

Estados $1s$ -like, $2p_-$ -like y $2p_+$ -like de una impureza hidrogenoide en un punto cuántico cilíndrico bajo la acción de un campo magnético aplicado

$1s$ -like, $2p_-$ -like and $2p_+$ -like States of a Hydrogenoid Impurity in a Cylindrical Quantum Dot Under the Action of an Applied Magnetic Field

A. A. Portacio¹, D. A. Rasero² y M. Urango Baquero³

Resumen

Se estudia teóricamente los estados cuánticos de un punto cuántico cilíndrico, (CDQ) de GaAs/Ga_{0,6}Al_{0,4}As con una impureza hidrogenoide en su interior y bajo la acción de un campo magnético uniforme, aplicado en la dirección axial del cilindro. Usando el método variacional se encontraron las energías y las funciones de onda de los estados de impureza, $1s$ -like, $2p_-$ -like y $2p_+$ -like, cuando ella se mueve dentro del CQD. Se encontró que existe degeneramiento en la energía de la impureza para los estados $2p_-$ -like y $2p_+$ -like en ausencia de campo magnético. Este degeneramiento se rompe solo al aplicar un campo magnético, indicando un efecto Zeeman en el sistema, así la variación de la intensidad del campo magnético permite sintonizar la condición resonancia de dos fotones.

Palabras clave: Punto cuántico cilíndrico, impureza hidrogenoide, campo magnético.

Abstract

The quantum states of a cylindrical quantum dot (CDQ) of GaAs/Ga_{0,6}Al_{0,4}As are studied theoretically with a hydrogen-like impurity inside and under the action of a uniform magnetic field, applied in the axial direction of the cylinder. Using the variational method, the energies and wave functions of the impurity states, $1s$ -like, $2p_-$ -like and $2p_+$ -like, when she moves inside the CQD. It was found that there is degeneracy in the impurity energy for the $2p_-$ -like and $2p_+$ -like states in the absence of a magnetic field. This degeneracy is broken only by applying a magnetic field, indicating a Zeeman effect in the system, thus, the variation of the intensity of the magnetic field allows to tune the resonance condition of two photons.

Keywords: Cylindrical quantum dot, hydrogenoid impurity, magnetic field.

Recepción: 21-may-2022

Aceptación: 13-nov-2022

¹Universidad de los Llanos, Facultad de Ciencias Básicas e Ingeniería, Villavicencio, Colombia. Correo Electronico: aportacio@unnillanos.edu.co. <https://orcid.org/0000-0002-5495-7102>

²Universidad Surcolombiana, Departamento de Ciencias Naturales, Grupo de Física Aplicada FIASUR, Neiva, Colombia. Correo electronico: diego.rasero@usco.edu.co. <https://orcid.org/0000-0002-6583-0422>

³Secretaría de Educación, Meta, Colombia. Correo electrónico: pilyurango2@gmail.com. <https://orcid.org/0000-0002-0604-5010>

1 Introducción

Los puntos cuánticos (QD's) son nanoestructuras que cada día toman importancia en diferentes áreas de la ciencia y la tecnología. La diferencia esencial entre los QD's y otros sistemas de baja dimensionalidad está en la completa cuantización del espectro de energía de los portadores de carga situados en ellos. Debido a esto, los QD's tienen propiedades idénticas a los átomos reales en muchos aspectos, por ello se llaman "átomos artificiales" [1]. Otras propiedades de los QD's son la ocurrencia de transiciones ópticas inter sub-bandas y los grandes valores de los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico de transición óptica entre las sub-bandas de los QD's. Estas características aumentan la contribución de las partes no lineales en las constantes dieléctricas y en las propiedades ópticas [2]. Por lo anterior, en los últimos años ha aumentado el interés por investigar el efecto sobre las propiedades cuánticas de sistemas de baja dimensionalidad debido a la acción de agentes externos tales como la temperatura, la presión hidrostática, los campos eléctricos y los campos magnéticos, con el fin de desarrollar nuevas aplicaciones tecnológicas [3, 4, 5, 6, 7, 8]. Esto ha permitido importantes avances teóricos y experimentales en la manipulación y optimización de la respuesta óptica en nano-estructuras. Por otra parte, las impurezas en nanomateriales producen cambios significativos en las sub-bandas de energía de las nano-estructuras permitiendo transiciones ópticas controladas. La transición óptica controlada es de suma importancia para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos con propiedades de emisión o transmisión sintonizables y anchos de línea espectrales ultra estrechos. Además, la relación entre la energía de transición óptica y el confinamiento cuántico hace que la sintonización de la frecuencia de resonancia sea posible [9].

En este trabajo se presenta un estudio teórico sobre el cálculo de los estados cuánticos en un CQD de GaAs/Ga_{0,6}Al_{0,4}As con una impureza hidrogenoide en su interior y bajo la acción de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección axial del cilindro. Se analiza el efecto del campo magnético y de la posición de la impureza dentro del CQD

sobre los estados de impureza, 1s-like, 2p₋-like y 2p₊-like.

2 Teoría

El sistema estudiado consiste de una impureza hidrogenoide confinada en un CQD en presencia de un campo magnético uniforme \mathbf{B} orientado en la dirección axial del CQD (Figura 1).

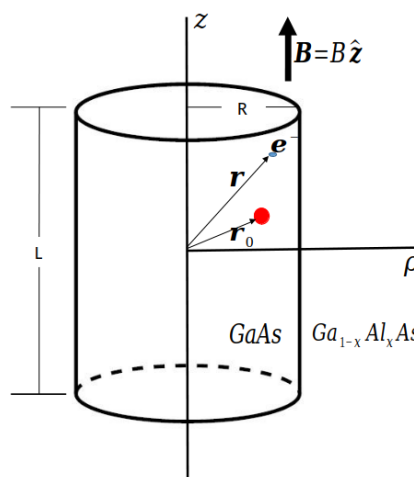


Figura 1. Representación esquemática del punto cuántico cilíndrico bajo estudio.

En el marco de la aproximación de masa efectiva y de un procedimiento variacional, el Hamiltoniano \hat{H}_0 de la impureza hidrogenoide se escribe como [10, 11]:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m^*} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + V_{\text{conf}}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

donde $\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = \sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + (z - z_0)^2}$, \mathbf{r}_0 es la posición de la impureza medida desde el centro de CQD, ϵ es la permitividad dieléctrica de la nano-estructura, $2m^*$ es la masa efectiva del electrón, $\hat{\mathbf{P}}$ es el operador momento canónico, e es la carga del electrón, c es la velocidad de la luz en el vacío, \mathbf{A} es el vector potencial del campo magnético uniforme, el cual se puede escribir como $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ con $\mathbf{B} = B \hat{\mathbf{z}}$ y que en coordenadas cilíndricas se expresa como: $A_\rho = A_z = 0$, $A_\phi = \frac{1}{2} B \rho$, $V_{\text{conf}}(\mathbf{r})$ es un potencial de confinamiento finito definido como sigue:

$$V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) = V_{\text{conf}}(\rho, \phi, z) = V_\rho(\rho) + V_z(z) \quad (2)$$

Las expresiones para $V_\rho(\rho)$ y $V_z(z)$ son:

$$V_\rho(\rho) = \begin{cases} V_0 \left(\frac{\rho}{R}\right)^2, & \rho \leq R, \\ V_0, & \rho > R, \end{cases} \quad (3)$$

$$V_z(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{L}{2}, \\ V_0, & |z| \geq \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (4)$$

R y L son el radio y la longitud del cilindro, respectivamente, V_0 es la altura de la barrera de potencial, que corresponde a la diferencia de las bandas de conducción del material (GaAs) y el material circundante ($\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$), el valor de V_0 depende de la concentración x de Al.

Usando coordenadas cilíndricas y unidades atómicas reducidas se definen las siguientes magnitudes: radio efectivo de Borh $a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}$ para la longitud y Rydberg $R^* = \frac{m^* e^2}{2\hbar^2 \epsilon}$ para la energía. La ecuación (1) se puede escribir en la forma:

$$\hat{H}_0(\rho, \varphi, z) = \hat{H}(\rho, \varphi) + \hat{H}(z) - \frac{2}{\sqrt{(\rho - \rho_0)^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (5)$$

$$\psi_1(\rho, \varphi) = N_1 \begin{cases} e^{-\beta_1 R^2} {}_1F_1(a_i, 1 + m, 2\beta_1 \rho^2) e^{im\varphi}, & \rho \leq R, \\ e^{(\beta_2 - \beta_1) R^2} \frac{{}_1F_1(a_i, 1 + m, 2\beta_1 R^2)}{{}_1U_1(a_e, 1 + m, 2\beta_2 R^2)} {}_1U_1(a_e, 1 + m, 2\beta_2 \rho^2) e^{im\varphi}, & \rho \geq R. \end{cases} \quad (8)$$

En la ecuación (8), $\beta_1 = \frac{\sqrt{4V_0 + (\gamma R)^2}}{4R}$, $\beta_2 = \frac{\gamma}{4}$, $a_i = \frac{1}{2} - \frac{E_1}{8\beta_1}$, $a_e = \frac{1}{2} - \frac{(E_1 - V_0)}{8\beta_1}$, m es el número cuántico magnético, N_1 es la constante de normalización. ${}_1F_1(a, b, x)$ y ${}_1U_1(a, b, x)$ son funciones hipergeométricas confluentes usadas en las partes interna y externa del cilindro, respectivamente. Aplicando condiciones de frontera a las funciones de onda descritas en la ecuación (8), se obtiene la ecuación trascendental que determina los valores de la energía E_1 para cada m . La solución de la ecuación (7) también es conocida [10] y para el estado base tiene la siguiente forma:

$$\psi_2(z) = N_2 \begin{cases} e^{k_2(\frac{L}{2} + z)} \cos(k_1 \frac{L}{2}), & z < -\frac{L}{2}, \\ \cos(k_1 z), & |z| < \frac{L}{2}, \\ e^{k_2(\frac{L}{2} - z)} \cos(k_1 \frac{L}{2}), & z > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (9)$$

con

$$\begin{aligned} \hat{H}(\rho, \varphi) \psi_1(\rho, \varphi) = & \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} \right. \\ & \left. + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + V_\rho(\rho) \right] \psi_1(\rho, \varphi) \\ = & E_1 \psi_1(\rho, \varphi), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}(z) \psi_2(z) = & \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \right] \psi_2(z) \\ = & E_2 \psi_2(z). \end{aligned} \quad (7)$$

Las ecuaciones (6) y (7) representan las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo, para un electrón en un CQD, en las direcciones radial y axial del QD respectivamente, $\gamma = \frac{e\hbar B}{2m^* c R^*}$ es una medida adimensional del campo magnético. La solución de la ecuación (6) es conocida [10, 11] y está dada por:

donde, $k_1 = \sqrt{E_2}$, $k_2 = \sqrt{V_z(z) - E_2}$. El valor de la energía E_2 se determina resolviendo

$$\tan\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = \frac{k_2}{k_1}. \quad (10)$$

Para calcular la energía de la impureza en el CQD en el estado k (k representa los estados $1s$ -like, $2p_-$ -like y $2p_+$ -like, respectivamente), se utiliza el método variacional [12], usando una función de prueba de la siguiente forma:

$$\Psi_k(\rho, \varphi, z) = N_k \psi_1(\rho, \varphi) \psi_2(z) \Gamma_k(r, \lambda_k), \quad (11)$$

se usa $m = 0$ para $\psi_1(\rho, \varphi)$, N_k y $\Gamma_k(r, \lambda_k)$ son la constante de normalización y el orbital hidrogenoide para cada estado k respectivamente. Las expresiones para las funciones $\Gamma_k(r, \lambda_k)$ se detallan en [13, 14].

Los λ_k son los parámetros variacionales que se obtienen minimizando el valor esperado del Hamiltoniano descrito en la ecuación (5), esta energía mínima corresponde a la energía de la impureza para cada estado k , E_{imp}^k ,

$$E_{imp}^k = \frac{\langle \Psi_k(\rho, \varphi, z) | \hat{H}_0 | \Psi_k(\rho, \varphi, z) \rangle}{\langle \Psi_k(\rho, \varphi, z) | \Psi_k(\rho, \varphi, z) \rangle} \Big|_{\min(\lambda_k)} \quad (12)$$

3 Resultados y análisis

En esta sección, se analiza el efecto del campo magnético y de la posición de la impureza dentro del CQD sobre los estados de impureza, $1s$ -like, $2p_-$ -like y $2p_+$ -like. Para realizar los cálculos se usaron los siguientes parámetros: masa efectiva del electrón $m^* = 0,067m$ (m_0 es la masa del electrón libre) y 40% de concentración de Al para el cual la barrera de potencial es $V_0 = 316$ meV [10, 11]. Además, se utiliza la siguiente notación Ψ_1 corresponde al estado $1s$ -like, Ψ_2 corresponde al estado $2p_-$ -like y Ψ_3 corresponde al estado $2p_+$ -like, así E_{fi} es la energía de transición del estado final Ψ_f al estado inicial Ψ_i .

El efecto de la variación de la posición de la impureza y/o la variación del campo magnético sobre la energía de transición entre los estados ($1s$ -like y $2p_-$ -like) y ($1s$ -like y $2p_+$ -like) se muestran en las Figura 2(A)-(B), respectivamente. Se observa que en ausencia de campo magnético $E_{21} = E_{31}$ para cualquier posición de la impureza. Esto se debe a que la energía del orbital hidrogenoide $2p$ es degenerada cuando $B = 0$ T, también se observa que este degeneramiento se rompe al aplicar un campo magnético indicando un efecto Zeeman en el sistema. Este fenómeno indica que el campo magnético es un parámetro externo que permite la sintonización de la frecuencia de resonancia en fenómenos ópticos presentes en nano-estructuras con impurezas en su interior. También se observa que para cualquier valor del campo magnético, las energías de transición E_{21} y E_{31} se desplazan hacia el rojo cuando la impureza se mueve desde el centro del CQD. La razón de este comportamiento se debe a la disminución de la interacción electrostática promedio ión-electrón en la impureza, cuando la impureza se acerca a la barrera de potencial. Se observa en la Figura 2 que el aumento de la posición radial de la impureza disminuye mucho más las energías de transición, que

el aumento de la posición axial de la impureza. Esto se debe a que el potencial de confinamiento geométrico en la dirección radial ecuación (3) es mayor que el potencial de confinamiento geométrico en la dirección axial ecuación (4).

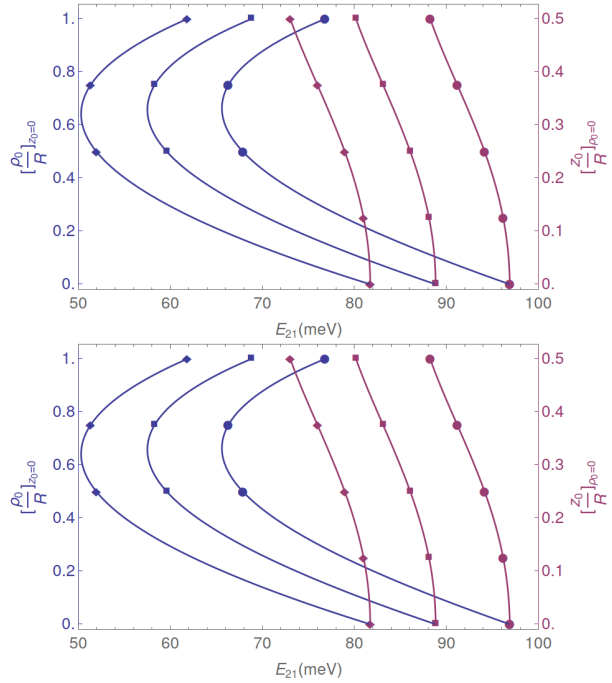


Figura 2. Energía de transición E_{fi} entre los estados (A) $1s$ -like y $2p_-$ -like. (B) $1s$ -like y $2p_+$ -like. La línea azul indica la variación de E_{fi} con la posición radial de la impureza para $z_0 = 0$. La línea purpura indica la variación de E_{fi} con la posición axial de la impureza en $\rho_0 = 0$. Para tres valores de campo magnético: $B = 0$ T (círculo), $B = 10$ T (rectángulo), $B = 20$ T (rombo).

4 Conclusiones

En este artículo, se calcularon las energías y las correspondientes funciones de onda para los estados $1s$ -like, $2p_-$ -like y $2p_+$ -like de una impureza hidrogenoide en un CQD de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,6}\text{Al}_{0,4}\text{As}$, en presencia de un campo magnético uniforme. Se encontró que existe degeneramiento en la energía de la impureza para los estados $2p_-$ -like y $2p_+$ -like en ausencia de campo magnético. Este degeneramiento se rompe solo al aplicar un campo magnético indicando un efecto Zeeman en el sistema, permitiendo sintonizar la condición resonancia de dos fotones con la variación del campo magnético.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por la Universidad de los Llanos a través del proyecto de investigación: *Cálculo del Espectro de Emisión de un Sistema Punto Cuántico-Nanocavidad Forzado por un Pulso Láser*, código C09-F02-008-2021.

Referencias

- [1] H. A. Sarkisyan. Electronic states in a cylindrical quantum dot in the presence of parallel electrical and magnetic fields. *Modern Physics Letters B*, vol. 16, no. 22, pp. 835-841, 2002.
- [2] G. Rezaei, M. R. K. Vahdani, and B. Vaseghi. Nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity in an ellipsoidal finite potential quantum dot. *Current Applied Physics*, vol. 11, no. 2, pp. 176-181, 2011.
- [3] R. Chegel, S. Behzad, and E. Ahmadi. Effects of electric and magnetic fields on the electronic properties of zigzag carbon and boron nitride nanotubes. *Solid State Sciences*, vol. 14, no. 4, pp. 456-464, 2012.
- [4] F. Ungan, H. Sari, E. Kasapoglu, U. Yesilgul, S. Sakiroglu, and I. Sökmen. Study of electron-related optical responses in the Tietz-Hua quantum well: Role of applied external fields. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, vol. 32, pp. 47-52, 2018.
- [5] S. Antil, M. Kumar, S. Lahon, and A.S. Maan. Pressure dependent optical properties of quantum dot with spin orbit interaction and magnetic field. *Optik*, vol. 176, pp. 278-286, 2019.
- [6] F. Ungan, M. K. Bahar, J. C. Martinez-Orozco, and M.E. Mora-Ramos. Optical responses in asymmetric hyperbolic-type quantum wells under the effect of external electromagnetic fields. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, vol. 41, p. 100833, 2020.
- [7] M. Chnafi, L. Belamkadem, O. Mommadi, R. Boussetta, M. El Hadi, vol. A. El Mousaouy, F. Falyouni, J.A. Vinasco, D. Laroze, F. Mora-Rey, and C.A. Duque. Hydrostatic pressure and temperature effects on spectrum of an off-center single dopant in a conical quantum dot with spherical edge. *Superlattices and Microstructures*, vol. 159, pp. 107052, 2021.
- [8] A. Turkoglu, H. Dakhlaoui, M.E. Mora-Ramos, and F. Ungan. Optical properties of a quantum well with razor confinement potential: Role of applied external fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 134, p. 114919, 2021.
- [9] J. Ganguly, S. Saha, S. Pal, and M. Ghosh. Fabricating third-order nonlinear optical susceptibility of impurity doped quantum dots in the presence of gaussian white noise. *Optics Communications*, vol. 363, pp. 47-56, 2016.
- [10] A. A. Portacio, B. A. Rodríguez, and P. Villamil. Non-linear optical response of an impurity in a cylindrical quantum dot under the action of a magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*, vol. 511, pp. 68-73, 2017.
- [11] P. Villamil. Donor in cylindrical quantum well wire under the action of an applied magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 42, no. 9, pp. 2436-2440, 2010.
- [12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Lalöe. *Quantum Mechanics: Angular Momentum, Spin, and Approximation Methods*, vol. 2. Wiley-VCH, 2 edition, 2020.
- [13] S. N. Chaudhuri and K. K. Bajaj. Effect of non-parabolicity on the energy levels of hydrogenic donors in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures. *Physical Review B*, vol. 29, no. 4, pp. 1803-1806, 1984.
- [14] A. Latgé, vol. N. Porrás-Montenegro, and L. E. Oliveira. Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs-(Ga,Al)As quantum-well wires. *Physical Review B*, vol. 45, no. 16, pp. 9420-9423, 1992.