

DISPERSIÓN RAMAN DE ELECTRONES EN PUNTOS CUÁNTICOS PIRAMIDALES

ÁLVARO LUIS MORALES ARAMBURO¹

RICARDO LEÓN RESTREPO ARANGO²

 CARLOS ALBERTO DUQUE ECHEVERRI³

RESUMEN

En este artículo se investiga teóricamente la dispersión Raman de electrones en puntos cuánticos piramidales. Se reporta la sección transversal diferencial Raman electrónica usando los estados cuánticos determinados analíticamente dentro de la aproximación de masa efectiva. Las características de la sección transversal diferencial Raman se discuten en términos de su dependencia de los cambios de la geometría de punto cuántico.

PALABRAS CLAVE: Puntos cuánticos, dispersión Raman, pirámides, banda de conducción, GaAs, semiconductores.

ELECTRON RAMAN SCATTERING IN PYRAMIDAL QUANTUM DOTS

ABSTRACT

The Raman scattering related with electrons in pyramidal quantum dots is theoretically investigated. The electron Raman differential cross section is calculated making use of analytically determined quantum states within the effective mass approximation. The features of the Raman differential cross section are discussed in terms of their dependence on the changes of the quantum dot geometry.

KEYWORDS: Quantum dots; Raman scattering; Pyramids; Conduction band; GaAs; Semiconductors.

ESPALHAMENTO RAMAN DO ELÉTRONES EM PONTOS QUÂNTICOS PIRAMIDAI

RESUMO

Este artigo busca pesquisar teoricamente o espalhamento Raman de elétrones em pontos quânticos piramidais. Reporta a seção transversal diferencial eletrônica de Raman usando estados quânticos determinados analiticamente dentro da aproximação de massa efetiva. As características da seção transversal diferencial de Raman são discutidos em termos de sua dependência das alterações da geometria do ponto quântico.

PALAVRAS-CHAVE: Pontos quânticos; Espalhamento Raman; Pirâmides; Banda de condução; GaAs; Semicondutores

¹ Grupo de Materia Condensada-U. de A., Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia U. de A., Medellín, Colombia.

² Físico, Magíster en Física, Doctor en Física. Universidad EIA- Las Palmas, Envigado, Colombia

³ Físico, M. Sc., Doctor Universidad de Antioquia



Autor de correspondencia: Duque Echeverri, C.A. (Carlos Alberto): Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia. Tel: (574) 219 56 30 / Correo electrónico: carlos.duque1@udea.edu.co

Historia del artículo:

Artículo recibido: 17-XI-2015 / Aprobado: 28-III-2016

Disponibile online: mayo 30 de 2016

Discusión abierta hasta mayo de 2017

1. INTRODUCCIÓN

Los puntos cuánticos semiconductores con forma piramidal han sido objeto de estudio durante más de dos décadas. Ellos han demostrado que tienen potenciales aplicaciones en los campos de la optoelectrónica y la información cuántica (ver, por ejemplo, Pelucchi, *et al.* [2012] y referencias allí incluidas).

A lo largo de los años ha aparecido en la literatura científica una cantidad cada vez mayor de artículos teóricos y experimentales sobre las propiedades electrónicas y ópticas de los puntos cuánticos piramidales (PCPs) (Chaganti y Apalkov, 2013). El cálculo de los estados cuánticos de portadores de carga en este tipo de sistemas se ha ocupado principalmente de la solución numérica de las ecuaciones diferenciales en la aproximación de masa efectiva, lo cual ha permitido investigar diferentes propiedades físicas (Park, Hong y Kim, 2015). En el caso de los PCP hay reportes de un tratamiento analítico de los estados electrónicos (Lozovski y Piatnytsia, 2011).

De otro lado, el estudio de la dispersión Raman de electrones (DRE) en heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad se remonta a los años 80. En sistemas de volumen el tratamiento de la dispersión Raman de electrones fue primeramente reportado por Comas, Trallero-Giner y Pérez-Álvarez (1986). Poco tiempo después el mismo fenómeno fue reportado para el caso de pozos cuánticos Riera, *et al.* (1988). Después de ello, los trabajos se extendieron rápidamente a otras heteroestructuras tales como hilos y puntos cuánticos Betancourt-Riera, *et al.* (2012). Sin embargo, hasta donde se sabe, hasta la fecha no han sido tema de investigación las características de la dispersión Raman de electrones en PCP.

En este trabajo se presenta un estudio de la dispersión inelástica de la luz que implica transiciones electrónicas entre diferentes estados en PCP. Los estados electrónicos confinados se describirán mediante el enfoque analítico propuesto por Lozovski y Piatnytsia (2011). Particularmente se estudia la influencia de la geometría del PCP en el espectro Raman de electrones. El artículo está organizado de la siguiente manera: en la Sección 2 se dan algunos elementos clave del modelo teórico; la sección 3 está dedicada a presentar y discus-

tir los resultados obtenidos y la sección 4 contiene las conclusiones.

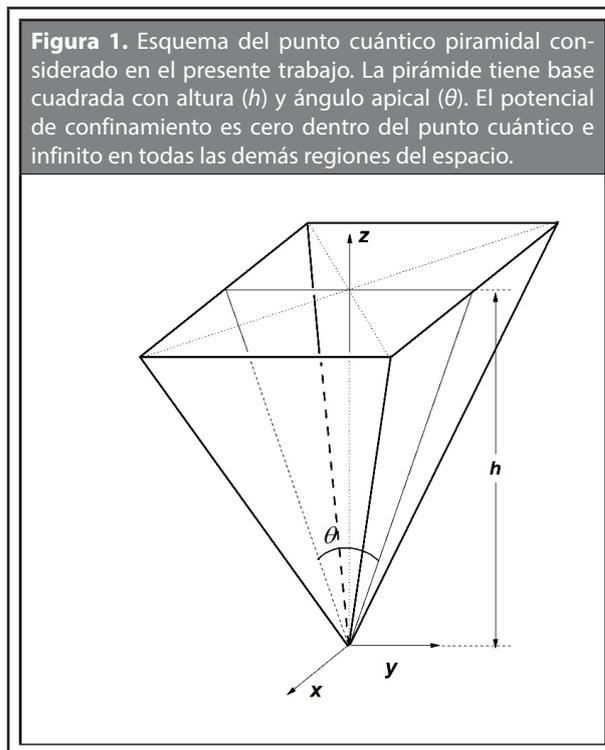


Figura 1. Esquema del punto cuántico piramidal considerado en el presente trabajo. La pirámide tiene base cuadrada con altura (h) y ángulo apical (θ). El potencial de confinamiento es cero dentro del punto cuántico e infinito en todas las demás regiones del espacio.

2. MARCO TEÓRICO

La **Figura 1** muestra un esquema del PCP usado dentro del modelo analítico para hallar los estados de un electrón confinado en la heteroestructura. El sistema de estudio corresponde a un electrón confinado en una región piramidal de base cuadrada con altura (h) y ángulo apical (θ). En la aproximación de masa efectiva la ecuación de Schrödinger está dada

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento definido como cero dentro del PCP e infinito en todas las demás regiones del espacio. Aquí $\Psi(\vec{r})$ son las autofunciones del Hamiltoniano, con sus correspondientes autovalores E .

Siguiendo el trabajo de Lozovski y Piatnytsia (2011) y considerando que la altura de la pirámide es suficientemente grande con respecto al lado de la base (situación que se logra con ángulo apical menor de 60

grados), las autofunciones para un electrón confinado en un PCP están dadas por

$$\Psi_{n,m,l}(\vec{r}) = N \frac{1}{\sqrt{z}} J_\theta(k_n z) [\sin(k_n/a) \cos(k_n x/z) + \cos(k_n/a) \sin(k_n x/z)] \times [\sin(k_m/a) \cos(k_m y/z) + \cos(k_m/a) \sin(k_m y/z)] \quad (2)$$

donde $\theta = \sqrt{k_n^2 + k_m^2 + 1/4}$, $k_l h$ es el l -cero de la función de Bessel y N una constante que garantiza la normalización de la función de onda. Adicionalmente $k_n = n \pi a / 2$ y $k_m = m \pi a / 2$ con $a = 1 / \tan(\theta / 2)$, y $n, m = 1, 2, 3, \dots$

La expresión general para la sección de transversal diferencial (STD) de la dispersión Raman de electrones está dada por Enderlein (1995)

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dv_s} = \frac{V^2 v_s n(v_s)}{8 \pi^3 c^4 n(v_l)} W(v_s, \hat{u}_s) \quad (3)$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío, $n(v)$ es el índice de refracción como función de la frecuencia de la radiación, \hat{u}_s es el vector de polarización de la radiación secundaria emitida cuya frecuencia es v_s , V es el volumen de la pirámide, v_l es la frecuencia de la radiación incidente cuyo vector de polarización es \hat{u}_l . $W(v_s, \hat{u}_s)$ es la tasa de probabilidad de transición la cual está dada por

$$W(v_s, \hat{u}_s) = \frac{2}{\hbar} \sum_{f=2}^4 \left| \frac{\langle f | H_s | f+1 \rangle \langle f+1 | H_l | 1 \rangle}{E_s + E_f - E_{f+1} + i \Gamma_{f+1}} \right|^2 \frac{\Gamma_f}{(E_l - E_s + E_1 - E_f)^2 + \Gamma_f^2} \quad (4)$$

En este trabajo solamente se consideran procesos de dispersión que involucran contribuciones de transiciones desde el estado inicial $|1\rangle = \Psi_{1,1,1}(\vec{r})$ con energía $E_{1,1,1}$ hacia tres estados finales $|l\rangle = \Psi_{1,1,l}(\vec{r})$ con energía $E_{1,1,l}$ y $l = 2, 3, 4$. Para estados intermedios solo se incluye el estado $|l+1\rangle = \Psi_{1,1,l+1}(\vec{r})$. En el caso del ensanchamiento de línea para los estados intermedio y final se ha escogido un valor fijo $\Gamma_{f+1} = \Gamma_f = 1.5 meV$.

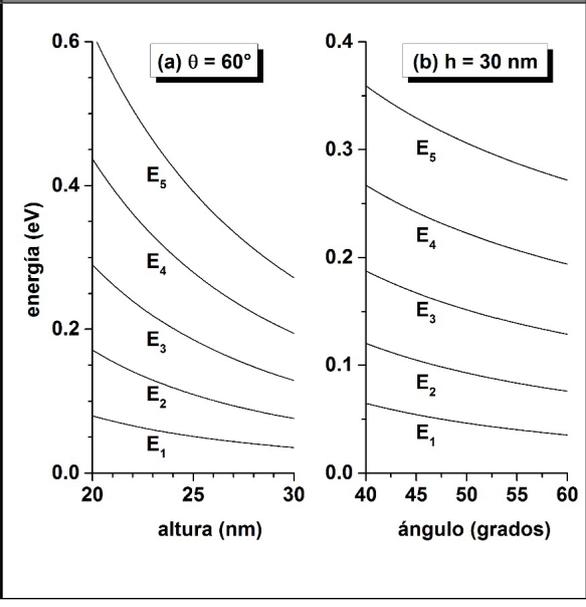
Considerando que la dirección de crecimiento de la heteroestructura es a lo largo del eje z y considerando la polarización de las radiaciones incidente y dispersada también a lo largo del mismo eje, los operados de interacción electrón-fotón que aparecen en los elementos de

matriz de la tasa de probabilidad de transición (H_k con $k = L, S$) están dados por

$$H_k = \frac{i|e|\hbar}{m_0} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^3}{V v_k}} \frac{\partial}{\partial z} \quad (5)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre.

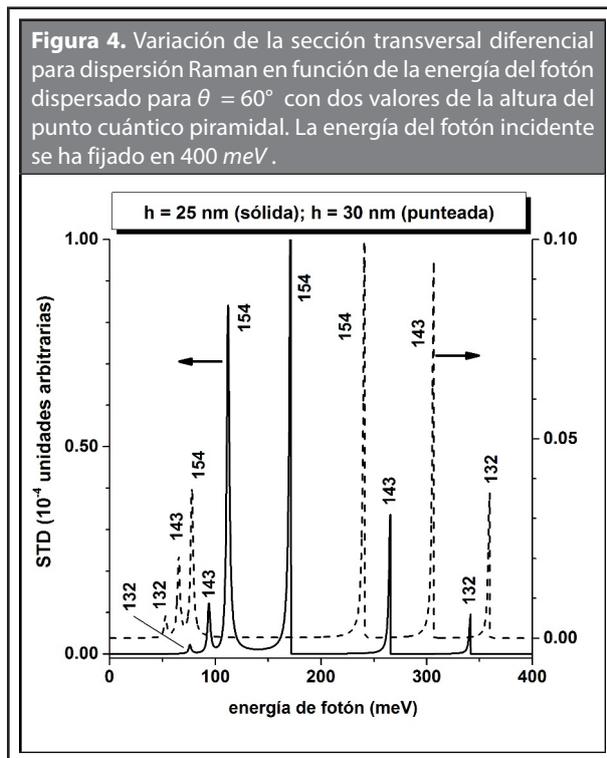
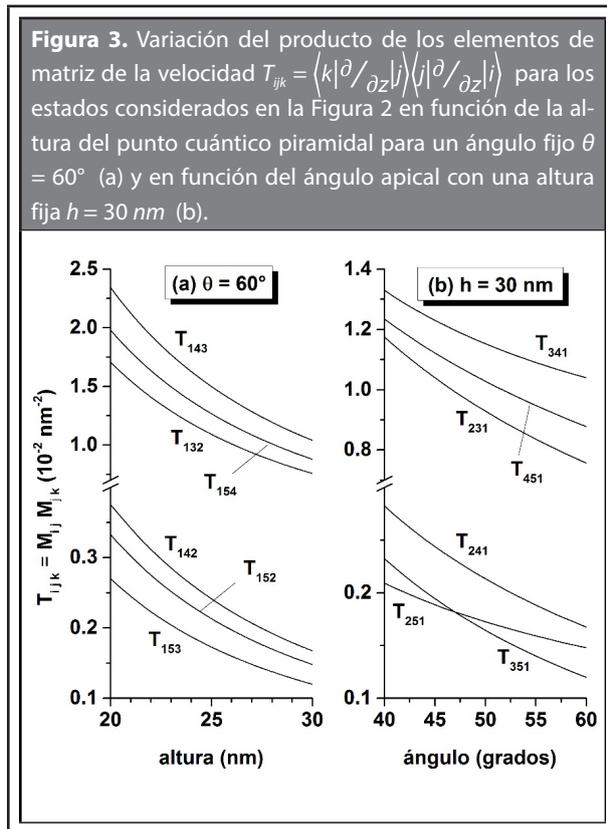
Figura 2. Variación de las energías $E_{1,l}$ con $l = 1, 2, 3, 4, 5$ en función de la altura del punto cuántico piramidal para un ángulo fijo $\theta = 60^\circ$ 2(a) y en función del ángulo apical con una altura fija $h = 30 \text{ nm}$ 2(b).



3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La **Figura 2a** contiene la variación de las energías $E_{1,l}$ con $l = 1, 2, 3, 4, 5$ en función de la altura de la PCP, para $\theta = 60^\circ$, mientras que la **Figura 2b** muestra las mismas cinco energías en función del ángulo apical con $h = 30 \text{ nm}$.

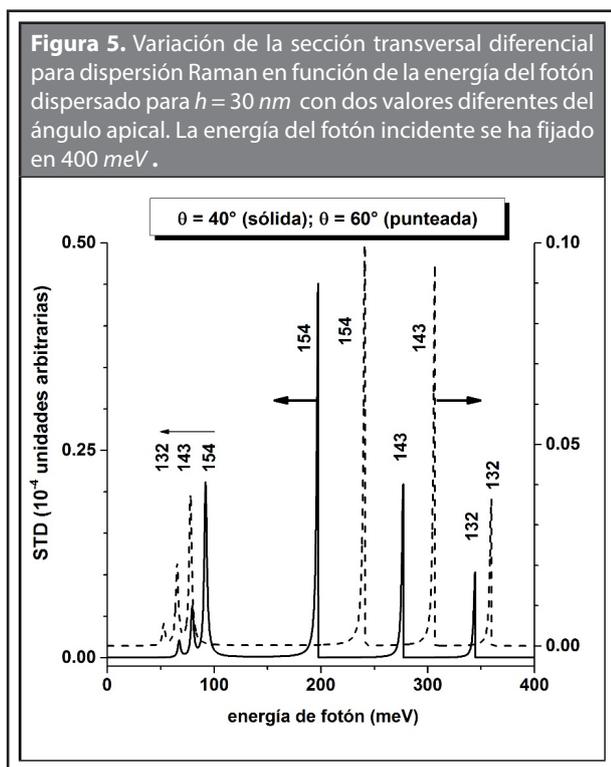
El comportamiento decreciente de las energías que aparecen en la **Figura 2a** es una consecuencia de la pérdida progresiva de la localización de la función de onda debido al incremento en el tamaño del punto. El mismo argumento explica la variación de los valores de energía mostrados en la **Figura 2b** aunque es menos pronunciada dadas las condiciones para el crecimiento de $V(\vec{r})$ relacionadas con el cambio del ángulo apical.



En la **Figura 3** se presenta el producto de los elementos de matriz de la velocidad $T_{ijk} = \langle k | \partial / \partial z | j \rangle \langle j | \partial / \partial z | i \rangle$ para los estados considerados en la **Figura 2** en función de la altura del punto cuántico piramidal para un ángulo fijo $\theta = 60^\circ$ 3(a) y en función del ángulo apical con una altura fija $h = 30 \text{ nm}$ 3(b). Claramente el comportamiento decreciente de dichas cantidades tiene que ver principalmente con la evolución del solapamiento espacial de las funciones de onda correspondientes y sus derivadas a lo largo de la dirección de crecimiento de la heteroestructura.

Con la información presentada en las **Figuras 2** y **3** es posible evaluar la sección transversal diferencial de la dispersión Raman relacionada con electrones que involucren los cinco estados mencionados en la **Figura 2**. Esta cantidad se presenta en la **Figura 4** para tres configuraciones particularmente escogidas de estados inicial-intermedio-final con $\theta = 60^\circ$ y dos valores de la altura del PCP. La sección transversal diferencial para los mismos procesos se muestra en la **Figura 5** tomando un valor fijo de $h = 30 \text{ nm}$ y dos valores diferentes del ángulo apical. En ambos casos, la energía del fotón incidente se ha fijado en 400 meV .

Los espectros en ambas figuras resultan de la suma de tres procesos donde siempre se usa el mismo estado inicial $|1\rangle : |1\rangle \rightarrow |3\rangle \rightarrow |2\rangle + |1\rangle \rightarrow |4\rangle \rightarrow |3\rangle + |1\rangle \rightarrow |5\rangle \rightarrow |4\rangle$. Nótese la aparición de estructuras tipo resonante (TR), localizadas a baja energía y con carácter simétrico, mientras que a alta energía aparecen estructuras tipo función paso (FP), de carácter asimétrico. Las primeras estructuras (TR) corresponden a la condición $E_s = \hbar\omega_s = E_{f+1} - E_f$, mientras que las estructuras FP corresponden a la condición $E_s = \hbar\omega_s = \hbar\omega_L + E_1 - E_f$.



Es posible notar que para valores más grandes de h , las estructuras FP se desplazan hacia energías más altas debido a la reducción en los valores de la diferencia de energía $E_f - E_1$, que es fácilmente evidente por la observación de la **Figura 2a**. Algo sucede igual cuando θ aumenta, aunque el corrimiento al azul es menos pronunciado. En este caso, los resultados representados en la **Figura 2b** proporcionan la explicación. La razón para el desplazamiento al rojo exhibido por las estructuras TR es el mismo mencionado anteriormente. Es decir, la reducción de las diferencias de energía $E_{f+1} - E_f$ como consecuencia del incremento en la altura del punto cuántico y del ángulo apical. Además, se puede observar una reducción en la amplitud de pico de ambas estructuras FP y TR como resultado de aumentar los valores de h y θ . Para describir esta situación el carácter dominante se puede atribuir a los elementos de matriz de la velocidad, presentados en la **Figura 3**.

4. CONCLUSIONES

En este artículo se ha investigado la dispersión Raman de electrones en puntos cuánticos piramidales basados en GaAs. Las transiciones electrónicas tienen

lugar entre estados confinados que se determinan con el uso de un enfoque analítico. Entre el conjunto de estados permitidos se elige un grupo con el que se calculó la sección transversal diferencial para dispersión Raman y se discute el efecto sobre ella de cambiar la geometría a través de la variación de la altura del punto cuántico y la amplitud del ángulo apical.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a las instituciones colombianas CODI-Universidad de Antioquia (Estrategia de Sostenibilidad de la Universidad de Antioquia y proyectos: "On the way to development of new concept of nanostructure-based THz laser" y «Propiedades ópticas de impurezas, excitones y moléculas en puntos cuánticos autoensamblados»), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-Universidad de Antioquia (CAD y ALM, proyecto de dedicación exclusiva 2015-2016), y el Patrimonio Autónomo Fondo Nacional de Financiamiento para la Ciencia, la Tecnología y la Innovación, Francisco José de Caldas. Proyecto EIA-U. de A. (Efectos de láser intenso sobre las propiedades ópticas de nanoestructuras semiconductoras de InGaAsN/GaAs y GaAlAs/GaAs) que es parcialmente financiado por la Escuela de Ingeniería de Antioquia.

REFERENCIAS

- Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re, Rosas R. y Riera, R. (2012). Electron Raman Scattering in Asymmetrical Multiple Quantum Wells System with an External Electric Field: Fröhlich Interaction. *J. Comput. Theor. Nanosci.* 9(12) diciembre, pp. 2093-2100.
- Chaganti V.R. y Apalkov V. (2013). Intraband optical transition in InGaAs/GaAs pyramidal quantum dots. *J. Appl. Phys.* 113(6) febrero, pp. 064310.
- Comas F., Trallero-Giner C. y Pérez-Álvarez R. (1986). Interband-intraband electronic Raman scattering in semiconductors. *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.* 19(32) noviembre, pp. 6479.
- Enderlein R. (7 de febrero de 2006). Theory of Interband Resonance Raman Scattering in Small-Gap Semiconductors. *Phys. Stat. Sol. B* 70(1) julio, pp. 263-268. Recuperado de DOI: 10.1002/pssb.2220700125
- Lozovski V. y Piatnytsia, V. (2011). The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and

- Cone-Like Quantum Dots. *J. Comput Theor. Nanosci.* 8(11), pp. 2335-2343.
- Park S.H., Hong W.P., Kim, J.J. y Ahn D. (2015). Effects of wetting layer on exciton binding energy of strained CdTe/ZnTe pyramidal quantum dots. *Solid. State Communications.* 204, febrero, pp. 61-63. Recuperado de doi:10.1016/j.ssc.2014.12.011
- Pelucchi E., Dimastrodonato V., Mereni L.O., Juska G. y Gocalska A. (2012). Semiconductor nanostructures engineering: Pyramidal quantum dots. *Curr. Opin. Solid St. M.* 16(2) abril, pp. 45-51. Recuperado de <http://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1204/1204.5630.pdf>
- Riera R., Comas F., Trallero-Giner C. y Pavlov S.T. (1988). Electron Raman Scattering in Semiconductor Quantum Wells. *Phys. Stat. Sol. B* 148(2) agosto, pp. 533-542. Recuperado de DOI: 10.1002/pssb.2221480210.

**PARA CITAR ESTE ARTÍCULO /
TO REFERENCE THIS ARTICLE /
PARA CITAR ESTE ARTIGO /**

Morales, A.L; Restrepo, R.L; Duque, C.A. (2016). Dispersión Raman de electrones en puntos cuánticos piramidales. *Revista EIA*, 12(E3), mayo, pp. 69-74. [Online]. Available on: <http://dx.doi.org/10.14508/reia.2016.12.e3.69-74>