Este tamaño mínimo requiere que la energía negativa total de cada estado debe ser menor que el potencial de confinamiento

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < V_0$$

Esto afecta también al valor de  $k$  y por lo tanto también a la longitud de onda  $\lambda$ ,  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ , por lo que:

$$\lambda \geq \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mV_0}}$$

Para poder satisfacer las condiciones de frontera que conectan las funciones oscilantes con las evanescentes se requiere acomodar al menos la mitad de la longitud de onda dentro del ancho  $2a$  del pozo de potencial,  $\frac{1}{2}\lambda \leq 2a$ . En consecuencia, existe una relación entre el potencial de confinamiento y grosor mínimos del pozo.

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mV_0}} \leq \lambda \leq 4a \quad (0.26)$$

$$V_0 \geq \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{\pi^2}{8} \quad (0.27)$$

### Punto Cuántico Esférico

Al considerar un punto cuántico esférico, las soluciones se simplifican de forma relativa con respecto a otras formas geométricas, en primer lugar, debido a la simetría de la estructura las condiciones de frontera se consideran iguales para cada punto de la barrera. Además, la

ecuación de Schrödinger se “simplifica” al considerar como independientes las dimensiones de la estructura.

A comparación de los casos anteriores en los cuales se considera un sistema confinado en una sola dimensión, para un punto cuántico esférico, debido a que la partícula se encuentra confinada en 3 dimensiones se considera que el potencial de confinamiento es isotrópico, es decir solo depende de la distancia desde el origen hasta la superficie de la esfera. Entonces, en vez de emplear coordenadas cartesianas  $\psi(r) = \{x, y, z\}$  es más conveniente usar un sistema de coordenadas esféricas (Ilustración 33)  $\psi(r) = \{r, \theta, \phi\}$  :

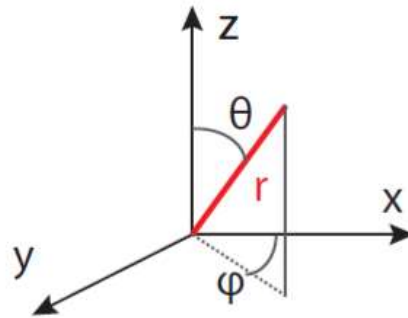


Ilustración 33: Sistema de coordenadas esféricas

Al ser una ecuación diferencial parcial es necesario considerar el Laplaciano, que en coordenadas esféricas es:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (0.28)$$

Sustituyendo el Laplaciano (0.28) en la Ecuación de Schrödinger:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V \right] \psi = E\psi \quad (0.29)$$

En este caso, la ecuación diferencial parcial, al estar confinada en tres dimensiones sus soluciones pueden ser determinadas por el método de separación de variables. Para lo cual se asume una solución de la forma:

$$\psi(r) = \{r, \theta, \phi\} = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (0.30)$$

Con sus respectivas derivadas parciales:

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = R'(r)Y(\theta, \phi); \quad \frac{\partial \psi}{\partial \theta \partial \phi} = R(r)Y'(\theta, \phi)$$

Sustituyendo en (0.29)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{Y}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R') + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta Y') + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} Y'' \right] + V \right] RY = ERY$$

Multiplicando por  $r^2$  y dividiendo entre  $RY$  se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} (r^2 R') + \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta Y') + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} Y'' \right] + Vr^2 = Er^2 \quad (0.31)$$

Agrupando los términos de la ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right] + r^2 (V - E) = \frac{\hbar^2}{2mY} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] \quad (0.32)$$

Al observar ambos lados de la ecuación uno se puede percatar que al lado izquierdo de la igualdad la función solo depende de  $r$  y en el lado derecho la función depende de  $\theta$  y  $\phi$ . Con excepción de una solución trivial, la única forma en la que la suma de ambos lados sea cero es si cada expresión es igual a la misma constante. Esta constante se le conoce como constante de separación  $\lambda$  (no hay que confundir que la longitud de onda).

Al separar la ecuación obtenemos dos expresiones:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V - E) = \lambda \quad (0.33)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -\lambda Y \quad (0.34)$$

La ecuación (0.33) es conocida como *la ecuación radial* y (0.34) es llamada *la ecuación angular*.

Ecuación angular

En la ecuación (0.34) se puede observar que esta no depende del potencial. Al ser también una ecuación diferencial parcial, de la misma forma se resuelve por medio de separación de variables proponiendo una solución de la forma:

$$Y(\theta, \phi) = f(\theta)g(\phi)$$

Con sus respectivas derivadas:

$$\frac{\partial Y}{\partial \theta} = f'(\theta)g(\phi); \quad \frac{\partial Y}{\partial \phi} = f(\theta)g'(\phi)$$

Sustituyendo en la ecuación angular:

$$\frac{g}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \cdot f') + \frac{f}{\sin^2 \theta} g'' = -\lambda fg$$

Al multiplicar ambos lados de la ecuación por  $\frac{\sin^2(\theta)}{Y(\theta, \phi)}$ :

$$\frac{\sin \theta}{f} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \cdot f') + \frac{1}{g} g'' = -\lambda \sin^2(\theta)$$

Acomodamos los términos:

$$\frac{1}{f} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \cdot \frac{df}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2(\theta) = -\frac{1}{g} \frac{d^2 g}{d\phi^2}$$

De la misma forma que se hizo con la ecuación de Schrödinger, la expresión a la izquierda de la ecuación depende solamente del ángulo polar y la expresión a la derecha únicamente depende del ángulo azimutal. También, la única solución no trivial tal que la suma de las expresiones sea cero es si ambos lados dependen de una misma constante de separación  $v$ . Al separar las expresiones:

$$\frac{1}{f(\theta)} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \cdot \frac{df(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2(\theta) = v \quad (0.35)$$

$$\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} + v g(\phi) = 0 \quad (0.36)$$

Donde la ecuación (0.35) es conocida como la ecuación polar y (0.36) es la ecuación azimutal.

Ecuación azimutal

La ecuación (0.36) es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuya solución es de la forma:

$$g(\phi) = A e^{i\sqrt{v}\frac{\phi}{2}} + B e^{-i\sqrt{v}\frac{\phi}{2}}$$

Recordando las condiciones de frontera,  $g(\phi)$  y su derivada deben ser continuas a lo largo del dominio de 0 a  $2\pi$  requiere que  $v$  sea igual al cuadrado de un número entero. Por lo que la solución se reemplaza por:

$$g_m(\phi) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{im\phi} \quad (0.37)$$

Se le agrega el subíndice  $m$  para indicar que hay tantas soluciones como valores de permitidos de  $m$ . La constante es  $(2\pi)^{-\frac{1}{2}}$  para sea posible normalizar la función azimutal a la unidad sobre el rango de  $\phi$ .

Ecuación polar

La ecuación (0.35) puede escribirse de la siguiente forma:

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \cdot \frac{df}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2(\theta) f - m^2 f = 0 \quad (0.38)$$

Tomando el primer término para su evaluación:

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{df}{d\theta} \right) = \sin \theta \left( \cos \theta \frac{df}{d\theta} + \sin \theta \frac{d^2 f}{d\theta^2} \right)$$

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{df}{d\theta} \right) = \sin^2 \theta \frac{d^2 f}{d\theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{df}{d\theta}$$

Entonces (0.38) se vuelve:

$$\sin^2 \theta \frac{d^2 f(\theta)}{d\theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} + \lambda \sin^2(\theta) f(\theta) - m^2 f(\theta) = 0 \quad (0.39)$$

Empleando un cambio de variable donde  $x = \cos \theta$ . Se requieren las derivadas con respecto a  $x$  sustituyendo  $\theta$ , entonces, al evaluar  $x$ :

$$\frac{df(\theta)}{d\theta} = \frac{df(x)}{dx} \frac{dx}{d\theta} = \frac{df(x)}{dx} (-\sin \theta) = -\sin \theta \frac{df(x)}{dx}$$

y

$$\frac{d^2 f(\theta)}{d\theta^2} = \frac{d}{d\theta} \left( -\sin \theta \frac{df(x)}{dx} \right) = -\cos \theta \frac{df(x)}{dx} - \sin \theta \frac{d}{d\theta} \frac{df(x)}{dx}$$

$$\frac{d^2 f(\theta)}{d\theta^2} = -\cos \theta \frac{df(x)}{dx} - \sin \theta \frac{d}{dx} \frac{dx}{d\theta} \frac{df(x)}{dx} = -\cos \theta \frac{df(x)}{dx} - \sin \theta \frac{d}{dx} (-\sin \theta) \frac{df(x)}{dx}$$

$$\frac{d^2 f(\theta)}{d\theta^2} = -\cos \theta \frac{df(x)}{dx} + \sin^2 \theta \frac{d^2 f(x)}{dx^2}$$

Sustituyendo estas derivadas en la ecuación (0.39)

$$\sin^2 \theta \left( \sin^2 \theta \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - \cos \theta \frac{df(x)}{dx} \right) + \sin \theta \cos \theta \left( -\sin \theta \frac{df(x)}{dx} \right) + \lambda \sin^2(\theta) f(x) - m^2 f(x) = 0$$

Dividiendo por  $\sin^2 \theta$

$$\sin^2 \theta \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - \cos \theta \frac{df(x)}{dx} - \cos \theta \frac{df(x)}{dx} + \lambda f(x) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} f(x) = 0$$

Considerando que  $\cos \theta = x$  y  $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - x^2$ , se obtiene:

$$(1-x^2) \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2x \frac{df(x)}{dx} + l(l+1) f(x) - \frac{m^2}{1-x^2} f(x) = 0$$

Si por un momento suponemos que la constante de separación  $\lambda = l(l+1)$ , la ecuación quedaría de la siguiente forma:

$$(1-x^2)\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2x\frac{df(x)}{dx} + \lambda f(x) - \frac{m^2}{1-x^2} f(x) = 0$$

La cual es una ecuación diferencial de segundo orden, por lo cual cuenta con dos soluciones linealmente independientes. Excepto para ciertos valores particulares de  $\lambda$ , ambas soluciones son infinitas para  $x = \pm 1$  y no son físicamente aceptables. Sin embargo, si  $\lambda = l(l+1)$ , donde  $l$  es un número entero positivo o cero, una de estas soluciones es finita para  $x = \pm 1$ ; por ello se introduce a  $l(l+1)$  como la constante de separación para la ecuación radial y angular [29].

La solución aceptable de esta ecuación se le llama ecuación asociada de Legendre, la cual se reduce a una ecuación de Legendre cuando  $m = 0$ . Escribiendo de otra forma:

$$(1-x^2)f''(x) - 2xf'(x) + l(l+1)f(x) - \frac{m^2}{1-x^2} f(x) = 0$$

Las soluciones de la ecuación asociada de Legendre son los polinomios asociados de Legendre, los cuales son generados por los polinomios de Legendre empleando:

$$P_{l,m}(x) = (-1)^m \sqrt{(1-x^2)^m} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

Donde  $P_l(x)$  son los polinomios de Legendre, los cuales son generados por la fórmula de Rodríguez:

$$P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (1-x^2)^l$$

Los primeros polinomios asociados de Legendre son:

$P_{0,0}(x) = 1$	$P_{0,0}(x) = 1$
$P_{1,0}(x) = x$	$P_{1,0}(x) = \cos \theta$
$P_{1,1}(x) = -(1-x^2)^{(1/2)}$	$P_{1,1}(x) = -\sin \theta$
$P_{2,0}(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$	$P_{2,0}(x) = \frac{1}{2}(3\cos^2 \theta - 1)$
$P_{2,1}(x) = -3x(1-x^2)^{(1/2)}$	$P_{2,1}(x) = -3\sin \theta \cos \theta$
$P_{2,2}(x) = 3(1-x^2)$	$P_{2,2}(x) = 3\sin^2 \theta$

*Tabla 2: Polinomios asociados de Legendre*

Como se mencionó anteriormente, la parte angular  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  de la función de onda completa es la solución de la ecuación (0.34) y se le conoce como armónico esférico. Los esféricos armónicos son funciones especiales definidas sobre la superficie de una esfera de la misma forma que las funciones circulares (senos y cosenos) se utilizan para representar funciones en un círculo a través de las series de Fourier [30].

Hay que recordar en este punto que esta solución funciona únicamente cuando consideramos una simetría esférica. El armónico esférico entonces será:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) g_m(\phi)$$

Donde  $\Phi_m(\phi)$  es proporcionado por la ecuación (0.37),  $N_{lm}$  es la constante de normalización para la función asociada de Legendre y no hay que olvidar el cambio de variable de  $x = \cos \theta$ , el cual se realizó para simplificar el álgebra que permitió llegar esta solución.

Ahora, por conveniencia, los armónicos esféricos serán de la siguiente forma:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad m \geq 0 \quad (0.40)$$

Y

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = Y_{l,m}^*(\theta, \phi) \quad m < 0$$

Donde  $P_{l,m}(\cos \theta)$  son los polinomios asociados de Legendre,  $\varepsilon = (-1)^m$  para  $m > 0$  y  $\varepsilon = (1)^m$  para  $m \leq 0$ . Si se desea obtener un armónico para un valor de  $m$  menor a 0, se calcula el armónico utilizando  $m = |m|$  y después obteniendo la adjunta del armónico.

Los primeros armónicos esféricos son:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{(4\pi)}} \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \end{aligned}$$

Tabla 3: *Harmónicos Esféricos*

Los números que aparecieron durante la solución,  $l$  y  $m$  son los números cuánticos que describen las propiedades del electrón. El número cuántico  $l$  es número cuántico de momento angular o azimutal. El número cuántico  $m$ , es el número cuántico magnético. La

ecuación de onda generalmente no puede separarse tal y como se ha hecho, todo esto es posible al considerar a la energía potencial simétrica esféricamente.

Momento angular

La ecuación de onda radial (0.33) puede reescribirse de tal forma que se parecería a la ecuación de onda en una dimensión. Si  $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ , la ecuación para la función radial de onda modificada quedaría como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = E \chi \quad (0.41)$$

Donde:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

Una región esférica de esta forma en la cual el potencial dentro del pozo es menor que el de los alrededores ayuda a atraer una partícula de la misma forma que en el caso unidimensional, véase Ilustración 34.

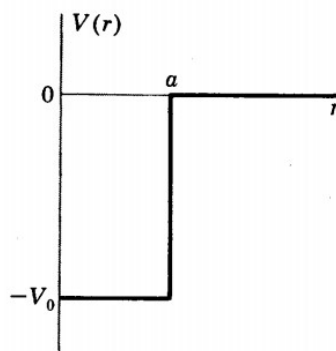


Ilustración 34: Pozo de potencial para un punto cuántico esférico.

En la función de onda radial,  $l$  se interpreta como una energía potencial adicional, la cual es considerada como una fuerza centrífuga repulsiva, esto sugiere que una partícula que posee un momento angular requiere un potencial más fuerte para ser atrapada que una partícula sin momento angular. Cuando  $l=0$  la ecuación es más sencilla de resolver.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2x}{dr^2} + -V_0x = Ex, \quad r < a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2x}{dr^2} = Ex, \quad r > a$$

Las soluciones de estas tres ecuaciones son iguales a las del pozo finito con la excepción de:

- La energía se reduce en cualquier parte de la esfera por una cantidad  $V_0$ .
- El dominio de  $r$  es de  $[0, \infty)$ , a diferencia del caso unidimensional donde el dominio es de  $(-\infty, \infty)$
- La condición de frontera en que la función de onda no se vuelva infinita en  $r = a$  será reemplazada por la misma condición, pero en  $r = 0$ .

Igual que en el pozo cuántico finito, las soluciones de la ecuación (0.41) cuando  $l = 0$  son;

$$x(r) = A \sin \alpha r + B \cos \alpha r, \quad r < a$$

$$x(r) = C e^{-\beta r}, \quad r > a$$

Donde:

$$\alpha = \left[ \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad r < a$$

y

$$\beta = \left[ \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad r > a$$

Aplicando la tercera condición de frontera requiere que  $B=0$ . Igual que en el caso del pozo finito, los niveles de energía se obtienen al igualar ambas expresiones en  $r = a$  y estos se obtienen al resolver:

$$\alpha \cot \alpha a = -\beta \quad (0.42)$$

La cual es la solución impar del pozo unidimensional, es posible observar que no hay niveles de energía a menos que  $V_0 a > \frac{\hbar^2}{2m}$ . Y similar al pozo finito, solo hay un nivel de energía cuando:

$$\frac{\hbar^2}{2m} < V_0 a < \frac{5\hbar^2}{2m}$$

Los niveles de Energía se obtienen al considerar que la función es continua en  $r = a$ . Cuando  $l = 0$ , se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\xi \cot \xi = -\eta \quad (0.43)$$

y

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad (0.44)$$

Donde:

$$\xi = \alpha a \quad \text{y} \quad \eta = \beta a$$

Y:

$$\alpha = \left[ \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (0.45)$$

y

$$\beta = \left[ \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (0.46)$$

Para obtener los niveles de energía

$$E = V_0 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

Donde  $\alpha = \frac{\xi}{a}$

Como se puede observar, el caso del pozo cuántico finito y el punto cuántico esférico simétrico tienen muchas similitudes entre sí. La forma de considerar a los potenciales, las condiciones de frontera, las soluciones de la ecuación. La solución de la energía para un punto cuántico es la misma que para un pozo, pero solo considerando las soluciones impares. Otra relación importante es que la energía en el pozo cuántico depende únicamente del radio

de la esfera, esto a pesar de ser una partícula confinada en tres dimensiones, el ángulo azimutal y polar no afectan en absoluto el potencial de confinamiento.

Para el caso en que  $l=1$ , la mayoría de las ecuaciones que permitiría obtener los niveles de energía se mantienen igual salvo la solución impar del punto cuántico, cuya complejidad incrementa debido a la dependencia del valor de  $l$ :

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2} \quad (0.47)$$

Donde:

$$\eta = \frac{\xi \sin \xi \pm \sqrt{\xi \sqrt{\sin \xi} \sqrt{\xi \sin \xi - 4 \sin \xi + 4 \cos \xi}}}{2(\cos \xi - \sin \xi)}$$

## Capítulo IV: Coeficiente de Absorción

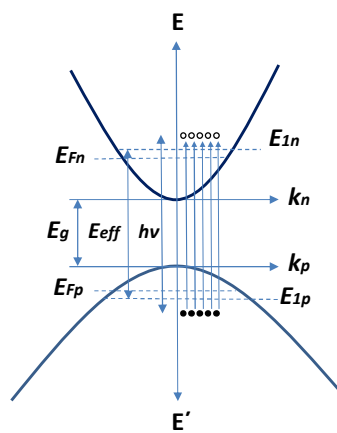
La materia puede emitir, absorber, transmitir, o colisionar/reflejar luz.

- **Emisión:** Un objeto con una temperatura finita puede emitir luz con una longitud de onda descrita por el espectro del cuerpo oscuro: Los átomos del objeto pueden absorber luz de cierta longitud de onda y después reemitirla en otra longitud distinta.
- **Absorción:** La materia puede absorber luz, resultando un incremento en su nivel energético y temperatura (conversión de la energía radiactiva en térmica)
- **Transmisión:** Ciertos tipos de materia (como vidrios) permite a la luz propagarse a través de ellos. La velocidad de la luz en estos materiales será diferente a la de la luz en el vacío. También puede cambiar la dirección de propagación.
- **Reflexión/colisiones:** Los fotones pueden ser rechazados a penetrar ciertas superficies de materiales (por ejemplo, los espejos) o penetrar cambiando su dirección de propagación.

La absorción de fotones es el mecanismo principal de generación de pares electrón-hueco en hetero-uniones para dispositivos fotónicos y opto electrónicos, tales como celdas solares y foto detectores. En las hetero-estructuras de baja dimensión, la determinación exacta del coeficiente de absorción ( $\alpha$ ) es muy importante dado que las dimensiones físicas óptimas de la hetero-estructura dependen de este parámetro.

Una manera de determinar el coeficiente de absorción es determinado considerando la ecuación de la tasa de absorción estimulada para un modo de operación simple a una frecuencia específica [31]. Posteriormente, una nueva técnica en donde la ecuación de la tasa de absorción depende de la densidad espectral del flujo de fotones incidente incluyendo términos de pérdida de fotones fue reportada por G. W. Taylor [32]. En ambos casos, tres diferentes criterios para la transición de cargas de la banda de valencia a la de conducción son utilizados: Selección estricta de momento, sin selección de momento y selección parcial de momento.

En el criterio de selección estricta de momento, la tasa de transición neta es una suma de las transiciones de banda a banda evaluada para cada energía del fotón ( $h\nu$ ). El coeficiente de absorción es calculado utilizando un conjunto de ecuaciones simplificadas asumiendo que el momento del electrón es significativamente mayor que el del fotón. Por ello se considera que el momento del fotón puede ser ignorado en la transición de banda a banda. La transición de los electrones es puramente vertical, donde el estado inicial y el final tienen el mismo momento,  $k_n = k_p$  (Ilustración 35).



*Ilustración 35: Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de selección estricta de momento*

Un criterio que considera más estados disponibles para la transición de electrones es el criterio de no selección de momento. En este criterio, todos los estados separados por la energía del fotón están disponibles para la transición (Ilustración 36). Esto requiere la integración de las ecuaciones de las tasas de transición, las cuales incrementan el espectro de absorción para la banda prohibida efectiva debido a la densidad de estados disponibles. De cualquier manera, este criterio arroja valores teóricos más grandes que los medidos de manera experimental [33]. Adicionalmente, el espectro muestra un incremento continuo de  $\alpha$  por encima de la banda prohibida, lo que significa la existencia de demasiados estados disponibles para las transiciones.

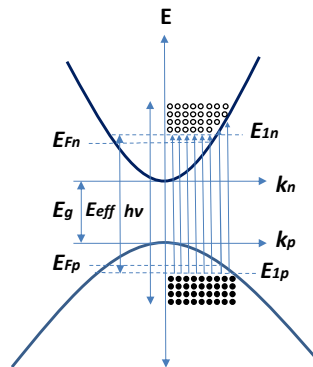


Ilustración 36: Diagrama de energía vs. momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de sin selección de momento

En el criterio de selección parcial de momento un rango de estados separados por la energía del fotón puede participar in la transición para un rango de valores de momentos (Ilustración 37). Esto significa la inclusión de mecanismos de colisión intra-banda que permiten la conservación del momento para cada transición. Idealmente, la implementación del criterio de selección parcial de momento es lo más cercano a la realidad dado que este se aproxima al criterio de selección estricta de momento para un rango infinitamente delgado de transiciones disponibles, y se aproxima al criterio de sin selección de momento para un rango infinitamente ancho de transiciones disponibles.

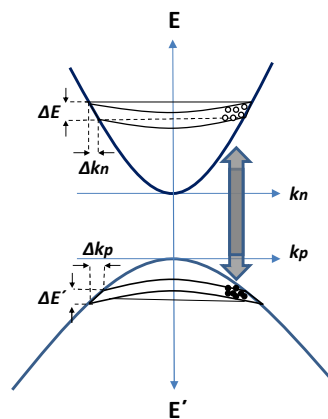


Ilustración 37: Diagrama de energía vs. momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de selección parcial de momento.

La interacción de la luz con un semiconductor puede ser descrita a partir de un flujo arbitrario de fotones con densidad espectral donde  $v_g$  es la velocidad de grupo que impacta una unidad de volumen del material. Una vez que el flujo de fotones, el cual tiene una densidad espectral  $F_{in}=F(v)\delta v$  en un intervalo pequeño de frecuencias  $\delta v$ , ha penetrado la parte frontal del material, el comportamiento de los fotones es determinado por la tasa de absorción, emisión (espontánea y estimulada) y las pérdidas. Por conservación de energía, la generación neta de fotones debe balancear la recombinación de estos por unidad de volumen del semiconductor. Esto puede ser descrito como [34]:

$$v_g \frac{dF_{in}}{dx} = -R_{abs} + R_{stim} + R_{spont} - R_{loss} \quad (4.1)$$

La cual describe el cambio en el flujo de fotones en función de la posición, donde  $R_{abs}$  representa el volumen total de la tasa de absorción,  $R_{stim}$  representa el volumen total de la tasa de emisión estimulada,  $R_{spont}$  representa el volumen total de la tasa de emisión espontánea y  $R_{loss}$  representa el volumen total de las pérdidas de fotones del material. Aquí, el volumen de la tasa de absorción es la tasa a la cual los electrones en la banda de valencia con energía hacen la transición a la banda de conducción con energía  $E$  absorbiendo un fotón con energía  $h\nu$ . Esta tasa debe ser proporcional al número de estados llenos en la banda de Valencia y el número de estados vacíos en la banda de conducción. El número de estados electrónicos llenos en la banda de valencia es igual a la densidad de estados disponibles con energía  $E$  expresado como  $N_v(E)$  por la distribución de probabilidades de Fermi-Dirac para la banda de Valencia, expresada como  $f_v(E)$ , de manera similar, el número de estados electrónicos libres en la banda de conducción está dado por la densidad de estados disponible con energía  $E$ , expresado como  $N_c(E)$  por  $[1-f_c(E)]$ , que es la probabilidad de que un estado en la banda de conducción este vacío.

Por lo tanto, el volumen de la tasa de absorción de fotones y pérdida de fotones están dados por las ecuaciones (4.2) and (4.3), respectivamente [35].

$$R_{abs} = N_v(E') f_v(E') N_c(E) [1 - f_c(E)] B(\nu) F(\nu) h\nu dE dE' \quad (4.2)$$

$$R_{loss} = \frac{F(\nu) \delta\nu}{\tau_{loss}} \quad (4.3)$$

Con distribución de Fermi-Dirac dada por:

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_{Fn})/kT}} \quad (4.4)$$

y

$$1 - f_c(E') = \frac{1}{1 + e^{(E' - E_{Fp})/kT}} \quad (4.5)$$

donde  $B(\nu) = \frac{A_b C^3}{8\pi\nu^2}$  es el coeficiente de Einstein para la absorción de fotones con unidades de  $cm^6 j^{-1} s^{-2}$ ,  $A_b$  es el coeficiente Einstein para la probabilidad de recombinación espontánea con unidades de  $cm^3 s^{-1}$ ,  $c$  es la velocidad de la luz,  $\tau_{loss} = \Gamma \tau_p(\nu)$  es una constante de tiempo que define las pérdidas de fotones,  $\Gamma$  es el factor de confinamiento de fotones, y  $\tau_p(\nu)$  es el tiempo de vida de los fotones con frecuencia  $\nu$ .

### Densidad de Estados para un Punto Cuántico

En las hetero-estructuras, el movimiento de los portadores es restringido en una, dos o tres dimensiones espaciales. Debido a este confinamiento, la relación de dispersión de los estados energéticos con respecto a la dirección de confinamiento cambia para cada tipo de estructura de baja dimensión, este cambio afecta a la densidad de estados, Ilustración 38.

Para un punto cuántico la partícula no es libre de moverse en tal estructura ya que esta se encuentra confinada en las tres dimensiones. Consecuentemente no hay un espacio-k disponible que pueda ser llenado por portadores. Cada estado cuántico de un sistema 0D puede encontrarse ocupado solamente por dos portadores. Esta densidad de estados es descrita por una función  $\delta$  [8].

$$\rho_{DOS}^{0D}(E) = 2\delta(E - E_0) \quad (4.6)$$

Donde E es la energía cinética de la partícula y  $E_0$  es la energía del primer estado energético. Para más de un estado, la densidad de estados está dada por:

$$\rho_{DOS}^{0D}(E) = \sum_n 2\delta(E - E_0) \quad (4.7)$$

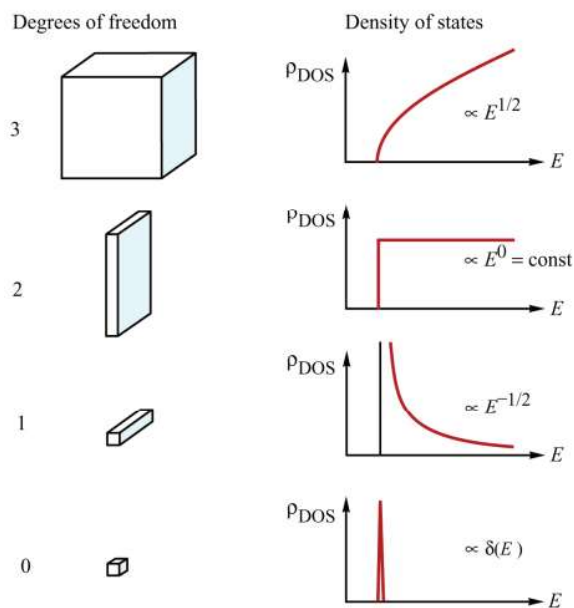


Ilustración 38: Densidad de estados.

## Densidad de estados efectiva

Para simplificar el cálculo de la población presente en la banda de conducción y de valencia se introduce la densidad de estados efectiva. Se asume que todos los estados se encuentran localizados directamente en la orilla de la banda. La concentración total de portadores en una banda se obtiene al integrar el producto de la densidad de estados con la probabilidad de que ese estado se encuentre ocupado.

$$n = \int_{E_{bottom}}^{E_{top}} \rho_{DOS}(E) f(E) dE \quad (4.8)$$

Donde  $f(E)$  es la probabilidad de que un estado energético  $E$  se encuentre ocupado. Los límites de integración son el nivel del fondo y más alto de la banda, ya que la concentración en toda la banda es de interés.  $f(E)$ , es la de distribución Maxwell-Boltzmann dada por:

$$f_B(E) = e^{\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

Donde, recordando,  $E_F$  es el nivel de Fermi. Al realizar la integración, la densidad efectiva de estados al fondo de la banda de conducción se define como la concentración de electrones

$$n = \int_{E_{bottom}}^{E_{top}} \rho_{DOS}(E) f_B(E) dE = N_c f_B(E_c)$$

Donde  $N_c$  es la concentración de portadores en la banda de conducción y  $E_c$  es la energía al fondo de la banda. Al evaluar la integral para la densidad de estados para un pozo cuántico se obtiene:

$$N_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (4.9)$$

Para el caso del punto cuántico, la densidad de estados no requiere una simplificación como tal, ya que su función es de tipo  $\delta$ . En la Tabla 4 se pueden observar las densidades de estado y densidades de estado efectivas para los diferentes tipos de estructuras de baja dimensión.

Degrees of freedom	Dispersion (kinetic energy)	Density of states	Effective density of states
3 (bulk)	$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$	$\rho_{\text{DOS}}^{3\text{D}} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_C}$	$N_c^{3\text{D}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$
2 (slab)	$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2)$	$\rho_{\text{DOS}}^{2\text{D}} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sigma(E - E_C)$	$N_c^{2\text{D}} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} kT$
1 (wire)	$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2)$	$\rho_{\text{DOS}}^{1\text{D}} = \frac{m^*}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m^*}{2(E - E_C)}}$	$N_c^{1\text{D}} = \sqrt{\frac{m^* kT}{2\pi \hbar^2}}$
0 (box)	–	$\rho_{\text{DOS}}^{0\text{D}} = 2\delta(E - E_C)$	$N_c^{0\text{D}} = 2$

Tabla 4: Densidad de estados para estructuras en 3D, 2D, 1D y 0D.

Al decir que un punto cuántico no tiene espacios k disponibles para ser ocupados, implica la selección de momento es estricta, por lo que el coeficiente de absorción es determinado por:

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{v_g} \left[ \bar{B}(\nu) \frac{D_{ln} D_{lp}}{L^2} \bar{a} \bar{b} \hbar^2 \delta\nu + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] \quad (4.10)$$

Donde:

$$\bar{a} = \frac{1}{(m_n / m_p) + 1} \quad \text{y} \quad \bar{b} = 1 - \bar{a}$$

## Capítulo V: Conclusiones y trabajo futuro

La implementación de puntos cuánticos en la fabricación de materiales semiconductores requiere un entendimiento muy profundo en cuestiones de mecánica cuántica. La aplicación de estos trae motivación a una industria que se esmera por obtener dispositivos cada vez más eficientes y de menor tamaño.

Dejando de lado la cuestión de la complejidad al justificar el procedimiento, los resultados del análisis de estas hetero-estructuras se simplifican en gran medida al considerar una simetría esférica, lo cual no es nada extraño pues se ha observado que este tipo de construcción es muy común en la fabricación de este tipo de materiales. Se pueden evadir cuestiones como la geometría del material pues al ser esférico ya no es relevante y a pesar de requerir obtener los 3 números cuánticos para obtener la solución de la función de onda, por el momento, los niveles de energía pueden ser obtenidos pues solo existe una dependencia con el radio de la esfera y estos son suficientes para el análisis presentado en este trabajo.

Como trabajo a futuro queda seguir comparando los resultados obtenidos, ahora, no solo con aquellos trabajos de otros autores sino con puntos cuánticos fabricados por nosotros mismos y partiendo de ello determinar si es necesario introducir un factor de ajuste al método de fabricación de un dispositivo semiconductor. Pues el cálculo de los niveles de energía y del coeficiente de absorción, a pesar de su importancia, no son las únicas magnitudes de interés para realizar el análisis por completo de un semiconductor.

## Referencias

- [1] T. Kuphaldt, *Lessons in Electric Circuits: Volume III-Semiconductors*, 5th ed., vol. 3. 2009.
- [2] W. Roberts, *Principles of Nature: Towards a New Visual Language*. W.A. Roberts Pty. Limited, 2003.
- [3] J. Brainard, "Electron Cloud Atomic Model | CK-12 Foundation," 2012. [Online]. Available: <https://www.ck12.org/book/CK-12-Physical-Science-Concepts-For-Middle-School/section/2.44/>. [Accessed: 23-May-2018].
- [4] C. R. Nave, "Band Theory for Solids," *hyperphysics.phy-astr.gsu.edu*, 1999. [Online]. Available: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Solids/band.html>. [Accessed: 29-May-2018].
- [5] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 3rd ed. Wiley, 2011.
- [6] J. A. Hoerni, "Semiconductor device."
- [7] M. A. Green, *Solar cells: operating principles, technology, and system applications*, Illustrate. Prentice-Hall, 1982.
- [8] E. F. Schubert, *Physical Foundations of Solid-State Devices*, 2006th ed. Troy, New York: Rensselaer Polytechnic Institute, 2006.
- [9] W. R. Frensley, "Heterostructure and Quantum Well Physics," in *VLSI Electronics Microstructure Science*, vol. 24, Elsevier, 1994, pp. 1–24.
- [10] N. Patel, K. Vo, and M. Hernandez, "Electromagnetic Radiation," *Chemistry LibreTexts*. [Online]. Available: [https://chem.libretexts.org/Core/Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry/Spectroscopy/Fundamentals\\_of\\_Spectroscopy/Electromagnetic\\_Radiation](https://chem.libretexts.org/Core/Physical_and_Theoretical_Chemistry/Spectroscopy/Fundamentals_of_Spectroscopy/Electromagnetic_Radiation). [Accessed: 04-Jun-2018].
- [11] C. R. Nave, "Wave-Particle Duality," *hyperphysics.phy-astr.gsu.edu*, 1999. [Online]. Available: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/mod1.html>.
- [12] "Electromagnetic Spectrum - Wavelength, Frequency, And Energy, Wavelength Regions," *Science Encyclopedia*. [Online]. Available: [science.jrank.org/pages/2368/Electromagnetic-](http://science.jrank.org/pages/2368/Electromagnetic-)

Spectrum.html.

- [13] P. Ronan, "EM spectrum." 2013.
- [14] R. J. B. Balaguru, "Quantum Wells , Quantum Wires , Quantum Dots , Quantum Limit of Conductance , Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect School of Electrical & Electronics Engineering," in *Electrical & Electronics Engineering – Semiconductor Nanodevices*, pp. 1–29.
- [15] S. White and M. Cataluna, "Unlocking Spectral Versatility from Broadly-Tunable Quantum-Dot Lasers," *Photonics*, vol. 2, no. 2, pp. 719–744, Jun. 2015.
- [16] D. Miller, "Optical physics of quantum wells," in *Quantum Dynamics of Simple Systems*," ed. G.-L. ..., 1996.
- [17] S. Y. Myong, "Recent progress in inorganic solar cells using quantum structures.," *Recent Pat. Nanotechnol.*, vol. 1, no. 1, pp. 67–73, 2007.
- [18] B.-P. Gou and X.-J. Kong, "Electron energy levels for a finite rectangular quantum wire in a transverse magnetic field," *J. Appl. Phys.*, vol. 98, no. 5, p. 053710, 2005.
- [19] E. P. Pokatilov, V. a Fonoberov, S. N. Balaban, and V. M. Fomin, "Electron states in rectangular quantum well wires (single wires, finite and infinite lattices)," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 12, no. 42, pp. 9037–9052, 2000.
- [20] S. Gangopadhyay and B. R. Nag, "Energy levels in finite barrier triangular and arrowhead-shaped quantum wires," *J. Appl. Phys.*, vol. 81, no. 12, p. 7885, 1997.
- [21] A.-M. Lepadatu, I. Stavarache, M. L. Ciurea, and V. Iancu, "The influence of shape and potential barrier on confinement energy levels in quantum dots," *J. Appl. Phys.*, vol. 107, no. 3, p. 033721, 2010.
- [22] K. E. Jasim, "Quantum Dots Solar Cells," in *Solar Cells -New Approaches and Reviews*, vol. 3, Intech, 2015, pp. 303–31.
- [23] A. Jones, N. Verlinden, and P. R. Quimby, "Optical Properties of Quantum Dots: An Undergraduate Physics Laboratory," 2007.
- [24] C. Christensen and G. Saxe, "Semiconductor Quantum Dot Lasers," Technical University of

Denmark January, 2013.

- [25] L. Wessels, "What Was Born's Statistical Interpretation?," *Proc. Bienn. Meet. Philos. Sci. Assoc.*, vol. 2, pp. 187–200, 1980.
- [26] X. Leyronas and M. Combescot, "Quantum wells, wires and dots with finite barrier: Analytical expressions for the bound states," *Solid State Commun.*, vol. 119, pp. 631–635, 2001.
- [27] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. McGraw-Hill, 1968.
- [28] P. Cappellaro, "22.02 Introduction to Applied Nuclear Physics." Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare.
- [29] H. Hassanabadi and A. A. Rajabi, "Energy levels of a spherical quantum dot in a confining potential," *Phys. Lett. Sect. A Gen. At. Solid State Phys.*, vol. 373, no. 6, pp. 679–681, 2009.
- [30] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. London: Princeton University Press, 1957.
- [31] G. Lasher and F. Stern, "Spontaneous and Stimulated Recombination Radiation in Semiconductors," *Phys. Rev.*, vol. 133, no. 2A, pp. A553–A563, Jan. 1964.
- [32] G. W. Taylor, "Theory of operation of the quantum-well injection laser without k selection," *J. Appl. Phys.*, vol. 70, no. 5, pp. 2508–2535, 1991.
- [33] G. W. Taylor *et al.*, "A new theoretical approach for the quantum well semiconductor laser," *Prog. Quantum Electr.*, vol. 16, pp. 73–133, 1992.
- [34] P. S. Zory, *Quantum Well Lasers*. Academic Press, 1993.
- [35] G. W. Taylor, "The use of Einstein's coefficients to predict the theory of operation of a semiconductor laser," *J. Appl. Phys.*, vol. 68, no. 7, pp. 3122–3139, Oct. 1990.
- [36] K. Bamham *et al.*, "Quantum well solar cells," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 4332, no. 113/114, pp. 722–733, 1997.

## Índice de ilustraciones

Ilustración 1: Modelo atómico de Hidrógeno. El primer elemento de la tabla periódica es la estructura atómica más básica. ....	10
Ilustración 2: Modelo atómico de Bohr.....	11
Ilustración 3: Los electrones "orbitan" alrededor del núcleo como ondas estacionarias. a) Se tienen dos ciclos por órbita y b) 3 Ciclos por órbita.....	12
Ilustración 4: Representación visual de un átomo donde la posición del electrón se representa como una nube de probabilidades. ....	13
Ilustración 5: Algunos átomos comparten sus electrones para completar sus niveles de valencia.:.....	15
Ilustración 6: Red cristalina de Silicio.....	15
Ilustración 7: Formación de bandas continuas de energía.....	17
Ilustración 8: Representación gráfica de las bandas de energía. ....	17
Ilustración 9: Diagramas de bandas de energía. ....	18
Ilustración 10: En un semiconductor intrínseco a bajas temperaturas no hay conducción eléctrica. Al aplicar un incremento de temperatura se liberan electrones pero no los suficientes como para ser considerado un buen conductor.....	20
Ilustración 11: b) Un material donador tipo N, como el fósforo, al ser introducido a un material intrínseco como el Silicio crea electrones libres. c) Un material aceptor tipo P como el boro, al estar en contacto con el silicio crea un hueco.....	21
Ilustración 12: Entre los materiales semiconductores se encuentran el silicio y el germanio [6]. ....	21
Ilustración 13: Zona de depleción. ....	23
Ilustración 14: Niveles de Fermi .....	25
Ilustración 15: Energía de la banda de valencia y conducción de dos semiconductores contra posición.....	26
Ilustración 16: Ejemplo de una hetero-estructura, un transistor bipolar BJT.....	27
Ilustración 17: Hetero-estructura. ....	27

Ilustración 18: Proceso de emisión de un fotón [10].	29
Ilustración 19: Efecto fotoeléctrico.	29
Ilustración 20: Espectro electromagnético [13].	31
Ilustración 21: Pozo cuántico.	33
Ilustración 22: Esquemas geométricos de las estructuras de baja dimensión compara contra la energía [15].	35
Ilustración 23: Diferentes tipos de potencial.	39
Ilustración 24: Pozo cuántico infinito.	40
Ilustración 25: Niveles de energía para un pozo infinito.	44
Ilustración 26: Pozo cuántico finito.	45
Ilustración 27: Pozo cuántico finito sencillo.	46
Ilustración 28: Región I.	47
Ilustración 29: Potencial de confinamiento en la región II.	48
Ilustración 30: Región III	49
Ilustración 31: Método gráfico para encontrar los niveles de energía impares de un pozo cuántico finito.	53
Ilustración 32: Método gráfico para encontrar los niveles de energía pares de un pozo cuántico finito.	54
Ilustración 33: Sistema de coordenadas esféricas.	56
Ilustración 34: Pozo de potencial para un punto cuántico esférico.	65
Ilustración 35: Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de selección estricta de momento.	71
Ilustración 36: Diagrama de energía vs. momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de sin selección de momento.	72
Ilustración 37: Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de selección parcial de momento.	72
Ilustración 38: Densidad de estados.	75

## Índice de tablas

Tabla 1: Fragmento de la tabla periódica .....	22
Tabla 2: Polinomios asociados de Legendre .....	63
Tabla 3: Harmónicos Esféricos .....	64
Tabla 4: Densidad de estados para estructuras en 3D, 2D, 1D y 0D.....	77