UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN AGUSTÍN DE AREQUIPA

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y FORMALES

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA

Determinación de la Distribución de Cargas en Sistemas Cuasi-bidimensionales a partir de la Solución de las Ecuaciones de Schrödinger y Poisson Acopladas por el Método Autoconsistente

Tesis Presentada por el Bachiller:
Niko Churata Mamani
Para optar el título profesional de Licenciado en Física

Asesor: Mg. Hilda Maricela Quispe Abarca

Arequipa – Perú

2019

Determinación de la Distribución de Cargas en Sistemas Cuasi-bidimensionales a partir de la Solución de las Ecuaciones de Schrödinger y Poisson Acopladas por el Método Autoconsistente

Tesis Presentada por el Bachiller:
Dr. Niko Churata Mamani

Jurado:

1.- Mg. ROLANDO MOISÉS PERCA GONZALES ----------
(Presidente)

2.- Mg. HILDA MARICELA QUISPE ABARCA ----------
(Asesor)

3.- Dra. JESSICA MOSQUEIRA YAURI ----------
(Secretaria)

Agradecimientos

Agradezco a todos los profesores del pregrado que me guiaron hasta terminar la carrera de Física y lograr mi diploma de Bachiller en Física; y a todos los que me guiaron para adquirir el conocimiento y la preparación hasta la actualidad. Conocimiento y preparación que me permiten desarrollar este trabajo para obtener el título Profesional de Física.

Índice general

Agradecimientos 2
Índice general 3
Índice de figuras 5
Índice de tablas 7
Resumen 8
Abstract 9
Introducción 10
Capítulo I: Marco teórico 14
1. Revisión Teórica y Bibliográfica 14
1.1 Semiconductores 14
1.2 Ingeniería del gap 16
1.3 Sistemas 2D y cuasi-2D 19
1.4 Distribución electrónica 20
1.5 Interacción electrónica 21
1.6 Pozos cuánticos 21
Pozo cuántico simple 22
Pozo cuántico doble 23
Pozo cuántico triple 25
1.7 Ecuación de Schrödinger 27
1.8 Método autoconsistente 28
1.9 Efectos asociados a la distribución de carga en sistemas de pozos cuánticos 30
1.10 Campos magnéticos en pozos cuánticos 30
1.10.1 Niveles de Landau 30
1.10.2 Magnetorresistencia 33
Capítulo II: Método 35
2. Metodología 35
2.1 Implementación del método autoconsistente 35
2.2 Ejecución del código del método autoconsistente 38
2.3 Análisis de los resultados 38
Capítulo III: Análisis y discusión de resultados 40
3. Resultados y discusión 40
3.1 Estructuras de pozos cuánticos utilizados 40

3.2 Verificación del método autoconsistente 41
Pozos cuánticos dobles comparación de validación 41
Pozos cuánticos triples comparación de validación 43
3.3 Pozos cuánticos triples parabólicos y triangulares. 46
Pozos cuánticos triples y desocupación del tercer nivel de energía 48
Capítulo IV 51
4. Conclusiones 51
Apendice A 52
Efecto Aharonov-Bohm en sistemas electrónicos de bicapas 52
Referencias 55

Índice de figuras

Figura 1-1 Esquemas: (a) distribución de niveles de energía de dos átomos distantes (arriba) y dos átomos próximos (abajo); (b) bandas de energía cuando el sistema está en su posición de equilibrio; y (c) formación de bandas como función de la separación atómica. (b) y (c) adaptados de la referencia (Callister Jr, 2007). 15

Figura 1-2 Esquemas de los diferentes tipos de bandas de energía que los materiales pueden tener: (a) Metal, (b) metal y semimetal, (c) aislante y (d) semiconductor. Adaptado de la referencia (Callister Jr, 2007). 16

Figura 1-3 Diagrama del gap de energia (*Minimum energy bandgap*) como variación del parámetro de red (*Lattice constant*) para diferentes materiales, la figura es de la referencia (Singleton, 2001). 17

Figura 1-4 Esquema del perfil del potencial de equilibrio de un pozo cuántico dopado remotamente. 18

Figura 1-5 (Lamas, 2004) (a) Esquema de un sistema de crecimiento MBE. (b) Esquema de la formación de una monocapa cuando es crecida por el método de MBE en el lado izquierdo, en el lado derecha sus respectivas señales en el sistema RHHE. 19

Figura 1-6 Esquema de la formación de: (a) un pozo cuántico simple, (b) un pozo cuántico doble y (c) un pozo cuántico triple. 22

Figura 1-7 Esquema de la formación de un pozo cuántico doble y su distribución de niveles de energía. (a) Cuando los pozos están separados por distancias grandes y (b) cuando están próximos. 23

Figura 1-8 Esquema de la formación de un pozo cuántico triple y su distribución de niveles de energía. (a) Cuando cada pozo está separado por distancias grandes y (b) cuando están próximos. 25

Figura 1-9 Esquema mostrando la diferencia entre un sistema bidimensional y un sistema cuasi-bidimensional de cargas en estructuras de pozos cuánticos simple, doble y triple; donde Ei representa los niveles de energía disponibles y EF es él nivel de Fermi. 26

Figura 1-10 Esquemas para un sistema de pozo cuántico doble, donde se señala el campo magnético perpendicular $B \perp$ y el campo magnético paralelo $B \parallel$ respecto al gas de electrones cuasi-bidimensional; y esquema de los niveles de Landau. 31

Figura 1-11 Esquemas de niveles de Landau alineados y no alineados en sistemas de pozos cuánticos dobles (a)-(b) y pozos cuánticos triples (c)-(d). 32

Figura 1-12 Relación de los parametros oscilatorios que están asociados a las magnetorresistencias de los pozos: (a) cuántico simple, sólo la energia de Fermi (un término oscilatório); (b) cuántico doble, adicionalmente $\Delta 12$ (dos términos oscilatórios); (c) y cuántico triple, adicionalmente $\Delta 13$ y $\Delta 23$ (tres términos oscilatórios). 34

Figura 2-1 Diagrama de flujo del método autoconsistente utilizado en este trabajo. 37

Figura 3-1 Perfil de la banda de conducción de los pozos cuánticos utilizados en este trabajo. Donde $dw1$ y $dw2$ es el ancho de cada pozo del pozo cuántico doble y db es el ancho de las barreras; dc y dl son el ancho del pozo central y el ancho de los pozos laterales. 40

Figura 3-2 Mapa de la distribución de carga: total n_s y por subbandas ocupadas n_1 y n_2; y diagramas de la estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 es la energia de los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga n_s; para pozos cuánticos de anchos iguales y barreras de 14, 20 y 50 Å. 43

Figura 3-3 Mapa de la distribución de carga: total n_s y por subbandas ocupadas n_1 y n_2; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga n_s, para pozos cuánticos de anchos iguales pero barreras de 14, 20 Å. 45

Figura 3-4 Mapa de la distribución de carga: total n_s y por subbandas ocupadas n_1 y n_2; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 son las energías de los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga n_s, para pozos cuánticos de ancho y barreras iguales, dos con perfiles parabólicos de profundidad diferente y uno con perfil lineal. 47

Figura 3-5 Mapa de la distribución de carga: total n_s y por subbandas ocupadas n_1 y n_2; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga n_s, para pozos cuánticos rectos de anchos y barreras diferentes.....49

Figura A- 1 Esquema del efecto Aharonov-Bhom: una fuente genera particulas que atraviesan un sistema de doble rendija, pasando por las rendijas A y B y llegando a un detector, el camino cerrado de estas dos trayectorias encierra un campo magnético restringido sólo a la región del solenoide. 53

Figura A- 2 Esquema del efecto Aharonov-Bhom: una fuente genera particulas que atraviesan un sistema de doble rendija, pasando por las rendijas A y B rendijas y llegando a un detector, el camino cerrado de estas dos trayectorias encierra un campo magnético restringido sólo a la región del solenoide.....53

Índice de tablas

Tabla 3-1 Parámetros de una estructura de PCD, donde $\mathrm{dw1}$ es el ancho del pozo central, $\mathrm{dw2}$ es el ancho de los pozos laterales, db es el ancho de las barreras; $\Delta\mathrm{SAS}ref$ es la energía referencial (Mamani et al., 2008) entre el primer y segundo nivel de energía y $\Delta\mathrm{SAScal}$ es su valor calculado.....41

Tabla 3-2 Parámetros de una estructura de PCT, donde dc es el ancho del pozo central, $\mathrm{d}l$ es el ancho de los pozos laterales, db es el ancho de las barreras y $\mathrm{d}total$ es el ancho total del pozo; $\Delta ijref$ es la energía referencial (Wiedmann et al., 2009) entre el i-ésimo y el j-ésimo nivel de energía y $\Delta ij\mathrm{cal}$ es su valor calculado. 44

Tabla 3-3 Parámetros de una estructura de PCT, donde dc es el ancho del pozo central, $\mathrm{d}l$ es el ancho de los pozos laterales, db es el ancho de las barreras y $\mathrm{d}total$ es el ancho total del pozo; $\Delta ijref$ es la energía referencial entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía y $\Delta\mathrm{ijcal}$ es su valor calculado. Los gaps de energía son calculados para densidades electrónicas de 9, 12 y 15 x10^{11} cm^{-2} correspondientes a los tres cuadros a la derecha respectivamente. 46

Tabla 3-4 Parámetros de una estructura de PCT, donde dc es el ancho del pozo central, $\mathrm{d}l$ es el ancho de los pozos laterales, db es el ancho de las barreras y $\mathrm{d}total$ es el ancho total del pozo; $\Delta ijref$ es la energía referencial entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía y $\Delta ij\mathrm{cal}$ es su valor calculado.....48

Resumen

En este trabajo son presentados sistemas cuasi-bidimensional de electrones, es decir electrones confinados en dos dimensión, específicamente en pozos cuánticos dobles y triples, en los mismos se resuelve la ecuación de Schrödinger para determinar la distribución de su densidad electrónica y su estructura de niveles de energía. La solución de la ecuación de Schrödinger es realizada utilizando la técnica de métodos autoconsistentes, debido al acoplamiento del potencial de confinamiento y las funciones de onda. De los cálculos fueron generados mapas de colores de la distribución electrónica de las cargas a lo largo de la estructura como función de la densidad en los pozos cuánticos y diagramas de su estructura de niveles de energía, también como función de la densidad electrónica. En pozos cuánticos triples fueron obtenidos tres niveles de energía como era esperado, dependiendo del ancho del pozo central o lateral, se logró verificar que el parámetro Δ_{ij}, correspondiente al gap de energía entre el nivel j-ésimo y el nivel i-ésimo, están asociados a la intensidad de acoplamiento entre los electrones ubicados en esos niveles de energía, así mismo se verificó que esa intensidad de acoplamiento también depende de la proximidad de las cargas entre estos niveles de energía a lo largo del sistema cuántico. El resultado más importante observado es la desocupación del tercer nivel con el incremento de la densidad electrónica, esta desocupación debe estar asociada a la interacción electrónica a través del potencial de Poisson. Adicionalmente a esta desocupación este tipo de sistema posee una intensidad de acoplamiento muy baja entre las cargas entre los dos primeros niveles de energía ocupados el mismo que se manifiesta en la ubicación de las cargas en los pozos laterales, esta última propiedad es importante porque permitirían mapear el nivel de Fermi a través del efecto Aharonov-Bohm, por la aplicación de campos magnéticos paralelos al sistema cuasi-bidimensional.

Palabras claves: Sistemas bidimensionales de electrones, método autoconsistente, distribución electrónica, estructura de niveles de energía

Abstract

In this work, quasi-two dimensional electron systems are presented, that is electrons confined in two dimension, it is in double and triple quantum wells, called quantum structures; then Schrödinger equation is solved in this quantum structures to obtain the electronic density distribution along the quantum well and energy level structure. The Schrödinger equation is solved by self-consistent method due to potential energy and wave functions are coupled. Calculus, allow us to obtain color maps of the electronic charge distribution along de quantum well vs total electronic density. At the same time energy level structure vs total electron density is obtained. Results was focus in triple quantum well system, in this way it is was verified, this system usually occupy three energy levels. Also, it was verified that the Δ_{ij} parameter, which is energy gap between j-th and i-th energy levels, are related to the coupling intensity between electrons in those energy levels; also was verified that this coupling intensity depend over the distance between charges in those levels along the triple quantum well. The depopulation of the third energy level with increasing total electronic density in the system is the most important result; this depopulation should be related to electronic interaction through Hartree potential. Simultaneously to the depopulation, coupling intensity between two first occupied energy levels decrease and at the same time is follow by high distance between charges; it is because in both energy levels electrons are confined in lateral wells. This last characteristic is important because it allow us to map Fermi level through Aharonov-Bohm effect, by apply parallel magnetic field over quasi-two dimensional electrons.

Key words: two dimensional electron systems, selfconsistent method, electronic distribution, energy level structure

Introducción

Una herramienta importante en el proceso de creación de nuevos materiales cuánticos de bajas dimensiones, basados en materiales semiconductores, es el diseño de tales materiales. En este sentido un problema a resolver es diseñar estos materiales con características requeridas que cumplan determinados objetivos; por ejemplo, en sistemas electrónicos confinados, observar algunos fenómenos físicos como efectos de interacciones intersubbanda o efectos de acoplamiento débil entre capas electrónicas (G. M. Gusev, Wiedmann, Raichev, Bakarov, & Portal, 2009; Gennady Mikhailovich Gusev, Bakarov, Lamas, & Portal, 2007; Mamani, Gusev, Lamas, Bakarov, & Raichev, 2008; Hu & MacDonald, 1992; Wu, Jiang, & Weng, 2010). Una de las herramientas auxiliares más simples en el diseño de materiales cuánticos con sistemas cuánticos confinados, es la solución autoconsistente de la ecuación de Schrödinger y Poisson acopladas (Brey, Dempsey, Johnson, & Halperin, 1990; Rimberg & Westervelt, 1989; Sajoto, Jo, Santos, & Shayegan, 1989).

Uno de los sistemas de bajas dimensiones más estudiados es el gas bidimensional de electrones, esto es, un gás confinado en una dimensión. Los materiales que permiten crear un sistema de confinamiento de electrones en la banda de conducción, de manera sencilla, son aquellos que permiten un modulamiento del gap de energía entre la banda de conducción y la banda de valencia. Utilizando este modulamiento es posible diseñar sistemas cuánticos con diferentes perfiles de confinamiento de electrones en la banda de conducción o huecos en la banda de valencia. En el estudio de las propiedades de transporte de estos sistemas son requeridos sistemas de alta calidad, esto es, sistemas con dispersión mínima debida a efectos de impurezas, efectos de superficie o interface, defectos en las aleaciones entre los principales (Ferry, 2016); esta calidad del sistema cuántico se mide en términos de la movilidad de sus portadores de carga. La dispersión por impurezas se minimiza considerando el tipo de dopaje en la estructura, y los efectos de superficie o interface se minimizan utilizando el tipo de material apropiado. Uno de estos materiales es la aleación ternaria de $Al_xGa_{1-x}As$ donde el gap de esta aleación puede modularse por la variación x de la concentración de aluminio (Adachi, 1994).

Sistemas cuánticos de bajas dimensiones de alta calidad principalmente son creados por sistemas de crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE, Molecular Beam Epitaxy)

(Pfeiffer & West, 2003), la dificultad en este tipo de técnica de crecimiento de materiales está en el costo del mismo sistema y el costo operativo del sistema. Adicionalmente el estudio del transporte eléctrico en este tipo de materiales se realiza utilizando la técnica experimental de magnetorresistencia. A pesar de su simplicidad está técnica es una de las más caras en el área de semiconductores, debido a la necesidad de estudiar el sistema cuántico en bajas y muy bajas temperaturas, abajo de la temperatura del Helio líquido; así el uso de equipamientos caros (criostatos de bajas temperaturas) y aún más, los costos de operatividad debido al uso de Helio líquido para la refrigeración hacen necesario optimizar la cantidad de sistemas a ser estudiados. Siendo así cuanto mayor el número de muestras a estudiar los costos tanto de fabricación como de caracterización son mayores; por lo cual fabricar directamente el material requerido (diseñado) es lo más deseable, siendo así, herramientas auxiliares que permitan disminuir el número de muestras a ser fabricadas y caracterizadas son consideradas.

En el estudio de sistemas bidimensionales y cuasi-bidimensionales, la solución autoconsistente de la ecuación de Schrödinger y de Poisson acopladas es el modelo teórico más simple que permite obtener resultados que son utilizados en investigación básica y de actualidad (G. M. Gusev et al., 2009; Hu & MacDonald, 1992; Mamani et al., 2008; Rimberg & Westervelt, 1989; Ullah, Gusev, Bakarov, & Hernandez, 2017). El método autoconsistente, aplicado a la ecuación de Schrödinger en un sistema confinado en una dimensión, se constituye en una herramienta que permite obtener la distribución electrónica del sistema a lo largo de la región de confinamiento y así mismo permite obtener su estructura electrónica de niveles de energía.

Los sistemas de bajas dimensiones más utilizados son los pozos cuánticos simples (PQS), pozos cuánticos dobles (PCD) y pozos cuánticos triples (PCT), donde los principales parámetros a ser considerados en el método autoconsistente es el perfil de los pozos, esto es: el ancho de los pozos el ancho de las barreras y las alturas energéticas de los pozos y de las barreras; variando esos parámetros se logra obtener distribuciones de carga y sus respectivos niveles de energía. Después del descubrimiento del efecto hall cuántico entero (Klitzing, Dorda, & Pepper, 1980), estos sistemas fueron ampliamente estudiados usando técnicas de magnetorresistencia aplicando campos magnéticos perpendiculares al sistema bidimensional de cargas (Raikh & Shahbazyan, 1994; Schubnikow & De Haas, 1930; Tsui, Stormer, & Gossard, 1982; Zudov, Du, Simmons, & Reno, 2001). Sin embargo el estudio de

sistemas bidimensionales bajo la aplicación de campos paralelos ha venido siendo intensificada en los últimos años, debido a la alta calidad de los sistemas cuánticos fabricados; en esa corriente uno de los sistemas más explorados son los pozos cuánticos dobles (PCD) (Gennady Mikhailovich Gusev et al., 2007; Guennadii Michailovich Gusev, Bakarov, Lamas, & Portal, 2008), debido el paso de cargas entre diferentes niveles de energía ocupados o entre diferentes pozos, este fenómeno denominado tunelamiento, el mismo que depende del ancho de la barrera de energía y de la distribución electrónica entre pozos.

El propósito para esta tesis podría ser optimizar los costos de fabricación de materiales escogiendo los tipos de estructuras antes de fabricarlos, sin embargo no lo es; debido que, el método autoconsistente en el diseño de materiales es ampliamente utilizado (Harrison & Valavanis, 2016; Nag, 2001), por lo cual cualquier implementación del método autoconsistente de la ecuación de Schrödinger y Poisson acopladas, ya ayudan naturalmente en acelerar el proceso de investigación de nuevos materiales. Por otra parte, la exploración de la distribución de carga, es decir la interacción entre cargas, y la estructura de niveles de energía en un sistema confinado no ha sido muy estudiada, por lo cual es un área abierta aún para contribuir en la investigación básica en el transporte eléctrico en sistemas de bajas dimensiones.

Enfatizando nuevamente que la solución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y Poisson acopladas en sistemas con confinamiento unidimensional a pesar de su simplicidad permite obtener resultados que son utilizados en investigación básica y de actualidad; esto, apenas considerando los niveles de energía ocupados y su distribución de carga. En ese sentido en este trabajo de tesis el objetivo *es utilizar el método autoconsistente en la aplicación de la ecuación de Schrödinger y Poisson acopladas en diferentes tipos de perfil de confinamiento para determinar diferentes distribuciones de carga que puedan permitir explorar fenómenos físicos como acoplamiento débil entre cargas, fenómenos de acoplamiento de cargas en niveles de energía ocupados, o nuevos fenómenos relacionados a la interacción electrón-electrón*. Para lograr este objetivo son considerados diferentes tipos de perfiles de confinamiento, pozos cuánticos dobles y pozos cuánticos triples y cabe señalar que parte de los cálculos fueron realizados utilizando un computador, Intel (R) core (TM) i7 con procesador de 3.2 GHz, del grupo de Física Teórica de la Escuela Profesional de Física de la UNSA.

El análisis desarrollado en esta tesis se organiza en 4 capítulos:

- Capítulo I: Son presentados los conceptos teóricos fundamentales referidos a lograr el objetivo de esta tesis. Primero son introducidos conceptos de semiconductores e ingeniería del gap de energía; a seguir son presentados los sistemas de bidimensionales de cargas y distribución de cargas en sistemas de pozos cuánticos. Luego es presentado el marco teórico de la solución de Schrödinger conjuntamente con el método autoconsistente señalando el acoplamiento con la ecuación de Poisson y finalmente se señala la aparición de los niveles de Landau y se presenta resumidamente la técnica de la magnetorresistencia para el estudio de fenómenos de transporte eléctrico en sistemas cuánticos
- Capítulo II: Se presenta la metodología utilizada para desarrollar el trabajo. Se señala el modo de la implementación del método autoconsistente en lenguaje de programación C. Luego se indica la forma de validación de este programa utilizando valores experimentales de sistemas conocidos en la literatura. Luego se indica como deben ser obtenidos mapas de colores de las distribuciones electrónicas y sus respectivos diagramas de niveles de energía y finalmente como debe ser realizado el análisis de los mismos.
- Capítulo III: Son presentados los resultados y las discusiones de los mismos. Primero son presentados resultados de la validación del programa implementado en C, la validación es realizada considerando resultados de pozos cuánticos dobles y pozos cuánticos triples. Luego son presentados resultados de pozos cuánticos triples con perfiles diferentes donde se confinan cargas principalmente el pozo central, y finalmente el resultado principal donde se presenta sistemas que pueden desocupar el tercer nivel ocupado a pesar del incremento de las cargas en el pozo cuántico.
- Capítulo IV: Se indica las conclusiones de este trabajo de tesis para obtener el título de licenciado en Física.

Capítulo I: Marco teórico

1. Revisión Teórica y Bibliográfica

1.1 Semiconductores

Los materiales pueden ser distinguidos de acuerdo a su capacidad de conducción de la corriente eléctrica, en este sentido la teoría de bandas permite una explicación clara de este tipo de distinción. Una forma intuitiva de describir la teoría de bandas consiste: en un sistema cuántico, cuando dos sistemas iguales se aproximan (cada uno con el mismo valor de energía del primer nivel) el conjunto forma un sistema cuántico con dos niveles de energía; esto es, el primer nivel asociado a cada sistema cuántico individual se desdobla en en dos niveles próximos por causa de la degeneración. Ahora si tres sistemas cuánticos se aproximan cada uno con el mismo nivel de energía, el nuevo sistema se desdoblará en tres niveles de energía próximos. Finalmente si una cantidad muy grande N de sistemas cuánticos se aproximan todos con el mismo nivel de energía ocurrirá un desdoblamiento en N niveles de energía próximos. Si N es del orden de 10^{23} la separación entre los niveles desdoblados se torna despreciable por tanto el conjunto de niveles formará una banda continua. En un sistema real de varios átomos los niveles atómicos más externos son más perturbados por la proximidad de los átomos, de manera que los niveles más externos serán los primeros en ser desdoblados, si la aproximación aumenta los niveles atómicos más internos comienzan a ser desdoblados. Sin embargo, existe un punto de máxima aproximación que corresponde a la separación de equilibrio para la formación de un determinado sólido y este punto de equilibrio determina el ancho posible de las bandas de energía. Los esquemas mostrados en la figura 1-1 ilustran con bastante claridad este fenómeno de la formación de bandas en un sólido cristalino: el fenómeno de influencia de los niveles más internos en presencia de dos átomos figura 1-1(a) y la formación de bandas en un sólido como función de la distancia de aproximación, indicando las bandas en la posición de equilibrio figura 1-1(b).

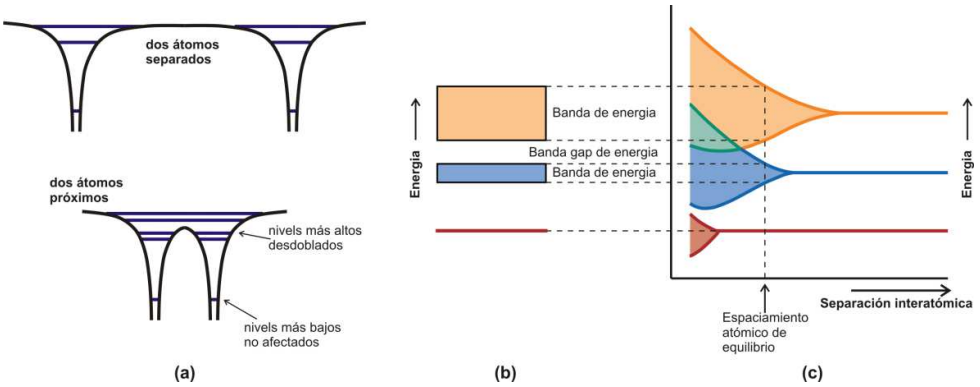

Figura 1-1 Esquemas: (a) distribución de niveles de energía de dos átomos distantes (arriba) y dos átomos próximos (abajo); (b) bandas de energía cuando el sistema está en su posición de equilibrio; y (c) formación de bandas como función de la separación atómica. (b) y (c) adaptados de la referencia (Callister Jr, 2007).

La banda que caracteriza a un material es la última banda ocupada (nivel más externo). A temperatura de 0 K existen 4 tipos de estructura de bandas. La primera indicada en la figura 1-2(a) donde la última banda ocupada esta parcialmente ocupada con electrones; donde el último nivel de energía ocupado a temperatura de 0 K es denominado nivel de Fermi (o energía de Fermi, E_F). Este tipo de banda es típico de los metales. La segunda estructura de bandas, figura 1-2(b), es formada por una superposición de una banda llena y una vacía, este tipo de bandas define también a metales como el magnesio; donde el nivel de Fermi es determinado por la distancia (energética) de superposición. El tercer tipo, figura 1-2(c) y el cuarto tipo, figura 1-2(d) son semejantes; en estos casos la banda de valencia (BV) esta completamente ocupada y la banda de conducción (BC) está completamente vacía, ambas bandas están separadas por una banda vacía, llamada también *gap* de energía (E_g). La magnitud de E_g define si los materiales son aislantes o semiconductores; si E_g es relativamente grande los materiales son aislantes, caso opuesto son llamados semiconductores.

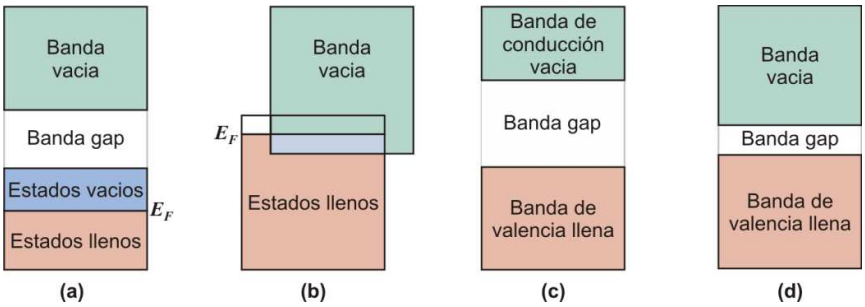

Figura 1-2 Esquemas de los diferentes tipos de bandas de energía que los materiales pueden tener: (a) Metal, (b) metal y semimetal, (c) aislante y (d) semiconductor. Adaptado de la referencia (Callister Jr, 2007).

En un semiconductor a temperatura 0 K la BV está llena de electrones y la BC está completamente vacía. Si no hay electrones en la BC no existirá conducción de electricidad en el semiconductor. En este caso, el semiconductor funciona como aislante. Sin embargo, al aumentar la temperatura algunos electrones en la BV tendrán energía suficiente para saltar a la BC, dejando al mismo tiempo estados vacios (huecos) con carga positiva en la BV. Estos electrones excitados térmicamente en la BC y los huecos en la BV permiten la conducción de corriente eléctrica en el semiconductor. Por ejemplo a temperatura ambiente la resistividad eléctrica de un semiconductor varia entre 10^{-2} y 10^{9} ohm-cm; una resistividad alta en relación a los conductores (metales) y baja en relación a los aislantes (Callister Jr, 2007; Kittel, 1976).

1.2 Ingeniería del gap

La ingeniería del gap puede ser resumida en: el estudio de la discontinuidad de la banda de conducción y de la banda de valencia en la formación de heteroestructuras para la formación de materiales con diferentes perfiles de potencial, donde la heteroestructura más simple conocida es una interface metal-óxido.

La elección de semiconductores apropiados permite obtener heteroestructuras de alta calidad y en la búsqueda de este objetivo el factor más importante es la mínima diferencia posible de las constantes de red de los materiales que forman la discontinuidad de las bandas de energía en una heterounión. Caso contrario se crean dislocaciones en las regiones de la interface generando pérdida de calidad de la interface que puede llevar a excluir la observación de efectos cuánticos.

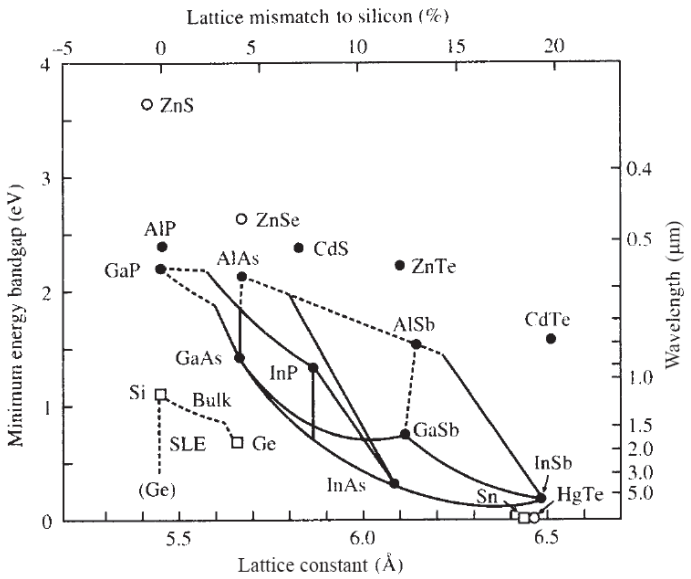

Figura 1-3 Diagrama del gap de energia (*Minimum energy bandgap*) como variación del parámetro de red (*Lattice constant*) para diferentes materiales, la figura es de la referencia (Singleton, 2001).

Interfaces de $Al_xGa_{1-x}As$-GaAs, es la combinación más utilizada en la investigación de transporte electrónico debido a que la pequeña diferencia de la constante de red entre el $Al_xGa_{1-x}As$ y el GaAs (donde $0 \leq x \leq 1$, con x menor de 0.15 a 300 K) minimiza los efectos de estados de interface (dispersión por efecto de interface) (Basu, 1990; Gold, 1986), la constante de red del GaAs y del AlGaAs es en el orden de 5.2 Å como se muestra en la figura 1-3. El tamaño de la discontinuidad en el caso de $Al_xGa_{1-x}As$ en relación al GaAs fueron estudiados para diferentes concentraciones x de aluminio; sin embargo no se tiene un consenso definitivo, (Adachi, 1994; Seraide, 2001). Sin embargo, a pesar de las diferencias es posible lograr resultados importantes en el estudio de las propiedades de transporte de electrones en sistemas bidimensionales en este tipo de estructuras (Janotti & Van de Walle, 2009; Lamas, 2004; Ma et al., 2011; Mamani et al., 2008; Ullah et al., 2017; Wiedmann et al., 2009).

Sistemas dopados son aquellos donde se introducen átomos denominados donadores o aceptadores, los mismos que pueden agregar portadores de carga como electrones o atrapar electrones generando huecos. En sistemas semiconductores un tipo de dopaje especial es el denominado, dopaje modulado, en este tipo de dopaje los átomos donadores se agregan en la capa del material de mayor gap. Sistemas cuánticos con dopaje modulado alcanzan altas movilidades por tanto son denominados de alta calidad, lo que es altamente

deseado en el estudio de transporte electrónico, altas movilidades indican grados de dispersión mínimos. La figura 1-4 muestra un ejemplo de una heteroestructura de tres capas, una capa de GaAs con gap pequeño entre dos capas de AlGaAs con gap grande.

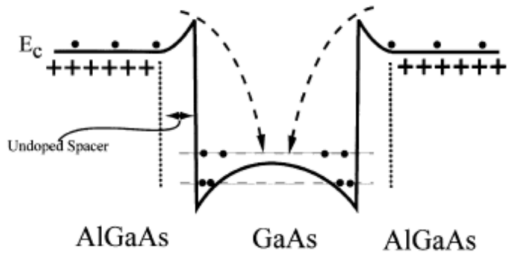

Figura 1-4 Esquema del perfil del potencial de equilibrio de un pozo cuántico dopado remotamente.

La variación del gap de energía en un material puede depender de varias propiedades físicas del mismo como es el caso de la tensión aplicada al material en estructuras nanométricas como hilos cuánticos, ejemplo en nano hilos de ZnO (Janotti & Van de Walle, 2009; Ma et al., 2011). Sin embargo, el trabajo presentado en esta tesis está pensado en la variación del ancho del gap como función de la concentración de Al en la aleación $Al_xGa_{1-x}As$, debido a que el mismo permite variar el ancho del gap de forma más versátil, dar la forma del perfil de la banda de conducción de la forma deseada.

La técnica de epitaxia por haz molecular (MBE, Molecular Beam Epitaxy) es la técnica más apropiada para crear estructuras de bajas dimensiones de alta calidad. En un sistema de MBE los elementos que se desean depositar sobre un substrato son colocados en células de efusión, posteriormente son evaporados o sublimados (dependiendo del elemento). En la superficie del substrato ocurren procesos químicos y físicos como la adsorción de los átomos o moléculas, migración superficial (difusión), disociación de moléculas, incorporación térmica de átomos en la red cristalina y desorción térmica de las especies no incorporadas. La incorporación de moléculas es controlada periódicamente, esto es, la cantidad de material cubre una capa uniforme de material, este capa es denominada monocapa, por ejemplo en el caso del GaAs la monocapa tiene espesor de 2.83 Å (Lamas, 2004). El tamaño del espesor indica el control de crecimiento que la técnica MBE posee. El ancho de la monocapa nos limita

el tamaño de las estructuras que se podrían construir, así en este trabajo la menor dimensión corresponde a los anchos de barrera es del orden de 14 Å.

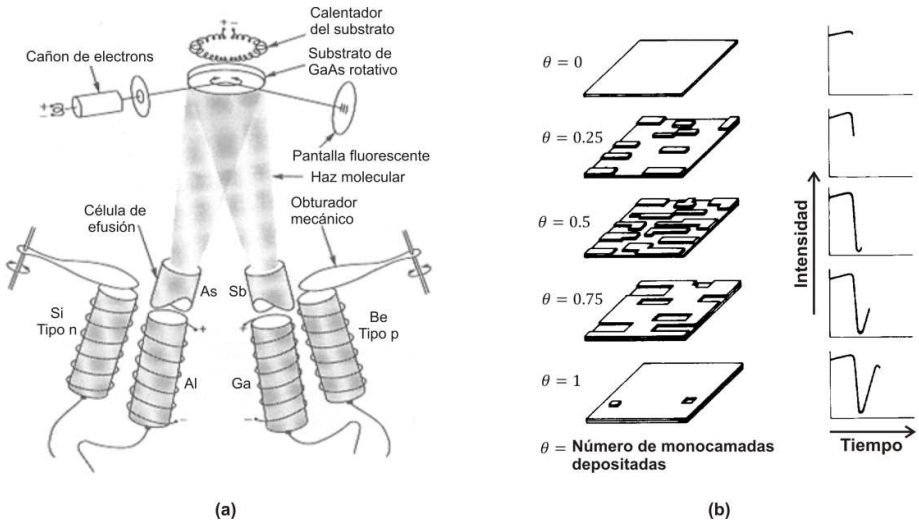

Figura 1-5 (Lamas, 2004) (a) Esquema de un sistema de crecimiento MBE. (b) Esquema de la formación de una monocapa cuando es crecida por el método de MBE en el lado izquierdo, en el lado derecha sus respectivas señales en el sistema RHHE.

1.3 Sistemas 2D y cuasi-2D

Sistemas de bajas dimensiones generalmente son clasificados por el número de dimensiones reducidas. Una definición más precisa señala que está asociada al número de grados de libertad del momento de la partícula (Harrison & Valavanis, 2016). Sistemas bidimensionales (2D) son aquellos que cuantizan el movimiento de un sistema de partículas quánticas en una dimensión permitiendo libertad de movimiento en las dos dimensiones adicionales. Existe la denominación de sistemas estrictamente 2d y sistemas cuasi-2d, el primero se distingue porque posee apenas un nivel de energía ocupado; los sistemas cuasi-bidimensionales (cuasi-2D), a diferencia de sistemas estrictamente 2D, poseen más de un nivel de energía ocupado, existiendo la posibilidad de transiciones de las partículas entre niveles de energía. Estos niveles de energía también son denominados subbandas de energía.

Por tanto transiciones entre diferentes niveles de energía, también son denominados transiciones intersubbanda[1].

Un sistema de 2D con portadores de carga de electrones es denominado de sistema de gas de electrones bidimensionales (2DEG, "*2 dimensional electron gas*"); es decir puede ser aplicada la teoría de gases en el estudio de este tipo de partículas, particularmente en el fenómeno de transporte.

1.4 Distribución electrónica

La distribución electrónica está relacionada a la forma cómo se acomodan físicamente los electrones a lo largo en un sistema cuántico. En sistemas de pozos cuánticos dobles o triples, para densidades moderadas de electrones, estos se distribuyen en los dos o tres niveles de energía usualmente ocupados. Estos niveles de energía distribuyen sus cargas a lo largo de los dos o tres pozos.

Dentro del formalismo teórico la distribución electrónica es establecida en la aproximación de Hartree que es gobernada por la ecuación de Poisson (Szabo & Ostlund, 2012). La distribución electrónica depende principalmente de la interacción electrón-electrón. La ecuación de Poisson asocia el potencial de Hartree y la densidad electrónica del sistema; en la aproximación de Hartree se considera que un electrón interactúa con el potencial asociado a todos los otros electrones (potencial promedio), de manera que resolver la ecuación de Schrödinger para un sólo electrón, es suficiente para describir el sistema cuántico con muchos electrones. La energía de Fermi, que corresponde al último nivel de energía ocupado, se calcula considerando la densidad electrónica total del sistema, y al mismo tiempo la densidad por subbandas (o por cada nivel ocupado) es calculada considerando la energía de Fermi y la energías por subbandas:

$$\boldsymbol{n_i = m^* 4.17731 * g_v (E_F - E_i)} \qquad 1.4.1$$

Donde m^* es la masa efectiva eléctrónica, g_v es la degeneración de valle, E_F y E_i son las energías de Fermi y de la i-ésima subbanda ocupada. El cálculo de la energía de Fermi y de la densidad son mutuamente dependientes, la solución de la ecuación de Schrödinger permitirá

[1] Subbanda e intersubbanda son denominaciones usualmente utilizadas en el área de transporte de portadores en bajas dimensiones.

aclarar esta dependencia. Dado que la solución de la ecuación de Schrödinger para el sistema cuántico es realizada en la aproximación de Hartree, la solución apenas de una partícula es suficiente para describir el sistema; en este caso la distribución electrónica es gobernada por las funciones de onda de cada estado ocupado y la densidad total en cada subbanda ocupada, las cuales son n_i. Por tanto, n_i se distribuye a lo largo del pozo según $\psi_i^*(z)\psi_i(z)$, esto es:

$$\boldsymbol{n_i(z) = n_i\psi_i^*(z)\psi_i(z)} \qquad 1.4.2$$

y la distribución de la densidad total es

$$\boldsymbol{n(z) = \sum_{i=1}^{N} n_i(z) = \sum_{i=1}^{N} n_i\psi_i^*(z)\psi_i(z)} \qquad 1.4.3$$

1.5 Interacción electrónica

La interacción electrónica en una misma subbanda es gobernada por el potencial de Hartree a través de la ecuación de Poisson para la densidad de portadores de carga. En esta aproximación es considerado un electrón del sistema bajo el cual interactúa un potencial promedio originado por todas las otras cargas (potencial estático). El potencial V_H, denominado potencial de Hartre, es observado por un electrón en la posición z debido al resto de electrones y expresado en forma diferencial como:

$$\boldsymbol{\frac{d^2V_H(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} n(z)} \qquad 1.5.1$$

donde ϵ es la permitividad eléctrica del material, e la carga electrónica. La interacción electrónica será tratada a través de la intensidad de acoplamiento entre las diferentes subbandas ocupas en los pozos cuánticos dobles y triples. Esta intensidad de acoplamiento también está asociada a la separación entre las cargas dentro del sistema cuántico, cuanto más próximas las cargas, el acoplamiento es mayor.

1.6 Pozos cuánticos

Pozos cuánticos son sistemas en los cuales se pueden confinar portadores de carga (Harrison & Valavanis, 2016; Nag, 2001). A seguir se presentan sistemas de pozos cuántico simple, doble y triple, los mismos que son usualmente utilizados en el estudio de transporte

electrónico cuántico; y como se señaló en las secciones anteriores se utiliza la ingeniería del gap para generar este tipo de estructuras.

i) **Pozo Cuántico Simple (PCS)**: Está formado por un material de gap de energía estrecho en medio de dos materiales de gap extenso, figura 1-6a.

ii) **Pozo Cuántico Doble (PCD)**: Formado por dos pozos cuánticos (material de gap estrecho) separados por un material de gap largo con ancho espacial corto. Los pozos son flanqueados por barreras (material de gap grande), figura 1-6b.

iii) **Pozo Cuántico Triple (PCT)**: Formado por tres pozos cuánticos (material de gap pequeño) separados por barreras estrechas (material de gap largo) y con barreras largas en ambos extremos del PCT, figura 1-6c.

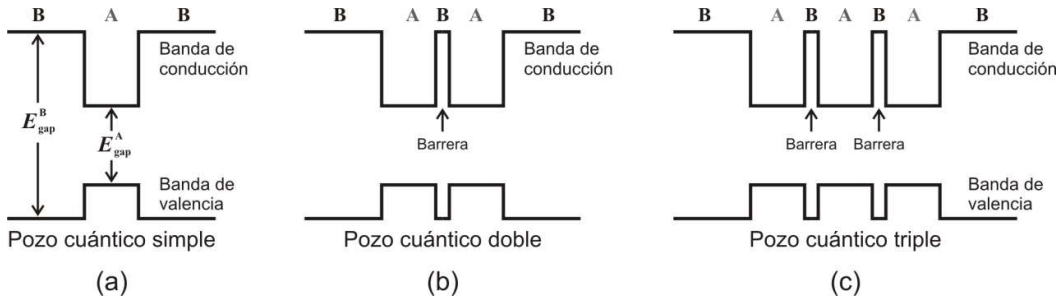

Figura 1-6 Esquema de la formación de: (a) un pozo cuántico simple, (b) un pozo cuántico doble y (c) un pozo cuántico triple.

La ingeniería del gap permite generar dos estructuras de pozos en un mismo material, pozos en la banda de conducción y en la banda de valencia, como se muestra en la figura 1-6. Los pozos en la banda de valencia son utilizados para confinar portadores de carga positiva, y los pozos en la banda de conducción son utilizados para confinar electrones. Los sistemas cuánticos tratados en este trabajo corresponden a sistemas de confinamiento sólo en la banda de conducción.

Pozo cuántico simple

En los sistemas cuánticos de PCS los niveles de energía disponibles se encuentran relativamente muy separados y el número de niveles de energía ocupados depende de la

densidad electrónica del sistema; así mismo, el último nivel de energía ocupado no se encuentra muy próximo del nivel de energía de Fermi.

Pozo cuántico doble

La distribución de los niveles de energía en PCDs es relativamente más compleja, esta formación puede ser analizada a partir de dos PCS's iguales que son aproximados. En un caso más general el sistema de dos PCS's es asimétrico; esto es, un pozo más profundo que el otro, donde esa diferencia de energia es dada por Δ. Si consideramos $\Delta = 0$, sin asimetría, y considerando los PC's separados por una distancia suficientemente grande los PC's podrían ser considerados independientes y ambos con el primer nivel de energía (E_1) iguales. Cuando los pozos fuesen aproximados lo suficiente para que hubiese una interacción entre ambos; estos niveles de energía iguales son desdoblados en dos niveles de energía próximos (E_{1+} energía mayor e E_{1-} energía menor). La energía de separación entre estos niveles de energía desdoblados es Δ_{SAS} y jústamente este parámetro determina la interacción entre los pozos. Las energías desdobladas y el parámetro que determina la interacción entre pozos son dados por:

$$\boldsymbol{E_{1\pm} = E_1 \pm \frac{1}{2}\Delta_{SAS}} \qquad 1.6.1$$

$$\boldsymbol{\Delta_{SAS} = E_{1+} - E_{1-}} \qquad 1.6.2$$

donde el subíndice SAS hace referencia a la diferencia entre los estados antisimétrico y simétrico, ver figura 1-7.

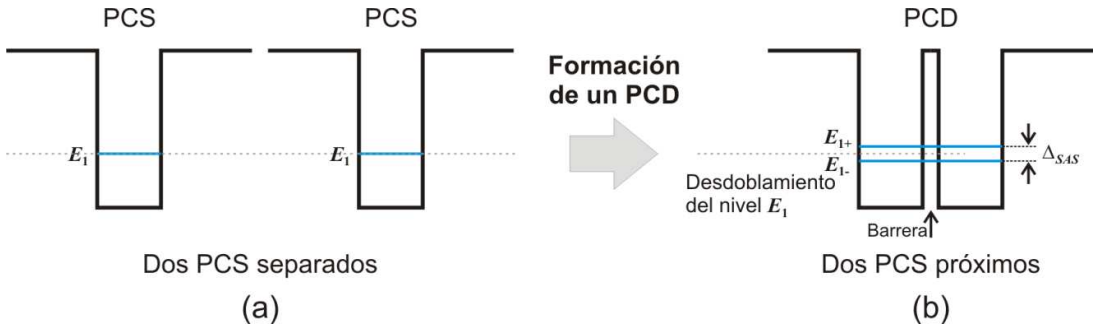

Figura 1-7 Esquema de la formación de un pozo cuántico doble y su distribución de niveles de energía. (a) Cuando los pozos están separados por distancias grandes y (b) cuando están próximos.

Cuando los pozos no interactúan los pozos poseen funciones de onda propias e idénticas en su forma; φ_1 el estado del pozo del lado izquierdo y φ_2 el estado del pozo del lado derecho. Cuando los pozos interactuan, por la proximidad entre los pozos, una aproximación de las funciones de onda del sistema interactuante son dadas por:

$$\boldsymbol{estado\ simétrico} \qquad \boldsymbol{\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2)} \qquad 1.6.3$$

$$\boldsymbol{estado\ antisimétrico} \qquad \boldsymbol{\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2)} \qquad 1.6.4$$

En PCDs con asimetría la aproximación anterior aún es válida, el paramento de asimetría Δ aparece en el cálculo de los niveles de energía del sistema interactuante, así los niveles de energía desoblados son: $E_{1\pm} = E_1 \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + \Delta_{\mathrm{SAS}}^2}$. La interacción entre los pozos es considerada como la posibilidad de tunelamiento entre los dos pozos; por tanto, el parámetro de tunelamiento entre sistemas de dos PCS es dado por Δ_{SAS}. Así, el tunelamiento será mayor cuanto mayor el valor de Δ_{SAS}.

Comparando la distribución de niveles de energía entre un PCS y un PCD, podemos señalar que los niveles de energía en un PCD apenas son equivalentes a los de un PCS desdoblados y separados por una pequeña diferencia de energía. Desde, que usualmente en el estudio de transporte electrónico en PCS apenas se considera un nivel de energía ocupado para densidades electrónicas moderadas, el equivalente en pozos cuánticos dobles corresponderá a dos niveles de energía ocupados resultado de un desdoblamiento; y en el caso de tres pozos cuánticos corresponderá a tres niveles de energía, también resultado de un desdoblamiento triple. Una de las características principales de PCD es la ocupación de apenas dos subbandas ocupadas en el rango característico de densidades de portadores $n_s =$ (1-20)x10^{11}cm^{-2} (rango relativamente grande) (Mamani et al., 2008). Para densidades moderadamente mayores arriba de 10x10^{11}cm^{-2} una diferencia fundamental en relación a los PCSs es que los niveles de energía de un PCD son más próximos al nivel de Fermi, característica que le confiere un acceso más directo a partir del estudio de transporte electrónico por técnicas de magnetorresistencia.

Pozo cuántico triple

De modo similar que el pozo duplo un pozo cuántico triple simétrico es formdo por tres pozos cuánticos simples de la misma profundidad y por tanto igual valor de energía del primer nivel de energía, E_1. Cuando los pozos se proximan este nivel de energia se desbobla en tres nivel de energia próximos ($E_{1+} > E_1 > E_{1-}$), ver figura 1-8. Estos niveles de energía son bastante próximos; por lo cual una vez ocupados generan interacción de entre los electrones cada nivel de energia ocupado, las mismas que puede ser consideradas dependiendo de las diferencias de energia entre cada nivel ocupado.

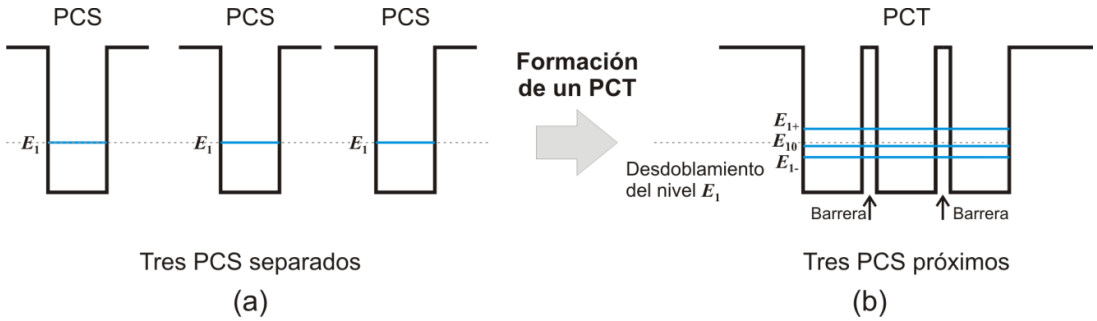

Figura 1-8 Esquema de la formación de un pozo cuántico triple y su distribución de niveles de energía. (a) Cuando cada pozo está separado por distancias grandes y (b) cuando están próximos.

Cuando los pozos no interactúan los pozos poseen funciones de onda propias e idénticas en su forma; φ_1 el estado del pozo del lado izquierdo, φ_2 el estado del pozo central y φ_3 el estado del pozo del lado derecho. Cuando los pozos interactuan por la proximidad entre los ellos, una aproximación de las funciones de onda del sistema interactuante es dada por (Liu & Li, 2014):

$$\boldsymbol{estado\ fundamental} \qquad \boldsymbol{\psi_0 = a_0(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3)}$$

$$\boldsymbol{primer\ nivel\ excitado} \qquad \boldsymbol{\psi_1 = a_1(\varphi_1 - \varphi_3)}$$

$$\boldsymbol{segundo\ nivel\ excitado} \qquad \boldsymbol{\psi_2 = a_2(\varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_3)}$$

donde los coeficientes a_i son constantes de normalización.

En los pozos cuánticos triples las interacciónes son más complejas debido a tres posibilidades de interacción, entre cada par de niveles ocupados. Por lo cual, la intercción

Coulombiana entre cargas de los diferentes niveles ocupados, constituye una fuente de fenómenos físicos a ser explorado (Jo, Suen, Engel, Santos, & Shayegan, 1992; Liu & Li, 2014; MacDonald, 1990).

Resumiendo, los sistemas de pozos cuánticos dobles y triples estudiados en este trabajo son sistemas cuasi-bidimensionales porque ocupan más de un nivel energía. En la figura 1-9 se ilustra esquematicamente el pozo cuántico simple, el pozo cuántico doble, y el pozo cuántico triple; respectivamente con uno, dos y tres niveles ocupados; se esquematiza la dirección de crescimiento y el material como siendo bloques planos uno sobre otro, donde algunas de las capas (pozos) contienen a los electrones, justamente debido a que los electrónes tienen libertad de movimiento en el plano xy (capas) se denomina sistema bidimensional, luego se denomina bidimiensional estricto porque hay un solo estado posible en la dirección asociada al eje z, dirección de crescimiento. Ya, en el caso del pozo cuántico doble o triple que permiten más de un estado posible en ladirección de crescimiento estos sistemas son denominados cuasi-bidimensionales.

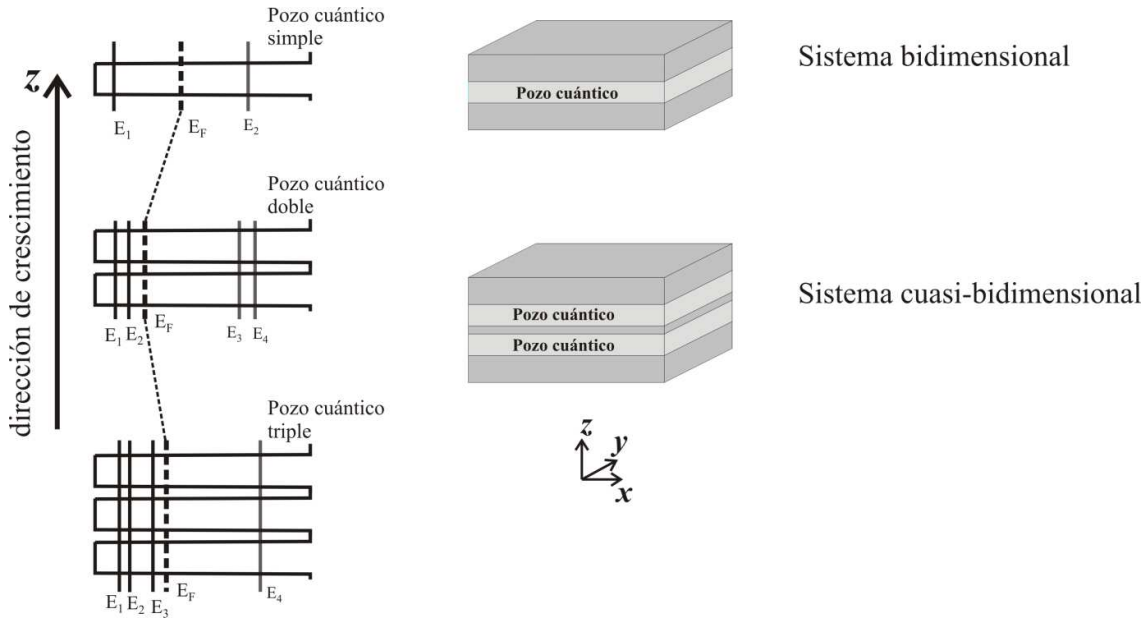

Figura 1-9 Esquema mostrando la diferencia entre un sistema bidimensional y un sistema cuasi-bidimensional de cargas en estructuras de pozos cuánticos simple, doble y triple; donde $\boldsymbol{E_i}$ representa los niveles de energía disponibles y $\boldsymbol{E_F}$ es él nivel de Fermi.

1.7 Ecuación de Schrödinger

En sistemas de bajas dimensiones las dimensiones espaciales se aproximan al orden atómico (ver sección 1.2), por tanto el estudio de estos sistemas es realizado en el marco de las leyes de la mecánica cuántica. En mecánica cuántica el concepto de trayectoria de partícula pierde su significado; esto es, cuando la distancia en la cual el potencial varía es del orden de la longitud de onda de De Broglie: $\lambda = hc/cp$ donde h es la constante de Planck, p es el momento de la partícula y c la velocidad de la luz. En el caso de partículas masivas donde la energía cinética (KE) es mucho mayor que la energía en reposo como el caso del electrón (KE ≈ 1eV y la energía da masa en reposo ≈ 0.511 MeV) se tiene $pc = \sqrt{2KEm_o c^2}$. Asi, para un electrón con KE1=300 meV se tiene λ=2.24 nm y para KE2=15 meV λ=10.0 nm. Una vez que sistemas 2D poseen dimensiones del orden 50 – 5000 Å (5 – 500 nm). Por ejemplo pozos cuánticos de 50 Å o de 5000 Å de ancho y con barreras de energía de altura de 300 meV tienen energías (niveles de energía) típicas de confinamiento del orden de 10-20 meV. Por tanto longitudes de onda de 10 nm corresponden a sistemas 2D estudiados convencionalmente (Rimberg & Westervelt, 1989; Sajoto et al., 1989).

Sistemas 2D son cuantizados apenas en una dirección de movimiento, en la dirección de formación del pozo cuántico. La ecuación de Schrödinger, considerando todas las coordenadas, debe ser utilizada en el estudio de estos sistemas

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{d^2\Psi}{dy^2}+\frac{d^2\Psi}{dz^2}\right)+V(z)\Psi = E\Psi \qquad 1.7.1$$

donde m^* es la masa efectiva, $V(z)$ es el perfial de energía potencial potencial, E es la energía y Ψ es la función de onda. Desde que el perfil del potencial, que corresponde al pozo de potencial, sólo depende de la coordenada z, la equación de Schrödinger se puede separar en una ecuación que depende sólo de z que permitirá determinar las energías de confinamiento asociadas a esa coordenada; las soluciones para las componentes x y y no generan confinamiento, siendo así un sistema con dos grados de libertad.

El perfil de la energía potencial dependen del perfil de la banda de conducción sin electrones más el perfil generado por el potencial de Hartree:

$$V(z) = V_H(z) + V_C(z) \qquad 1.7.2$$

donde $V_H(z)$ es el perfil de la energía potencial de Hartree y $V_C(z)$ es el perfil de la banda de conducción sin electrones. Desde que para obtener la solución del potencial de Hartree son necesarias las funciones de onda y al mismo tiempo para obtener la solución de las funciones de onda es necesario conocer el potencial de Hartree, se dice que ambos potencial y funciones de onda están acoplados; y sistemas de este tipo se resuelven por métodos autoconsistentes, este método será tratado en la siguiente sección.

1.8 Método autoconsistente

Una vez que el perfil de la energía potencial de confinamiento y la función de onda dependen entre sí para ser determinados, así la ecuación de Schrödinger se resuelve por el método autoconsistente.

En el método autoconsistente la ecuación de Schrödinger se resuelve en la aproximación de la masa efectiva (el electrón se mueve en un medio material) para una partícula; y en la aproximación de Hartree en el modelo de una partícula efectiva (en el caso desarrollado en este trabajo, el electrón). Dado que el potencial varia apenas en una dirección (escogemos el eje z), la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la función envolvente (Harrison & Valavanis, 2016; Rimberg & Westervelt, 1989; Sajoto et al., 1989) de los electrones en la i-ésima subbanda es dado por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_i(z)}{dz^2} + V(z)\psi_i(z) = E_i\psi_i(z) \qquad 1.8.1$$

donde ψ_i y E_i son la función de onda envolvente y la energía de la i-ésima subbanda; $V(z)$ es la variación espacial de la energía potencial que ya fue considera en la sección anterior; m^* es la masa efectiva del electrón y $\hbar$ es la constante de Planck dividida por 2π. Esta función envolvente es parte de la solución general de la función de onda en la dirección z, la solución completa en la dirección z es el producto de la función envolvente y una función $u(z)$, donde esta última función varia de forma rápida, siendo la función envolvente que modula a la función $u(z)$. No será demostrado aqui, señalamos que es suficiente determinar la solución de la función de onda envolvente en la ecuación de Schrödinger. También, la función envolvente es suficiente para determinar la densidad de probabilidad de los electrones en una dirección z (esto es $\psi_i^*(z)\psi_i(z)$). Por tanto la distribución electrónica $n(z)$ es:

$$\boldsymbol{n(z) = \sum_{i=1}^{N} n_i[\psi_i^*(z)\psi_i(z)]} \qquad 1.8.2$$

donde n_i es la densidad electrónica en la i-ésima subbanda ocupada y N es un número entero que indica el número de subbandas ocupadas. n_i es dada por

$$\boldsymbol{n_i = \frac{g_v m^*}{\pi\hbar^2}(E_F - E_i)} \qquad 1.8.3$$

donde g_v es la degeneración de valle (o el número depresiones en el perfil de la banda de conducción), E_F es la energía de Fermi y E_i es la energía de la i-ésima subbanda ocupada. El potencial de Hartree $V_H(z)$ es obtenido resolviendo la ecuación de Poisson

$$\boldsymbol{\frac{d^2V_H(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} n(z)} \qquad 1.8.4$$

donde e es la carga electrónica y ϵ es la permitividad eléctrica del material.

Es evidente que la ecuación de Schrödinger y la ecuación de Poisson para el potencial de Hartree están acopladas. Para resolver la ecuación del potencial de Hartree son necesarias las funciones de onda y al mismo tiempo para encontrar las funciones de onda es necesario el potencial de Hartree. La forma de resolver este sistema de ecuaciones acopladas es el denominado método autoconsistente; una forma de implementar este método consiste en resolver primero la ecuación de Schrödinger para un potencial $V(z)$ que inicialmente puede ser el potencial de la banda de conducción $V_C(z)$, en seguida con las funciones de onda envolventes se obtiene el potencial $V_H(z)$. En un segundo cálculo se determina el $V(z) = V_H(z) + V_C(z)$ $(antiguo)$ y se resuelve la ecuación de Schrödinger por segunda vez, y en seguida se obtiene un nuevo $V_H(z)$ y se calcula un nuevo $V(z)$. La autoconsistencia consiste en la comparación del $V(z)$ nuevo y el antiguo, si el error entre ambos perfiles de energía potencial es menor que un valor escogido, se considera que el perfil de energía potencial converge. Si el potencial no converge, se continua con el cálculo (iteraciones) considerando una mezcla del potencial antiguo y el nuevo hasta alcanzar la convergencia del perfil de energía potencial. La implementación del método autoconsistente utilizado en este trabajo, puede ser encontrado con mayor detalle en la sección de metodología.

1.9 Efectos asociados a la distribución de carga en sistemas de pozos cuánticos

En un sistema de gas de electrones bidimensional (2deg) en la aproximación de Hartree los efectos de la distribución de las cargas principalmente son observados debido al sistema de confinamiento y son manifestados en la estructura de los niveles de energía. En pozos cuánticos simples cuanto más estrecho el pozo, las cargas siguen a una tendencia de interactuar más. Por tanto, para evitar esa interacción los niveles de energía son más espaciados. En sistemas de pozos dobles y pozos triples el escenario es un poco más complejo, dado que es adicionado el efecto de tunelamiento (acoplamiento entre pozos).

1.10 Campos magnéticos en pozos cuánticos

La aplicación de un campo magnético en un sistema cuántico genera un desdoblamiento de los niveles de energía, estos niveles de energía generados son denominados niveles de Landau.

1.10.1 Niveles de Landau

Cuando electrónes son colocados en un campo magnético estos son sometidos a la fuerza de Lorentz haciendo que los electrones tengan un movimiento circular. En el caso de los sistemas analisados en este trabajo, los campos magnéticos son aplicados al sistema cuántico en la dirección perpendicular al gás bidimensional de electrones, esto es en la dirección de crescimiento del material, como se señala en la figura 1-10. Este campo magnético a través del potencial magnético debe ser incluido en el Hamiltoniano señalado en la ecuación 1.7.1; y desde que el Potencial no depende de la dirección z de crescimiento, la ecuación de Schrödinger en los ejes x y y se separan como:

$$\frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla + eA)^2\phi(x,y) = E\phi(x,y) \qquad 1.10.1.1$$

donde el potencial magnético es dado por: $A_x = -yB_\perp$ y $A_y = 0$; y $B_\perp$ es el campo magnético perpendicular al gás de electrones, ver figura 1-10.

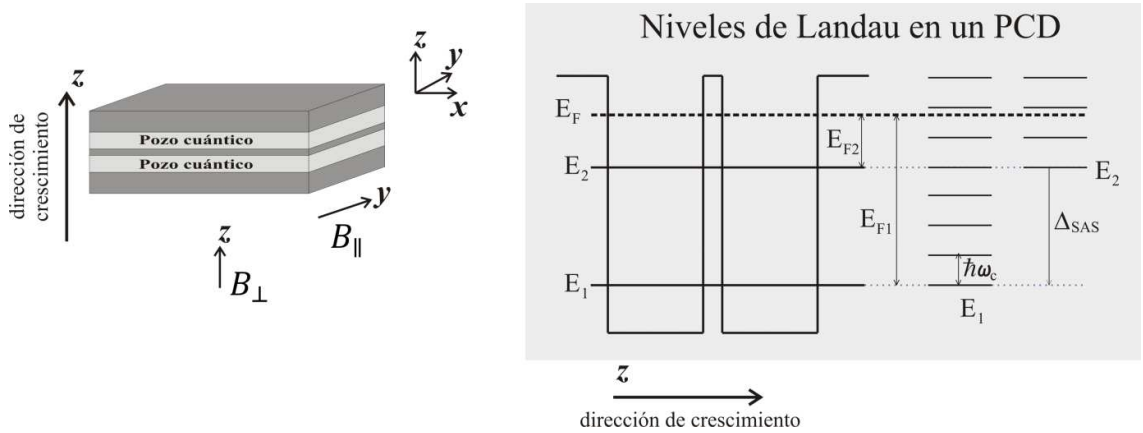

Figura 1-10 Esquemas para un sistema de pozo cuántico doble, donde se señala el campo magnético perpendicular $\boldsymbol{B}_\perp$ y el campo magnético paralelo $\boldsymbol{B}_\parallel$ respecto al gas de electrones cuasi-bidimensional; y esquema de los niveles de Landau.

Considerando soluciones del tipo $\phi(x,y) = e^{ik_x}u(y)$ se puede separar la ecuación en y,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2(y - l_o^2 k_x)\right]u_n(y) = E_n u_n(y) \qquad 1.10.1.2$$

donde: $\omega_c = \frac{eB_\perp}{m^*}$ se denomina frecuencia ciclotrónica, e la carga electrónica; y $l_o = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_\perp}}$ es la longitud magnética relacionada al movimiento circular del electrón. La ecuación 1.16 es la ecuación de un oscilador y tiene soluciones de

$$E_{ny} = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_c \qquad 1.10.1.3$$

donde n es un número entero mayor o igual a cero, y $\hbar\omega_c$ es la separación entre niveles de energía, este conjunto de niveles de energía se denomina **niveles de Landau**. Desde que n no tiene restricciones, los niveles de energia son desdoblados en infinitos niveles de Landau (ver figura 1-10),

$$E_{i,n} = E_i + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$

donde E_i corresponde a los niveles de energía calculados en la ausencia de campo magnético. Ya que $\hbar\omega_c$ depende del campo magnético perpendicular, la separación de los niveles de Landau varia con el campo mágnético perpendicular aplicado, cuanto mayor el campo magnético mayor será la separación entre niveles de Landau.

Un resultado natural en sistemas de más de una subbanda ocupada (PCD y PCT) es el alineamiento de estos niveles de Landau entre diferentes subbandas ocupadas; en la figura 1-11 se muestra el caso característico de un PCD y un PCT cuando los niveles de Landau están sin alinear (figura 1-11a y b) y cuando están alineados figura 1-11b y d.

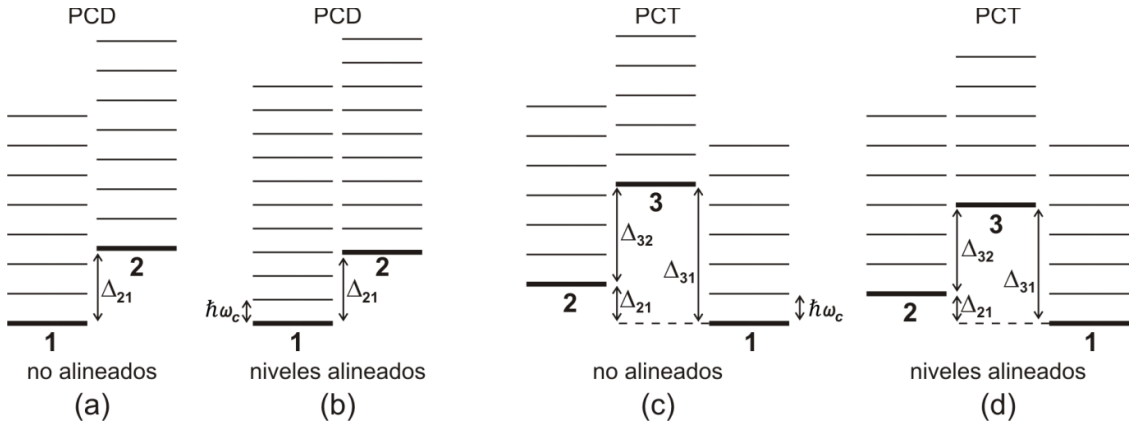

Figura 1-11 Esquemas de niveles de Landau alineados y no alineados en sistemas de pozos cuánticos dobles (a)-(b) y pozos cuánticos triples (c)-(d).

En un PCD con dos subbandas ocupadas, E_1 e E_2, se tiene $\Delta_{21} = E_2 - E_1$ el alineamiento de los niveles de Landau ocurre de acuerdo a la condición:

$$\boldsymbol{\Delta_{21} = m\hbar\omega_c} \qquad 1.10.1.4$$

donde m es un número entero y se ajusta de acuerdo a la modulación del campo magnético (ω_c depende del campo magnético). El valor de m indica el número de níveles de Landau que pueden ser acomodados dentro del gap Δ_{SAS}. Observando el esquema de la figura 1-11, es evidente que cuanto menor $\hbar\omega_c$ (menor el campo magnético) el valor de m será mayor. Cuando $m = 1$ tendremos el campo magnético máximo para el cual ocurre el último alineamiento posible entre el alineamiento del nivel fundamental de la segunda subbanda con el primer nivel de Lanau excitado de la primera subbanda ocupada.

En un PCT con tres subbandas ocupadas E_1, E_2 y E_3 se tiene tres gaps $\Delta_{21} = E_2 - E_1$, $\Delta_{32} = E_3 - E_2$ y $\Delta_{31} = E_3 - E_1$ y la ocurrencia del alineamiento entre los niveles de Landau de dos o de las tres subbandas ocupadas ocurre:

Alineamiento individual $\qquad \boldsymbol{\Delta_{21} = m\hbar\omega_c} \qquad$ 1.10.1.5

Alineamiento individual $\boldsymbol{\Delta_{32} = m'\Delta_{21}}$
1.10.1.6

Alineamiento individual $\boldsymbol{\Delta_{31} = m''\hbar\omega_c}$ 1.10.1.7

Alineamiento total $\boldsymbol{\Delta_{31} = (m + m' = m'')\Delta_{21}}$ 1.10.1.8

donde m indica el número de níveles de Landau que pueden ser acomodados en el gap Δ_{21}, y m' es el número de níveles de Landau que pueden ser acomodados en el gap Δ_{32} y m'' es el número de níveles de Landau que pueden ser acomodados en el gap Δ_{31}. Una de las posibilidades deseadas es la alineación total que ocurre cuando $m + m' = m''$. Una de las técnicas experimentales que permite tener acceso a estos niveles de energía es la técnica de magnetorresistencia que justamente utiliza campos magnéticos.

1.10.2 Magnetorresistencia

La magnetorresistencia está relacionada a la obtención de la resistencia eléctrica de un material en condiciones de campo magnético externo y bajo aplicación de una corriente eléctrica en un sistema cuántico, usualmente la condición variable es el campo magnético externo a la corriente fija. Las curvas de magnetorresistencia presentan una serie de oscilaciones asociadas a diferentes fenómenos físicos; siguiendo un secuencia cronológica de las observaciones experimentales o descubrimientos de estos fenómenos, se tienen principalmente: 1) oscilaciones Shubnikov de Haas (en campo magnético bajo); 2) oscilaciones asociadas al efecto cuántico Hall entero y 3) efecto Hall cuántico fraccionario (en campo magnético alto); 4) oscilaciones magnéticas intersubbanda (en campos magnéticos bajos), 5) oscilaciones de microondas de estado de resistencia cero (en campos magnéticos bajos). Todas las observaciones experimentales tienen en común la alta calidad de los sistemas, lo que es manifestado a través de altas movilidades electrónicas.

Las oscilaciones 1-2 están asociadas a las transiciones del nivel de Fermi entre los niveles de Landau. Las oscilaciones 4 están asociadas al alineamiento de los niveles de Landau de las diferentes subbandas ocupadas, son necesarias como mínimo dos niveles ocupados.

Los parámetros obtenidos “por defecto” a través de la técnica de magnetorresistencia son la densidad de la carga electrónica y la movilidad de portadores. Utilizando la densidad por

subbanda ocupada se obtiene información de los niveles de energía; siendo así, se obtiene información del la interacción entre subbandas ocupadas.

Los niveles de energía ocupados en un sistema de pozo cuántico simple, doble o triple puede ser accesado directamente a través de medidas de magnetorresistencia utilizando las ecuaciones que se muestra en la figura 1-12. Las oscilaciones en la magnetorresistencia están relacionadas a los terminos oscilatorios, los cosenos señalados con (a), (b) y (c); los argumentos asociados a estos terminos oscilatorios son accesados realizando un análisis de Fourier de las curvas respectivas. En los ejemplos mostrados en la figura, tenemos el caso de un pozo cuántico simple con una subbanda ocupada, por lo cual la densidad de la subbanda única n_1 es igual a la densidad total n_s que esta relacionada a la energía de Fermi E_F. En el caso del pozo cuántico doble se tiene acceso al término $\Delta_{12}= E_2 - E_1$, en el caso del pozo cuántico triple se tiene acceso a $\Delta_{13}= E_3 - E_1$, $\Delta_{23}= E_3 - E_2$ y Δ_{12} ya señalado. Asi, es importante poder escoger un sistema de pozo cuántico con determinadas características que permitan obtener las energías deseadas.

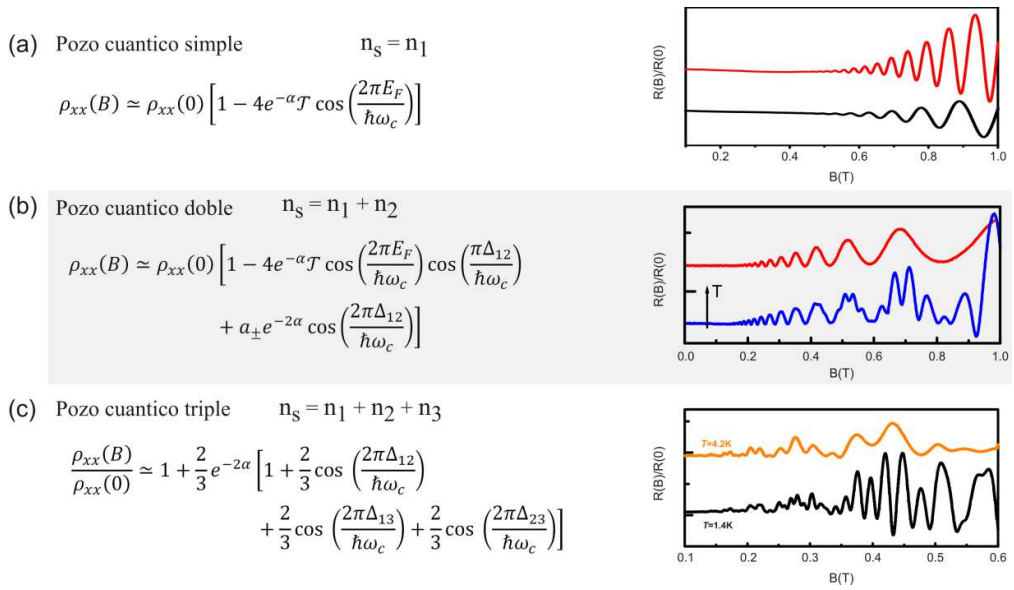

Figura 1-12 Relación de los parametros oscilatorios que están asociados a las magnetorresistencias de los pozos: (a) cuántico simple, sólo la energia de Fermi (un término oscilatório); (b) cuántico doble, adicionalmente Δ_{12} (dos términos oscilatórios); (c) y cuántico triple, adicionalmente Δ_{13} y Δ_{23} (tres términos oscilatórios).

Capítulo II: Método

2. Metodología

Una vez desarrollado el marco teórico y realizada la revisión bibliográfica de sistemas cuasi-bidimensionales en la sección anterior. En esta sección se desarrolla la implementación del programa en el lenguaje de programación C para resolver la ecuación de Schrödinger por el método autoconsistente.

2.1 Implementación del método autoconsistente

Dada la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_i(z)}{dz^2} + V(z)\psi_i(z) = E_i\psi_i(z) \qquad 2.1.1$$

es resuelta utilizando el método de Runge Kutta de cuarto orden RK4 (Flannery, Press, Teukolsky, & Vetterling, 1992). Este método es impreciso, debido a que el error se propaga desde el primer punto calculado, así el error en los últimos puntos calculados aumenta significativamente; si la extensión del sistema cuántico es grande el error se torna significativo. Una forma de evitar este problema es utilizar un punto de convergencia en la región próxima del centro del pozo cuántico (Hargrove, Henning, Slinkman, & Hembree, 1998). Este punto es llamado de *patchpoint* z_{patch}. En el método estándard RK4 las condiciones de contorno son especificadas en los extremos ($z = 0$ y $z = z_{max}$), cuando es considerado el método del punto *patchpoint* las condiciones de contorno están en el mismo punto z_{patch}. Para el caso de un pozo cuántico simple el *patchpoint* puede ser implementado como

$$z_{patch} = \frac{z_1+z_2}{2} \qquad 2.1.2$$

donde z_1 y z_2 son los puntos extremos del pozo cuántico.

La ecuación de Schrödinger es resuelta, considerando una energía inicial E_{min} y un incremento espacial en z desde $z = 0$ hasta $z = z_{patch}$, para encontrar la función de onda ψ_{LR} (LR indica izquierda para la derecha en inglés *left to right*). Una segunda solución ψ_{RL} (derecha para izquierda) es obtenida desde $z = z_{max}$ hasta $z = z_{patch}$. Estás funciones cumplen las condiciones de continuidad en el punto de frontera.

$$\left|\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{LR}}(\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{patch}})\right| - \left|\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{RL}}(\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{patch}})\right| < \mathbf{0} \qquad 2.1.3$$

$$\left|\left.\frac{d\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{LR}}(\boldsymbol{z})}{d\boldsymbol{z}}\right|_{\boldsymbol{z}=\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{patch}}}\right| - \left|\left.\frac{d\boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{RL}}(\boldsymbol{z})}{d\boldsymbol{z}}\right|_{\boldsymbol{z}=\boldsymbol{z}_{\boldsymbol{patch}}}\right| < \mathbf{0} \qquad 2.1.4$$

La función de onda final es dada por la combinación de ambas soluciones:

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{LR}}(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{RL}}(\boldsymbol{z}) \qquad 2.1.5$$

En nuestro trabajo, la extensión espacial en la que se realiza el cálculo numérico es simétrica, donde el centro de la estructura cuántica (pozo o pozos) es el punto de simetría. La posición del patchpoint es escogida apropiadamente antes del punto central de tal modo que la condición de contorno más relevante será la primera.

Para alcanzar una solución de la ecuación de Schrödinger en la primera iteración se escoge el menor valor posible de energía $E_1 = E_{min}$, donde E_{min} es una energía apropiada arriba del valor mínimo de la banda de conducción. Por tanto, en la primera iteración la ecuación de Schrödinger, para el potencial $V(z)$ y la energía E_1, es resolvida; obteniendo las funcións $\psi_{LR}^1(z)$ y $\psi_{RL}^1(z)$. Se evalua las condiciones de contorno y si son menores que un valor determinado $\epsilon < 0.0001$ se considera que se há obtenido una solución. Si la condición ϵ no se cumple se procede a incrementar el valor de energía por un valor δE. Por tanto, para una segunda iteración $E_2 = E_1 + \delta E$ com este valor y con un nuevo potencial $V(z)$ (explicado en el texto más adelante) se procede a resolver la ecuación de Schrödinger en la segunda iteración obteniendo las funciones $\psi_{LR}^2(z)$ y $\psi_{RL}^2(z)$. Se evalua nuevamente las condiciones de contorno en el patchpoint si persiste en no cumplir la condición ϵ se procede un tercer incremento de $E_3 = E_2 + \delta E$ y así sucesivamente hasta cumplir la condición ϵ. Una vez cumplida la condición ϵ, se procede a refinar el valor de la energía obtenido, para esto se retorna al valor de la energía de la iteración imediata anterior (antes de cumplir la condición ϵ) y se procede a refinar el incremento de la energía $\delta E \leftarrow \frac{\delta E}{10}$, y luego se procede a incrementar el valor de la energía; con la nueva energía se resuelve la ecuación de Schrödinger y se procede en las iteraciones hasta alcanzar la condición ϵ y nuevamente refinar la energía. La solución de la ecuación de Schrödinger se calcula hasta una condición de refinamiento de la energía de 8 veces, esto es, una precisión de 8 dígitos decimales.

La ecuación de Poisson dada por

$$\frac{d^2V_H(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} n(z) \qquad 2.1.6$$

también es resuelta numéricamente, en este caso se considera el método de Milne (Korsch & Laurent, 1981), que es un método de predictor y corrector que es utilizado para resolver ecuaciones de diferenciales de segundo orden, se calcula inicialmente un valor de $V_{H,n+1}$ y con este mismo valor se corrige el valor final de $V_{H,n+1}$. En este trabajo, dado que el sistema es simétrico se procede a determinar la solución apenas en una extension del pozo desde el punto de simetría. La otra solución de la otra extensión del pozo es apenas el reflejo de la solución en la otra región; esto es posible dado que la ecuación de Poisson es una ecuación cuadrática y la distribución de la densidad electrónica es simétrica alrededor del punto central (punto de simetría). En el cálculo de iteración actual para resolver la ecuación de Schrödinger se utiliza un potencial de entrada $V(z) = V_{entrada}(z)$, luego resloviendo la ecuación de Poisson se calcula el potencial de salida $V(z) = V_{salida}(z)$. El criterio de convergencia general está asociado a la comparación del potencial de entrada y salida, si la diferencia entre ambos es menor que 0.0001 se considera que el potencial de entrada esencialmente es el mismo; por tanto la solución de Schrödinger esencialmente es la misma, ver figura 2-1.

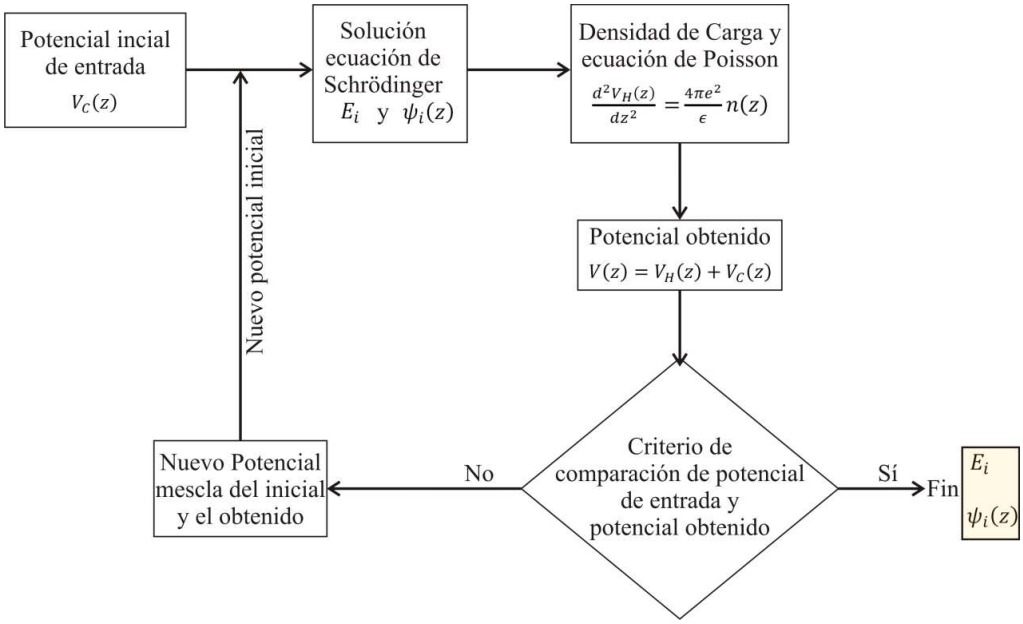

Figura 2-1 Diagrama de flujo del método autoconsistente utilizado en este trabajo.

En la literatura existen publicados resultados similares al perfil escogido en nuestros cálculos como por ejemplo perfiles de PCS parabólicos donde fueron realizados cálculos para diferentes densidades de electrones (Mamani et al., 2008; Rimberg & Westervelt, 1989; Sajoto et al., 1989). Estos cálculos permitirán realizar una comparación y verificar la validez de nuestro código del método autoconsistente (programa desarrollado en lenguaje de programación C). El código implementado es aplicado a perfiles de potencial simples y simétricos, este código debe ser suficientemente para obtener resultados que describan satisfactoriamente efectos cuánticos indicados en está propuesta de tesis.

2.2 Ejecución del código del método autoconsistente

En la ejecución del código del método autoconsistente algunos parámetros no serán variados, en cuanto otros sí serán modificados. En general, los parámetros a variar serán las dimensiones que determinan el perfil del potencial de confinamiento (ancho de los pozos, ancho de la barrera entre pozos, profundidad de los pozos en relación a las barreras) y la densidad de electrones. El parámetro de la densidad electrónica será barrido para parámetros (fijos) de dimensiones del perfil de potencial escogido apropiadamente.

Serán realizados cálculos de estructura electrónica y distribución de carga en PCD y PCT. Estas distribuciones de carga y estructura de niveles de energía permitirán generar mapas de colores y comparar la variación de la distribución en función de la densidad electrónica.

2.3 Análisis de los resultados

Serán generados mapas de colores de la distribución electrónica y diagramas de la estructura de niveles de energía como función de la densidad electrónica para diferentes pozos cuánticos (perfiles de energía potencial de confinamiento), lo que permitirá buscar cuales distribuciones de carga podrían permitir estudiar efectos asociados a transiciones intersubbanda (oscilaciones MIS), efectos de acoplamiento débil, y posibles aplicaciones en dispositivos.

Los mapas de colores de la distribución de carga permitirán determinar la evolución de la distribución electrónica de las subbandas ocupadas en un pozo cuántico. En está etapa, el caso de un PCT se tornará de mayor interés dada la posibilidad de manipular la ocupación de los pozos laterales o del central tanto de la primera, segunda o tercera subbanda ocupada.

Experimentalmente es posible lograr la variación de carga cuando es aplicada una cantidad adicional de electrones proveniente de la banda de valencia a través de excitación electromagnética, por ejemplo de radiación infrarroja.

Los diagramas de la estructura de niveles de energía como función de la densidad de electrones, permiten principalmente un análisis de la ocupación de las subbandas ocupadas y el grado de acoplamiento entre subbandas ocupadas. Nuevamente el sistema de PCT se torna de mayor interés que un PCS o un PCD, una vez que usualmente existen tres subdandas ocupadas. Este tipo de diagrama, permitirá realizar un análisis del grado de alineamiento posible entre niveles de Landau. Finalmente será realizado un análisis teórico de las interacciones intersubbanda a través de las oscilaciones MIS en PCT cuando existe alineamiento máximo y cuando los alineamientos pueden ser parciales.

Capítulo III: Análisis y discusión de resultados

3. Resultados y discusión

3.1 Estructuras de pozos cuánticos utilizados

En este trabajo fueron utilizados pozos cuánticos dobles y triples como los señalados en la figura 3.1 donde se indican las características físicas de estos sistemas: ancho de los pozos, ancho de las barreras y profundidad de los pozos y de las barreras. Fueron utilizados pozos con perfil cuadrado, parabólico y triangular. En los pozos de perfil parabólico y triangular fueron considerados profundidades diferentes. Las características principales son consideradas más adelante en las secciones correspondientes.

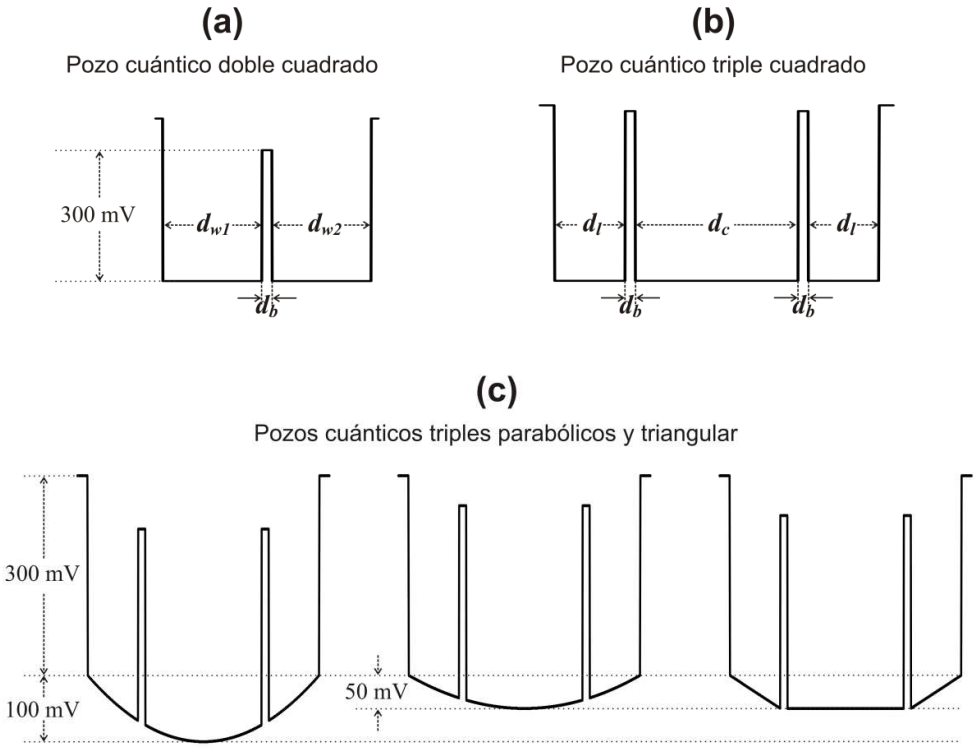

Figura 3-1 Perfil de la banda de conducción de los pozos cuánticos utilizados en este trabajo. Donde $\boldsymbol{d_{w1}}$y $\boldsymbol{d_{w2}}$ es el ancho de cada pozo del pozo cuántico doble y $\boldsymbol{d_b}$ es el ancho de las barreras; $\boldsymbol{d_c}$ y $\boldsymbol{d_l}$ son el ancho del pozo central y el ancho de los pozos laterales.

3.2 Verificación del método autoconsistente

El programa fue implementado en lenguaje de programación C, el método autoconsistente fue validado considerando resultados conocidos de pozos cuánticos dobles y triples, los mismos son presentados a seguir.

Pozos cuánticos dobles comparación de validación

Estudios autoconsistentes y experimentales de distribución electrónica a lo largo de un PQD ya fueron realizados por muchos grupos de investigación (Harrison & Valavanis, 2016; Mamani et al., 2008; Raichev, 2008; Sahu, 2004; Van Houten, Williamson, Broekaart, Foxon, & Harris, 1988), los mismos fueron reproducidos para dar validez al código de software implementado en este trabajo.

Los resultados experimentales escogido para comparar corresponden a la referencia (Mamani et al., 2008), donde el parámetro a comparar es el gap de energía $\Delta_{SAS} = E_2 - E_1$. Para determinar Δ_{SAS} utilizando el programa implementado fueron consideradas las caracterísiticas de los pozos cuánticos dobles señalados en la referencia. Fueron considerados tres pozos cuánticos dobles con ancho de los pozos de 14 nm y ancho de las barreras de 1.4 nm, 2 nm y 5 nm, con altura de la barrera de 290 meV. En la tabla 3-1 se muestra los parámetros de los PCD utilizados y el parámetro de comparación Δ_{SAS}. Donde Δ_{SAS}^{ref} es el valor experimental obtenido de la referencia y Δ_{SAS}^{cal} es el valor calculado por el programa.

Tabla 3-1 Parámetros de una estructura de PCD, donde $\mathbf{d_{w1}}$ es el ancho del pozo central, $\mathbf{d_{w2}}$ es el ancho de los pozos laterales, $\mathbf{d_b}$ es el ancho de las barreras; $\Delta_{\mathbf{SAS}}^{\boldsymbol{ref}}$ es la energía referencial (Mamani et al., 2008) entre el primer y segundo nivel de energía y $\Delta_{\mathbf{SAS}}^{\mathbf{cal}}$ es su valor calculado.

Tipo	d_{w1} (Å)	d_{w2} (Å)	d_b (Å)	Δ_{SAS}^{ref} (meV)	Δ_{SAS}^{cal} (meV)	Error % relativo
DQWb1	140	140	14	4.22	4.03	4.5
DQWb2	140	140	20	2.07	2.27	9.7
DQWb3	140	140	50	0.65	0.52	20.0

Los valores obtenidos por el programa son próximos de los valores de la referencia. Desde que el digito de presición esta en primer digito decimal, energias menores que 1 meV deberian tener errores significativamente altos; sin embargo este error es de alrededor del 20%. Por otra parte, energías mayores a 1.0 meV tienen errores menores del 20%. Siendo así, la solución de la ecuación de Schrödinger a través del programa puede ser considerado apropiado para estimar valores de energía próximos a los valores correctos; otra camparación es realizada en la siguiente sección.

Adicionalmente a la validación del programa implementado es realizado un análisis de la distribución electrónica en estos sistemas como función de diferentes densidades electrónicas que podrían ser contenidas en estos sistemas, estos análisis para los diferentes pozos cuánticos dobles son mostrados en en la figura 3-2 utilizando mapas de colores de la variación de la densidad en el ancho del pozo como función de la densidad electrónica. i) Para la densidad electrónica total, ii) para la densidad electrónica por subbanda ocupada; también se calcula los niveles de energía para cada pozo en relación a su respectivo nivel de energía de Fermi en función de la densidad electrónica. En la figura 3-2, respecto de los niveles de energía, se observa que este tipo de estructura ocupa esencialmente dos subbandas. La ocupación muestra una dependencia con el ancho de la barrera de potencial, sin embargo esta dependencia no muestra variación significativa en la distribución de las cargas; cuanto mayor el ancho de la barrera, la ocupación de la segunda subbandas se inicia en densidades menores. Para el pozo de barrera de 14 Å la segunda banda comienza a ser ocupada aproximadamente en una densidad de $9.0\text{x}10^{-11}$ cm^{-2} y para el pozo de barrera de 50 Å la segunda banda comienza a ser ocupada alrededor de una densidad de $0.5\text{x}10^{-11}$ cm^{-2}. Las variaciones significativas en este tipo de estructuras para una misma densidad de carga es en la energía de tunelamiento Δ_{SAS}, como es el caso para una densidad de $9.0\text{x}10^{-11}$ cm^{-2}. Estos valores obtenidos fueron utilizados para validar el software implementado para realizar los cálculos presentados en este trabajo de tesis. La distribución de las cargas en la densidad electrónica total y en cada subbanda muestra esencialmente la misma separación, aproximadamente 200 Å, uno de los objetivos en el estudio de distribución de cargas es jústamente el poder variar la distribución electrónica de cargas en la procura de la observación de fenómenos nuevos, en ese camino siguen las siguientes secciones de este trabajo.

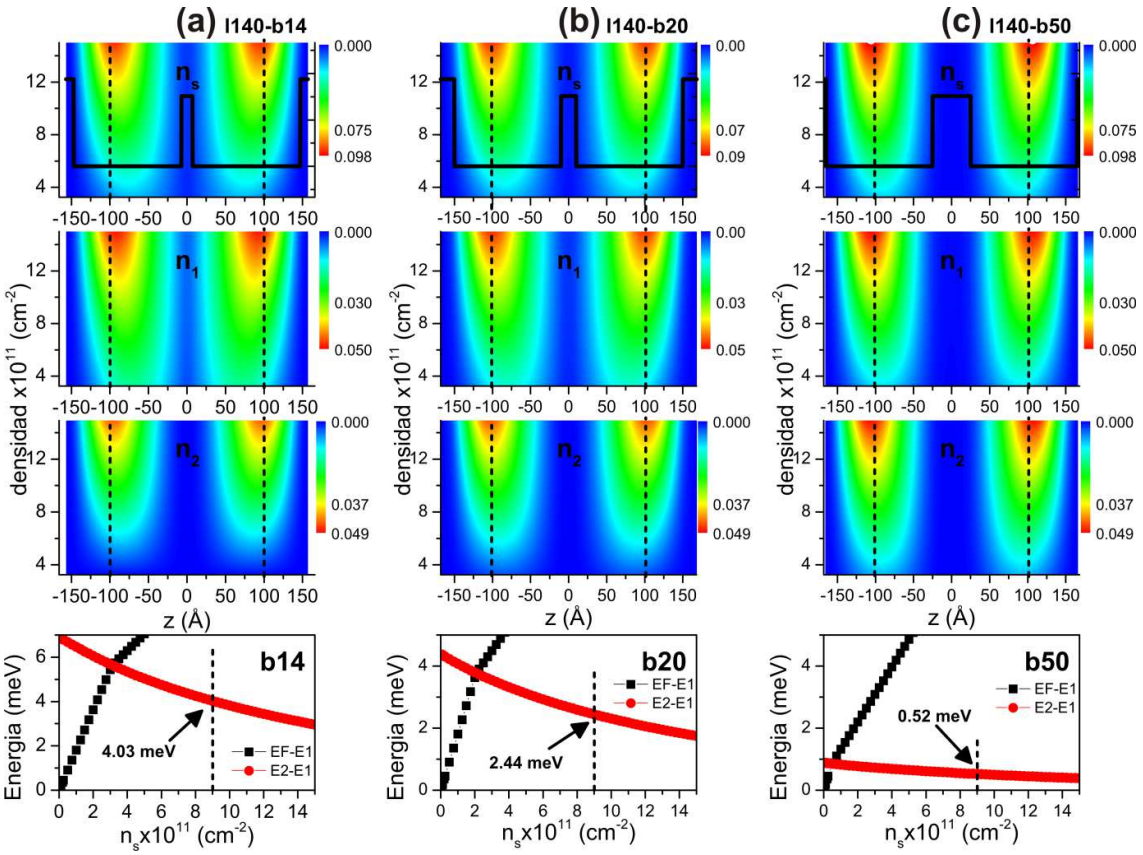

Figura 3-2 Mapa de la distribución de carga: total $\mathbf{n_s}$ y por subbandas ocupadas $\mathbf{n_1}$ y $\mathbf{n_2}$; y diagramas de la estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 es la energia de los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga $\mathbf{n_s}$; para pozos cuánticos de anchos iguales y barreras de 14, 20 y 50 Å.

Pozos cuánticos triples comparación de validación

Estudios autoconsistentes y experimentales de distribución electrónica a lo largo de un PQT, tambien ya fueron realizados por muchos grupos de investigación (Hanna & MacDonald, 1996; Jo et al., 1992; Shukla, Suen, & Shayegan, 1998; Ullah et al., 2017; Wiedmann et al., 2009); de la misma manera que en el caso de PCD, aqui los trabajos en PCT también fueron reproducidos para dar validez al código de software implementado en este trabajo.

Los resultados experimentales escogido para comparar corresponden a la referencia (Wiedmann et al., 2009), donde los parámetros a comparar son los gaps de energía Δ_{12}, Δ_{23} y Δ_{13}, los indices 1, 2 y 3 corresponden a los respectivos niveles de energía ocupados. Para determinar estos gaps utilizando el programa implementado fueron consideradas las características físicas de los pozos cuánticos triples señalados en la referencia. Fueron

considerados dos pozos cuánticos triples; el primero PCT1b14 con ancho de pozo central de 23 nm, ancho de los pozos laterales de 10 nm y ancho de barreras de 1.4 nm el segundo PCT1b20 apenas difiere del primero en la ancho de la barrera de 2 nm, tabla 3-2; ambos pozos con altura de barrera de 300 meV. Donde Δ_{ij}^{ref} corresponde al gap entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía de la referencia y Δ_{ij}^{cal} es el gap entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía calculado por el programa. En la tabla 3-2 se muestran los resultados de los gaps calculados y los de la bibliografia, se observa un aproximación significativa de entre los valores calculados y los valores de la referencia; los errores porcentuales son menores del 10%, por lo cual se puede considerar que la comparación de resultados en las estructuras de pozos cuánticos triples es satisfactoria, inclusive se tiene mejor aproximación que en el caso de los pozos cuánticos duplos. Así, el programa implementado puede ser considerado útil para resolver la estructura de niveles de energía de otros perfiles de confinamiento.

Tabla 3-2 Parámetros de una estructura de PCT, donde $\mathbf{d_c}$ es el ancho del pozo central, $\mathbf{d_l}$ es el ancho de los pozos laterales, $\mathbf{d_b}$ es el ancho de las barreras y $\mathbf{d_{total}}$ es el ancho total del pozo; Δ_{ij}^{ref} es la energía referencial (Wiedmann et al., 2009) entre el i-ésimo y el j-ésimo nivel de energía y Δ_{ij}^{cal} es su valor calculado.

Tipo	d_c (Å)	d_l (Å)	d_b (Å)	d_{total} (Å)	Δ_{12}^{ref} (meV)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{ref} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)	Δ_{13}^{ref} (meV)	Δ_{13}^{cal} (meV)
PCT1b14	230	100	14	458	1.4	1.43	3.9	3.98	5.3	5.41
PCT2b20	230	100	20	470	1.0	0.96	2.4	2.58	3.4	3.54
PCT1b14					Error %	2.1	Error %	2.1	Error %	2.1
PCT2b20					Error %	4.0	Error %	7.5	Error %	4.1

Por otro lado, respecto a la distribución de cargas en estas estructuras con pozo central y lateral de igual ancho apenas variando el ancho de la barrera de potencial desde 14 Å hasta 20 Å, mostrados en la figura 3-3; se puede señalar que en densidades bajas la primera subbanda ocupada posiciona electrones a lo largo de los tres pozos. El aumento de la densidad electrónica en el sistema conduce a una desocupación del pozo central en el primer nivel de energía y al mismo tiempo la ocupación del pozo central se incrementa, pero con electrones en el tercer nivel de energía.

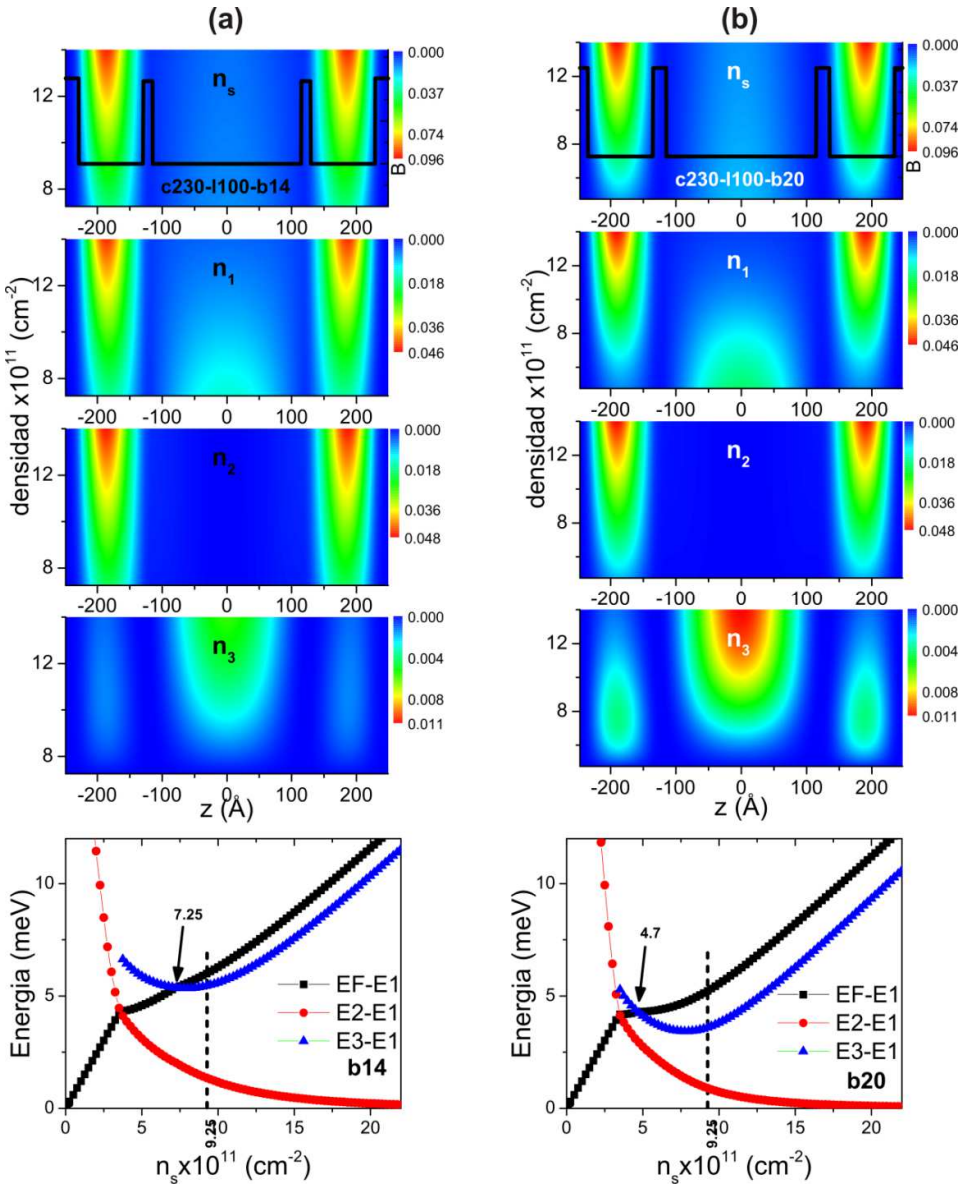

Figura 3-3 Mapa de la distribución de carga: total $\mathbf{n_s}$ y por subbandas ocupadas $\mathbf{n_1}$ y $\mathbf{n_2}$; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga $\mathbf{n_s}$, para pozos cuánticos de anchos iguales pero barreras de 14, 20 Å.

Por su lado, el segundo nivel de energía posiciona sus electrones en los pozos laterales para todo el rango de densidades electrónicas utilizado. En los dos sistemas considerados la interacción de los dos primeros niveles ocupados es influenciado por la ocupación del tercer nivel de energía, debido a que la cantidad de cargas acopladas van migrando al tercer nivel y hay menos cargas en los dos primeros niveles energéticos, esto es observado principalmente para el pozo con ancho de barrera mayor, debido a que el tercer nivel de energía comienza a

ser ocupada en densidades bastante menores, que en el caso del pozo con ancho de barrera menor. Esto era de se esperar desde que sistemas con ancho de barrera mayor disminuye el acoplamiento asociado a las cargas en los dos primeros niveles de energía.

3.3 Pozos cuánticos triples parabólicos y triangulares.

En esta sección son presentados resultados de la distribución electrónica sus niveles de energía asociados para pozos parabólicos y triangulares como señalados en la figura 3-4 y en la tabla 3-3, como valores referenciales los gaps de energía son calculados para densidades electrónicas de 9, 12 y 15 x10^{11} cm^{-2} correspondientes a los tres cuadros a la derecha en la tabla 3-3.

La ocupación del pozo central es la característica principal de este tipo de pozos, así en densidades bajas los electrones inician posicionándose principalmente en el pozo central y con el incremento de la densidad electrónica del sistema, el segundo nivel de energía secuencialmente también es poblado posicionando los electrones principalmente en los pozos laterales. Es evidente que cuando más profundo el pozo este puede posicionar más cargas en el pozo central o primer nivel de energía, siendo así que la ocupación del segundo nivel se iniciará para densidades mayores en comparación con los pozos menos profundos como se observa en la figura 3-4 que corresponde a la distribución de niveles de energía.

Tabla 3-3 Parámetros de una estructura de PCT, donde $\mathbf{d_c}$ es el ancho del pozo central, $\mathbf{d_l}$ es el ancho de los pozos laterales, $\mathbf{d_b}$ es el ancho de las barreras y $\mathbf{d_{total}}$ es el ancho total del pozo; Δ_{ij}^{ref} es la energía referencial entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía y Δ_{ij}^{cal} es su valor calculado. Los gaps de energía son calculados para densidades electrónicas de 9, 12 y 15 x10^{11} cm^{-2} correspondientes a los tres cuadros a la derecha respectivamente.

Tipo	d_c (Å)	d_l (Å)	d_b (Å)	d_{total} (Å)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)
PCT3b14	230	100	14	458	---	---	8.05	2.63	6.09	2.44
PCT4b14	230	100	14	458	5.21	2.43	3.43	2.67	2.08	3.28
PCT5b14	230	100	14	458	4.69	---	3.10	3.79	1.95	4.51

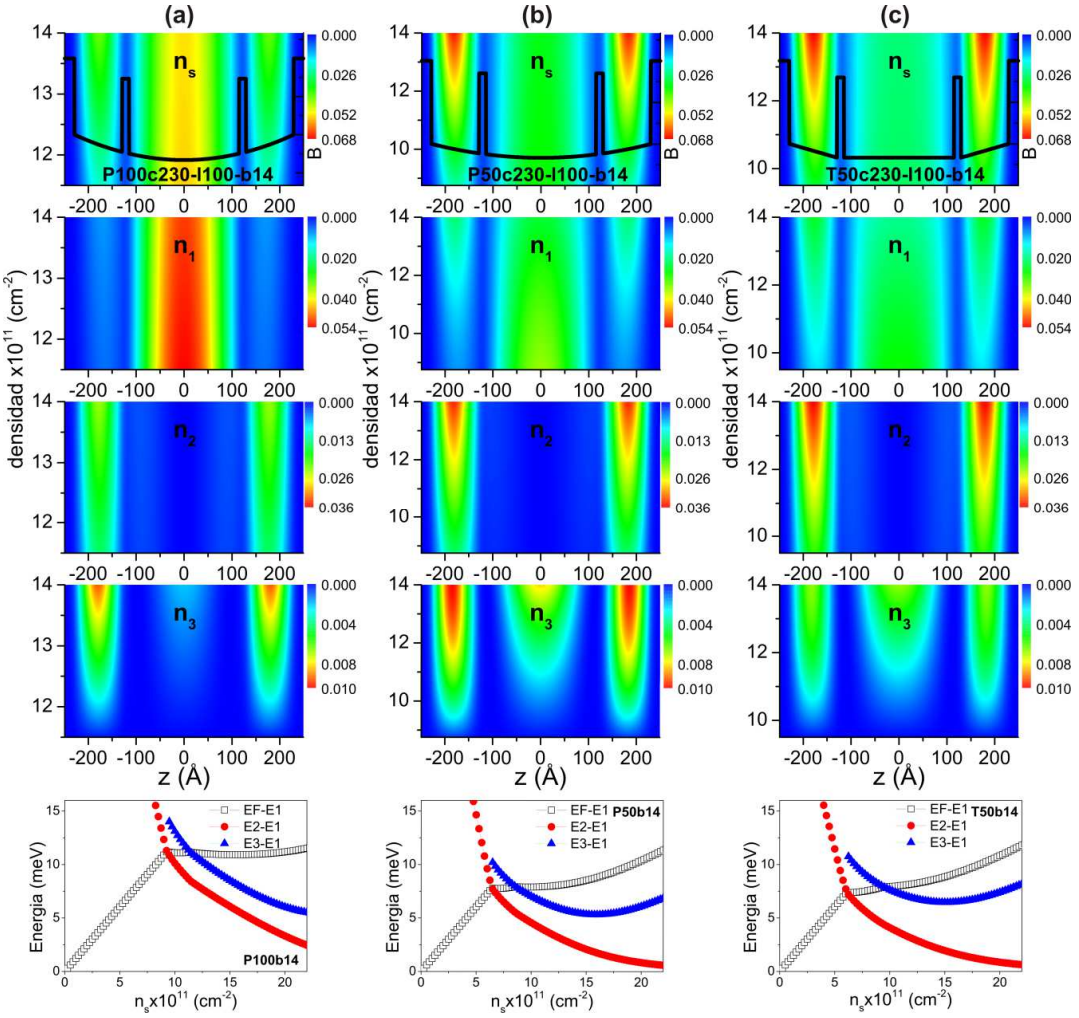

Figura 3-4 Mapa de la distribución de carga: total $\mathbf{n_s}$ y por subbandas ocupadas $\mathbf{n_1}$ y $\mathbf{n_2}$; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 son las energías de los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga $\mathbf{n_s}$, para pozos cuánticos de ancho y barreras iguales, dos con perfiles parabólicos de profundidad diferente y uno con perfil lineal.

Otra característica importante en este tipo de estructuras es el acoplamiento entre las cargas de los dos primeros niveles de energía ocupados, los resultados muestran que la intensidad de interacción es relativamente fuerte cuando el segundo nivel comienza a ser ocupado, este fenómeno es claramente explicado debido a que las cargas del primer nivel de energía (principalmente pozo central) se encuentran más próximas de las cargas del segundo nivel de energía (principalmente pozos laterales. Sin embargo, en este tipo de sistemas la ocupación del tercer nivel de energía se inicia para densidades relativamente próximas luego de iniciada la ocupación del segundo nivel de energía y la interaccion de las cargas de este tercer nivel de energía, con los dos niveles primeros, es significativo con las cargas del primer

nivel y relativamente débiles con las cargas del segundo nivel ocupado, esto es mas claro cuanto más profundo el pozo central; este resultado, en el caso de pozos más profundos se explica debido a que las cargas en los pozos centrales sufren mayor interacción coulombiana por cargas en los pozos laterales que son ocupados por electrones en el segundo y tercer nivel, por lo cual los gaps asociados entre estos nivel y el primero deben ser significativos, ya el gap entre el tercer nivel y el segundo nivel ocupados es menor debido a que sus cargas se encuentran en los pozos laterales.

Por otro lado, un aspecto importante en este tipo de estructuras es descrito por su estructura de niveles de e energía, cuanto menor la profundidad del pozo central la interacción de las cargas del tercer nivel con las cargas en los primeros niveles de energía se incrementa secuencialmente con la disminución de la profundidad, esto debido al incremento secuencial de cargas en el tercer nivel. Observar en la figura 3-4 la curva de $E_3 - E_1$ se va doblando para energías mayores con el incremento de la densidad electrónica del sistema, eso es se va dificultando más la ocupación del tercer nivel. Este último aspecto es uno de los principales resultados obtenidos en este trabajo y será presentado en la siguiente sección.

Pozos cuánticos triples y desocupación del tercer nivel de energía

En esta sección son presentados resultados de la distribución electrónica y sus niveles de energía asociados para pozos cuadrados como señalados en la figura 3-5 y en la tabla 3-4, como valores referenciales los gaps de energía son calculados para densidades electrónicas de 9, 12 y 15x 10^{11} cm^{-2} correspondientes a los tres cuadros a la derecha en la tabla 3-4. En estos pozos se observa la desocupación del tercer nivel de energía, debido a la interacción electrónica.

Tabla 3-4 Parámetros de una estructura de PCT, donde $\mathbf{d_c}$ es el ancho del pozo central, $\mathbf{d_l}$ es el ancho de los pozos laterales, $\mathbf{d_b}$ es el ancho de las barreras y $\mathbf{d_{total}}$ es el ancho total del pozo; Δ_{ij}^{ref} es la energía referencial entre el j-ésimo y el i-ésimo nivel de energía y Δ_{ij}^{cal} es su valor calculado.

Tipo	d_c (Å)	d_l (Å)	d_b (Å)	d_{total} (Å)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)	Δ_{12}^{cal} (meV)	Δ_{23}^{cal} (meV)
PCT8b14	202	110	14	450	1.11	---	0.66	6.64	0.41	8.44
PCT6b20	180	115	20	450	0.54	4.83	0.30	7.00	0.19	8.92
PCT7b20	182	120	20	462	0.42	5.19	0.23	---	0.13	---

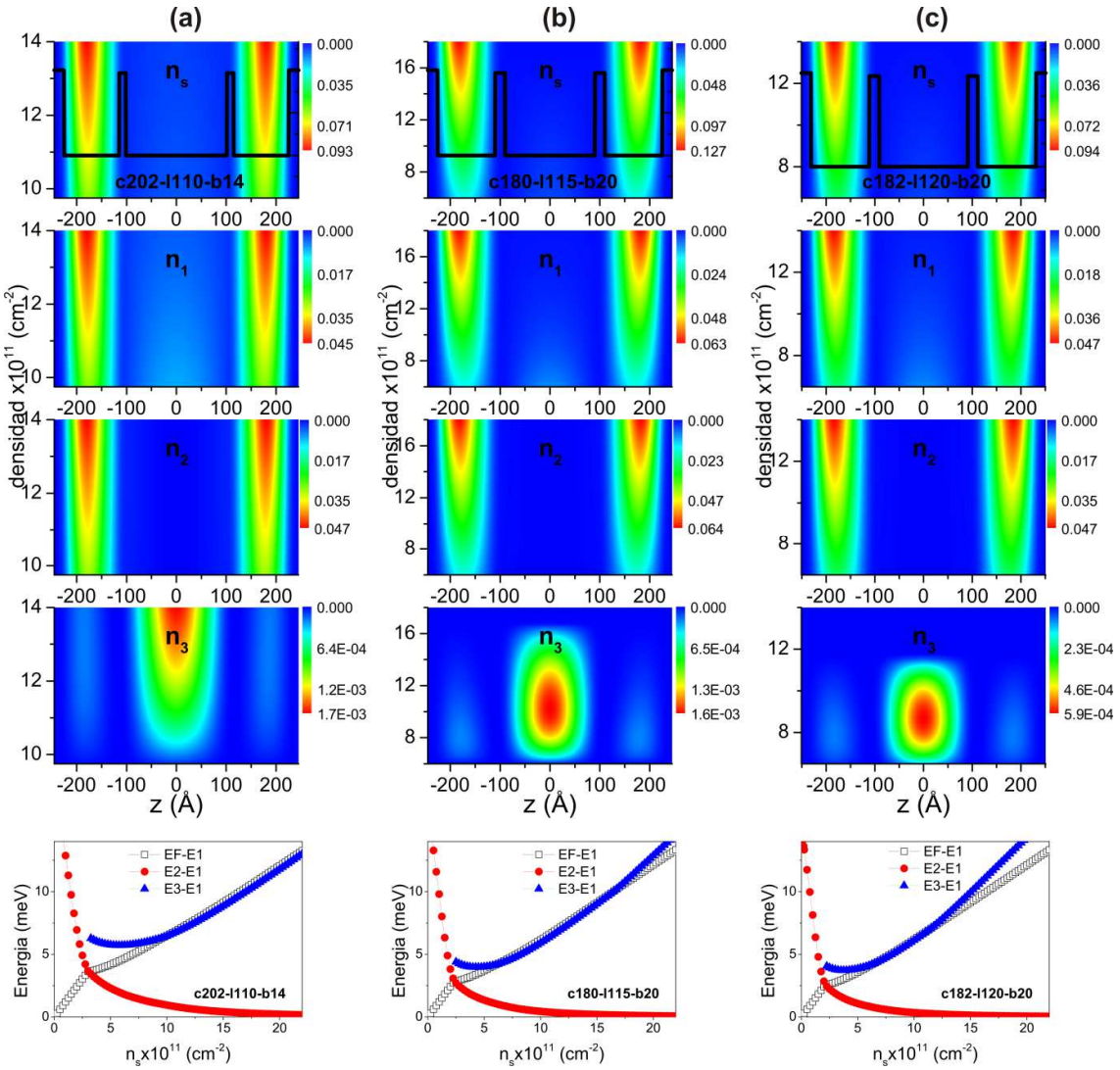

Figura 3-5 Mapa de la distribución de carga: total $\mathbf{n_s}$ y por subbandas ocupadas $\mathbf{n_1}$ y $\mathbf{n_2}$; y estructura de los niveles de energía, EF es la energía de Fermi, E1 y E2 los niveles de energía ocupados; ambos como función de la densidad de carga $\mathbf{n_s}$, para pozos cuánticos rectos de anchos y barreras diferentes.

Como fue señalado en la sección anterior cuando el pozo central es menos profundo, en el diagrama de estructura de niveles de energía, $E_3 - E_1$ que esta asociada al tercer nivel de energía ocupado se curva para densidades superiores después de iniciada la ocupación. En la figura 3-5(a) este mismo resultado se verifica para el pozo cuántico triple con pozo central de 202 Å y ancho de barrera de 14 Å; sin embargo, la ocupación del tercer nivel persiste para densidades altas; ya para pozos cuánticos triples con pozos centrales de ancho menores 180 Å y ancho de barrera de 20 Å, se observan que la $E_3 - E_1$ se curva significativamente y el tercer nivel ocupado supera el nivel de Fermi, lo que significa la desocupación de este nivel

de energía. Estos resultados son verificados en la distribución de cargas, el segundo nivel de energía comienza a ser ocupado en densidades moderadamente bajas y la tercera subbanda inicia su ocupación en densidades moderadas y finalmente para densidades moderadamente altas se desocupa. Los resultados muestran que la densidad electrónica del sistema a partir de la cual inicia la desocupación del tercer nivel está estrechamente conectada con los anchos de los pozos central y lateral; para iniciar la desocupación en densidades menores el pozo central debe ser relativamente menor y los pozos laterales deben ser relativamente más anchos.

La ocupación de apenas los pozos laterales por parte de los dos primeros niveles de energía es otro resultado importante observado en este tipo de estructuras. Este posicionamiento de las cargas puede explicar el fenómeno de desocupación del tercer nivel, desde que el tercer nivel de energía posiciona las cargas principalmente en el pozo central y las cargas en los dos primeros niveles de energía se encuentran principalmente en los pozos laterales se puede señalar que existirá una mayor interacción de las cargas entre estos dos niveles y las cargas del tercer nivel, siendo así posible que con el incremento de la densidad electrónica las cargas se acomoden principalmente en los dos niveles de energía y el tercer nivel de energía sea desocupado.

Capítulo IV

4. Conclusiones

En este trabajo de tesis para optar el grado de licenciado fueron presentados cálculos de las distribuciones de carga electrónica y su estructura de niveles de energía dentro de pozos cuánticos triples a través de la solución de la ecuación de Schrödinger en el modelo de un electrón y en la carga distribuida dentro del formalismo del potencial de Hartree. Esto es, el modelo bastante restringido permite verificar que es posible lograr distribuciones de carga posibles variando los parámetros de ancho de cada pozo y de la barrera de pozo central y de los mismos poder predecir posibles resultados no esperados.

El principal resultado obtenido es la posibilidad de una desocupación del tercer nivel ocupado con el incremento de la densidad de carga, para un rango de anchos y barreras específicas de pozos cuánticos triples. Este resultado también es acompañado de un acoplamiento débil entre las subbandas ocupadas, debido a que los pozos ocupados son principalmente los pozos laterales, por lo cual las cargas se encuentran relativamente muy distantes. El acceso a este parámetro de separación podría ser verificado a través del efecto Aharonov-Bohm, por la aplicación de campos magnéticos.

Resultados adicionales son la posibilidad de lograr mayor interacción entre las cargas dentro del pozo central y los pozos laterales a través de los dos niveles de energía más bajos ocupados. Sin embargo en este, aún se encuentra un tercer nivel ocupado con acoplamiento débil con las cargas de los otros niveles ocupados. Un caso deseado sería construir un sistema apenas con los dos niveles de energía más bajos ocupados.

De forma general podemos concluir que los cálculos realizados pueden ser auxiliares en la construcción de estructuras cuánticas apropiadas para el estudio de sistemas con interacción fuerte o débil, a lo largo de toda la estructura de pozos cuánticos triples.

Apendice A

Efecto Aharonov-Bohm en sistemas electrónicos de bicapas

El efecto Ahoaronov-Bohm fue descubierto en 1959 (Aharonov & Bohm, 1959), e señala la importancia del vector potencial magnético. Este efecto muestra que partículas cargadas que atraviesan una región donde el campo magnético es nulo son afectadas por potenciales magnéticos. El caso más característico es un electrón en trayectoria circular cerrada al rededor de un solenoide que contiene un campo mágnetico, su movimiento es afectado por el potencial magnético que genera el campo encerrado dentro del solenoide.

El ejemplo comun del efecto Aharonov-Bohm es el experimento de doble rendija y un solenoide atras de la barrera, entre la doble rendija, como mostrado en la figura A-1. Donde el flujo magnético alrededor de la trajectoria C es

$$\boldsymbol{\Phi} = \int_S \vec{\boldsymbol{B}} \cdot \boldsymbol{d}\vec{\boldsymbol{S}} = \oint_C \vec{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{d}\vec{\boldsymbol{l}} \qquad \text{donde:} \qquad \vec{\boldsymbol{B}} = \vec{\boldsymbol{\nabla}} \times \vec{\boldsymbol{A}} \qquad \text{A. 1}$$

donde $\vec{B}$ es el campo magnético dentro del solenoide, $\vec{A}$ es el vetor potencial magnético, C es el camino cerrado formado por los electrones que pasan por la rendija **A** (camino C_1) y el camino que pasan los electrones por la rendija **B** (camino C_2). El campo magnético fuera del solenoide es nulo, esto vale tambien en la región de los caminos; sin embargo, el flujo magnético no es nulo. Siendo así, el potencial magnético debe ser finito en la región de la trayectoria C. Haciendo una separación del flujo en ambos caminos C_1 y C_2, tenemos:

$$\boldsymbol{\Phi} = \oint_{C_1} \vec{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{d}\vec{\boldsymbol{l}} + \oint_{-C_2} \vec{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{d}\vec{\boldsymbol{l}} \qquad \text{A. 2}$$

Considerando electrónes que van por el camino C_1 y electrones que van por el camino C_2 hacia el detector, un resultado cuántico es que existe un desfase entre las funciones de onda de las partículas que siguen esos caminos cuando llegan al detector, ese desfase es dado por

$$\Delta\varphi = \frac{e\Phi}{\hbar}$$

lo que significa que las integrales de camino en la ecuacion 3.3.2 son diferentes. Este desfase es verificado experimentalmente; si el detector mostrado en la figura A-1 es desplazado

verticalmente, serán generados patrones de interferencia resultado de las partículas llegando por las dos trayectorias (Chambers, 1960; Fowler, Marton, Simpson, & Suddeth, 1961).

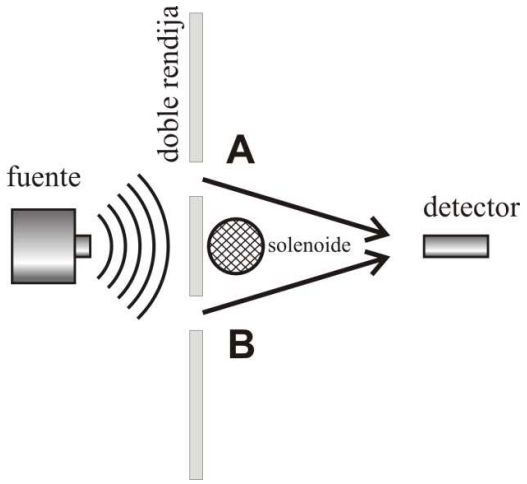

Figura A- 1 Esquema del efecto Aharonov-Bhom: una fuente genera particulas que atraviesan un sistema de doble rendija, pasando por las rendijas **A** y **B** y llegando a un detector, el camino cerrado de estas dos trayectorias encierra un campo magnético restringido sólo a la región del solenoide.

Este mismo efecto puede ser aplicado a un sistema bicama de cargas como en el caso de pozos cuánticos duplos a los cuales se les aplica campos magnéticos paralelos $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ y puede ser considerado un trayecto para un flujo magnético como se observa en la figura A-2.

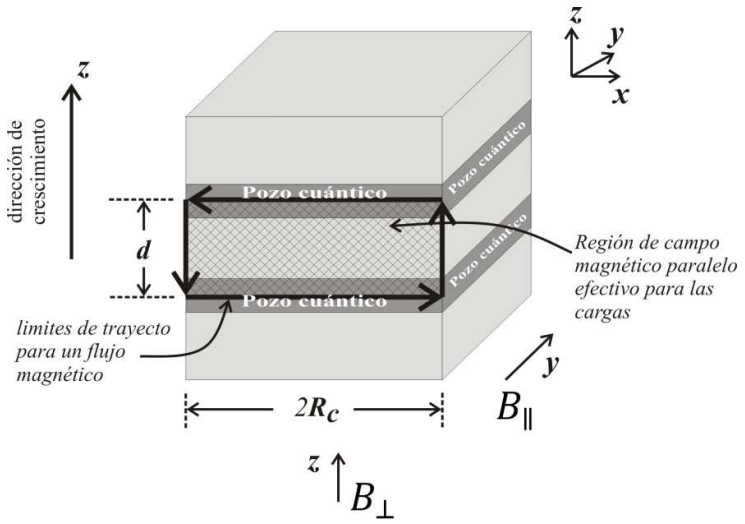

Figura A- 2 Esquema del efecto Aharonov-Bhom: una fuente genera particulas que atraviesan un sistema de doble rendija, pasando por las rendijas A y B rendijas y llegando a un detector, el camino cerrado de estas dos trayectorias encierra un campo magnético restringido sólo a la región del solenoide. Adaptado de la referencia (McKenzie & Moses, 1998).

En la figura A-2 las capas electrónicas en cada pozo cupantico están separadas por una distancia d, sujetas a campo magnético paralelo y perpendicular. En la aproximación semi-clássica el movimiento de los electrones es en el plano del gas de electrones con un radio de $R_c = \hbar k_F / eB_\perp$ que depende de la componente perpendicular del campo. Por otro lado, existe el flujo magnético debido a la componente paralela del campo magnético a través de un área $S = 2R_c d$, ver la figura A-2; este flujo magnético genera un desplazamiento de fase entre orbitas electrónicas de capas electrónicas diferentes, resultando en el efecto Aharonov-Bohm. Este efecto resulta en oscilaciones del parámetro de interacción entre cargas de diferentes niveles de energia $\Delta_{SAS} = E_2 - E_1$, la cual es dada por

$$\Delta_{\boldsymbol{SAS}} = \Delta^{\boldsymbol{0}}_{\boldsymbol{SAS}} J_0[\boldsymbol{k_F d} \tan(\boldsymbol{\theta})] \qquad \text{A. 3}$$

donde J_0 es la función de Bessel, $\tan(\theta) = B_\parallel / B_\perp$ y Δ^0_{SAS} es el gap de energía entre los dos primeros niveles de energia ocupados en ausencia de campo magnético. La ecuación 3.3.3 permite explorar la distribución electronica a través del parámetro $\boldsymbol{d}$ en el sistema de dos capas electrónicas y asi mismo permite explorar la energia de Fermi que esta asociada a $\boldsymbol{k_F}$.

Referencias

Adachi, S. (1994). *GaAs and related materials: Bulk semiconducting and superlattice properties*. World Scientific.

Aharonov, Y., & Bohm, D. (1959). Physical Review, 115, 485. *CrossRef ADS MathSciNet*.

Basu, P. K. (1990). Linewidth of free excitons in quantum wells: Contribution by alloy disorder scattering. *Applied physics letters*, *56*(12), 1110–1112.

Brey, L., Dempsey, J., Johnson, N. F., & Halperin, B. I. (1990). Infrared optical absorption in imperfect parabolic quantum wells. *Physical Review B*, *42*(2), 1240.

Callister Jr, W. D. (2007). Materials Science and Engineering, John willey & Sons. *Inc, New York*, 362–363.

Chambers, R. G. (1960). Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Physical Review Letters*, *5*(1), 3.

Ferry, D. (2016). *Semiconductor transport*. CRC Press.

Flannery, B. P., Press, W. H., Teukolsky, S. A., & Vetterling, W. (1992). Numerical recipes in C. *Press Syndicate of the University of Cambridge, New York*, *24*, 78.

Fowler, H. A., Marton, L., Simpson, J. A., & Suddeth, J. A. (1961). Electron interferometer studies of iron whiskers. *Journal of Applied Physics*, *32*(6), 1153–1155.

Gold, A. (1986). Metal insulator transition due to surface roughness scattering in a quantum well. *Solid state communications*, *60*(6), 531–534.

Gusev, G. M., Wiedmann, S., Raichev, O. E., Bakarov, A. K., & Portal, J. C. (2009). Emergent and reentrant fractional quantum Hall effect in trilayer systems in a tilted magnetic field. *Physical Review B*, *80*(16), 161302.

Gusev, Gennady Mikhailovich, Bakarov, A. K., Lamas, T. E., & Portal, J. C. (2007). Reentrant quantum Hall effect and anisotropic transport in a bilayer system at high filling factors. *Physical review letters*, *99*(12), 126804.

Gusev, Guennadii Michailovich, Bakarov, A. K., Lamas, T. E., & Portal, J. C. (2008). Reentrant quantum Hall effect in bilayer system at high filling factors. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *40*(5), 1576–1578.

Hanna, C. B., & MacDonald, A. H. (1996). Spontaneous coherence and the quantum Hall effect in triple-layer electron systems. *Physical Review B*, *53*(23), 15981.

Hargrove, M. J., Henning, A. K., Slinkman, J. A., & Hembree, C. E. (1998). Self-Consistent Solution of the Schr odinger and Poisson Equations Applied to Quantum Well Heterostructures. *Technical Report.*

Harrison, P., & Valavanis, A. (2016). *Quantum wells, wires and dots: Theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons.

Hu, J., & MacDonald, A. H. (1992). Electronic structure of parallel two-dimensional electron systems in tilted magnetic fields. *Physical Review B*, *46*(19), 12554.

Janotti, A., & Van de Walle, C. G. (2009). Fundamentals of zinc oxide as a semiconductor. *Reports on progress in physics*, *72*(12), 126501.

Jo, J., Suen, Y. W., Engel, L. W., Santos, M. B., & Shayegan, M. (1992). Quantum Hall effect in a triple-layer electron system. *Physical Review B*, *46*(15), 9776.

Kittel, C. (1976). *Introduction to solid state physics* (Vol. 8). Wiley New York.

Klitzing, K. v, Dorda, G., & Pepper, M. (1980). New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical Review Letters*, *45*(6), 494.

Korsch, H. J., & Laurent, H. (1981). Milne's differential equation and numerical solutions of the Schrodinger equation. I. Bound-state energies for single-and double-minimum potentials. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, *14*(22), 4213.

Lamas, T. E. (2004). *Epitaxia por feixe molecular de camadas dopadas do tipo p para a construção de dispositivos optoeletrônicos* (PhD Thesis). Universidade de São Paulo.

Liu, X., & Li, W. (2014). Three-mode approximation of symmetrical triple-square wells. *American Journal of Modern Physics*, *3*(2), 113–117.

Ma, S., Liang, H., Wang, X., Zhou, J., Li, L., & Sun, C. Q. (2011). Controlling the band gap of ZnO by programmable annealing. *The Journal of Physical Chemistry C*, *115*(42), 20487–20490.

MacDonald, A. H. (1990). The fractional Hall effect in multi-component systems. *Surface Science*, *229*(1–3), 1–6.

Mamani, N. C., Gusev, G. M., Lamas, T. E., Bakarov, A. K., & Raichev, O. E. (2008). Resonance oscillations of magnetoresistance in double quantum wells. *Physical Review B*, *77*(20), 205327.

McKenzie, R. H., & Moses, P. (1998). Incoherent Interlayer Transport and Angular-Dependent Magnetoresistance Oscillations in Layered Metals. *Physical Review Letters*, *81*(20), 4492–4495. American Physical Society.

Nag, B. R. (2001). *Physics of quantum well devices* (Vol. 7). Springer Science & Business Media.

Pfeiffer, L., & West, K. W. (2003). The role of MBE in recent quantum Hall effect physics discoveries. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, *20*(1–2), 57–64.

Raichev, O. E. (2008). Magnetic oscillations of resistivity and absorption of radiation in quantum wells with two populated subbands. *Physical Review B*, *78*(12), 125304.

Raikh, M. E., & Shahbazyan, T. V. (1994). Magnetointersubband oscillations of conductivity in a two-dimensional electronic system. *Physical Review B*, *49*(8), 5531.

Rimberg, A. J., & Westervelt, R. M. (1989). Electron energy levels for a dense electron gas in parabolic GaAs/Al x Ga 1- x As quantum wells. *Physical Review B*, *40*(6), 3970.

Sahu, T. (2004). Intersubband-coupling and screening effects on the electron subband mobility in a GaAs/ In x Ga 1- x As delta-doped double quantum well system. *Journal of applied physics*, *96*(10), 5576–5581.

Sajoto, T., Jo, J., Santos, M., & Shayegan, M. (1989). High quality electron system with variable electron layer thickness in a parabolic quantum well. *Applied physics letters*, *55*(14), 1430–1432.

Schubnikow, L., & De Haas, W. J. (1930). A new phenomenon in the change of resistance in a magnetic field of single crystals of bismuth. *Nature*, *126*(3179), 500.

Seraide, R. M. (2001). *Mobilidade eletrônica em poços quânticos parabólicos de AlGaAs* (PhD Thesis). Universidade de São Paulo.

Shukla, S. P., Suen, Y. W., & Shayegan, M. (1998). Magnetic-field-induced triple-layer to bilayer transition. *Physical review letters*, *81*(3), 693.

Singleton, J. (2001). *Band theory and electronic properties of solids* (Vol. 2). Oxford University Press.

Szabo, A., & Ostlund, N. S. (2012). *Modern quantum chemistry: Introduction to advanced electronic structure theory*. Courier Corporation.

Tsui, D. C., Stormer, H. L., & Gossard, A. C. (1982). Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Physical Review Letters*, *48*(22), 1559.

Ullah, S., Gusev, G. M., Bakarov, A. K., & Hernandez, F. G. G. (2017). Large anisotropic spin relaxation time of exciton bound to donor states in triple quantum wells. *Journal of Applied Physics*, *121*(20), 205703.

Van Houten, H., Williamson, J. G., Broekaart, M. E. I., Foxon, C. T., & Harris, J. J. (1988). Magnetoresistance in a GaAs-Al x Ga 1- x As heterostructure with double subband occupancy. *Physical Review B*, *37*(5), 2756.

Wiedmann, S., Mamani, N. C., Gusev, G. M., Raichev, O. E., Bakarov, A. K., & Portal, J. C. (2009). Magnetoresistance oscillations in multilayer systems: Triple quantum wells. *Physical Review B*, *80*(24), 245306.

Wu, M. W., Jiang, J. H., & Weng, M. Q. (2010). Spin dynamics in semiconductors. *Physics Reports*, *493*(2–4), 61–236.

Zudov, M. A., Du, R. R., Simmons, J. A., & Reno, J. L. (2001). Shubnikov–de Haas-like oscillations in millimeterwave photoconductivity in a high-mobility two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, *64*(20), 201311.