

## RESUMEN

Se presentan los cálculos teóricos de los niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos.

Los resultados se presentan en dependencia con el ancho de las barreras del potencial de confinamiento, del ancho de los pozos, la amplitud de los campos eléctricos externos, respectivamente.

Se discuten los efectos de los campos eléctricos sobre las energías de la impureza donadora en distintas configuraciones de la geometría de los pozos cuánticos acoplados.

Se encuentra que las energías corresponden a energías del infrarrojo medio en la región de los terahertz.

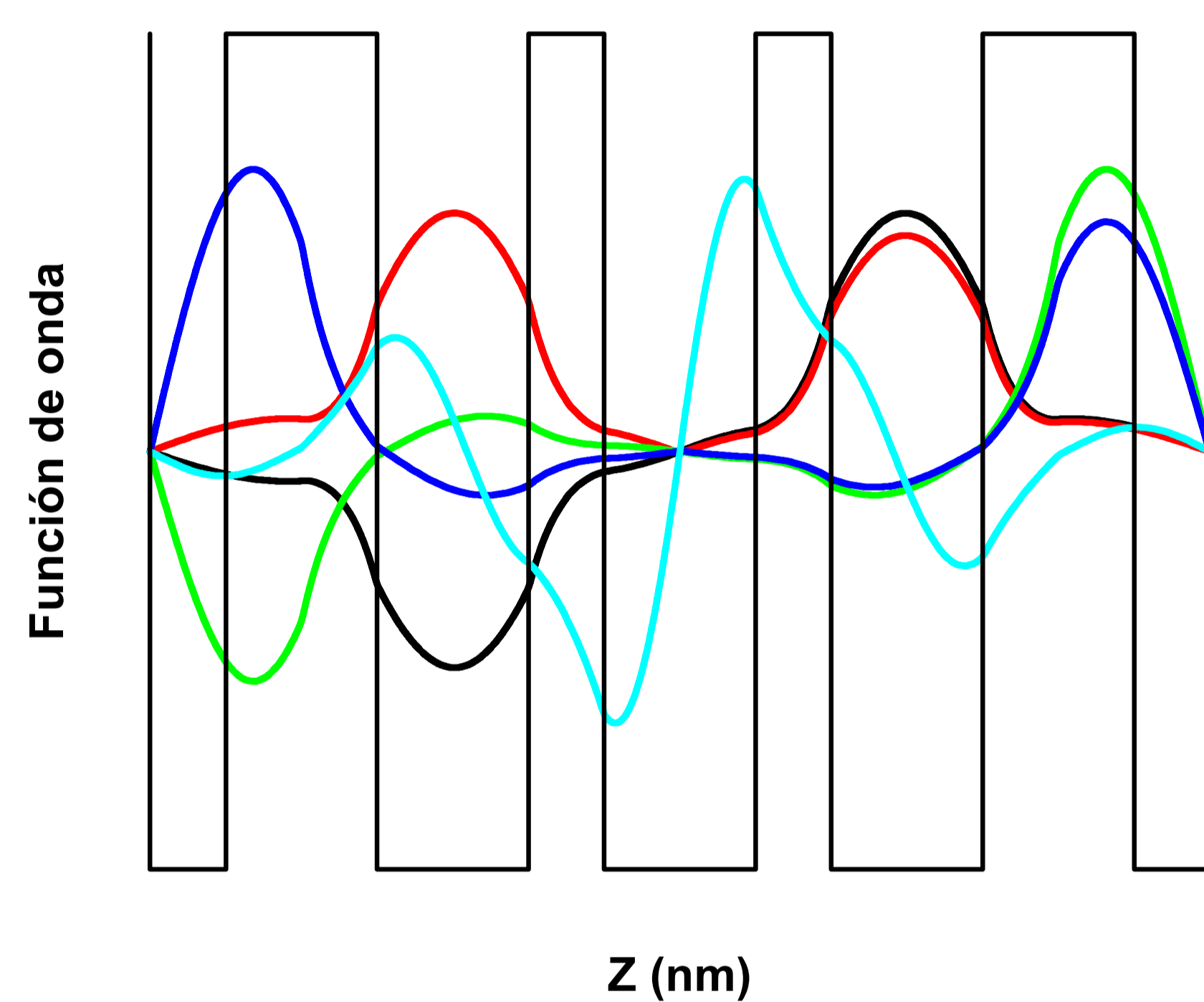


FIG. 1: Esquema de los pozos cuánticos de *CdS/CdTe*. Además se presentan las funciones de onda de los primeros cinco estados de una impureza donadora.

## MARCO TEÓRICO

El Hamiltoniano para una interacción electrón-impureza donadora, en el marco de la aproximaciones de masa efectiva y de bandas parabólicas, viene dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m^*} \nabla \right) + V(z) + \frac{e^2}{\varepsilon(|z-z_0|)} + ezF, \quad (1)$$

donde el valor de  $m^*$  y el potencial de confinamiento  $V(z)$  dependen de la región en la cual se resuelve la ecuación de Schrödinger.

$z_0$  es la posición de la impureza donadora poco profunda, que tiene la misma carga  $e$  el valor absoluto de la carga del electrón.

Tomamos la masa efectiva en los dos materiales así:  $m^* = m_{in}^* = 0,10 m_0$  (*CdTe*), y  $m^* = m_{out}^* = 0,2 m_0$  (*CdS*), donde  $m_0$  es la masa del electrón libre.

Además,  $\varepsilon = \varepsilon_{in}^* = 10 \varepsilon_0$  (*CdTe*), y  $\varepsilon = \varepsilon_{out}^* = 9 \varepsilon_0$  (*CdS*), donde  $\varepsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío.

$F$  es la magnitud del campo eléctrico externo aplicado a lo largo del eje- $z$ . Para aplicar el campo en diferentes sentidos en la Ec. (1), cambiamos el signo de la energía potencial eléctrica.

El potencial de confinamiento  $V(z)$ , se define como cero en la región donde el material es *CdTe*.

Y vale  $V(z) = 654$  meV en la región de las barreras donde el material es *CdS*.

La solución de la ecuación de Schrödinger, para el Hamiltoniano en Ec. (1), se obtuvo usando el método de elementos finitos.

Las condiciones de frontera se impusieron de la siguiente manera:

- (1) Continuidad de la función de onda en la frontera de cada región donde cambiamos de material,  $\psi_{in} = \psi_{out}$ .
- (2) Continuidad de  $\frac{1}{m^*} \nabla_{x,y} \psi$  en la interface *CdS/CdTe* con  $\left( \frac{1}{m_{in}^*} \frac{\partial \psi_{in}}{\partial X} = \frac{1}{m_{out}^*} \frac{\partial \psi_{out}}{\partial X} \right)$  con  $X = z$ .
- (3) Las condiciones de frontera de Dirichlet para las barreras laterales de (*CdS*) donde  $\psi = 0$  en el borde.

## RESULTADOS

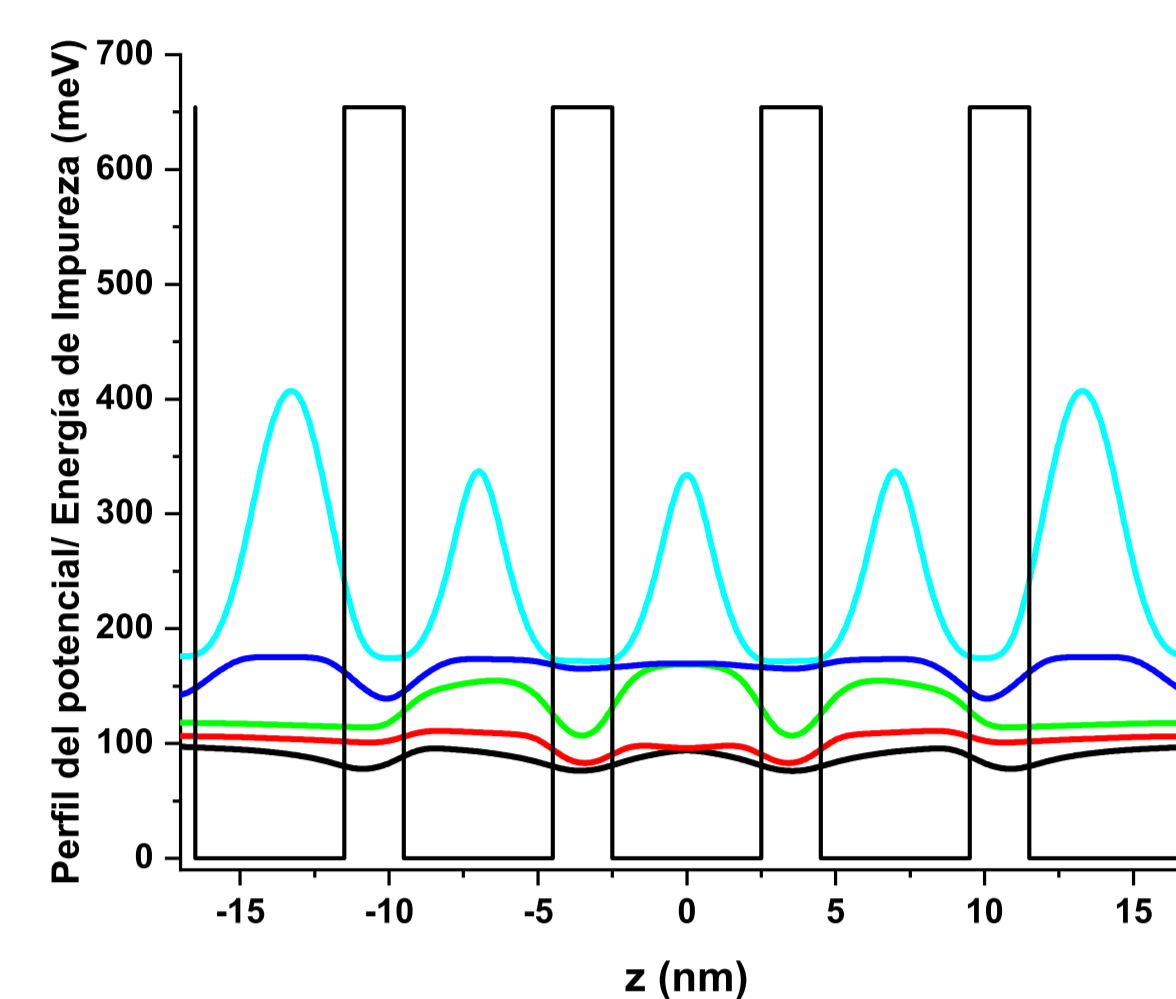


FIG. 2: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* con  $F = 0$  kV/cm.

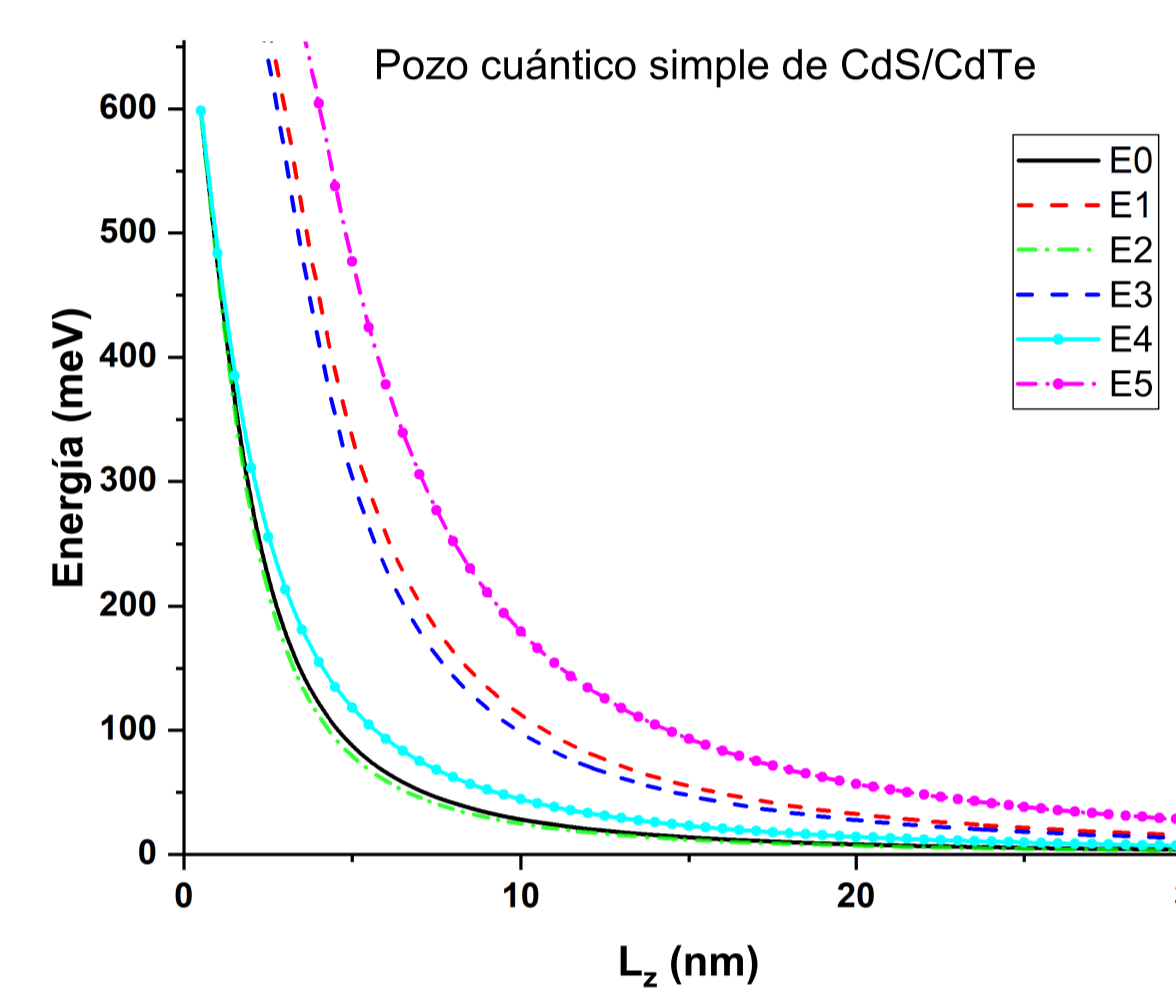


FIG. 3: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos.

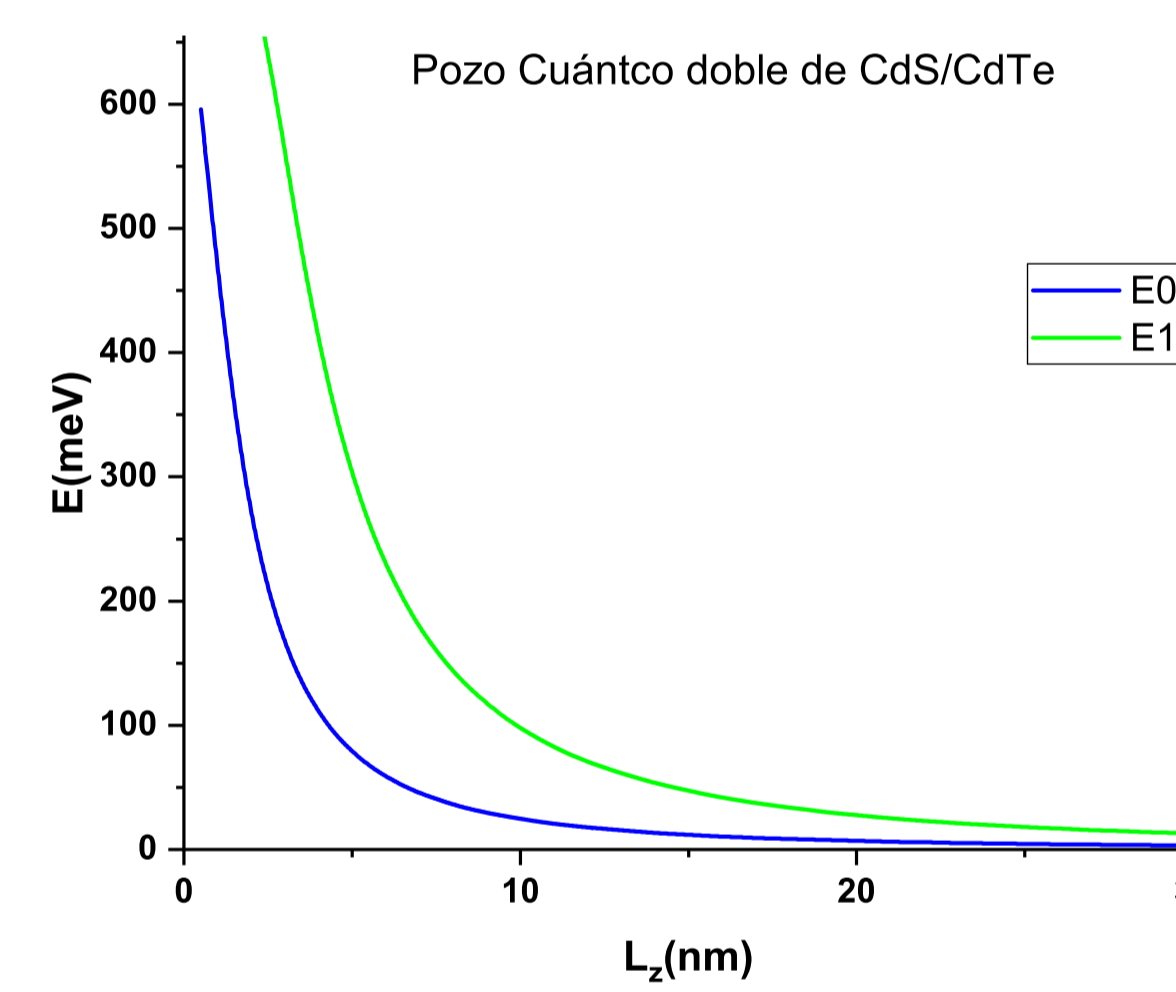


FIG. 4: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos..

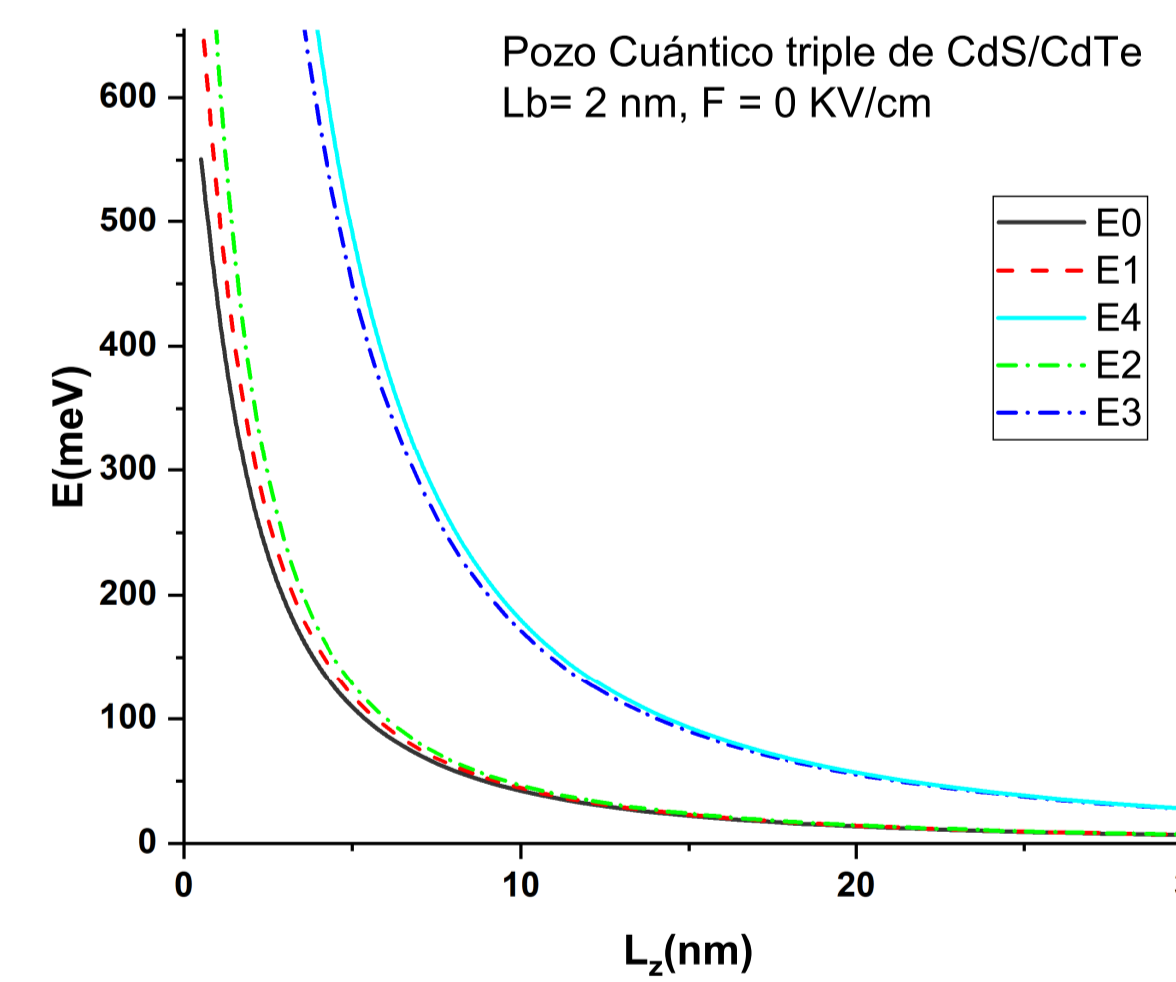


FIG. 5: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos..

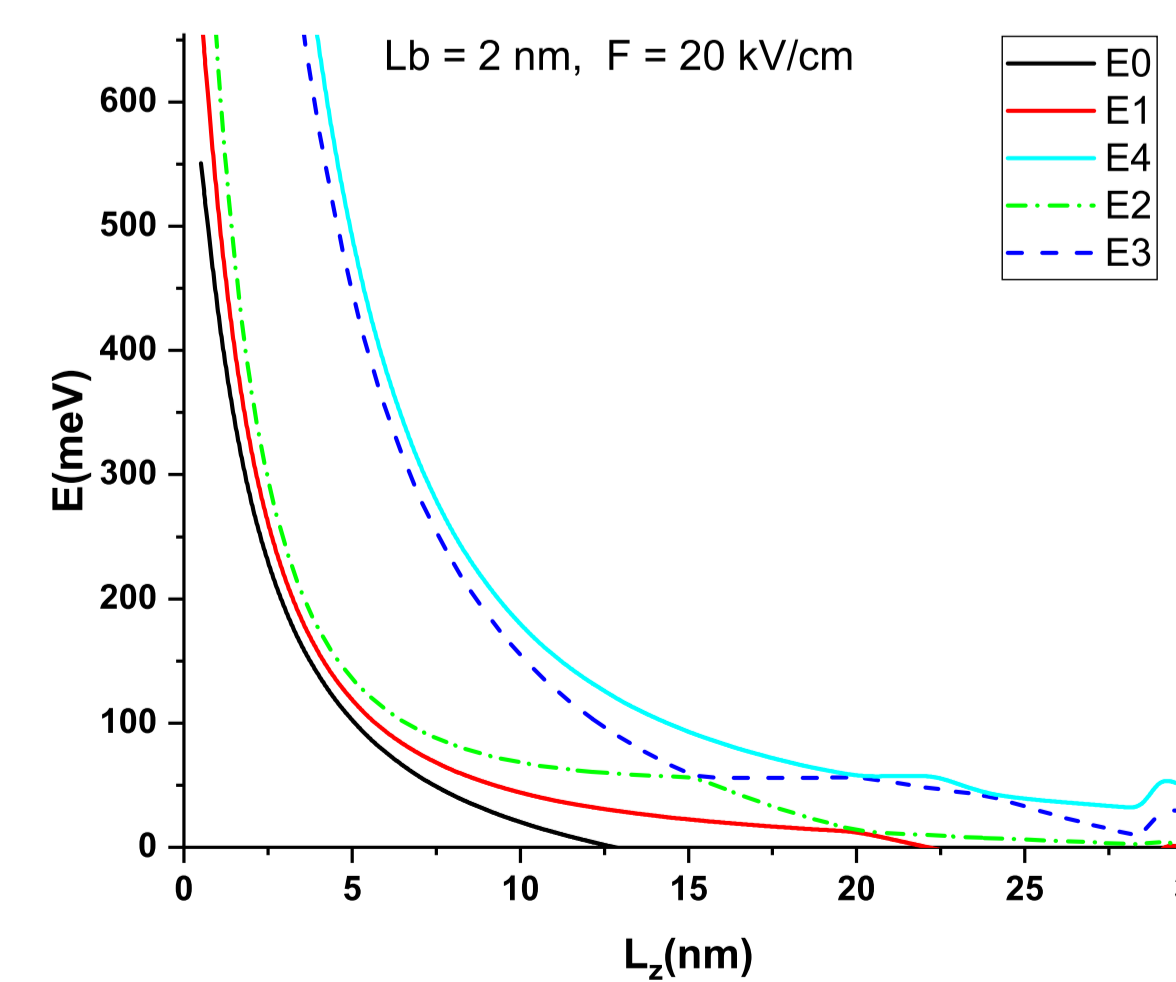


FIG. 6: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos..

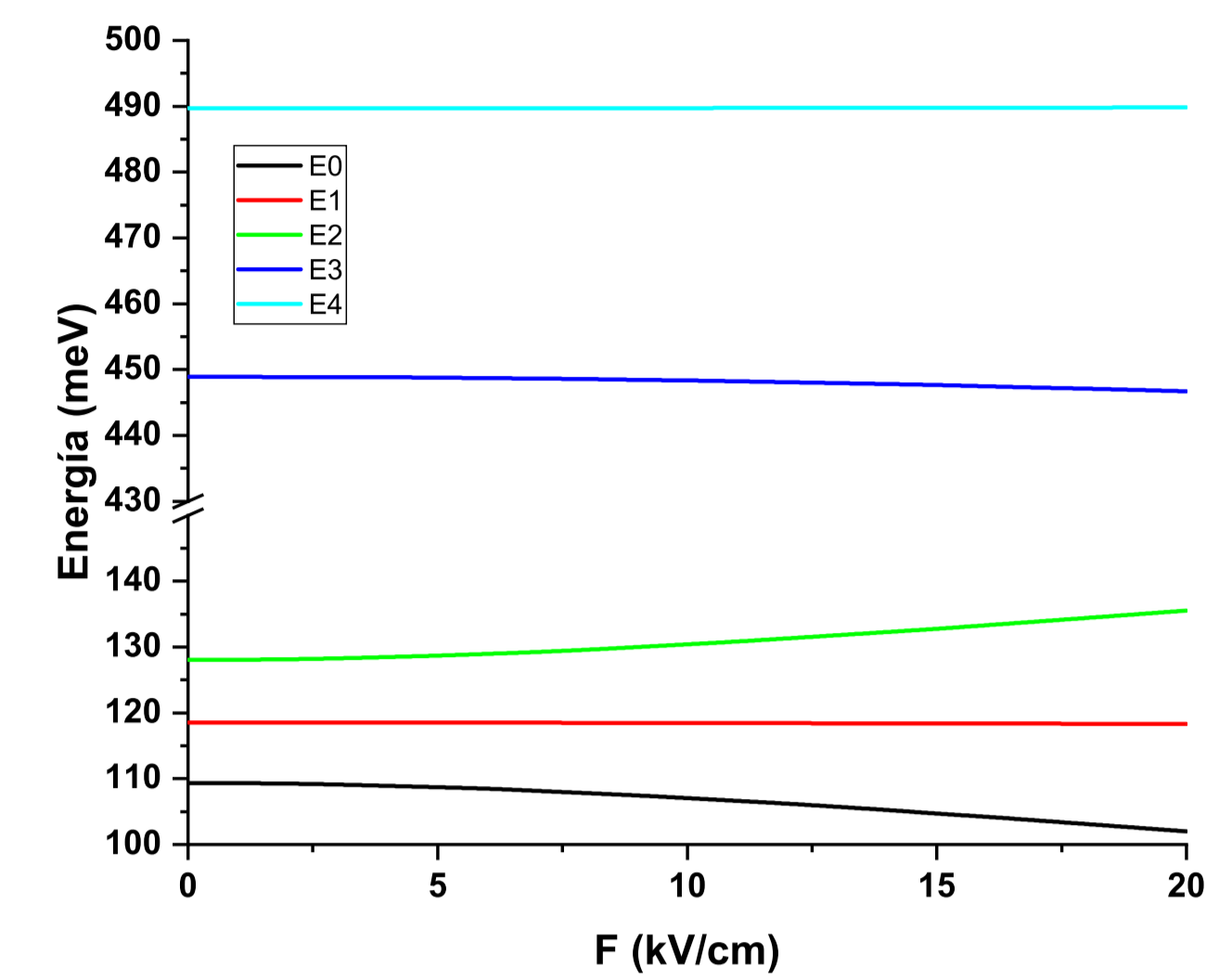


FIG. 7: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos.

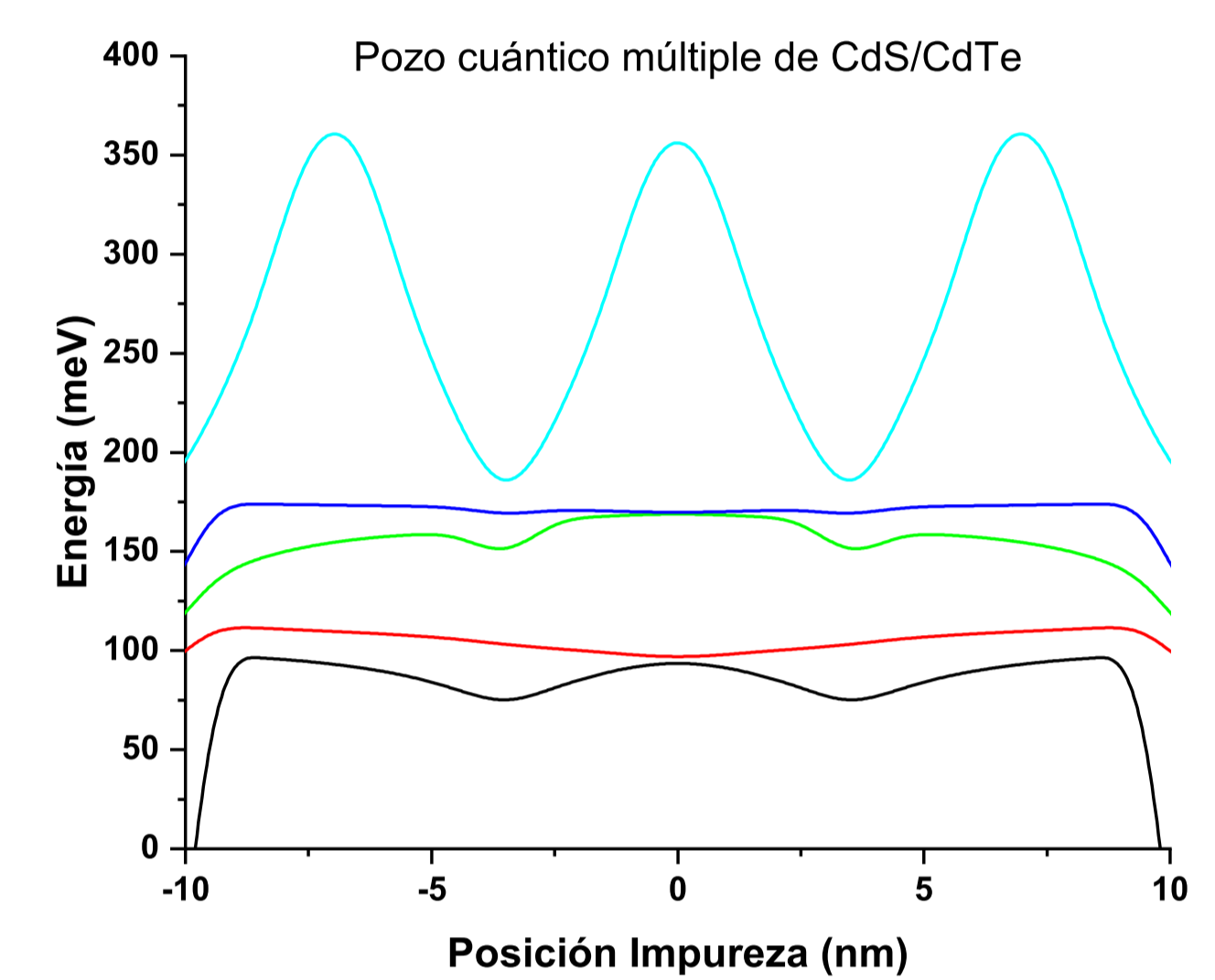


FIG. 8: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos.

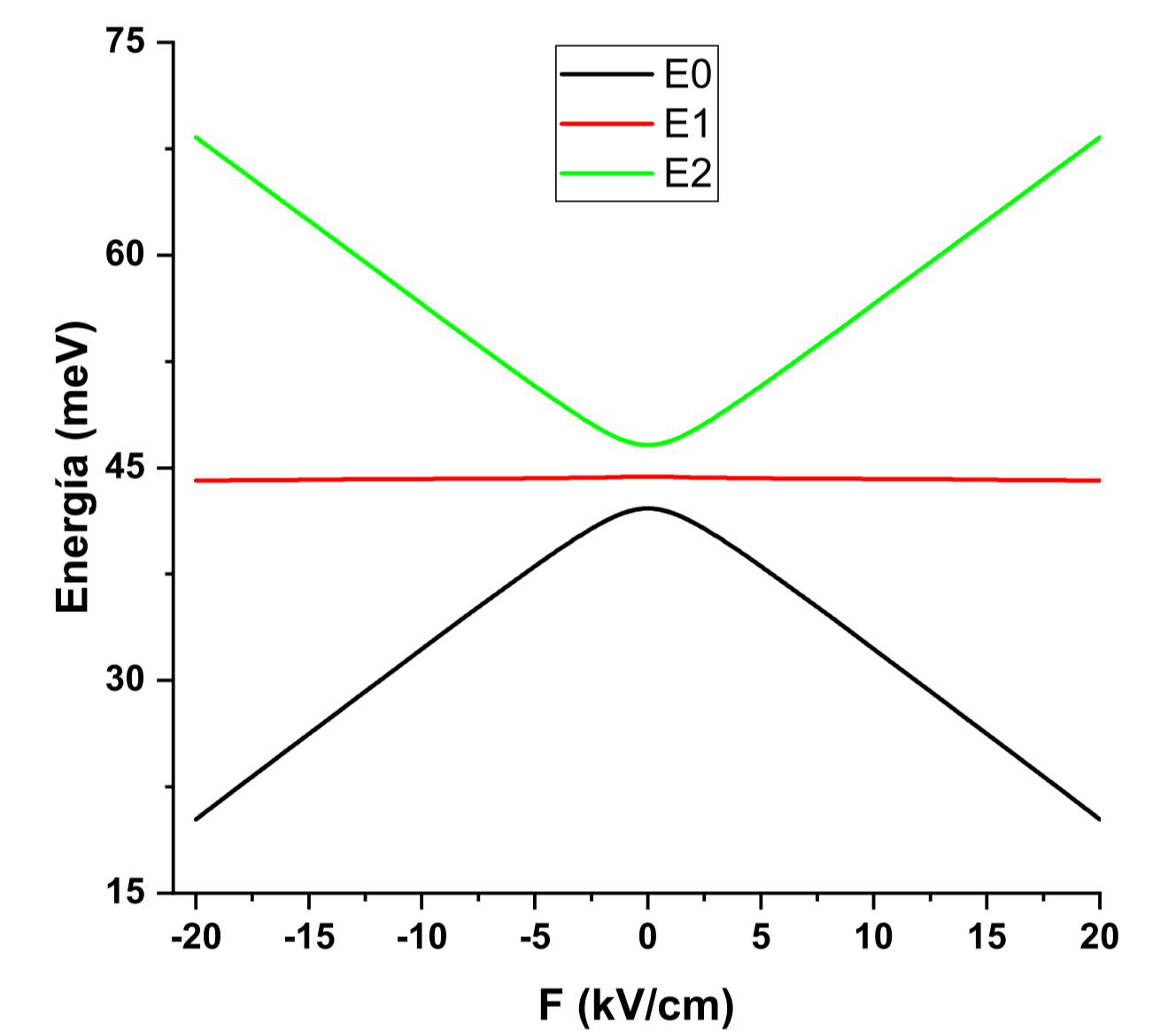


FIG. 9: Niveles de energía de una impureza donadora poco profunda en pozos cuánticos de *CdS/CdTe* bajo efectos de campos eléctricos estáticos.

## CONCLUSIONES

Las energías de los estados del electrón presentan un decrecimiento monótono en general en función del campo eléctrico, en particular es más notorio para el estado fundamental, esto se debe a que el estado base, siempre se localiza en el nivel más bajo en el pozo central de la heteroestructura, sobre la cual hay menos efecto del campo eléctrico por que la energía potencial eléctrica depende de las coordenadas y esta zona está rodeando el origen de coordenadas en  $x = 0$  nm, en las otras regiones, por estar alejadas del centro, se observa el salto de los valores de energía a valores cada vez mayores de los estados excitados, entre más alto se considera el nivel, más energía tiene, más efecto del campo.

El resultado para el espectro energético de los electrones, confirma el comportamiento decreciente, generalmente relacionado con el confinamiento espacial. Las energías permitidas son funciones de los tamaños de las regiones que contienen *CdTe*, este comportamiento es típico de las estructuras de baja dimensión.

Los resultados muestran que los valores de energía más altos están asociados a las regiones de pozos cuánticos más estrechos, mientras que los más pequeños corresponden a las regiones donde los pozos son más anchos.

Se observa el efecto túnel, cuando la función de onda del electrón-impureza tiene alguna probabilidad en las regiones de las barreras *CdS*.

Esperamos que estos resultados motiven investigadores a considerar los pozos cuánticos de materiales colcagenuros como un nanoestructura viable para uso en optoelectrónica dado su respuesta que corresponden al rango de energía del infrarrojo medio o las frecuencias de onda en THz.