



**Departamento de Investigación en Física
División de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Sonora**

Aspectos del confinamiento de un electrón con masa dependiente de la posición en un medio semiconductor, y del confinamiento del ión molecular de hidrógeno.

**Tesis que para obtener el grado de
Doctor en Ciencias (Física) presenta**

Martín Eduardo Molinar Tabares

**Director de Tesis
Dr. Germán Campoy Güereña**

Noviembre del 2011

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Indice.

Prefacio.	1
Introducción.	3
1. Sobre el confinamiento.	9
2. Antecedentes en el estudio del confinamiento de un electrón en un semiconductor y del confinamiento del ión molecular de hidrógeno.	12
2.1. Confinamiento de un electrón en un semiconductor.	12
2.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno.	18
3. Casos de confinamiento estudiados.	25
3.1. Confinamiento de un electrón en un doble pozo cuántico parabólico con masa efectiva dependiente de la posición.	25
3.1.1. El doble pozo cuántico parabólico.	25
3.1.2. Solución de la ecuación de Schrödinger.	29
3.1.3. La Ganancia.	32
3.1.4. Estructuras de tres y cinco dobles pozos cuánticos parabólicos.	34
3.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno por un esferoide.	41
3.2.1. Energía del ión molecular.	41

3.2.2. Presión ejercida por el esferoide confinante sobre la molécula.	51
3.2.3. Polarizabilidad del ión molecular H_2^+ .	54
3.3. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno por una elipse.	58
4. Conclusiones.	70
4.1. Confinamiento en un doble pozo cuántico parabólico de un electrón con masa efectiva dependiente de la posición.	70
4.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno (H_2^+) entre dos esferoides (caso tridimensional), y entre dos elipses (caso bidimensional).	71
4.2.1. Caso tridimensional.	71
4.2.2. Caso bidimensional.	72
5. Perspectivas.	73
6. Bibliografía.	74

Prefacio.

El objetivo central en este trabajo es el estudio del confinamiento cuántico. Se presentan el estudio del confinamiento de un electrón con masa efectiva variable en un medio semiconductor, y el del confinamiento del ión molecular de hidrógeno, sistema al que también se hará referencia como H_2^+ .

El trabajo consta de cuatro capítulos y un apartado donde se citan las referencias bibliográficas. En el primero se describe, sin grandes detalles, el significado de confinamiento, haciendo una revisión de los tipos de confinamiento (rígido o penetrable) y la manera como se podrían conseguir en un laboratorio.

En el segundo capítulo se hace una revisión de algunos antecedentes de trabajos relacionados con el tema.

En la tercera parte de este trabajo se hace un análisis del confinamiento del electrón en un semiconductor, y del confinamiento del H_2^+ , en la aproximación de Born – Oppenheimer, por esferoides y elipses.

En la cuarta parte se consignan las conclusiones del trabajo, separando de manera puntual, las conclusiones específicas para cada uno de los casos de confinamiento estudiado.

En la quinta parte se mencionan los puntos relativos al tema de este trabajo, que por ser de interés para el autor de este trabajo, se piensan trabajar en un futuro.

La sexta parte de este trabajo contiene las referencias consultadas durante el desarrollo de las actividades.

En la parte final de este impreso se encuentra a manera de anexo, una copia de uno de los artículos ya publicados en el que el autor de esta tesis aparece como

primer autor, este artículo contiene los resultados del estudio del confinamiento del electrón en un sistema de dobles pozos parabólicos asimétricos; así como una copia del mensaje enviado por el editor de la revista, donde notifica que un segundo artículo fue ya aprobado para su publicación.

Todos los cálculos hechos fueron realizados usando programas de cómputo escritos en lenguaje Fortran, dentro del ambiente de Digital Visual Fortran 6.0.A, desarrollado por Digital Equipment Corporation. Se usaron subrutinas del paquete IMSL dentro de los programas. Las gráficas fueron realizadas con el paquete Origin 6.1 (1999-2000), desarrollado por la compañía OriginLab Corporation de Northampton MA., y con el paquete Surfer 6.01 (1993-1995), desarrollado por Golden Software, Inc., de Golden CO.

Algunas de las figuras que aparecen en este trabajo tienen su origen en diversas fuentes, y en el pie de la figura se hace referencia a su origen. El resto de las figuras fueron generadas específicamente para esta presentación. En cada caso, la numeración de las figuras se compone por el número del capítulo y por el número de figura dentro de ese capítulo.

Las tablas que se incorporaron al trabajo son totalmente hechas por el autor del mismo, y su numeración aparece con formato de número romano.

Introducción.

Se estudia el comportamiento del electrón con masa variable dependiente de la posición, en un medio semiconductor. El semiconductor que se estudia es el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, el cual se podría depositar sobre un sustrato con una concentración x variable. Un estudio de este tipo es importante debido a que, como se verá en su momento, la masa efectiva del electrón depende de la concentración x del semiconductor y ésta a su vez, de la posición del mismo dentro del medio.

El segundo de los sistemas que es estudiado es el ión molecular de hidrógeno H_2^+ , el cual se considera confinado por un esferoide (confinamiento tridimensional) y por una elipse (confinamiento bidimensional); este estudio fue propuesto por el Dr. José Luis Marín Flores (+) y motivó al autor, debido a que podría llevar a una aplicación del trabajo de Tesis de Maestría [1] (aplicación de difracción de ondas interferidas).

La aplicación de la difracción de ondas, considerando que el patrón de difracción tenga una simetría elíptica, se estudia debido a que tal patrón puede servir para confinar en dos dimensiones al H_2^+ que tiene por naturaleza una simetría elíptica. En el caso de la simetría circular estudiada en el programa de Maestría en Ciencias, se explora el uso de la difracción de ondas interferidas en la construcción de la rejilla toroidal dipolar óptica (RTDO). La RTDO que se puede utilizar como una trampa óptica o estructura de confinamiento de simetría circular, está constituida por un cierto número de anillos concéntricos, que confinan o atrapan a las partículas por la acción de la fuerza dipolar óptica. En esta estructura, los haces difractados generan en un plano una distribución de energía potencial, es decir, una distribución de anillos de máxima y mínima intensidad de luz difractada, donde la energía potencial es proporcional al cuadrado del valor absoluto del campo difractado, multiplicada por su complejo conjugado. En cada

punto de estos anillos se genera la fuerza dipolar eléctrica, siendo más intensa donde hay más intensidad de campo difractado.

En Fig. I-1 se muestran ejemplos de estas RTDO:

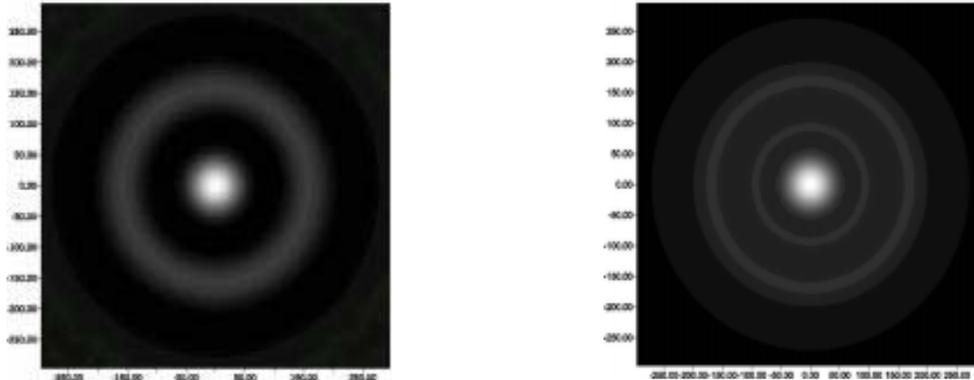


Fig. I-1. Distintos patrones circulares generados por una RTDO.

Fuente: “Difracción de ondas interferidas: caso de simetría circular”, Tesis para obtener el grado de Maestro en Ciencias (Física) (Martin E. Molinar Tabares, Mayo del 2002).

Estas rejillas son generadas por un montaje como el que se muestra en la Fig. I-2:

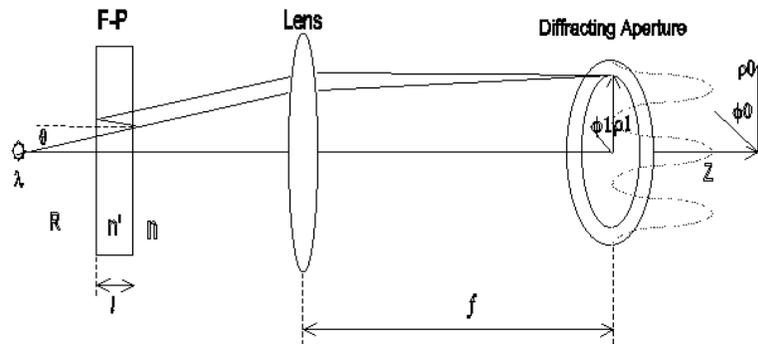


Fig. I-2. Montaje para generar la difracción en laboratorio.

Fuente: M. A. Cervantes et al. [2].

Los elementos que componen el montaje son una fuente puntual de longitud de onda λ , un etalon de Fabry – Perot de espesor l , índice de refracción n y reflectancia R ; una lente positiva; y una rejilla de difracción opaca con apertura circular. El plano donde se observaría el campo difractado es ubicado a determinada distancia de la rejilla. Dependiendo de la posición en que el plano sea ubicado, podremos observar en el centro una región brillante u oscura (Fig. I-3):

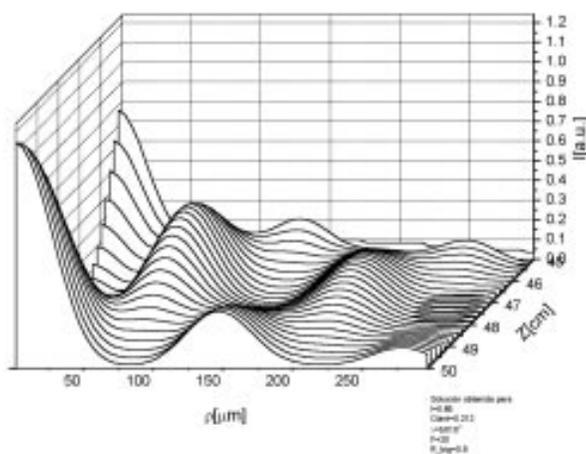


Fig. I-3. Distintos perfiles de difracción, que se podrían observar dependiendo de la distancia a la que se encuentre el plano de observación respecto a la rejilla. Fuente: “Difracción de ondas interferidas: caso de simetría circular”, Tesis para obtener el grado de Maestro en Ciencias (Física) (Martin E. Molinar Tabares, Mayo del 2002).

Ahora, la idea es estudiar el confinamiento del H_2^+ en tres y dos dimensiones. Una analogía del confinamiento en tres dimensiones puede ser por ejemplo el de la existencia de iones en un cristal. El caso del confinamiento del ión en dos dimensiones se puede ver como un atrapamiento de esta molécula por una elipse en lo que sería una trampa óptica.

Para generar las elipses confinantes, podríamos hacer uso del montaje experimental que aparece en la figura del artículo de Cervantes et al. [2]. En este montaje, podríamos hacer dos modificaciones: cambiar la apertura circular por una de forma elíptica, o colocar un prisma cilíndrico entre la apertura de difracción y el

plano donde se observa la distribución de campo difractado (pantalla o plano de observación).

Esta nueva configuración nos modificaría el patrón de haces difractados, cambiándolo de un conjunto de anillos circulares concéntricos por uno de elipses confocales (Fig. I-4):

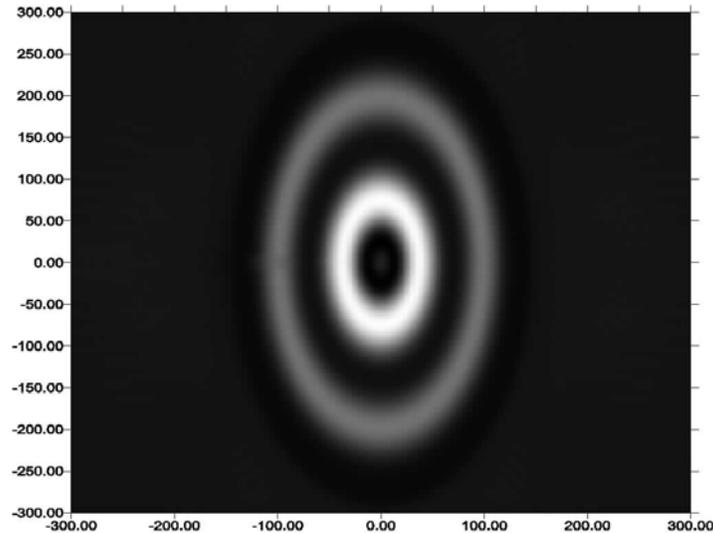


Fig. I-4. Elipses confocales generadas por la rejilla de difracción, observadas en el plano de observación.

Fuente: Martin E. Molinar Tabares. (2011).

Esta imagen se puede representar en tres dimensiones. En la elipse central se tendría una mayor intensidad de campo difractado que en la elipse externa, y podríamos representar a ambas regiones como zonas donde existen potenciales de barrera, con cierta altura, como se muestra en la Fig. I-5:

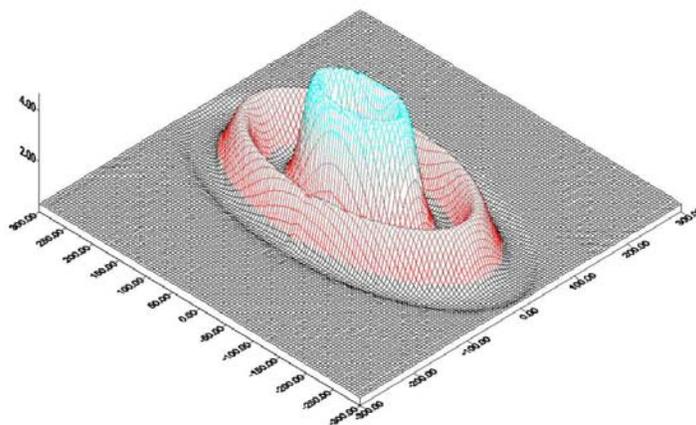


Fig. I-5. Elipses confinantes generadas por una rejilla de difracción.

La elipse interna tiene una mayor altura de potencial.

Fuente: Martin E. Molinar Tabares. (2011).

En el trabajo de tesis desarrollado para obtener el grado de maestría, se mostró, que, haciendo modificaciones en la longitud de onda de la fuente puntual, el espesor del etalon o en las dimensiones de la apertura, podemos modificar las características del patrón, como son un corrimiento de las franjas, su anchura, etc. Dichas modificaciones nos permitirían confinar al ión dentro de una de las elipses, con cada uno de sus núcleos ubicados sobre los focos.

En la imagen anterior se muestran las elipses confocales. Para este caso en particular, las áreas oscuras representarían zonas donde no hay potencial, es decir ahí el campo difractado tiene un valor muy pequeño comparado al que se encontraría en las zonas claras.

En este trabajo, el estudio del confinamiento en dos dimensiones se hace a partir de un modelo. En los casos de difracción estudiados en el programa de Maestría se consideró que la fuerza dipolar es finita, lo que lleva a la existencia de potenciales también finitos. En el modelo del confinamiento se va a trabajar bajo la consideración de que la elipse confinante se encuentra a un potencial tan grande, que para fines prácticos se puede considerar como infinito. Se va a hacer una

caracterización del sistema, para determinar su energía. Dentro de la etapa de búsqueda de referencias no se encontró alguna fuente donde se hiciera un análisis de este tipo.

Previo al estudio del confinamiento bidimensional, se hace un análisis del confinamiento en tres dimensiones.

Todos los resultados se presentaron en congresos nacionales e internacionales. Los resultados del estudio del confinamiento del electrón con masa variable en un semiconductor, fue ya publicado. En el caso del estudio del confinamiento de la molécula ionizada de hidrógeno, el artículo donde se muestran los cálculos relativos a su confinamiento en tres dimensiones se encuentra en proceso de ser publicado, después de haber sido aprobado para su publicación en Junio del 2011. Actualmente se encuentra en redacción un tercer artículo donde se va a reportar el estudio del confinamiento en dos dimensiones.

1. Sobre el confinamiento.

Podemos iniciar este capítulo señalando que el confinamiento es una situación, en la que la existencia de un potencial no necesariamente infinito restringe el movimiento o la posibilidad de que una partícula se encuentre en un determinado rango de posiciones. Para quienes han estudiado mecánica cuántica, el ejemplo más inmediato es el de la partícula encerrada dentro de un pozo de potencial infinito. Supongamos que el pozo tiene una anchura L y que tenemos el origen de coordenadas en la posición $x=0$. Estando las paredes del pozo en $x=0$ y en $x=L$, si $\psi(x)$ es la función de estado asociada a la partícula, el confinamiento impondría sobre el sistema las condiciones de frontera

$$\psi(0) = 0,$$

$$\psi(L) = 0,$$

(a este tipo de condición se le conoce como condición de frontera de Dirichlet).

Para el caso anterior, las paredes del pozo están a un potencial infinito. Esta situación impone la restricción de que la probabilidad de encontrar a la partícula fuera del pozo sea nula. Por tanto, podríamos decir que el confinamiento es rígido. Ahora, si tenemos las paredes del pozo a un potencial finito V_0 y la partícula tiene una energía $E < V_0$, existe la probabilidad de que la partícula escape y la función de onda no se anule en $x=0$ y en $x=L$, dando lugar a una penetración a una región clásicamente prohibida y nos referiríamos a esta situación como la de un confinamiento flexible o no rígido.

El confinamiento de un sistema no tiene limitantes en cuanto a su dimensión, de manera que podemos tener confinamiento en una, dos o tres dimensiones.

El estudio del confinamiento de partículas o moléculas es un tema que ha sido abordado en muchos trabajos debido a que propiedades de los sistemas, como su

energía, su polarizabilidad o su espectro de emisión, son diferentes cuando éstos se encuentran bajo confinamiento. Los trabajos de investigación en alambres y puntos cuánticos son un reflejo de esto.

En este trabajo de tesis se estudia el confinamiento del electrón en el medio semiconductor $Al_xGa_{1-x}As$, donde existe una estructura de dobles pozos cuánticos parabólicos asimétricos; se toma en cuenta aquí que la masa efectiva del electrón depende de su posición dentro del medio. También se hace el estudio del confinamiento del ion molecular de hidrógeno en tres y dos dimensiones.

En todos los casos se resuelve numéricamente la ecuación de Schrödinger usando bases de funciones. De este modo por ejemplo, usando una base de 500 funciones de onda de la partícula encerrada en el pozo de potencial infinito se resuelve la ecuación de Schrödinger considerando en ella la dependencia de la masa efectiva del electrón con respecto a su posición. Las energías del estado base y de los estados excitados se determinan a partir de la representación matricial del Hamiltoniano del sistema, considerando en su momento que esta matriz de tamaño 500X500 debe de ser simétrica por ser el Hamiltoniano un operador Hermitiano. A partir de la solución de la matriz se encuentran las densidades de probabilidad de cada estado. Debido a que los sistemas de dobles pozos cuánticos se utilizan para la construcción de diodos laser, se calcula el factor relevante de la ganancia para diodos donde en los que se podrían emplear potenciales parabólicos asimétricos.

En el caso del confinamiento del H_2^+ , el estudio del confinamiento se hace primeramente considerando que la molécula esta confinada por esteroides de distinto tamaño ξ_0 (caso tridimensional), para posteriormente hacer el estudio del confinamiento con elipses de tamaño ξ_0 (caso bidimensional). A partir de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger en la aproximación de Born – Oppenheimer, y considerando una base de 200 polinomios asociados de Legendre, se usa un método iterativo para calcular la energía del electrón en su

estado base y algunos estados excitados, la separación de equilibrio entre los núcleos, la energía vibracional y la polarizabilidad de la molécula. En el método iterativo se considera que la función de onda del sistema depende de las coordenadas y de la energía.

2. Antecedentes en el estudio del confinamiento de un electrón en un semiconductor y del confinamiento del ión molecular de hidrógeno.

2.1. Confinamiento del electrón en un semiconductor.

Como en todo trabajo de investigación, la primera etapa debe de consistir en la búsqueda de referencias sobre el tema de interés. En el caso de la investigación del confinamiento del electrón en un medio semiconductor, se buscaron referencias sobre uso de semiconductores en láseres, sobre pozos de potencial y entre otras cosas, sobre el concepto de masa efectiva dependiente de la posición del electrón dentro del semiconductor.

La emisión láser se da en un dispositivo donde los electrones de un gas o un semiconductor, son excitados llevándolos de un estado de energía a otro de energía mayor, después los electrones descienden a otro nivel emitiendo luz de determinada longitud de onda o frecuencia. En un medio semiconductor, los electrones se confinan en pozos cuánticos donde son estimulados para que salten a niveles superiores y se emita luz cuando pasan a un estado de energía menor.

En el semiconductor, la energía potencial de los electrones depende de la posición en la que éstos se encuentren. En la estructura cristalina podemos encontrar varios pozos de potencial; un pozo de potencial es una región de pequeñas dimensiones en la que la energía potencial cambia abruptamente de una posición a otra.

Cuando se está haciendo el crecimiento de un cristal en una determinada dirección, los pozos cuánticos se generan cuando en un substrato se depositan capas de semiconductores ligeramente diferentes. En las referencias se pueden

encontrar casos donde los pozos son rectangulares o bien curvos, como parábolas.

Un estudio sobre la emisión a partir de pozos rectangulares se detalla en un artículo de O. Gauthier-Lafaye et al. [3]. El principio físico de emisión en este sistema se da en la estimulación de los electrones para su interacción dentro de la estructura donde hay dos pozos rectangulares de distinta anchura, pero de la misma altura (ver la Fig. 2-1 donde se detallan los niveles de energía y el proceso de emisión). En este caso, la masa efectiva del electrón tiene el mismo valor en cualquier punto dentro del pozo, y otro valor distinto que será constante en cualquier punto dentro de la barrera.

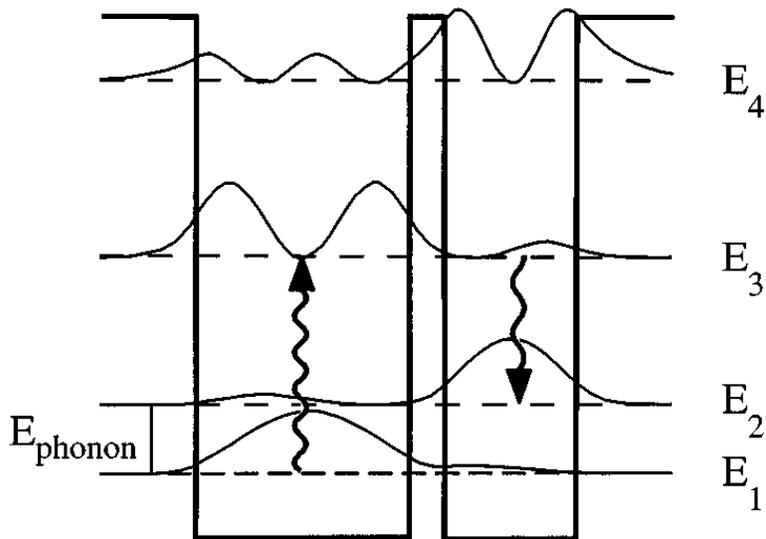


Fig. 2-1. Doble pozo rectangular finito, con fondo y cima de la barrera con potencial constante. Fuente: O. Gauthier-Lafaye et al. [3].

Para entender qué significa el concepto de masa efectiva, podemos decir que en la red cristalina, los átomos en las capas de semiconductor generan un número muy grande de pozos de potencial. Estos pozos aparecen de forma periódica en toda la estructura y en conjunto, perturban al electrón de forma tal que su masa se modifica al cambiar su valor a lo que se conoce como masa efectiva.

Para electrones libres se establece una relación entre su energía y la magnitud del vector de onda (k), dada por [4]

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (2.1)$$

Se puede hablar de un paquete de onda formado por funciones de onda con vector de onda cercano a un vector k . Si la frecuencia asociada con una función de onda de energía E es $\omega = E/\hbar$, la velocidad de grupo será

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}), \quad (2.2)$$

y de aquí, para un caso unidimensional

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (2.3)$$

Si los pozos de potencial originan una perturbación sobre el electrón y esta se manifiesta a través, digamos de un campo E o lo que es lo mismo, a través de una fuerza F , la fuerza la podríamos expresar, haciendo uso de la relación de De Broglie, como

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{h}{\lambda} \right) = \hbar \frac{dk}{dt}. \quad (2.4)$$

Despejando de la ecuación (2.3) la derivada del vector de onda y sustituyendo en la ecuación (2.4) llegamos a la expresión

$$F = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \frac{dv_g}{dt},$$

de donde relacionando esto con la forma de la segunda ley de Newton, encontramos una expresión para la masa efectiva:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (2.5)$$

Se señala en la referencia [3] que los pozos están formados con GaAs, mientras que la barrera se forma con $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, alcanzando una altura de 300meV. La anchura de los pozos es de 8.2 y 5.1 nanómetros (nm), mientras que la barrera que los separa tiene una anchura de 1.40 nm. La altura del pozo de potencial es determinada por la concentración del semiconductor. Por sentido común, la altura del pozo de potencial debe de crecer linealmente con la concentración x . De acuerdo con S. Shah et al. [5], al depositar $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre un substrato para formar un pozo cuántico de potencial, la altura V del pozo varía linealmente con la concentración

Esta estructura da lugar a una emisión láser en la región espectral infrarroja media, para temperaturas de 30, 80 y 90 grados Kelvin, y para cada una de estas temperaturas, ellos analizaron la potencia de emisión infrarroja contra la potencia incidente de estimulación de la emisión. La potencia de salida exhibe un valor de comportamiento que es característico de la emisión láser: 0.60 W para 30 K y de alrededor de 0.40 W para 77 K.

Este mismo principio de emisión, basado en la dispersión Raman, fue estudiado por G. Sun et al. [6] haciendo uso de pozos rectangulares. La dispersión Ramán es un mecanismo que envuelve tres fotones, uno incidente y dos dispersados [4]. Cuando el fotón incide sobre el electrón, es dispersado inelásticamente, creándose o aniquilándose un fonón o un magnon. La dispección Raman se puede

clasificar como dispersión de Stokes o dispersión de anti – Stokes. En el proceso se da una conservación de las frecuencias y de los vectores de onda asociadas a los tres fotones, es decir, si ω_i y k_i son frecuencia y el vector de onda del fotón incidente, y ω_i y k_i , y Ω y K las frecuencias y vectores de onda de los fotones dispersados, entonces

$$\omega = \omega' \pm \Omega, \quad (2-7)$$

$$\vec{k} = \vec{k}' \pm \vec{K}. \quad (2-8)$$

(En las ecuaciones anteriores el signo + indica una dispersión anti – Stokes, y el signo – la dispersión de Stokes). En la dispersión de Stokes se da un proceso de creación de fonón y en el de anti – Stokes el de aniquilación del fonón.

En otro artículo [7], los autores mencionados estudian un dispositivo de emisión formado por cuatro pozos rectangulares de potencial y a partir de éste, proponen una fuente de radiación infrarroja basada en la misma dispersión Raman. I. Lyubomirsky et al. [8], compararon en un estudio la emisión de láseres de semiconductor basados en esquemas de tres y cuatro niveles de energía (Fig. 2-2), usando series de dos y tres pozos cuadrados de potencial consecutivos, y encontraron que a pesar de la complejidad del esquema de cuatro niveles, con estos sistemas es posible obtener mejores valores de la ganancia y frecuencia de emisión. De acuerdo con Sun et al. [6], la ganancia para un láser que funciona en base a la dispersión Raman se define como

$$G_{R,n} = \left(\frac{4\pi\alpha_0}{n} \right)^2 \frac{I_p \hbar \omega_{out}}{\Gamma^2} |\langle u|z|g \rangle|^2 |\langle u|z|l \rangle|^2 N_g (T_{u,v} - T_{l,e}), \quad (2-9)$$

donde α_0 es el coeficiente de absorción resonante lineal para la transición del estado u al estado l , I_p la intensidad de bombeo óptico para la operación del láser, Γ la ampliación de la línea espectral, ω_0 la frecuencia de salida, N_g la densidad de

población del estado g , $T_{u,v}$ la vida media del estado u y $T_{l,E}$ la vida media del estado l .

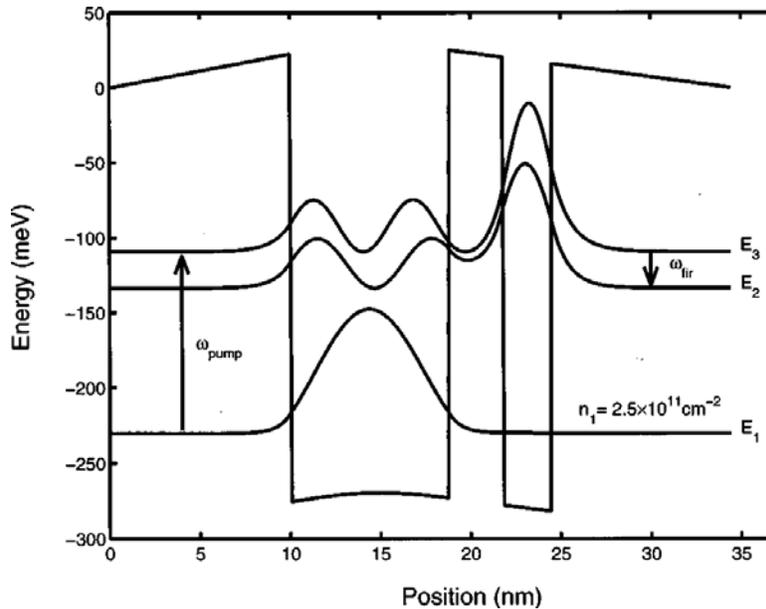


Fig. 2-2. Doble pozo rectangular finito, con fondo y cima de la barrera con potencial variable. Fuente: I. Lyubomirsky et al. [8].

La figura anterior muestra el tipo de estructura de pozos cuánticos empleada en el estudio de Lyubomirsky et al., y en ella podemos observar como a diferencia de los pozos y barrera estudiados por O. Gauthier-Lafaye et al., en ella la el fondo de los pozos y la barrera no tienen un potencial constante, por lo que podemos pensar que debió de considerarse en los cálculos una masa efectiva variable (dependiente de la posición) para el electrón.

Siempre es uno de los principales objetivos en el diseño de un láser, que éste pueda tener la máxima ganancia. En un láser de semiconductores la ganancia puede cambiar debido a factores como la altura o anchura de los pozos de potencial [9].

Otro tipo de emisión láser se genera usando pozos rectangulares con un escalón en su interior; el estudio de uno de estos dispositivos fue reportado en un artículo por P. Kinsler et al. [10] Ellos estudiaron la emisión en el infrarrojo lejano. El pozo donde se generan cuatro bandas de emisión, se ejemplifica en la Fig. 2-3:

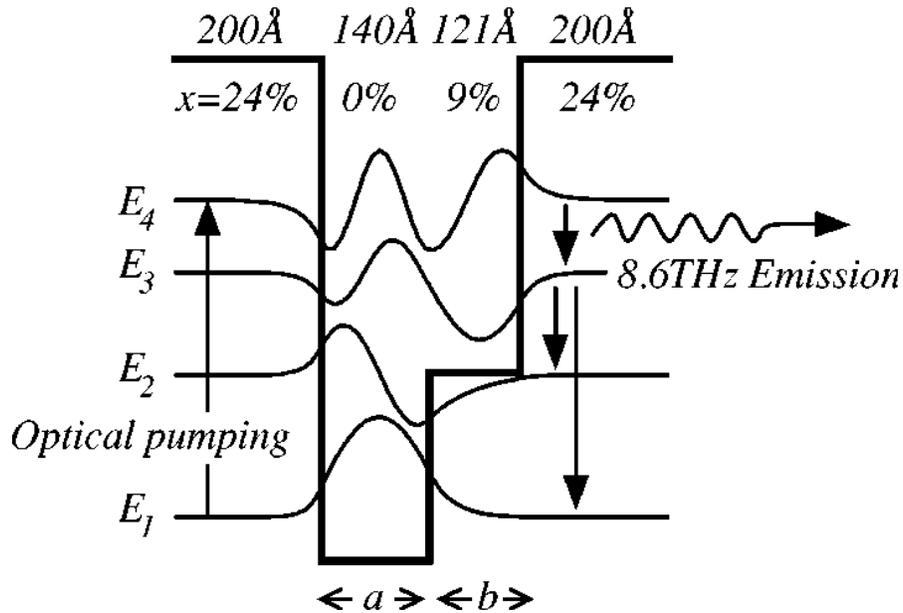


Fig. 2-3. Pozo rectangular finito con un potencial escalón en su interior. Fuente: P. Kinsler et al. [10].

Los potenciales se crean al depositar sobre el sustrato GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con diferentes concentraciones (La Fig. 2-3 muestra cómo se usaron distintos tipos de concentración x para generar el pozo valores de x). Los autores señalan la operatividad del sistema para la emisión a temperatura ambiente, contrario a lo que afirman ocurre en esquemas de emisión con tres bandas, donde se debe trabajar con una densidad electrónica y una temperatura bajas. De acuerdo con la figura anterior, dado que el potencial es constante para ciertos intervalos de anchura, se puede decir que la masa efectiva del electrón toma valores fijos en determinadas regiones.

Un ejemplo del uso de pozos no rectangulares se presenta en un artículo de L. Zhang y H. – J. Xie [11], quienes estudian el efecto del campo eléctrico sobre las

propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos parabólicos y semiparabólicos. En este sistema, los pozos también se generan depositando sobre un sustrato, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y GaAs con distintas concentraciones x . En ese artículo se indica cómo la simetría juega un papel importante en el desempeño del dispositivo, ya que los autores señalan que la susceptibilidad de la generación del segundo armónico es mayor en el pozo cuántico semiparabólico que en el parabólico, incluso cuando estos pozos tienen la misma anchura. Como en los casos anteriores, los electrones tienen la misma masa efectiva. Siguiendo la misma línea, L. Zhang [12] estudia los efectos del campo eléctrico sobre el índice refractivo entre las subbandas.

B. Chen et al. [13], estudiaron los efectos que los parámetros de la estructura de dos pozos cuánticos rectangulares asimétricos, como la altura y anchura de los pozos, pueden tener en los cambios lineales, no lineales y totales del índice de refracción.

I. Marín – Enríquez et al. [14] estudiaron el confinamiento de un electrón en un doble pozo de potencial, y su relación con los láseres moleculares. En este caso, ambos pozos son parabólicos y asimétricos. Se considera al electrón con una masa efectiva promedio dentro del cristal. El semiconductor estudiado es el $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$. Proponen el uso de pozos de tipo parabólico en lugar de rectangulares (Fig. 2-4), mostrando que con ellos el láser tiene una mayor ganancia.

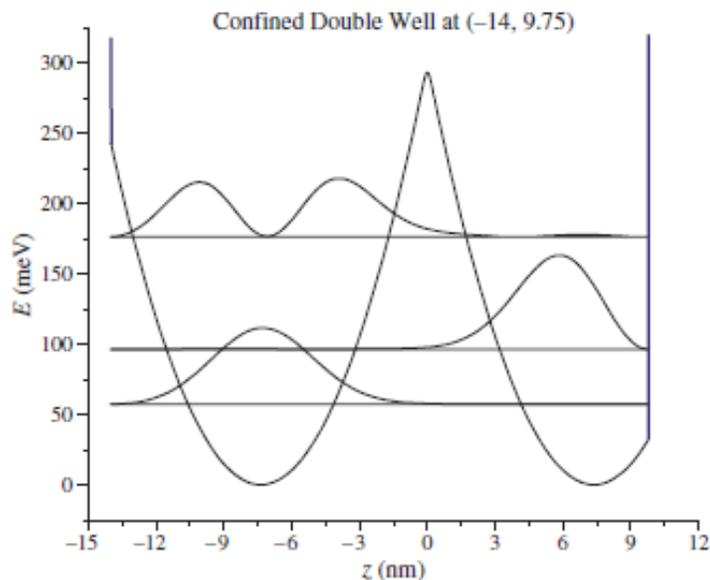


Fig. 2-4. Doble pozo de potencial de oscilador armónico confinado dentro de un pozo de potencial infinito. Fuente: I. Marín – Enríquez et al. [14].

En varias de las referencias citadas anteriormente, se hace mención de que los pozos se crean mediante un proceso de depósito de semiconductores sobre un sustrato. El rendimiento de un pozo cuántico empleado en un láser depende de la orientación del depósito para formar el cristal. De este modo, por ejemplo, el depósito de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ comienza con el diseño de un patrón sobre un sustrato plano (litografía), seguido de un proceso de grabado químico que se hace para revelar los detalles del sustrato original. Después, un crecimiento epitaxial con $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ o vapor químico va creando las capas. Sanz – Herás et al., y Mailhiot y Smith [15,16], señalan en sus artículos cómo, al dar ciertas propiedades específicas a la estructura en determinadas direcciones, el crecimiento de un pozo cuántico en la dirección [100] requeriría una densidad menor de portadores, para alcanzar la inversión de población en el umbral láser, situación contraria a lo que ocurriría con un crecimiento en la dirección [101].

El crecimiento del cristal se puede dar en varias direcciones y esto estará relacionado con la concentración, es decir, esta puede ser dependiente de una, dos o tres dimensiones. En el caso de un crecimiento en la dirección [100]

estaríamos hablando de un crecimiento unidimensional, un ejemplo de esto sería el procedimiento que habría de seguirse para construir un pozo cuántico de potencial unidimensional. Entonces la simbología [xyz] se utiliza para representar en crecimiento en las direcciones x, y, z, y se usa un cero para indicar cuando, en una determinada dirección, no hay crecimiento.

En los casos anteriormente citados se considera que la masa efectiva del electrón es constante dentro del semiconductor. M. Molinar y G. Campoy [17] estudiaron el confinamiento del electrón con masa efectiva variable, dependiente de su posición dentro del cristal. Ellos relacionan el potencial ejercido sobre el electrón y la masa, con la concentración x del semiconductor $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

2.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno.

Para hacer el estudio del confinamiento del ión molecular de hidrógeno, previamente se hizo una búsqueda de referencias en una página de internet. Se encontró una buena cantidad de artículos donde se trabaja con este ión en confinamiento rígido, flexible y libre, y se calculan valores de energía para su estado base y estados excitados, y valores de su polarizabilidad.

La referencia más antigua sobre el H_2^+ a la que se pudo tener acceso, corresponde a una conferencia que H. C. Urey [18] dio en la Academia de Ciencias de los Estados Unidos, en Abril de 1925. En este trabajo Urey hace uso de elementos de la física clásica, como son la naturaleza coulombiana de la interacción electrón – núcleos, y la descripción clásica del movimiento del electrón. Considera también que el estado estacionario del sistema está sujeto a las condiciones de cuantización de Wilson – Sommerfeld.

Una de las primeras referencias donde se hace uso de la ecuación de Schrödinger para estudiar al ión molecular de hidrógeno, corresponde a un artículo de O. Burrau [19], publicado un año después de los trabajos de Schrödinger (1927). En

este artículo Burrau presenta los valores de energía que calculó para el H_2^+ . Aquí se resuelve con el método de separación de variables la ecuación de Schrödinger en coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, ϕ) . Las ecuaciones en η y ξ son resueltas con series de potencias, mientras que la ecuación en ϕ se resuelve por integración simple.

Se encontró en la búsqueda un artículo de G. Jaffe [20]. En este trabajo, se resuelve con el método de separación de variables, la ecuación de Schrödinger en coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, ϕ) y en la aproximación de Born – Oppenheimer. G. Jaffe encontró la energía del estado base del ión molecular, con un tratamiento matemático que ha sido empleado por otros autores [21,22] y es usado también en esta Tesis, este método consiste en resolver la ecuación diferencial para η usando álgebra matricial, y la ecuación diferencial para ξ usando el método de series de potencias. El valor de la energía obtenido por G. Jaffe es mejor que el valor obtenido por E. A. Hylleraas en 1931.

E. Ley – Koo y S. A. Cruz [21] publicaron en 1981 un artículo donde se estudia el confinamiento rígido por elipsoides, del átomo de hidrógeno y las moléculas H_2^+ y HeH^{++} . En este artículo los autores encuentran el tamaño que debe tener el elpósito para cualquier valor de la energía, estudiando las moléculas en su estado base y en algunos de sus estados excitados. Este artículo es citado varias veces en otros trabajos publicados posteriormente.

El estudio del confinamiento rígido y flexible del ión molecular de hidrógeno fue publicado por J. Gorecki y W. Byers Brown [22] en 1988. En este estudio encuentran la energía y la polarizabilidad en términos de la presión ejercida por la pared confinante sobre la molécula.

El método usado por G. Jaffe da resultados mejores resultados al calcular valores de energía que los resultados que se obtienen usando funciones prueba y el método variacional. En algunos artículos [23-30] se citan el uso de funciones

prueba y el método variacional, para resolver la ecuación de Schrödinger en la aproximación de Born – Oppenheimer, reportando los resultados del cálculo de la energía, frecuencia vibracional y polarizabilidad del H_2^+ . El desarrollo de los equipos de cómputo disponibles para la comunidad de investigadores y la aparición de software, ha permitido trabajar con funciones prueba variacionales que contienen una cantidad muy grande de funciones base, como las funciones prueba empleadas por J. Hertzner y C. H. Greene [31], quienes emplean hasta 23000 funciones base.

El artículo mas antiguo que se pudo encontrar sobre polarizabilidad, corresponde a un trabajo de J. G. Kirkwood, publicado en 1936 [32], en este artículo se estudia con cálculos estadísticos, la polarizabilidad dieléctrica en un campo homogéneo, considerando N moléculas isotrópicas que el denomina *moléculas simples*. Aparte de esta referencia, se localizaron otros artículos donde se hacen cálculos de esa variable.

En los artículos señalados en los párrafos anteriores, se considera solo la interacción núcleo – núcleo, y electrón – núcleos. En la búsqueda de referencias se encontró un trabajo de M. Vincke y D. Baye [33], donde se estudia al ión molecular de hidrógeno dentro de un campo magnético de diferente magnitud. En este artículo los autores hacen el comentario que no se consideran efectos importantes que se observarían en una situación donde los núcleos del ión se encontraran en movimiento.

En la búsqueda de referencias del estudio del H_2^+ se encontraron varios artículos donde se considera a los núcleos en movimiento [31,34-38]. Los autores de consideran al sistema como un arreglo de tres cuerpos, introduciendo en el Hamiltoniano el centro de masa del sistema, que después es separado para trabajar un Hamiltoniano donde aparece solo la energía cinética de los núcleos (la remoción de la energía cinética del electrón se hace cuando se introduce el centro de masa).

En la lista de referencias encontradas, se encontró un artículo de V. I. Korobov [39], quien al observar una discrepancia entre la polarizabilidad del ión molecular, calculada por P. L. Jacobson et al. [40], y el valor medido experimentalmente, trata de introducir una corrección relativista para explicar la diferencia (esto hace una corrección de la quinta parte).

3. Casos de confinamiento estudiados.

3.1. Confinamiento de un electrón en un doble pozo cuántico parabólico con masa efectiva dependiente de la posición.

Los semiconductores se caracterizan por tener estructuras de bandas. En esta sección se va a estudiar a un electrón dentro de un medio semiconductor como el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, donde las distintas concentraciones x originan la existencia de dobles pozos cuánticos parabólicos asimétricos. El estudio se hace considerando primeramente una estructura simple de un par de pozos, calculando las energías del estado base y de algunos estados excitados de un electrón confinado dentro del medio. La energía se obtiene considerando que al haber una variación de la concentración existe una masa específica que dependerá de la posición del electrón dentro del medio. Los pozos de potencial en semiconductores y la emisión de radiación de los electrones dentro de ellos, son elementos que se usan para el diseño de diodos laser, por lo que se va a calcular el factor relevante para la ganancia de estos dispositivos considerando potenciales parabólicos de distinta forma. Se verá posteriormente como al considerar estructuras de más de un par de pozos surgen las sub-bandas de energía.

3.1.1. El doble pozo cuántico parabólico.

Se va a considerar en este estudio que tenemos una estructura unidimensional donde hay una serie de pares de pozos cuánticos parabólicos asimétricos. Dentro de esta estructura tendremos regiones de la misma anchura con potencial constante de 300meV, y regiones donde este potencial varía de acuerdo con una función parabólica. Elijamos de esta estructura unidimensional un elemento o celda representativa de la red cristalina, que tenga una anchura e . De acuerdo con esto, en la celda encontraremos un potencial de la forma

$$V(z) = V_0 \begin{cases} f(z) & b < z \leq c \\ g(z) & c \leq z \leq d \\ 1 & z \leq b, d \leq z \leq e \end{cases} \quad (3-1)$$

donde

$$f(z) = \frac{\left(z - \frac{(c+a)}{2}\right)^2}{\left(\frac{c-a}{2}\right)^2} \quad (3-2a)$$

$$g(z) = \frac{\left(z - \frac{(d+c)}{2}\right)^2}{\left(\frac{d-c}{2}\right)^2} \quad (3-2b)$$

y V_0 es igual a 300meV. En una porción de tamaño b y en otra de tamaño $e-d$ de la celda el potencial es constante, mientras que en el resto del elemento el potencial varía de la forma dada en (3-2a) o (3-2b). El parámetro c representa a un punto de la celda donde las parábolas asimétricas se unen y ahí el potencial es V_0 . El parámetro a es un punto que al igual que los otros parámetros, puede cambiar su valor e imaginariamente forma parte de la rama izquierda de una de las parábolas. La celda estará encerrada por paredes a potencial infinito. Todo lo anterior sería hecho depositando $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre un substrato, con diferentes valores de x , con el fin de lograr el valor de 300meV cuando la concentración x tenga un valor de 0.35. La pared a potencial infinito podría modelarse usando un semiconductor que tenga una gran diferencia de potencial con respecto al GaAs, como podría ser el caso del AlAs [3,14].

La Fig. 3.1 muestra el potencial $V(z)$ delimitado por paredes de potencial infinito, considerando que la estructura de pozos cuánticos parabólicos asimétricos está separada una distancia (D_{sep}) 11.00 nm de cada una de las paredes de potencial

infinito. De acuerdo con las ecuaciones (3-2a) y (3-2b), la estructura se construye con los valores $a=9.40$ nm, $b=11.00$ nm ($D_{sep}/2$), $c=25.00$ nm, $d=31.00$ nm y $e=42.00$ nm. Las paredes infinitas estarían colocadas sobre $z=0$ y $z=42.00$ nm.

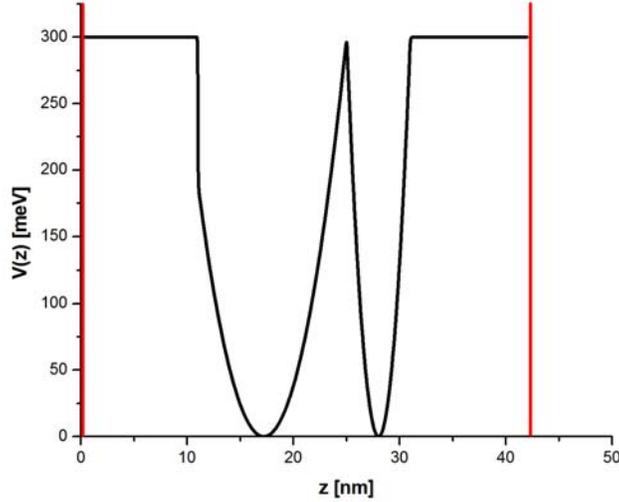


Fig. 3.1. El potencial $V(Z)$ delimitado por paredes a potencial infinito sobre $z=0$ y $z=42.00$ nm. Las líneas en color rojo representan las paredes del pozo de potencial infinito.

Sabemos que si tomamos el valor de 0 para la energía potencial cuando la concentración x es igual a 0, entonces para x igual a 0.35 tendríamos el semiconductor $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ y este material daría origen a una diferencia de 300meV en la energía potencial. El potencial requerido para nuestro modelo se logra con un depósito de $Al_xGa_{1-x}As$ sobre el substrato, variando la concentración x al crecer el cristal en la dirección z , de acuerdo a la expresión

$$x(z) = \begin{cases} x_0 f(z) & b < z \leq c \\ x_0 g(z) & c \leq z \leq d \\ 0 & z \leq b, d \leq z \leq e \end{cases} \quad (3-3)$$

donde x_0 es 0.35. Es aquí donde introducimos la dependencia de la masa efectiva en la posición del electrón en el semiconductor. La masa efectiva depende de la naturaleza del semiconductor (C. Kittel [4] ofrece una tabla con la masa efectiva del electrón en varios semiconductores).

Ahora, la existencia de potenciales parabólicos en el semiconductor y la relación de la diferencia de energía potencial entre dos valores específicos de la concentración x , lleva a la existencia de formas específicas para la dependencia de la masa efectiva con respecto a la concentración, y por otro lado, de la dependencia de esa masa con respecto a la posición z del electrón dentro del medio.

Se puede ver que en base al párrafo anterior, existe una relación lineal entre la masa efectiva y la concentración en el intervalo $[0.00,0.35]$, dada por

$$m^*(x) = m_1 + \frac{(m_2 - m_1)}{x_0} x \quad (3-4)$$

Debido a esto, conforme se hace el depósito en el sustrato y se consigue con ello crear el pozo cuántico de potencial asimétrico, la masa efectiva m^* del electrón debe variar en el intervalo $[0,e]$, de acuerdo a

$$m^*(z) = \begin{cases} m_1 + (m_2 - m_1) f(z) & b < z \leq c \\ m_1 + (m_2 - m_1) g(z) & c \leq z \leq d \\ m_2 & z \leq b, d \leq z \leq e \end{cases} \quad (3-5)$$

con $m_1=0.0665 m_e$ y $m_2=0.0960 m_e$, donde m_e es la masa del electrón libre [4].

3.1.2. Solución de la ecuación de Schrödinger.

La variación de la masa efectiva del electrón, nos lleva a resolver una forma de la ecuación de Schrödinger donde el operador de energía cinética toma en cuenta la dependencia de la masa efectiva con la posición; de esta manera, para considerar una masa variable y además cumplir con el requisito de que el operador Hamiltoniano sea Hermitiano, la ecuación de Schrödinger debe tener la forma [41-43]

$$H\Psi(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (3-6)$$

O. von Roos [44] introduce un operador de energía cinética de la forma

$$T = -\frac{\hbar^2}{4} \left(m^\alpha \nabla m^\beta \nabla m^\gamma + m^\gamma \nabla m^\beta \nabla m^\alpha \right), \quad (3-7)$$

donde m sería la masa reducida, y las constantes α , β y γ satisfacen la constricción

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \quad (3-8)$$

Esta forma para el operador fue empleada por R. A. Morrow et al. [45] para estudiar el comportamiento de la función de onda y su derivada espacial en una heterounión abrupta entre dos cristales.

Ahora, de acuerdo con la forma de Von Roos, en nuestro caso hemos seleccionado $\alpha=\gamma=0$.

Los sistemas con masa dependiente de la posición son importantes, en la descripción de las características de muchas microestructuras. La ecuación de

Schrödinger para estos casos tiene soluciones analíticas exactas para formas particulares de $m(z)$ y $V(z)$. Los métodos se describen en varios trabajos [41,42].

En nuestro caso, la solución a la ecuación de Schrödinger se encontró numéricamente. Con el fin de resolverla para los eigenvalores y eigenvectores, la solución se desarrolló en términos de una base de N funciones de onda ortonormalizadas de la partícula libre en un pozo de potencial cuadrado infinito, que satisfacen las condiciones de frontera de Dirichlet en $z=0$ y $z=e$:

$$\Psi(z) = \sum_{n=0}^N a_n \psi_n(z) = \left(\frac{2}{e}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^N a_n \sin\left(\frac{n\pi z}{e}\right) \quad (3-9)$$

y construimos los elementos de matriz H_{mn} para el Hamiltoniano. Buscando obtener resultados muy precisos se escogió $N=500$, de manera que la matriz tiene 500 eigenvalores, de los cuales nos interesan sólo los tres más pequeños (la energía del estado base y la de los dos primeros estados excitados), para los que se consigue mayor precisión (por la naturaleza del método numérico empleado para encontrar los eigenvalores, la precisión va disminuyendo conforme se encuentra la energía de un estado excitado cada vez mas superior). Los eigenvalores y los eigenvectores se encontraron usando la subrutina DEVCRG del paquete IMSL.

En la Tabla II se muestran las energías del estado base, y del primer y segundo estados excitados del sistema. En la Fig. 3.2 se muestran las densidades de probabilidad para estos estados, considerando que existen paredes de potencial infinito en $z=0$ y $z=42.00$ nm.

Tabla II. Eigenvalores para un par de pozos encerrados por paredes a potencial infinito.

Estado	Energía (meV)
n=1 (Estado base)	50.527710
n=2	117.369463
n=3	156.513093

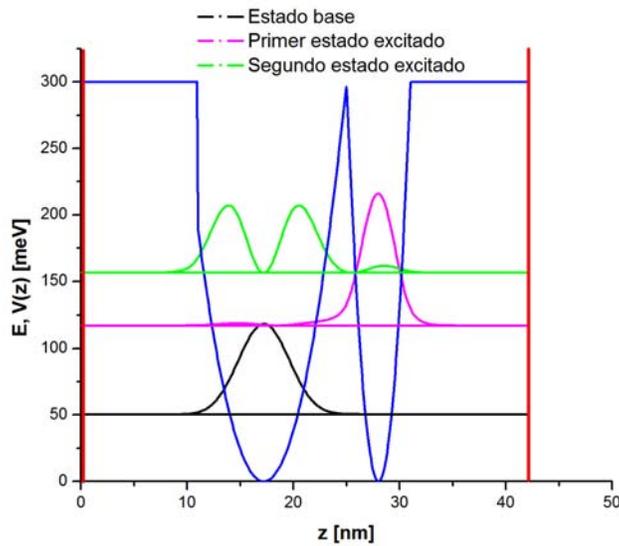


Fig. 3.2. Densidad de probabilidad y nivel de energía para el estado base y los dos primeros estados excitados. Las líneas en color rojo representan las paredes del pozo de potencial infinito.

Cuando ocurre una excitación de la magnitud adecuada, ésta provoca que el electrón pase del estado base (E_1) al segundo estado excitado (E_3). Después de esto, el electrón decae del segundo al primer estado excitado (E_2), y es aquí cuando ocurre la emisión láser. Este tipo de láser es un dispositivo que emite en un esquema de tres niveles (el estado base, el primer estado excitado y el segundo estado excitado). De acuerdo a la forma del potencial y a la deposición de GaAs, tendremos diferentes valores de la frecuencia de emisión $\nu=(E_3-E_2)/h$ [3].

Este decaimiento se da a partir de una regla de selección. En principio un láser se diseña para que emita radiación de cierta frecuencia y este proceso de emisión comienza con una perturbación o excitación de los electrones para que estos pasen del estado base a un determinado estado energético. En un láser que opere con tres niveles de energía (como sería por ejemplo, aquel que se basara en un esquema como el que se muestra en la Fig. 3.2), la frecuencia de emisión deseada se podría generar considerando una determinada concentración x del semiconductor $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ o bien, eligiendo las características de los pozos cuánticos del potencial (como por ejemplo la anchura si se trata de pozos rectangulares o la curvatura como en la Fig. 3.2).

El proceso de emisión al pasar el electrón del segundo al primero estado excitado se basa en la regla de oro de Fermi [46]. La emisión de luz es un evento de dispersión entre un estado “i” y un estado final “f”. El proceso de emisión puede ser inducido a partir de un campo electromagnético que sea dependiente del tiempo. De inicio los electrones pueden absorber cualquier porción de la energía del campo y pasar a ciertos estados excitados, para después decaer al estado base, pudiendo dar una emisión en determinada frecuencia, pero el proceso de emisión va a ser dado por la regla de oro de Fermi, que nos dice que la emisión va a depender del tiempo τ que permanezca el electrón en el estado inicial:

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |\langle f | \tilde{H} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (3-10)$$

con \tilde{H} el Hamiltoniano de la perturbación debida al campo electromagnético.

3.1.3. La ganancia.

Hay un factor que mide el cociente ganancia/pérdida en el proceso de emisión de un láser. Para el caso de un potencial formado por dos pozos asimétricos

consecutivos este factor, que es conocido como ganancia, tiene como su principal componente a

$$F = |z_{13}|^2 |z_{23}|^2 |E_2 - E_3| \quad (3-11)$$

donde $z_{ij} = \langle i|z|j \rangle$ (el vector $|k\rangle$ está asociado a la función de onda del estado k , $\Psi_k = \langle z|k \rangle$) con $i=1, 2, 3$. Si escalamos los valores de a, b, c, d y e , de tal manera que todos los segmentos lineales del pozo de potencial cuántico, divididos entre $(c-b)$ mantengan su valor, podemos calcular la variación del factor F para una familia similar de pozos con respecto a la anchura del primer segmento parabólico $(c-b)$; esto es mostrado en la Fig. 3.3, donde se muestra el factor F para diferentes valores de e , que equivale a la longitud total de cada estructura de doble pozo cuántico en el cristal de semiconductor, incluyendo la distancia de separación con su vecino.

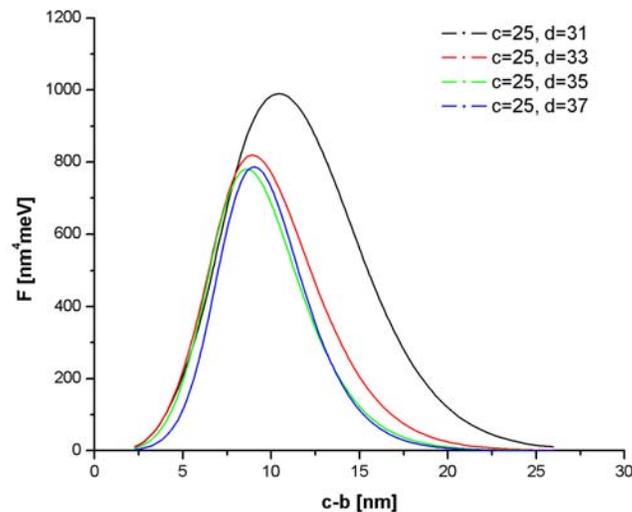


Fig. 3.3. Factor F (principal factor de la ganancia), para diferentes valores de d .

3.1.4. Estructuras de tres y cinco dobles pozos cuánticos parabólicos.

En un cristal podemos encontrar centenares de estructuras de pozos cuánticos. Hasta antes de este punto se ha estudiado solo una celda de la estructura cristalina, pero para acercarnos un poco más a la realidad, vamos a estudiar una estructura de tres y de cinco pares de pozos cuánticos parabólicos asimétricos, y veremos como en el espectro de energía salen niveles que forman lo que se conoce como sub-bandas de energía. Las sub-bandas son una consecuencia de que en el semiconductor se encuentren muchos pozos de potencial, y debido a este número de pozos, existe un igual número de niveles en cada una de las sub-bandas.

Ahora supongamos que tenemos una estructura o cadena formada por tres dobles pozos de potencial, considerando que entre cada dos de ellos existe la misma distancia de separación D_{sep} . Como tenemos tres pares y D_{sep} es igual a 22.00 nm, usando los valores ya empleados para a, b, c, d y e, resolvemos la ecuación de Schrödinger considerando una energía potencial como la mostrada en la Fig. 3.4:

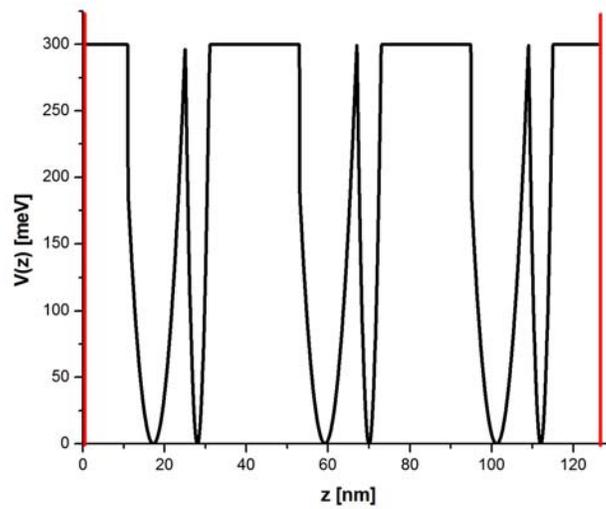


Fig. 3.4. El potencial $V(z)$ para tres pozos cuánticos, delimitado por paredes a potencial infinito sobre $z=0$ y $z=126.0$ nm. Las líneas en color rojo representan las paredes del pozo de potencial infinito.

La solución de la ecuación de Schrödinger, con masa efectiva dependiente de la posición, se resuelve de nuevo numéricamente, usando la base de N funciones de onda ortonormalizadas del pozo de potencial cuadrado infinito, para obtener los eigenvalores mostrados en la Tabla III:

Tabla III. Eigenvalores para tres pares de pozos encerrados por paredes a potencial infinito.

Estado	Energía (meV)
<i>Primera sub-banda</i>	
n=1 (Estado base)	50.527954
n=2	50.538993
n=3	50.539036
<i>Segunda sub-banda</i>	
n=4	117.284667
n=5	117.285883
n=6	117.371527
<i>Tercera sub-banda</i>	
n=7	156.507818
n=8	156.574771
n=9	156.581485

Notamos en esta tabla, cómo al formar una cadena con dos o más estructuras de pozos cuánticos, la solución de la ecuación de Schrödinger nos da unos valores de energía que se empaquetan en sub-bandas. La Fig. 3.5 muestra la densidad de probabilidad del estado base y los estados excitados, para una secuencia de tres pozos cuánticos de potencial.

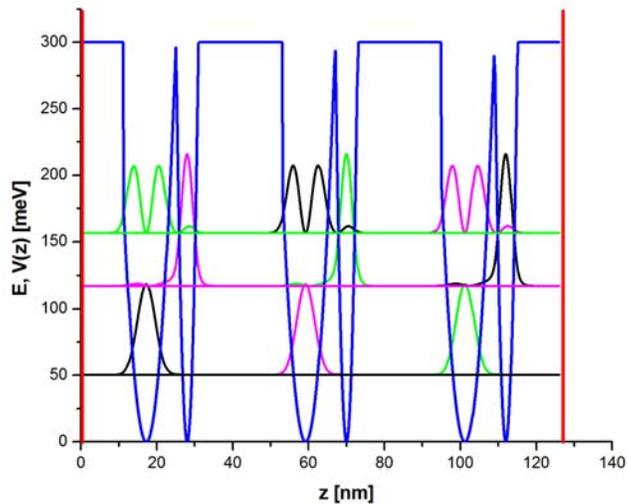


Fig. 3.5. Densidad de probabilidad y niveles de energía para el estado base y los primeros estados excitados. Las líneas en color rojo representan las paredes del pozo de potencial infinito.

Como podemos ver en la figura anterior, cuando el electrón está en el estado base, la densidad de probabilidad es una Gaussiana centrada sobre el eje de simetría de la parábola más ancha.

Concluimos este análisis con el estudio de una cadena de cinco pares de dobles pozos cuánticos, parabólicos y asimétricos. Con el uso de los valores de a , b , c , d , e y D_{sep} que se han manejado anteriormente, la solución de la ecuación de Schrödinger nos da los eigenvalores mostrados en la tabla.

Tabla IV. Eigenvalores para cinco pares de pozos encerrados por paredes a potencial infinito.

Estado	Energía (meV)
<i>Primera sub-banda</i>	
n=1 (Estado base)	50.5282320
n=2	50.5391844
n=3	50.5391859
n=4	50.5391862
n=5	50.5392262
<i>Segunda sub-banda</i>	
n=6	117.2857216
n=7	117.2869194
n=8	117.2869217
n=9	117.2869231
n=10	117.3718060
<i>Tercera sub-banda</i>	
n=11	156.5091574
n=12	156.5756547
n=13	156.5756694
n=14	156.5756806
n=15	156.5823269

Las gráficas de la densidad de probabilidad exhiben un comportamiento que puede ser explicado de una manera similar a como se hizo en los casos previos. Además, hemos estudiado los cambios en estas energías, para diversos valores de la distancia de separación entre cada uno de los pares:

Tabla V. Sub-bandas de energía para cinco pares de dobles pozos separados por distintas distancias.

Estado	Energía (meV)		
	Dsep=22.00 nm	Dsep =10.00 nm	Dsep =5.00 nm
<i>Primera sub-banda</i>			
n=1	50.5282320	50.5228795	50.5172258
n=2	50.5391844	50.5269867	50.5199986
n=3	50.5391859	50.5270458	50.5234253
n=4	50.5391862	50.5271122	50.5261988
n=5	50.5392262	50.5271602	50.5658317
<i>Segunda sub-banda</i>			
n=6	117.2857216	117.3740249	117.2923978
n=7	117.2869194	117.3763484	117.3634928
n=8	117.2869217	117.3793240	117.4520374
n=9	117.2869231	117.3818105	117.5242189
n=10	117.3718060	117.4361165	118.0282928
<i>Tercera sub-banda</i>			
n=11	156.5091574	156.4920306	156.1584231
n=12	156.5756547	156.5009798	156.3677072
n=13	156.5756694	156.5123226	156.6272491
n=14	156.5756806	156.5223317	156.8379533
n=15	156.5823269	156.5283717	157.2159270

Podemos seguir agregando más pozos de potencial o trabajando con diferentes distancias de separación entre ellos, pero como no encontramos mucha diferencia entre los arreglos de tres y cinco pares, podemos inferir que si hacemos esto, no habrá ninguna modificación relevante en el espectro de energía.

Ahora, el diodo láser se debe caracterizar por una coherencia en la frecuencia de la luz que emite y esta luz se genera cuando los electrones pasan, del segundo, al primer estado excitado. En los casos que se vieron aquí, hemos visto como las sub-bandas están formadas por una cantidad de niveles igual al número de pares de pozos considerados en el cristal (Tabla III y Tabla IV), esto hace que por ejemplo, un electrón pueda pasar del uno de los estados de la tercera sub-banda a uno de la primera sub-banda y se originaría una emisión de luz, de aquí que se pueda hablar de varias combinaciones y con ello de varias frecuencias de emisión; para que haya coherencia en la emisión, las frecuencias deben de ser muy parecidas, lo que se originaría obteniendo sub-bandas muy compactas, es decir, con una semejanza tal en sus niveles, que la desviación entre ellos sea idealmente nula.

Observemos la Tabla III (sub-bandas de energía para una estructura de tres dobles pozos) y la Tabla IV (sub-bandas de energía para una estructura de cinco dobles pozos). Podemos identificar en cada una de esas tablas, que cada una de las sub-bandas tiene una anchura (energía del nivel superior menos energía del nivel inferior en la sub-banda), de aquí se observa que (i) para el caso de tres dobles pozos, la primera sub-banda tiene una anchura de 0.011 meV, mientras que la segunda tiene una de 0.087 meV y la tercera una de 0.073 meV; y que (ii) en el caso de una estructura de cinco pares, la primera sub-banda tiene una anchura de 0.011 meV, la segunda una de 0.086 meV y la tercera, una de 0.073 meV.

En consecuencia, el aumento del número de dobles pozos sugiere que los niveles de energía adicionales, se van a ir “empaquetando” dentro de las sub-bandas; mientras las anchuras de estas van a permanecer prácticamente sin cambio.

3.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno por un esferoide.

Como fue señalado en la introducción, el objetivo es hacer un análisis del confinamiento del ión H_2^+ en dos dimensiones, para hacer uso de la difracción de ondas interferidas. Para este análisis se hicieron, a partir del cálculo de la energía del sistema, cálculos de distancia de separación de equilibrio de los núcleos y su energía vibracional, presión ejercida por el confinamiento y polarizabilidad. Aunque se presentan los resultados de los cálculos con cuatro cifras decimales, cabe aclarar que se trabajó también con multiprecisión. La multiprecisión permite trabajar con mas cifras decimales que las que se pueden usar cuando se trabaja con doble precisión. Para codificar con multiprecisión se siguió el formato de codificación que recomienda David H. Bailey, de NERSC, Lawrence Berkeley Lab.

3.2.1. Energía del ión molecular.

Antes de entrar a este análisis creo conveniente hacer la revisión del confinamiento de ese ión por un esferoide, y de principio indicar que todas las ecuaciones que se manejen se escribirán en unidades atómicas. La molécula de H_2^+ consta de dos núcleos, constituido cada uno por un protón y un solo electrón. Por simetría, el movimiento del electrón alrededor de los núcleos nos hace ver que la simetría natural del sistema es la esferoidal, razón por la cual, el sistema de coordenadas que usaremos para especificar la posición del electrón es el sistema de coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, ϕ) . En este sistema tridimensional, el punto donde se ubica el electrón queda definido por la intersección de tres superficies constantes [47], un esferoide prolato de tamaño ξ_0 , un hiperboloide de dos hojas de tamaño η_0 y un plano medio a través del eje x , ϕ_0 , esto se ilustra en la Fig. 3-6.

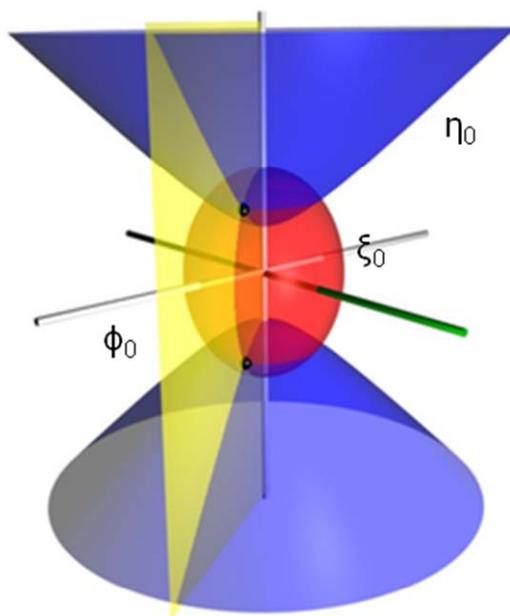


Fig. 3-6. Superficies ξ_0 , η_0 y ϕ_0 , que en su intersección nos darían las coordenadas del electrón. Fuente: http://en.wikipedia.org/wiki/Prolate_spheroidal_coordinates

con

$$1 \leq \xi_0 \leq \infty$$

$$-1 \leq \eta_0 \leq 1$$

$$0 \leq \phi_0 \leq 2\pi.$$

En la Fig. 3-6 el plano ϕ_0 intersecta dos veces al esteroide y al hiperboloide y se puede pensar que hay dos posiciones para el electrón. En realidad, al barrer η_0 de -1 a 1, primero se genera una rama del hiperboloide y aquí, en la intersección de las superficies, identificaríamos una de las posiciones, pero al pasar el valor de 0 en el barrido del intervalo para η_0 , se generaría la otra rama del hiperboloide y por ende otras posiciones.

Para una distancia focal constante, las elipses confocales ξ tienden a ser circunferencias conforme ξ_0 se hace más grande, esto se puede apreciar en la Fig. 3-7, donde se muestra lo que sería una proyección del esferoide de la Fig. 3-6 hacia un plano con ϕ_0 constante:

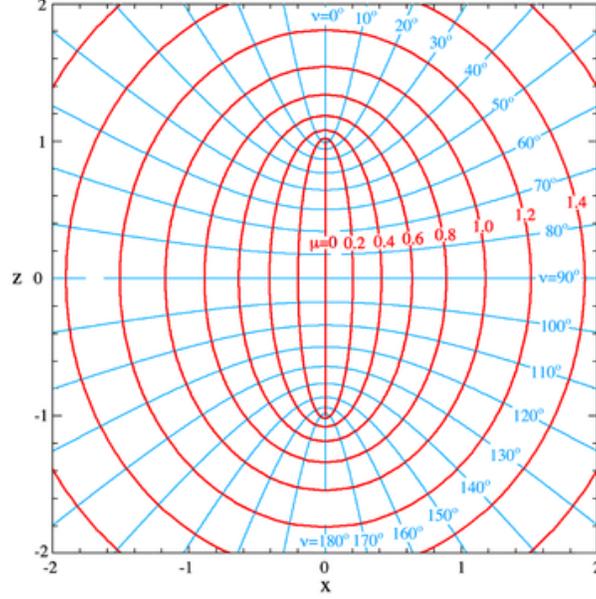


Fig. 3-7. Coordenadas μ y v para $R=1$, considerando un valor fijo para la coordenada ϕ . Fuente: Wikipedia.

La relación entre las coordenadas esferoidales prolatas y las cartesianas está dada por

$$x = a(\xi^2 - 1)^{1/2}(1 - \eta^2)^{1/2} \cos \phi \tag{3-12a}$$

$$y = a(\xi^2 - 1)^{1/2}(1 - \eta^2)^{1/2} \sin \phi \tag{3-12b}$$

$$z = a\xi\eta, \tag{3-12c}$$

con a , la magnitud del semi-eje focal (en adelante nos referiremos a esa magnitud como $R/2$, siendo R la distancia entre los focos). De esta manera, la ecuación de Schrödinger para el electrón confinado por un esferoide, en coordenadas

esferoidales prolatas, en unidades atómicas y en la aproximación de Born – Oppenheimer [47], quedaría escrita como

$$\begin{aligned} & \frac{-2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \psi(\xi, \eta, \phi) \\ & - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} \psi(\xi, \eta, \phi) + \frac{1}{R} \psi(\xi, \eta, \phi) = E \psi(\xi, \eta, \phi), \end{aligned} \quad (3-13)$$

donde en el lado izquierdo de la ecuación, el primer término representa a la energía cinética, el segundo a la energía potencial (interacción núcleos – electrón), y el tercero a la energía potencial debida a la interacción entre los núcleos.

Debido a la forma de la ecuación (3-13), se puede identificar que es separable, y en base a ello se propone como solución a una función producto de tres funciones, cada una de ellas dependiente de una de las coordenadas esféricas: $\Psi = \Xi(\xi)H(\eta)\Phi(\phi)$. En base a lo anterior, el método de separación de variables nos lleva a obtener el sistema de ecuaciones

$$\frac{d^2}{d\phi} \Phi(\phi) = -m^2 \Phi(\phi) \quad (3-14)$$

$$\left[-\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} + \frac{m^2}{\xi^2 - 1} - 2R\xi - \frac{R^2}{2} \left\{ E - \frac{1}{R} \right\} \xi^2 \right] \Xi(\xi) = K \Xi(\xi) \quad (3-15)$$

$$\left[-\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} + \frac{m^2}{1 - \eta^2} + \frac{R^2}{2} \left\{ E - \frac{1}{R} \right\} \eta^2 \right] H(\eta) = -KH(\eta), \quad (3-16)$$

con m^2 y K las constantes de separación. La solución a la ecuación (3-14) es

$$\Phi(\phi) \propto \exp(im\phi),$$

con $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$

Ahora, las ecuaciones (3-15) y (3-16) son simultáneas en K y E. Recordando la ecuación asociada de Legendre

$$\left[-\frac{d}{d\eta} (1-\eta^2) \frac{d}{d\eta} + \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] P_l^m(\eta) = l(l+1)P_l^m(\eta). \quad (3-17)$$

vemos que conviene escribir a H(η) como un desarrollo en términos de los polinomios asociados de Legendre:

$$H(n) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\eta). \quad (3-18)$$

Aprovechando la ortogonalidad de dichos polinomios y dado un valor inicial E_i para la energía, podemos construir con la ecuación (3-16) una matriz de elementos H_{l,l'} dados por

$$\begin{aligned} \langle l, m | \left\{ -\frac{d}{d\eta} (1-\eta^2) \frac{d}{d\eta} + \frac{m^2}{1-\eta^2} + \frac{R^2}{2} \left[E - \frac{1}{R} \right] \eta^2 \right\} | l', m \rangle &= l(l+1)\delta_{l,l'} - \\ \frac{R^2}{2} \left[E - \frac{1}{R} \right] \left\{ \frac{1}{2l+3} \left(\frac{(l+1+m)(l+2+m)(l+1-m)(l+2-m)}{(2l+1)(2l+5)} \right)^{1/2} \right. &\delta_{l+2,l'} + \\ \left. \left(\frac{(2l-1)(l+1+m)(l+1-m) + (2l+3)(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)(2l+3)} \right) \delta_{l,l'} + \right. & \\ \left. \frac{1}{2l-1} \left(\frac{(l+m)(l-m)(l-1+m)(l-1-m)}{(2l-3)(2l+1)} \right) \delta_{l-2,l'} \right\} & \end{aligned} \quad (3-19)$$

cuyos eigenvalores serán los valores de K, y sus eigenvectores los coeficientes del desarrollo (3-18). En este trabajo los eigenvalores y los eigenvectores se encontraron usando la subrutina DEVCRG del paquete IMSL. El eigenvalor más pequeño, K_i, al que asociaremos con el estado base de la molécula, lo llevaremos a la ecuación (3-15) para resolverla considerando que esta ecuación tiene una singularidad en ξ=1. Vamos a suponer que el esferoide prolato tiene tamaño ξ₀. Esta ecuación se puede entonces resolver con una serie de potencias en ξ.

Cuando la serie de potencias se corta, se verifica si se cumple la condición de frontera de Dirichlet ($\Xi=0$). Si la condición de frontera no se satisface, se mejora el valor de la energía utilizando la fórmula de Newton – Raphson [48]

$$E_{i+1} = E_i - \frac{\Xi(\xi, E_i)}{\left. \frac{\partial}{\partial \xi} \Xi(\xi, E) \right|_{\xi = \xi_0}} \quad (3-20)$$

Para facilitar la convergencia de la serie para la solución de la ecuación diferencial en ξ , se introduce la variable [21]

$$\zeta = \frac{\xi - 1}{\xi + 1} \quad (3-21)$$

Es decir, cuando la diferencia entre dos términos consecutivos de la serie sea menor o igual a cierto criterio, pasamos a mejorar el valor de energía usando la ecuación (3-20), obteniendo entonces un nuevo valor E_{i+1} . Este nuevo valor E_{i+1} lo usamos para construir de nuevo la matriz asociada con $H(\eta)$, y obtener un nuevo eigenvalor K_{i+1} . Se presenta entonces un proceso iterativo, el cual se detiene cuando el valor absoluto de las diferencias entre E_{i+1} y E_i , y K_{i+1} y K_i sean menores o iguales a ciertos valores predefinidos de acuerdo a criterios de precisión en la obtención de estos eigenvalores; todo esto lleva a la solución simultánea de las ecuaciones (3-15) y (3-16).

En base a este algoritmo y considerando una separación R entre los núcleos de 2.00 a.u. y una base con 200 polinomios asociados de Legendre, se encontraron las energías que se muestran en las tablas VI y VII usando como unidad el Hartree, para la molécula confinada por esferoides de distinto tamaño ξ_0 , en el estado base y en los estados excitados señalados (el Hartree es una unidad de medición de energía que se define como \hbar^2/ma_0^2 , con a_0 el radio de Bohr, y equivale a $4.3597482 \times 10^{-18}$ Joule).

Tabla VI. Energías para el estado base y algunos estados excitados.

ξ_0	Energías [Hartree]		
a.u.	E(1s σ_g)	E(2p σ_u)	E(2p π_u)
5.00	-0.60191555	-0.15919987	0.12100237
4.50	-0.60030518	-0.14911835	0.15719014
4.00	-0.59534625	-0.12748671	0.22047024
3.50	-0.58061060	-0.08089284	0.33463681
3.00	-0.53778670	0.02246191	0.55188989
2.50	-0.41185775	0.26867584	1.00399515
2.00	-0.00945118	0.94851644	2.10848163
1.50	1.65451214	3.53850204	5.97101862

Las unidades atómicas en que se mide el tamaño de ξ_0 son equivalentes al Bohr. La nomenclatura empleada en cada columna de la energía señala los números cuánticos del estado, considerando que σ equivale a $m=0$, π equivale a $m=1$, s equivale a $l=0$ y p , a $l=1$.

Tabla VII. Comparación con energías reportadas en referencias.

ξ_0	Energías [1s σ_g , Hartree]		
a.u.	E ^[21]	E ^[22]	E ^{Molinar}
4.4468	-0.600	-0.6000	-0.600000
2.4196	-0.375	-0.3750	-0.375026
2.0917	-0.125	-0.1250	-0.124952
1.9002	0.150	0.1532	0.153303
1.8186	0.325	0.3250	0.325063

Las energías que hemos encontrado con nuestros cálculos están acordes con las que citan las referencias [21] y [22]. La dependencia de la energía con respecto al tamaño del esferoide se muestra en la Fig. 3-8:

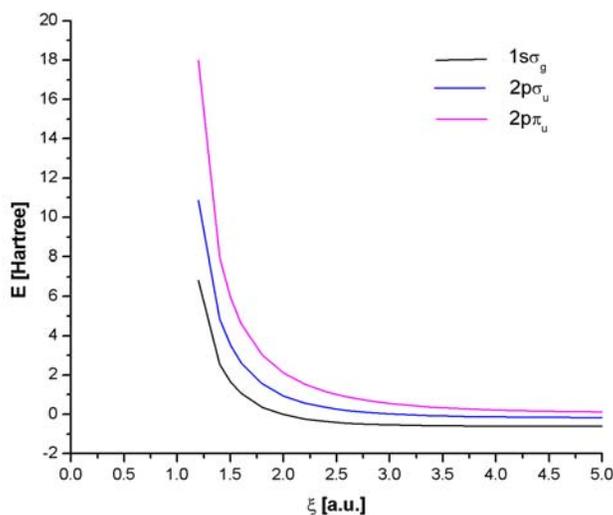


Fig. 3-8. Energía del estado base y los dos primeros estados excitados, para distintos tamaños de confinamiento.

La Fig. 3-8 muestra el comportamiento esperado de la energía: debido al confinamiento y a la presión ejercida sobre el sistema, conforme vamos reduciendo el tamaño del esferoide, la energía de la molécula debe ser mayor. También apreciamos en la imagen el comportamiento asintótico de las energías hacia sus valores para el ión libre (Tabla VIII). La energía para la molécula no confinada se encuentra haciendo el tamaño del esferoide cada vez más grande, hasta que no observemos cambios significativos en ella. La siguiente tabla nos muestra esta energía, considerando de nueva cuenta $R=2.00$ a.u.

Tabla VIII. Energía del ion libre en el estado base y algunos estados excitados.

Estado	Energía [Hartree]
$1s\sigma_g$	-0.60263421
$2p\sigma_u$	-0.16753439
$2p\pi_u$	0.07122818

Ahora, conforme vamos aumentando desde un valor inicial el tamaño del esferoide, la separación entre los núcleos (distancia de equilibrio), varía hasta que la energía alcanza un valor mínimo. Este comportamiento de la distancia de equilibrio se debe a que el electrón aumenta su energía cinética, por lo que el promedio de la fuerza de atracción electrón - núcleos disminuye, y por tanto el efecto de repulsión Colulombiana aleja a los protones uno del otro. En la Tabla IX se muestra la distancia de equilibrio R_{\min} para los núcleos de la molécula, cuando ésta se encuentra en su estado base.

Tabla IX. Distancia de equilibrio entre los núcleos para la molécula no confinada en su estado base.

ξ_0 [a.u.]	R_{\min} [a.u.]	E [Hartree]
5.00	2.0238	-0.60194667
4.50	2.0657	-0.60055799
4.00	2.1565	-0.59691384
3.50	2.3350	-0.58846088
3.00	2.6753	-0.57108739

Tomando valores cada vez más grandes para ξ_0 , hasta encontrar un valor de la energía que no cambie significativamente, podemos identificar que la energía del ión libre es de -0.60317976 Hartree, con una distancia de equilibrio entre los núcleos igual a 1.9966 a.u.

Considerando al ión como libre (circunstancia que se daría dando valores cada vez mas grandes a ξ , hasta notar que no hay cambios significativos en su energía) se calculó la energía vibracional del sistema. Esta energía se encontró variando R de tal modo que se fueran encontrando las energías de la molécula. Haciendo más de 150 cálculos de energía para distintos valores en los alrededores de $R=2.00$ a.u., se generó una dispersión (ver figura) de puntos donde se identificó el valor mínimo E_{\min} para un valor específico R_{\min} .

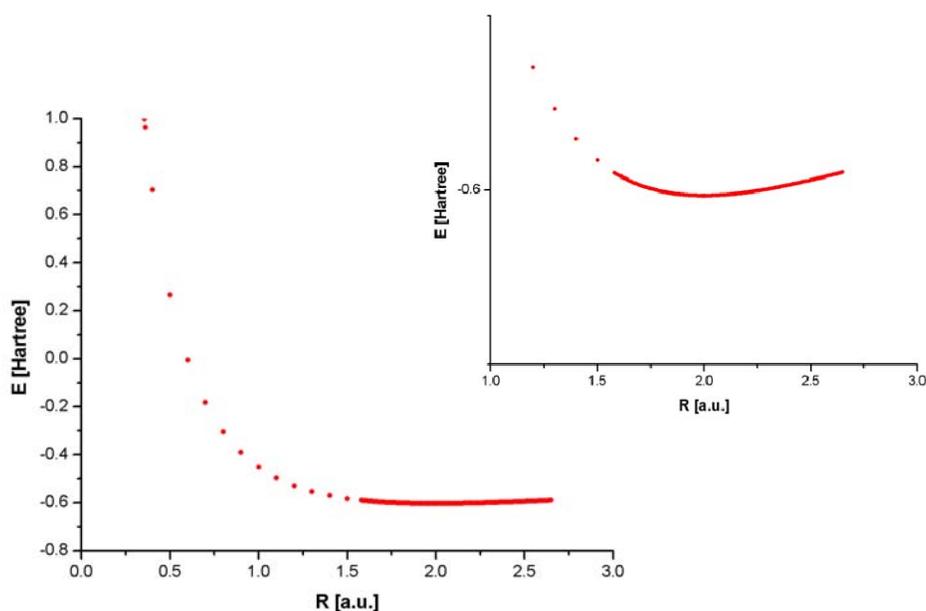


Fig. 3-9 Dispersión de energías (Hartree) contra distancia de separación entre los núcleos (a.u.).

De la tabla de valores se identificó el valor mínimo de energía (E_{\min}) que fue de -0.60317976 Hartree y la distancia mínima correspondiente entre los núcleos (R_{\min}), que fue de 1.9965625 a.u. Se aprecia en la Fig. 3-9 cómo se trabajaron muchos valores alrededor del valor mínimo de energía. A todos los valores de R y de E calculados, se les restó el valor de R_{\min} y E_{\min} , para hacer un ajuste con un polinomio de grado 10; este polinomio representa de manera aproximada al potencial de oscilación de los núcleos:

$$V(r) = -0.00002r + 0.5160r^2 - 0.04362r^3 + 0.02669r^4 - 0.01478r^5 + 0.00780r^6 - 0.00404r^7 + 0.00214r^8 - 0.00108r^9 + 0.00033r^{10}. \quad (3-22)$$

Este polinomio ajusta muy bien la dispersión, sobre todo alrededor del mínimo, que es la zona que nos es de mayor interés para determinar la energía vibracional. El potencial anterior se usó en la ecuación de Schrödinger, considerando para este sistema el valor de la masa reducida de los dos protones, es decir

$$m = \frac{m_p^2}{2m_p} = \frac{m_p}{2} = \frac{1836.152701m_e}{2}. \quad (3-23)$$

La solución de la ecuación nos da un valor de 0.00523523 Hartree para la energía del estado base vibracional. Considerando este valor y el valor de la energía mínima de -0.60317976 Hartree, se obtiene una energía

$$E = E_0 + E_{vib} = -0.60317976Hartree + 0.00523523Hartree = -0.59794453Hartree$$

(Para obtener esta energía del estado base vibracional se resolvió la ecuación de Schrödinger numéricamente, haciendo uso de la subrutina DEVCRG del paquete IMSL. H. Li et al. [30] reportan un valor de -0.59713906 Hartree sin hacer uso de la aproximación de Born – Oppenheimer, trabajando en coordenadas de Hylleraas y usando el método variacional.

3.2.2. Presión ejercida por el esferoide confinante sobre la molécula.

El confinamiento del ión molecular dentro del esferoide definido por ξ_0 genera una presión sobre el sistema. Este esferoide va a tener un volumen V dado por la expresión

$$V(R, \xi_0) = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{R \xi_0}{2} \right)^3 (1 - \xi_0^{-2}) \quad (3-24)$$

Ahora, la energía del ión debe variar con respecto a R y ξ_0 , por lo que entonces tendríamos que

$$dE = \left(\frac{\partial}{\partial R} E \right)_V dR + \left(\frac{\partial}{\partial V} E \right)_R dV$$

Como la presión viene dada por

$$P = - \frac{dE}{dV},$$

entonces

$$P = - \left(\frac{\partial}{\partial \xi_0} \langle \Psi | H | \Psi \rangle \right)_R \left(\frac{\partial}{\partial \xi_0} V \right)_R^{-1}. \quad (3-25)$$

De acuerdo entonces con la ecuación (3-25), se requiere calcular el valor esperado de la derivada del valor esperado del Hamiltoniano. Del teorema de Hellman – Feynman, este valor se encontró a partir de hacer desarrollos de Taylor a la izquierda y derecha de ξ_0 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_0} \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{1}{8\Delta\xi} \left\{ \langle \Psi | H | \Psi \rangle \Big|_{\xi+2\Delta\xi} + 2 \langle \Psi | H | \Psi \rangle \Big|_{\xi+\Delta\xi} \right. \\ \left. - 2 \langle \Psi | H | \Psi \rangle \Big|_{\xi-\Delta\xi} - \langle \Psi | H | \Psi \rangle \Big|_{\xi-2\Delta\xi} \right\} \end{aligned} \quad (3-26)$$

Luego, de la ecuación (3-25) y considerando $R=2.00$ a.u., se encontraron las presiones que aparecen en la Tabla X:

Tabla X. Algunos de los valores calculados para la presión (en a.u. y bar), para el ión en el estado base.

ξ_0 [a.u.]	P [a.u.]	P [bar]
10.00	3.9247E-12	0.00115473
9.00	6.9610E-11	0.02048066
8.00	1.2184E-09	0.35847937
7.00	2.0902E-08	6.14973237
6.00	3.4784E-07	102.34009927
5.00	5.5284E-06	1626.56576623

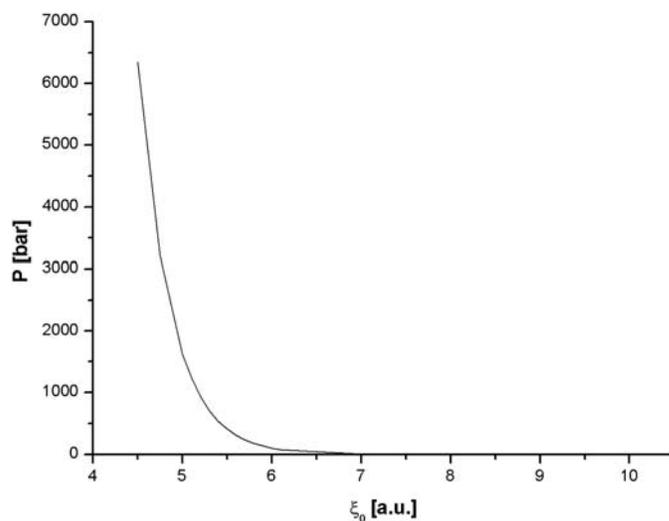


Fig. 3-10. Presión (en bares) contra ξ_0 , para el ión en el estado base.

La Fig. 3-10 muestra que la presión tiene el comportamiento que debemos de esperar, es decir, que ésta tienda a cero conforme ξ_0 crece; ambas cantidades deben de estar ligadas, ya que al aumentar la presión, aumentamos la energía de la molécula. J. Gorecki y W. Byers Brown [22] calculan también la presión para el

ión confinado por el esferoide rígido, pero en su caso, ellos determinan ésta en función de un determinado volumen limitado por ξ_0 y de la separación mínima R_{\min} .

3.2.3. Polarizabilidad del ión molecular H_2^+ .

Cuando se coloca una molécula en un campo eléctrico externo, los electrones son atraídos ligeramente en una dirección, mientras los núcleos se desplazan en la dirección opuesta. A este efecto es al que se conoce como polarización. Las diferencias entre los momentos multipolares de las distribuciones de cargas distorsionadas y las distribuciones no distorsionadas se conocen como momentos multipolares inducidos. Para campos muy pequeños, el momento dipolar inducido es proporcional a la magnitud F del campo eléctrico, donde la constante de proporcionalidad es la polarizabilidad α [28]. La energía total del sistema es entonces

$$E = E_0 - \frac{1}{2} \alpha F^2 \quad (3-27)$$

con E_0 la energía de la molécula en ausencia de campo. La polarizabilidad es aproximada a través de la teoría de perturbaciones a segundo orden ($E^{(2)}$) en la energía [31,49].

Para una molécula de hidrógeno, ionizada o no, la polarizabilidad tiene dos componentes, la paralela (α_{\parallel}) y la perpendicular al eje de la molécula. En coordenadas cartesianas, estas componentes tienen la forma [50]

$$\alpha_{\parallel} = \alpha_{zz} = 4n \langle z^2 \rangle + (n-1) \langle z_1 z_2 \rangle^2 \quad (3-28)$$

$$\alpha_{\perp} = \alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 4n \langle x^2 \rangle + (n-1) \langle x_1 x_2 \rangle^2. \quad (3-29)$$

Aquí, para el H_2^+ , $n=1$ y para el H_2 , $n=2$ (en nuestro estudio, se considera entonces $n=1$). Para el caso del H_2 , x y z son el valor promedio de las coordenadas de los dos electrones. Las componentes α_{\parallel} y α_{\perp} determinan la polarizabilidad promedio (o simplemente polarizabilidad), como

$$\alpha = \frac{1}{3}(\alpha_{\parallel} + 2\alpha_{\perp}). \quad (3-30)$$

La polarizabilidad es entonces un efecto de deformación que produce un campo eléctrico sobre la molécula. Existe una cantidad que nos mide esa deformación, ésta es la anisotropía:

$$\kappa = \frac{1}{3\alpha}(\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}). \quad (3-31)$$

Como sabemos, desde el inicio de este estudio se propuso que la función de onda sería una función de la forma $\Psi = \Xi(\xi)H(\eta)\Phi(\phi)$, con $\Xi(\xi)$ aproximada por una serie de potencias finita en ξ y $H(\eta)$ por combinación lineal de N polinomios asociados de Legendre (3-18):

$$H(n) = \sum_{l=0}^N c_l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\eta),$$

donde los coeficientes del desarrollo son los eigenvectores de la matriz asociada a un operador en η que resulta de la separación de la ecuación de Schrödinger. Para obtener la serie en ξ , se introdujo el cambio de variable (3-21)

$$\zeta = \frac{\xi - 1}{\xi + 1}.$$

Para cualquiera de las componentes de α , digamos α_{\parallel} , hay que calcular un valor esperado. Por ejemplo, en el caso de la componente paralela, en coordenadas esféricas tendríamos que

$$\alpha_{\parallel} = \alpha_{zz} = 4 \langle z^2 \rangle = \frac{R^{10}}{256} \left(C \int_1^{\xi_0} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \Xi^* H^* \Phi^* \xi^2 \eta^2 \Xi H \Phi (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\phi \right)^2, \quad (3-41)$$

con C, una constante de normalización. Las integrales de las componentes de la polarizabilidad fueron calculadas numéricamente, haciendo uso de cuadraturas de Gauss - Legendre para la integración en ξ , y de las relaciones de recurrencia para los polinomios asociados de Legendre, que permiten hacer uso de una integración inmediata con respecto a η [51].

La cuadratura de Gauss – Legendre nos dice que una integral con límites entre -1 y 1 la podemos determinar a partir de las raíces de los polinomios de Legendre:

$$\int_{-1}^1 y(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i y(x_i), \quad (3-42)$$

con x_i las raíces de los polinomios de Legendre $P_n(x)$, y A_i unos coeficientes dados por

$$A_i = \frac{2(1-x_i^2)}{n^2 [P_{n-1}(x_i)]^2}. \quad (3-43)$$

El empleo de esta cuadratura requiere la modificación de los límites de la integral respecto a ξ , esto se consiguió introduciendo el cambio de variable

$$z = \frac{2}{2\xi_0} \xi - 1. \quad (3-44)$$

La polarizabilidad se calculó considerando $R=2.00$ a.u. Los resultados de los cálculos se muestran en la siguiente tabla, conjuntamente con los de la anisotropía (para $R=2.00$ a.u.), mientras que la gráfica de la polarizabilidad α contra ξ_0 (Fig. 3-11) también se muestra a continuación.

Tabla XI. Polarizabilidad y anisotropía calculadas para algunos valores de ξ_0 (en a.u.).

ξ_0	$\langle z^2 \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	α_{\parallel}	α_{\perp}	α	κ
2	0.4660	0.2328	0.9317	0.8688	0.2168	0.4341	0.5005
3	0.8827	0.4404	1.7635	3.1166	0.7758	1.5561	0.5014
4	1.1245	0.5606	2.2456	5.0580	1.2570	2.5240	0.5020
5	1.2099	0.6026	2.4151	5.8554	1.4525	2.9201	0.5026
6	1.2300	0.6121	2.4543	6.0515	1.4988	3.0164	0.5031
10	1.2394	0.6147	2.4688	6.1445	1.5113	3.0557	0.5054
15	1.2469	0.6157	2.4783	6.2190	1.5164	3.0839	0.5083
20	1.2544	0.6167	2.4879	6.2941	1.5214	3.1123	0.5112

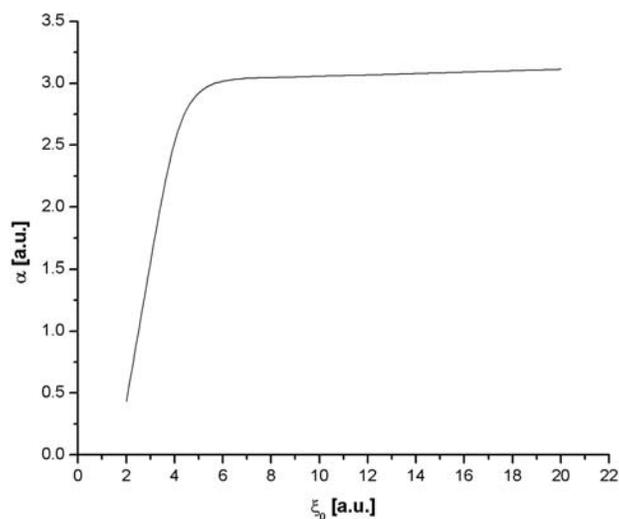


Fig. 3-11. Polarizabilidad α contra ξ_0 .

El comportamiento de la polarizabilidad cuando el tamaño del esferoide se hace más pequeño, se debe al efecto que causa la presión confinante sobre la interacción repulsiva entre los núcleos.

La Tabla XII muestra algunos valores de la polarizabilidad que son reportados en referencias, junto con el valor encontrado en este trabajo de tesis para el ión libre. El dato reportado en este trabajo se encontró calculando el valor de la polarizabilidad para un determinado valor de ξ_0 , que fue aumentando hasta ver que el valor calculado no cambiaba en las primeras cifras decimales.

Tabla XII. Polarizabilidad para el ion molecular de hidrógeno en su estado base.

Author	α [a.u.]
LeSar and Herschbach ³⁵	2.9470
Este trabajo	3.1123
J. M. Taylor, A. Dalgarno, and J. F. Babb ⁴³	3.1687

Al hacer la comparación de los valores que muestra la tabla anterior, es necesario recordar que los cálculos de α fueron hechos bajo distintas consideraciones. Así, por ejemplo, LeSar y Herschbach calcularon la polarizabilidad usando la aproximación de Born – Oppenheimer, mientras que Dalgarno et al. no la utilizan.

3.3. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno por una elipse.

Ya analizado el caso del confinamiento en tres dimensiones por medio de esferoides, ahora analizaremos el confinamiento del ión H_2^+ en dos dimensiones, donde los esferoides se reducen a elipses. Como fue señalado en la introducción, hasta este momento no nos fue posible encontrar referencias donde se hiciera este estudio. En este caso tendremos al sistema restringido al plano, con los núcleos del ión molecular separados por una distancia R y localizados sobre los

focos de una elipse definida por $\xi = \xi_0$, en cuyo interior se encontrará el electrón. La posición del electrón será representada por el punto (ξ, η) . En el caso bidimensional, la ecuación de Schrödinger en la aproximación de Born – Oppenheimer es

$$\begin{aligned} & \frac{-2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ (\xi^2 - 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + (1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right\} \psi(\xi, \eta) \\ & - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} \psi(\xi, \eta) + \frac{1}{R} \psi(\xi, \eta) = E \psi(\xi, \eta). \end{aligned} \quad (3-45)$$

Proponiendo una solución de la forma $\Psi = C \Xi(\xi) H(\eta)$ para trabajar con el método de separación de variables, se llega al siguiente sistema de ecuaciones simultáneas

$$\left\{ (\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} + 2R\xi + \left[\frac{R^2 E}{2} - \frac{R}{2} \right] \xi^2 \right\} \Xi(\xi) = K \Xi(\xi) \quad (3-46)$$

$$\left\{ (1 - \eta^2) \frac{d^2}{d\eta^2} - \eta \frac{d}{d\eta} - \left[\frac{R^2 E}{2} - \frac{R}{2} \right] \eta^2 \right\} H(\eta) = -K H(\eta), \quad (3-47)$$

donde K es la constante de separación. La solución a este sistema de ecuaciones se hizo con el mismo procedimiento seguido para encontrar las energías del ión confinado en tres dimensiones. Como se recuerda, comparando la ecuación diferencial para H(η) y la forma de la ecuación asociada de Legendre, se hizo uso de soluciones de esta última para construir una matriz cuyos eigenvalores son los posibles valores de la constante K, y los eigenvectores son los coeficientes del desarrollo (3-18). Los eigenvalores y los eigenvectores se encontraron usando la subrutina DEVCRG del paquete IMSL.

Para esto, de nueva cuenta vamos a recurrir a la ecuación asociada de Legendre (3-17):

$$\left[-\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta} + \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] P_l^m(\eta) = l(l+1)P_l^m(\eta).$$

Esta ecuación de Legendre la podemos escribir como

$$-(1-\eta^2)\frac{d^2}{d\eta^2}P_l^m(\eta) + 2\eta\frac{d}{d\eta}P_l^m(\eta) + \frac{m^2}{1-\eta^2}P_l^m(\eta) = l(l+1)P_l^m(\eta).$$

Ahora, comparando la ecuación anterior con la ecuación (3-47), vemos que para poder usar como base a los polinomios asociados es necesario restar y sumar en esa ecuación un término, con lo cual tendremos una ecuación equivalente:

$$\left\{ -(1-\eta^2)\frac{d^2}{d\eta^2} + 2\eta\frac{d}{d\eta} - \eta\frac{d}{d\eta} + \left[\frac{R^2E}{2} - \frac{R}{2} \right] \eta^2 \right\} H(\eta) = KH(\eta), \quad (3-48)$$

Utilizando el desarrollo dado en términos de los polinomios asociados de Legendre (3-18), podemos construir una matriz cuyos elementos $H_{l,l'}$ serán dados por

$$\begin{aligned} \langle l,0 | \left\{ -(1-\eta^2)\frac{d^2}{d\eta^2} + 2\eta\frac{d}{d\eta} - \eta\frac{d}{d\eta} + \left[\frac{R^2E}{2} - \frac{R}{2} \right] \eta^2 \right\} | l',0 \rangle &= l(l+1)\delta_{l,l'} - l\delta_{l,l'} + \quad (3-49) \\ &- [(2l+1)(2l-3)]^{1/2} \delta_{l-2,l'} - [(2l+1)(2l-7)]^{1/2} \delta_{l-4,l'} - [(2l+1)(2l-11)]^{1/2} \delta_{l-6,l'} - \dots \\ &+ \left[\frac{R^2E}{2} - \frac{R}{2} \right] \frac{1}{2l+3} \sqrt{\frac{(l+1)^2(l+2)^2}{(2l+1)(2l+5)}} \delta_{l+2,l'} + \left[\frac{R^2E}{2} - \frac{R}{2} \right] \left\{ \frac{(2l-1)(l+1)^2 + (2l+3)l^2}{(2l-1)(2l+1)(2l+3)} \right\} \delta_{l,l'} \\ &+ \left[\frac{R^2E}{2} - \frac{R}{2} \right] \frac{1}{2l-1} \sqrt{\frac{l^2(l-1)^2}{(2l-3)(2l+1)}} \delta_{l-2,l'} \end{aligned}$$

Dando un valor inicial E_i para la energía, se encuentra un valor de K_i ; luego éste se sustituye en la ecuación para ξ (3-46), donde el valor de la energía se va a mejorar hasta encontrar un valor E_{i+1} . El valor E_{i+1} para la energía se sustituye en la ecuación para encontrar un segundo valor de K , K_{i+1} . Con esto se realiza un

proceso iterativo que se detiene hasta que el valor absoluto de las diferencias entre E_{i+1} y E_i , y K_{i+1} y K_i sean menores o iguales a ciertos criterios.

Dejando fijo el valor de R en 2.00 a.u. y una base con los 200 polinomios asociados de Legendre, se calcularon las energías del ión en el estado base y en algunos estados excitados, estas energías se muestran en la siguiente tabla:

Tabla XIII. Energía del ión confinado en dos dimensiones, en estado base y en algunos estados excitados.

ξ_0	Energía [Hartree]		
a.u.	E_0 (Estado base)	E_1	E_2
5.00	-2.13524548	0.05533034	0.96076138
4.50	-2.13523956	0.10637885	1.25710443
4.00	-2.13519190	0.20186275	1.7090136
3.50	-2.13482078	0.38581064	5.29678372
3.00	-2.13205015	0.75560988	
2.50	-2.11236924	1.54091897	
2.00	-1.97621968	3.37250988	
1.50	-0.94790935		

Los valores faltantes en las columnas de la energía para los estados excitados no se reportan por que el programa no tuvo convergencia al hacer los cálculos. La energía de estos estados contra los valores de ξ_0 son mostrados en la Fig. 3-12:

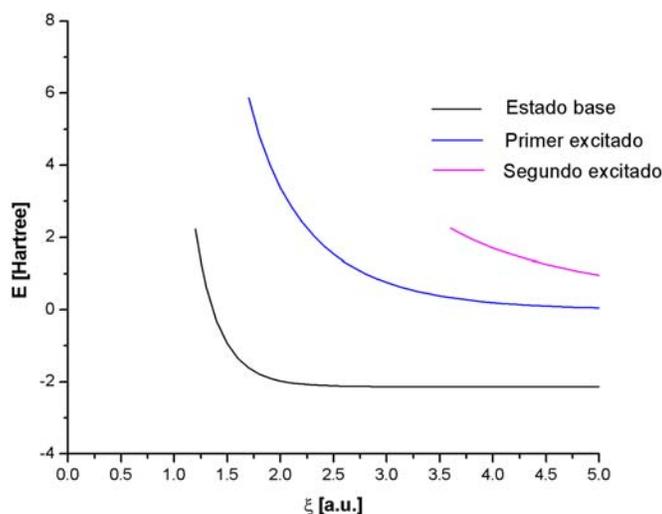


Fig. 3-12. Energía para el ión molecular confinado en dos dimensiones: estado base y estados excitados).

En esta figura se observa como las energías del primer estado excitado y segundo estado excitado son mas sensibles a la variación del tamaño de la elipse confinante (ξ_0). Hay que mencionar aquí que estas energías, así como la energía del estado base, fueron calculadas considerando una distancia internuclear R igual 2.00 a.u. La realidad es que como veremos mas adelante, al cambiar el valor de ξ_0 , se modifica la distancia de equilibrio hasta que esta alcanza un valor que se conoce como distancia de equilibrio internuclear.

A continuación, se hace una comparación de la energía del ión, en su estado base, confinado en dos y tres dimensiones (para distintos valores de ξ_0); en ambos casos se considera que R=2.00 a.u. En la Fig. 3-13 se muestra gráficamente los valores de la energía para valores de ξ_0 .

Tabla XV. Energía del ión confinado en tres y dos dimensiones.

ξ_0	Energía 3D	Energía 2D
a.u.	Hartree	Hartree
5.00	-0.6019	-2.13524548
4.50	-0.6003	-2.13523956
4.00	-0.5953	-2.13519190
3.50	-0.5806	-2.13482078
3.00	-0.5378	-2.13205015
2.50	-0.4119	-2.11236924
2.00	-0.0095	-1.97621968
1.50	1.6545	-0.94790935

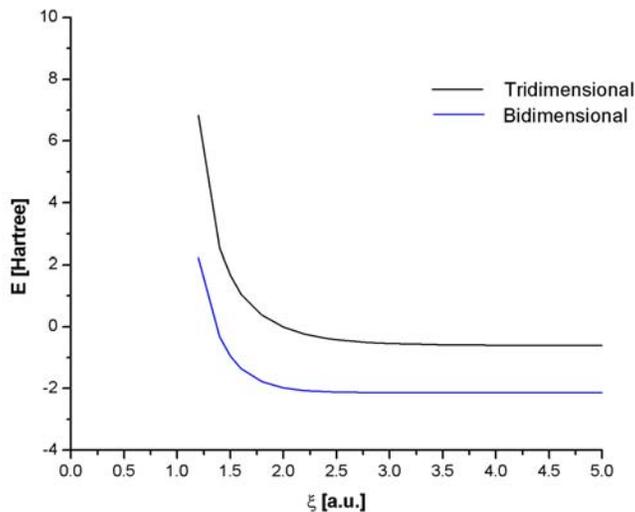


Fig. 3-13. Energía para el ión molecular confinado en tres y dos dimensiones.

La Fig. 3-13 muestra cómo la reducción de un confinamiento de tres a dos dimensiones origina una disminución en la energía del ión molecular. Haciendo el

ejercicio de ver como varía la energía conforme el confinamiento es cada vez más grande, puede encontrarse que la energía del ión libre en el estado base y confinado en dos dimensiones, es de -2.13524630 Hartree, cuando la distancia entre los núcleos es de 2.00 a.u.

Como ocurre en el caso tridimensional, al modificar el tamaño del confinamiento, se origina un desplazamiento de los núcleos sobre el eje de la elipse. De esta manera dejando fijo el valor de ξ_0 , se fue calculando la energía para distintos valores de R, encontrando con ello el valor de la distancia de separación entre los núcleos para la cual la energía tiene un valor mínimo (R_{\min}). La siguiente tabla muestra esta distancia para distintos valores de ξ_0 , mientras que en la Fig. 3-14 se muestra como al variar la distancia mínima de equilibrio internuclear se modifica también la ubicación del orbital del electrón o la región de mayor manifestación probabilística electrónica.

Tabla XVII. Distancia de equilibrio entre los núcleos para la molécula H_2^+ en su estado base.

ξ_0 [a.u.]	R_{\min} [a.u.]	E [Hartree]
5.00	0.5940135	-2.76081335
4.50	0.6366491	-2.71899930
4.00	0.7000738	-2.65418570
3.50	0.7975879	-2.55658920
3.00	0.9590522	-2.41368287

Tomando valores cada vez más grandes para ξ_0 , hasta encontrar un valor de la energía que no cambie significativamente, podemos identificar que la energía del ión libre es de -2.82237060 Hartree, con una distancia de equilibrio entre los núcleos igual a 0.51458031 a.u.

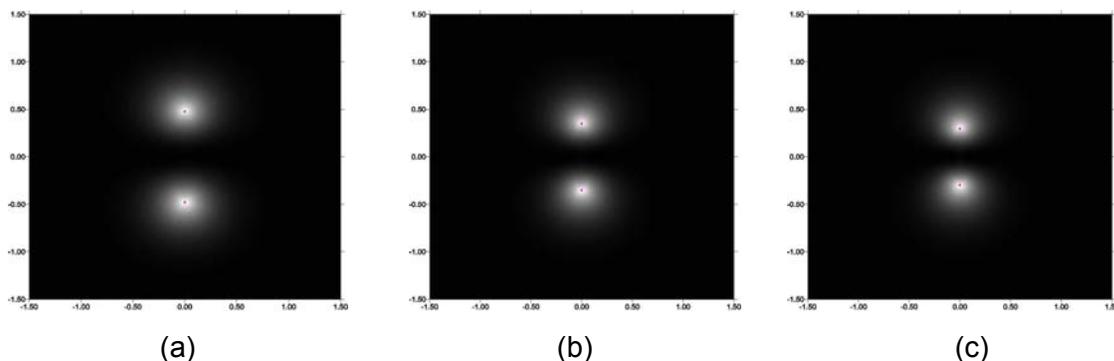


Fig. 3-14. Variación de la densidad de probabilidad (orbital electrónico), al cambiar la separación de equilibrio entre los núcleos: (a) $R_{\min}=0.9590522$ a.u. ($\xi_0=3.00$ a.u.), (b) $R_{\min}=0.7000738$ a.u. ($\xi_0=4.00$ a.u.), y (c), $R_{\min}=0.5940135$ a.u. ($\xi_0=5.00$ a.u.)

En el caso bidimensional también se puede calcular la energía vibracional de los núcleos, siguiendo el mismo procedimiento empleado para calcular esta energía en el confinamiento tridimensional. Considerando al ión como libre y variando la distancia R , se calcularon las energías correspondientes para la molécula. Al analizar los cálculos fue posible identificar un valor mínimo de la energía E_{\min} , -2.82237060 Hartree, para una correspondiente distancia de separación R_{\min} , 0.51458031 a.u. Estos valores se restaron a las energías calculadas y a las distancias empleadas para calcularlas, y después la dispersión se ajustó con un polinomio de grado diez que viene a ser el potencial de la oscilación:

$$V(r) = 3.6000r^2 - 10.8000r^3 + 24.7000r^4 - 52.0000r^5 + 110.0000r^6 - 233.4000r^7 + 403.5000r^8 - 430.7000r^9 + 198.3000r^{10}. \quad (3-50)$$

Sustituyendo este potencial en la ecuación de Schrödinger y considerando una masa de $1836.152701m_e/2$ (masa reducida de los dos protones), se encontró una energía de estado base vibracional de 5.4×10^{-6} Hartree.

Igual a como se hizo en el caso tridimensional, los valores de la polarizabilidad y de la anisotropía se calcularon considerando $R=2.00$ a.u. El cálculo de la polarizabilidad se hace, como en el caso tridimensional, a partir de la determinación de los valores esperados $\langle x^2 \rangle$ y $\langle z^2 \rangle$, estos valores esperados se

construyen a partir de la expresión para la función de onda $\Psi=C\Xi(\xi)H(\eta)$. De este modo, el cálculo de los valores esperados requiere la determinación de la constante de normalización C, la cual se puede hallar a partir de

$$C^2 R^2 \int_1^{\xi_0} \int_{-1}^1 \Xi^* H^* \Xi H \frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)^{1/2} (1 - \eta^2)^{1/2}} d\xi d\eta = 1. \quad (3-51)$$

Antes de hacer el cálculo, hay que recordar que la función $\Xi(\xi)$ se ha encontrado con una serie de potencias, haciendo previamente el cambio de variable (3-21)

$$\zeta = \frac{\xi - 1}{\xi + 1}.$$

Considerando este cambio de variable, la condición de normalización queda como

$$C^2 R^2 \int_0^{\xi_0} \int_{-1}^1 \Xi^* H^* \Xi H \frac{1}{\zeta^{1/2} (1 - \eta^2)^{1/2}} \left\{ \left(\frac{1 + \zeta}{1 - \zeta} \right)^2 - \eta^2 \right\} \frac{1}{(1 - \zeta)} d\zeta d\eta = 1. \quad (3-52)$$

los resultados de los cálculos hechos en este trabajo se han obtenido a partir de métodos numéricos. En el caso del confinamiento en tres dimensiones, las integraciones se obtuvieron haciendo uso de la regla de Simpson. Observando la ecuación anterior, podemos ver cómo aparecen singularidades en $\zeta=0$ y en $\zeta=1$, así como en $\eta=\pm 1$; esto ocasiona que el uso de la regla de Simpson no sea muy conveniente para emplearse en el cálculo de la constante de normalización y en el cálculo de los valores esperados $\langle x^2 \rangle$ y $\langle z^2 \rangle$. En base a esto, se procedió a hacer los cálculos empleando la cuadratura de Gauss – Legendre (para el caso de las integración respecto a ζ) y la cuadratura de Gauss – Tchebychev [51] (para el caso de las integraciones respecto a η).

La cuadratura de Gauss – Tchebychev se recomienda para integrales con límites entre -1 y 1:

$$\int_{-1}^1 y(x)w(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i y(x_i), \quad (3-53)$$

con

$$w(x) = \frac{1}{(1-x^2)^{1/2}}. \quad (3-54)$$

En esta cuadratura

$$x_i = \cos\left(\frac{(2i-1)\pi}{2n}\right), \quad (3-55)$$

y

$$w_i = \frac{\pi}{n}. \quad (3-56)$$

Para los cálculos con la cuadratura Gauss – Legendre se emplearon las 2000 raíces del polinomio $P_{2000}(x)$, mientras que para la cuadratura Gauss – Tchebychev se uso $n=500$.

La siguiente tabla muestra los valores obtenidos al calcular la polarizabilidad y la anisotropía del ión, confinado por elipses de distinto tamaño ξ_0 .

Tabla XVIII. Polarizabilidad y anisotropía calculada para algunos valores de ξ_0 (en a.u.).

ξ_0	$\langle z^2 \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	α_{\parallel}	α_{\perp}	α	κ
2	0.4465	0.2124	0.6589	0.7976	0.1804	0.3260	0.6311
3	0.5159	0.2869	0.8028	1.0647	0.3292	0.4646	0.5277
4	0.5228	0.2942	0.8170	1.0932	0.3462	0.4798	0.5190
5	0.5231	0.2945	0.8176	1.0945	0.3470	0.4805	0.5186
6	0.5231	0.2945	0.8176	1.0945	0.3470	0.4805	0.5186
10	0.5231	0.2945	0.8177	1.0946	0.3470	0.4805	0.5186
15	0.5250	0.2966	0.8216	1.1026	0.3518	0.4848	0.5162

Y la siguiente gráfica (Fig. 3-15) muestra el comportamiento de α al variar el tamaño de la elipse ξ_0 confinante.

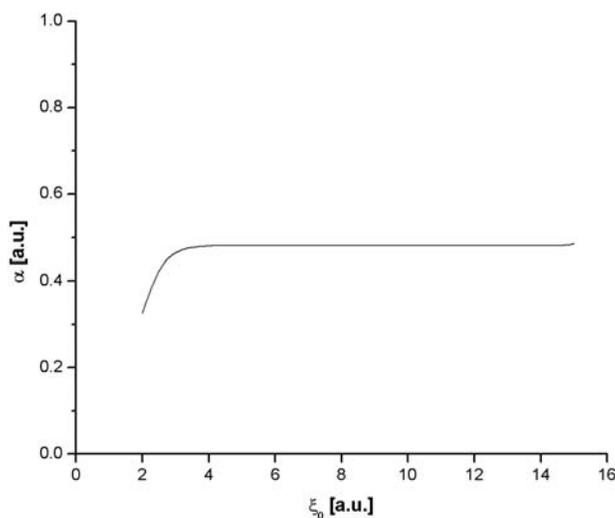


Fig. 3-15. Polarizabilidad α contra ξ_0 (caso bidimensional).

Para el confinamiento de la molécula en dos dimensiones, la polarizabilidad tiene un comportamiento similar al que ocurre en tres dimensiones, es decir,

aumenta muy rápido cuando la elipse confinante ξ_0 tiene valores muy pequeños alrededor de 2.00 a.u., pero luego varía muy lentamente, de manera que podríamos decir que se mantiene en un valor constante.

4. Conclusiones.

4.1. Confinamiento en un doble pozo cuántico parabólico de un electrón con masa efectiva dependiente de la posición.

Se considera en el estudio del confinamiento de un electrón, en una estructura unidimensional de dobles pozos cuánticos parabólicos asimétricos, el concepto de masa efectiva del electrón dependiente de su posición dentro del cristal semiconductor. Esta idea no había sido considerada en trabajos previamente publicados. La necesidad de trabajar con una masa efectiva dependiente de la posición se hace patente al trabajar con pozos, en los que la magnitud de la energía del potencial, depende de la posición del electrón dentro del semiconductor. De acuerdo con lo anterior, se introducen expresiones para la concentración del semiconductor y para la masa efectiva del electrón dependiente de la posición, misma que se introduce en la ecuación de Schrödinger dentro del operador de energía cinética.

Al considerar un sistema de dobles pozos cuánticos parabólicos asimétricos, el factor relevante para la ganancia obtiene un valor más grande cuando los pozos tienden a ser semejantes en su anchura y curvatura; en los casos estudiados, este factor alcanzó un valor superior a los $1000 \text{ nm}^4 \text{ meV}$.

Al tomar en cuenta que la operación de un diodo laser semiconductor real se basa en la emisión de radiación al excitar electrones dentro de centenares de pozos cuánticos, se obtuvo una solución de la ecuación de Schrödinger que lleva a la definición de las sub-bandas de energía. Cada sub-banda está formada por un número de niveles de energía igual al número de pozos que tiene el semiconductor.

En nuestro estudio, se consideró una estructura de tres y de cinco pares de pozos, con los resultados siguientes:

- (i) Para el caso de tres dobles pozos la primera sub-banda tiene una anchura de 0.011 meV, mientras que la segunda tiene una de 0.087 meV y la tercera una de 0.073 meV;
- (ii) En el caso de una estructura de cinco pares, la primera sub-banda tiene una anchura de 0.011 meV, la segunda una de 0.086 meV y la tercera, una de 0.073 meV.

En consecuencia, el aumento del número de dobles pozos sugiere que los niveles de energía adicionales, se van a ir “empaquetando” dentro de las sub-bandas; mientras las anchuras de estas van a permanecer prácticamente sin cambio.

4.2. Confinamiento del ión molecular de hidrógeno (H_2^+) por un esferoide (caso tridimensional), y por una elipse (caso bidimensional).

4.2.1 Caso tridimensional.

Se considera el estudio del confinamiento del ión molecular de hidrógeno (H_2^+) en tres y dos dimensiones. En el caso tridimensional el confinamiento lo define un esferoide mientras que en el caso bidimensional lo establece una elipse.

En el caso tridimensional se resuelve la ecuación de Schrödinger para el ión molecular, obteniendo las energías del estado base y las de los primeros estados excitados, considerando diferentes configuraciones de confinamiento. Los resultados nos muestran que la energía del ión libre en su estado base es de -0.6031 Hartree, con una distancia de equilibrio entre los núcleos de 1.9966 a.u. La energía del modo vibracional en este estado alcanzó un valor de 0.0052 Hartree.

Por otro lado, para el caso de esferoides confinantes, el valor de la presión ejercida por el esferoide disminuye conforme el tamaño del confinamiento aumenta. Para la polarizabilidad y la anisotropía de la molécula confinada, se

consideraron varios casos de la superficie confinante, encontrando que ambas tienden a un valor fijo cuando el esferoide es muy grande: 3.1123 para la polarizabilidad y 0.5112 para la anisotropía.

4.2.2 Caso bidimensional.

En el caso del confinamiento del H_2^+ en dos dimensiones, podemos reportar que nuestro trabajo es pionero, por lo que sostenemos que los resultados obtenidos aparentemente no están reportados.

Nuestro enfoque en la solución de la ecuación de Schrödinger nos permitió obtener las energías del estado base, y la de dos estados excitados. Todas ellas tienden a valores muy grandes conforme la molécula está más confinada. La energía del ión libre en su estado base es de -2.8224 Hartree, con una distancia de equilibrio entre los núcleos de 0.5146 a.u. Asimismo, se encontró un valor de 5.4×10^{-6} Hartree para la energía del estado base vibracional.

Para la polarizabilidad y la anisotropía de la molécula confinada en dos dimensiones, al considerar una magnitud variable de la elipse confinante. Se encontró que conforme la elipse confinante es mas grande, la polarizabilidad y la anisotropía tienden a un valor fijo, de 0.485 y de 0.516, respectivamente.

5. Perspectivas.

En el desarrollo de este trabajo surgieron muchas inquietudes de interés que pienso explorar en el futuro.

Sería interesante estudiar experimentalmente el uso de los dobles pozos cuánticos parabólicos asimétricos, para verificar con ello el comportamiento de la dependencia de la posición, de la masa efectiva del electrón y de la concentración del semiconductor.

Respecto al confinamiento del ion molecular sería interesante el estudiar desde el punto de vista relativista el comportamiento del sistema, para ver como se podría producir un efecto de fusión de los núcleos conforme el confinamiento se hace mas fuerte.

Ahora, todo el estudio de la molécula fue hecho bajo la consideración de Born – Oppenheimer, sería interesante hacer los cálculos considerando el movimiento de los nucleos.

6. Bibliografía.

1. M. E. Molinar Tavares, Tesis para obtener el grado de Maestro en Ciencias (Física), DIFUS (2002).
2. M. A. Cervantes, A. A. Lipovka y M. Molinar Tavares, *Opt. Comm.*, 198, 101 – 105 (2001).
3. O. Gauthier-Lafaye, P. Boucaud, F. H. Julien, S. Sauvage, S. Cabaret y J. - M. Lourtioz, *Appl. Phys. Lett.*, 71, 25, 3619 - 3621 (1997).
4. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley.
5. Sameer Shah, M. Thirumavalavan, Ranjay Laha, A. T. Kalghatgi y S. B. Krupanidhi, *International Workshop on Quantum Well Infrared Photodetectors*, Sri Lanka (June 18, 2006).
6. G. Sun, J. B. Khurgin, L. Friedman y R. A. Soref, *J. Opt. Soc. Am. B*, 15, 2, 648 - 651 (1998).
7. J. B. Khurgin G. Sun, L. Friedman y R. A. Soref, *J. Appl. Phys.*, 78, 12, 7898 - 7400 (1995).
8. I. Lyubomirski y Q. Hu, *J. Appl. Phys. Lett.*, 73, 3, 300 - 302 (1998).
9. D. Ahn, T. – K. Yoo, E. Mendez y S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.*, 70, 10, 5246 - 5253 (1991).
10. P. Kinsler, P. Harrison y R. W. Kelsall, *J. of Appl. Phys.*, 85, 1, 23 - 28 (1999).
11. L. Zhang y H. – J. Xie, *Phys. Rev. B*, 68, 1, 235315 (2003).
12. L. Zhang, *Superlattices and Microstructures*, 37, 261 - 272 (2005).
13. B. Chen, K. – X. Guo, R. – Z. Wang, Y. – B. Zheng y B. Li, *Chinese J. of Phys.*, 47, 3, 326 - 335 (2009).
14. I. Marín – Enríquez, G. Campoy – Güereña, J. L. Marín – Flores y R. Riera – Aroche, *J. of Comput. and Theor. Nanosci.*, 4, 1, (2007).
15. A. Sanz – Hervás. S. Cho, A. Majerfeld y B. W. Kim, *Appl. Phys. Lett*, 76, 21, 3073 – 3075, (2000).
16. C. Mailhot y D. L. Smith, *Phys. Rev. B*, 35, 3, 1242 – 1259, (1987).
17. M. E. Molinar – Tabares y G. Campoy – Güereña, *J. of Comput. and Theor. Nanosci.*, 7, 11, 2308 - 2313 (2010).

18. H. C. Urey, *lecture before the Academy, Proc. N. A. S.*, (April 27, 1925).
19. O. Burrau, *Det. Kgl. Danske Videnskabernes Selskab, Matematisk-fysike Meddelesier*, VII, 14 (1927).
20. G. Jaffe, *Z. Physik*, 87, 535 – 544 (1934).
21. E. Ley - Koo y S. A. Cruz, *J. Chem. Phys.*, 74 (8), 4603 - 4610 (1981).
22. J. Gorecki y W. Byers Brown, *J. Chem. Phys.*, 89, 4, 2138 - 2148 (1988).
23. O. Burrau, *Det. Kgl. Danske Videnskabernes Selskab, Matematisk-fysike Meddelesier*, VII, 14 (1927).
24. N. Rosen, *Phys. Rev.* 38, 2099 – 2114 (1931).
25. C. A. Coulson y P. D. Robinson, *Proc. Phys. Soc. (London)*, 71, 815 - 827 (1958).
26. W. Kolos y C. C. Roothaan, *Rev. of Mod. Phys.*, 32, 2, 219 - 232 (1960).
27. M. Geller, A. A. Frost y P. G. Lykos, *J. of Chem. Phys.*, 36, 10, 2693 – 2698 (1962).
28. H. Sambe, *J. of Chem. Phys.*, 42, 5, 1732 – 1738 (1965).
29. R. E. Moss, *Phys. Rev. A*, 58, 6, 4447 - 4448 (1998).
30. H. Li, J. Wu, B. L. Zhou, J. M. Zhu y Z. C. Yan, *Phys. Rev. A*, 75, 1, 012504-1 – 012504-6 (2007).
31. J. Shertzer y C. H. Greene, *Phys. Rev. A*, 58, 2, 1082 - 1086 (1998).
32. J. G. Kirkwood, *J. of Chem. Phys.*, 4, 592 – 601 (1936).
33. M. Vincke y D. Baye, *J. Phys. B*, [27], 167 - 176 (1985).
34. A. K. Bhatia y R. J. Drachman, *Phys. Rev. A*, 59, 1, 205 - 208 (1999).
35. J. M. Taylor, A. Dalgarno y J. F. Babb, *Phys. Rev. A*, 60, 4, 2630 - 2632 (1999).
36. J. M. Taylor, Z. C. Yan, A. Dalgarno y J. F. Babb, *Mol. Phys.*, 97, 1 - 2, 25 - 33 (1999).
37. Z. C. Yan, J. Y. Zhang e Y. Li, *Phys. Rev. A*, 67, 6, 062504-1 – 062504-6 (2003).
38. H. Li, J. Wu, B. L. Zhou, J. M. Zhu y Z. C. Yan, *Phys. Rev. A*, 75, 1, 012504-1 – 012504-6 (2007).
39. V. I. Korobov, *Phys. Rev. A*, 63, 4, 044501-1 – 044501-3 (2001).

40. P. L. Jacobson, R. A. Komara, W. G. Sturru y S. R. Lundeen, Phys. Rev. A, 62, 1, 012509-1 – 012509-12 (2000).
41. B. Midya y B. Roy, Phys. Lett. A, 373, 45, 4117 - 1422 (2009).
42. J. J. Peña, G. Ovando, J. Morales, J. García – Ravelo y C. Pacheco – García, Int. J. Quantum Chem., 109, 15, 3039 - 3045 (2007).
43. L. Dekar, L. Chetouani y T. F. Hammann, J. Math. Phys., 39, 5, 2551 - 2563 (1998).
44. O. von Roos, Phys. Rev. B, 27, 12, 7547 - 7552 (1983).
45. R. A. Morrow y K. R. Brownstein, Phys. Rev. B, 30, 2, 678 - 680 (1984).
46. P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley.
47. G. Arfken, *Métodos Matemáticos para Físicos*, Editorial Diana México (1981).
48. G. Campoy y A. Palma, Int. J. of Quantum Chem., Symposium No. 20, 33, (1986).
49. R. LeSar y D. R. Herschbach, J. Phys. Chem., 85, 19, 2798 – 2804 (1981).
50. R. LeSar y D. R. Herschbach, J. Phys. Chem., 87, 25, 5202 - 5206 (1983).
51. Francis Scheid, *Theory and Problems of Numerical Analysis*, Schaum's Outline Series, McGraw – Hill Book Company, 1968.

Application of the Double Parabolic Quantum Well in a Laser

Martín E. Molinar-Tabares* and Germán Campoy-Güereña

Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088, 83190 Hermosillo, Son. México

We propose an alternative method for the development of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ semiconductor laser diodes. The emission of this device is based on the behavior of the electrons inside of a system where the deposition with variable concentration of semiconductors creates a structure of two asymmetrical parabolic potential wells. Considering a position-dependent electron effective mass, we solve the Schrödinger equation to calculate the ground state energy, first and second excited state energies and the emission frequency of the laser as well as the relevant factor for the gain. These results are compared with values found in the literature for systems that work with rectangular potential wells. Forming structures or chains consisting of double parabolic potential wells separated by different given distances, the rise of subbands is observed. Our study has been performed considering different parabolic potential wells and a variety of separation distances between the double potential wells on the chains.

Keywords: Asymmetrical Parabolic Potential Wells, Position-Dependent Electron Effective Mass, Relevant Factor for Gain.

1. INTRODUCTION

The use of quantum potential wells generated on semiconductors, has allowed the development of laser diodes. Properties of the lasers as the gain and the efficiency are described in scientific literature,^{1–8} where many kinds of potential wells are studied. The laser emission requires that a potential difference in the crystal be established. The potential well is implemented by depositing semiconductors like $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, on a substrate, and the width and depth of the well are achieved according to the kind of semiconductor and the width of its layer on the substrate. So, when the electron is adequately stimulated by an external radiation in the semiconductor, a transition from its ground state to the second excited state is produced, and after that the emission of the laser is produced by the electron decay from the second to the first excited state.

The performance of the quantum well depends on the crystal orientation. The deposition of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on a substrate begins with the design of a pattern on a plane substrate (lithography), followed by a wet chemical etching process, that is made for to reveal crystalline details of the original substrate. After, on the pattern, a growth by molecular beam epitaxy with $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ or chemical vapor creates deposition^{9,10} and finally the structure. The

growth in certain directions will give specific properties to the structure, for example, for a quantum well grown in the [100] direction a smaller carrier density would be required for achieving population inversion at the lasing threshold, contrary to what would happen for a grown in the [111] direction.

Essentially, in the semiconductor laser diode appears a system of quantum potential wells, such that this structure can be considered as a one dimensional crystal. The frequency of the radiation emitted, the gain and efficiency of the laser, can be calibrated by modifying the characteristics of the potential wells. In this paper we calculate the gain for a laser constructed with a series of asymmetrical parabolic quantum well pairs (QWP). Working with a chain of three and then of five QWP's separated by the same distances, we observe the appearance of energy subbands. All of this is done by considering a position-dependent electron effective mass m^* which depends on its position inside the semiconductor in an analogous way as the relative concentration of its constituent elements.

Gauthier-Lafaye et al.¹ investigated the gain for a structure formed with a QWP generated by deposition of GaAs separated by $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$. This structure gives rise to a laser emission in the mid-infrared spectral region, for temperatures of 30, 80, 90 and 100 Kelvin and for each of these temperatures, they analyzed the infrared emission power versus the incident pump power, finding that

*Author to whom correspondence should be addressed.

the output power exhibits a threshold behavior which is characteristic of the lasing process; this threshold occurs around 10 kW for 30 K and around 19 kW for 100 K.

Sun et al.² studied theoretically a tunable intersubband Raman laser in multiple quantum wells. The emission is generated by a structure of three energy levels in a GaAs-Al_xGa_{1-x}As QWP, and this structure is optimized for a maximum Raman Gain. This proposed laser has several advantages over the conventional stimulated Raman lasers made of bulk semiconductors, as for example that it allows the independent control of laser states and the tuning range is controlled by the design of the quantum wells. A comparative analysis between optically pumped intersubband lasers and intersubband Raman Oscillators is described in an article of the same authors.³

A laser emission where four levels of asymmetric QWP's are involved, is reported by Kinsler et al.⁴ Their laser works with infrared wavelength, in four energy levels of GaAs-Al_xGa_{1-x}As asymmetric stepped quantum wells. This device has an advantage over the three levels quantum wells, since it gives population inversions at room temperatures. Electrons are excited from their ground state into the highest subband, with an optical pumping of 10.6 μm CO₂ laser.

Zhang and Xie⁵ investigated the effects of the electric field, on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells, generated by the deposition of GaAs and Al_xGa_{1-x}As. Using the density matrix approach and an iterative method, they made calculations for the second-harmonic generation susceptibility tensor. The energy of the electron and the wave functions, for different electric field strengths, are found for each kind of potential well. They show how the electric field causes a slight shift to the wave functions for the electron inside the material. In other work,⁶ Zhang study the linear and nonlinear intersubband refractive index changes, in a semiparabolic quantum well with an applied electric field. The semiconductor studied is the GaAs. His numerical calculations show how the changes in its refractive index depend on the incident optical intensity, the frequencies of the confined potential and the strength of the system. In a similar work, where a pair of asymmetric rectangular potential wells is considered, Chen et al.⁷ show how the linear and the third order nonlinear changes in the refractive index are obtained using the density matrix method and an iterative approach; the wells are realized with GaAs and Al_xGa_{1-x}As deposition. Their results show how the structure parameter can have a big effect on the value of the refractive index as the barrier width separating the wells is varied.

Marín-Enriquez et al.⁸ studied the confinement of an electron inside a pair of asymmetric parabolic quantum wells. In this work, a deposition of Al_xGa_{1-x}As is studied. The effective mass of the electron is considered with a constant value, calculated as the average of its value in

the extreme cases $x = 0$ and $x = 0.35$. The energies of the three lower states are obtained and used to determine the values of the relevant factor in the definition of the gain, for different widths of the wells.

Most of the works on the use of potential wells for the fabrication of laser diodes, consider a constant value for the effective mass of the electron. Instead of this, we use the actual effective mass, which depends on the position according to the concentration of each of the component elements in the deposition of semiconductor layers on the substrate.

In Section 2 we describe how to generate the potentials, and the form in which the effective mass varies with the position of the electron along the growing axis of the crystal. Once the potential and the effective mass are defined, the Schrödinger equation is solved, which is the subject of Section 3. In Section 4 we describe the gain, which is a quantity that characterizes the performance of a laser diode; it takes into account the balance between the efficiency of the optical pumping, the stimulated intersubband emission and the losses due to the free carrier energy absorption. The gain has a relevant factor which is proportional to $|z_{13}|^2|z_{23}|^2|E_3 - E_2|$. In Section 5 the structure formed by three and five asymmetrical parabolic potential well pairs is analyzed, and we observe the appearance of subbands and how the energy levels change when the separation between the well pairs varies. Finally, the Section 6 contains the conclusions.

2. THE DOUBLE PARABOLIC QUANTUM WELL

As noted in the introduction, the operation of the semiconductor laser device is linked to the geometry of the quantum wells. We are going to consider, as it was indicated on the Introduction, that we have a one dimensional structure where there are a series of asymmetrical parabolic quantum wells pairs, separated by a distance D_{sep} , as is shown in the figure:

Now, we analyze a portion of this structure, where an asymmetrical parabolic quantum well pair is shown. Inside this structure we have regions with constant potential (300 meV) and regions where a parabolic potential has been traced, all of this according to the following expressions:

$$V(z) = V_0 \begin{cases} f(z) & b < z \leq c \\ g(z) & c \leq z \leq d \\ 1 & z \leq b, d \leq z \leq f \end{cases} \quad (1)$$

where

$$f(z) = \frac{(z - (c + a)/2)^2}{((c - a)/2)^2}$$

$$g(z) = \frac{(z - (d + c)/2)^2}{((d - c)/2)^2}$$

and V_0 is 300 meV. The region $[0, f]$ would be enclosed by walls at “infinite” potential because this structure is representative of the sequence that constitutes the actual crystal, which contains several hundreds of these elements. All of this would be done with the deposition of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on the substrate, with different values of x , in order to achieve the value of 300 meV. Figure 1 shows the potential $V(z)$ bounded by infinite potential walls, for the values: $a = 9.40$ nm, $b = 11.0$ nm ($D_{\text{sep}}/2$), $c = 25.0$ nm, $d = 31.0$ nm and $f = 42.0$ nm. The “infinite walls” would be located at $z = 0$ and $z = 42.0$ nm.

We know that if we take the value of 0 for the potential energy when x equals 0, then for a concentration x equal to 0.35, we would have the semiconductor $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ and this material would give rise to an energy potential difference of 300 meV. The potential required for our model is achieved with a deposition of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on the substrate, varying the concentration x as the crystal is growing in the z direction, according to:

$$x(z) = \begin{cases} x_0 f(z) & b < z \leq c \\ x_0 g(z) & c \leq z \leq d \\ 0 & z \leq b, d \leq z \leq f \end{cases} \quad (2)$$

where x_0 is 0.35. As the asymmetrical QWP is achieved, the effective mass of the electron must vary accordingly, so in the interval $[0, f]$ it varies as

$$m^*(z) = \begin{cases} m_1 + (m_2 - m_1)f(z) & b < z \leq c \\ m_1 + (m_2 - m_1)g(z) & c \leq z \leq d \\ m_2 & z \leq b, d \leq z \leq f \end{cases} \quad (3)$$

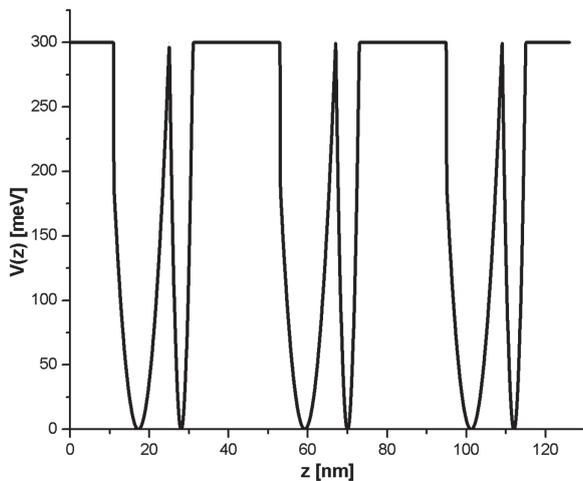


Fig. 1. A series of asymmetrical wells pairs in a one dimensional structure.

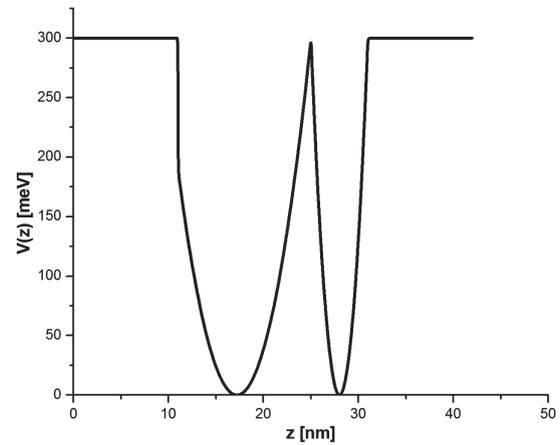


Fig. 2. The potential $V(z)$, bounded by infinite potential walls at $z = 0$ and $z = 42.0$ nm.

With $m_1 = 0.0665 m_e$ and $m_2 = 0.0960 m_e$, where m_e is the electron mass.¹¹ There is a relation between effective mass and concentration x ,¹² this is given by

$$m^*(x) = m_1 + \frac{m_2 - m_1}{x_0} x$$

which can be deduced from Eqs. (2) and (3)

3. SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION

The variation on the effective mass of the electron lead us to solve a form of the Schrödinger equation where the kinetic energy operator takes into account the dependence of the effective mass on the position so, to fulfill the requisite that the Hamiltonian operator be Hermitian, the Schrödinger equation have to take the form¹³

$$H\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (4)$$

Systems with position-dependent mass are important in the description of the features of many microstructures. The Schrödinger equation for this cases has analytical solutions for particular forms of $m(z)$ and $V(z)$. The method is described in various works^{14,17} and basically consists in the transformation of the Schrödinger equation into a form where the mass appears as a constant and the system is described by a new potential function.

In order to numerically solve for the eigenvalues and eigenfunctions of Eq. (4), we use a basis of N orthonormalized infinite square well wave functions $\psi(z)$ that obey the boundary conditions of vanishing at $z = 0$ and $z = f$:

$$\Psi(z) = \sum_{n=0}^N a_n \psi_n(z) = \left(\frac{2}{f}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^N a_n \sin\left(\frac{n\pi z}{f}\right) \quad (5)$$

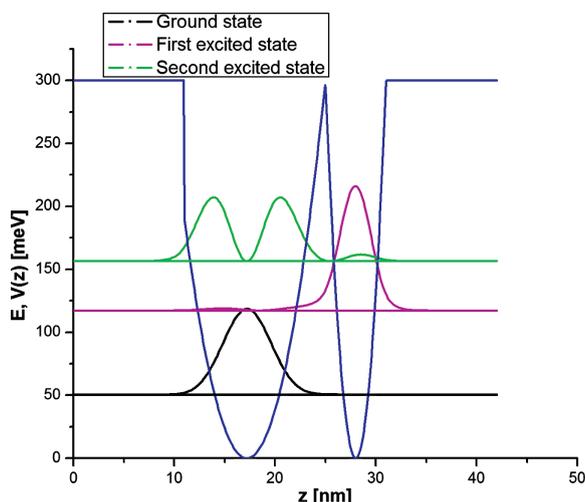


Fig. 3. Potential $V(z)$, bounded by infinite potential walls at $z = 0$ and $z = 42.0$ nm. Probability density and energy level for ground state and the two first excited states.

and we build the elements H_{mn} of the matrix H for the Hamiltonian, verifying that indeed the matrix associated to the kinetic energy operator is hermitian. As we wanted to get the most precise results we chose $N = 500$, so this matrix has 500 eigenvalues of which only the smaller three, for which the higher accuracy is achieved, are of interest to our calculations.

We show in Figure 3 the probability density for these states. The potential energy and the walls of infinite potential, at $z = 0$ and $z = 42.0$ nm are also illustrated.

When an excitation of the adequate magnitude occurs, the electron is promoted from the ground state (E_1) to the second excited one (E_3). After that, the electron decays from the second excited state to the first excited state (E_2), and it's here where the emission of the laser occurs. According to the form of the potential and the deposition of GaAs, we will have different values of the emission frequency $\omega = (E_3 - E_2)/\hbar$, depending on the values of a , b , c , d and f defining the well's geometry. Lyubomirsky and Hu¹⁸ compared the emission of semiconductor lasers based on three levels and four levels of electron energy schemes, using series of two and three consecutive square potential wells, respectively. They found that despite the complexity of the four levels scheme, we can obtain from this kind of systems better values for the gain and emission frequency.

4. THE GAIN

For the emission process in a laser, there is a quantity that measures the ratio gain/loss for the system. For the case of two asymmetrical potential wells, enveloped by infinite potential walls, this ratio known as the gain, contains as its main constituent the factor¹

$$F = |z_{13}|^2 |z_{23}|^2 |E_2 - E_3| \quad (6)$$

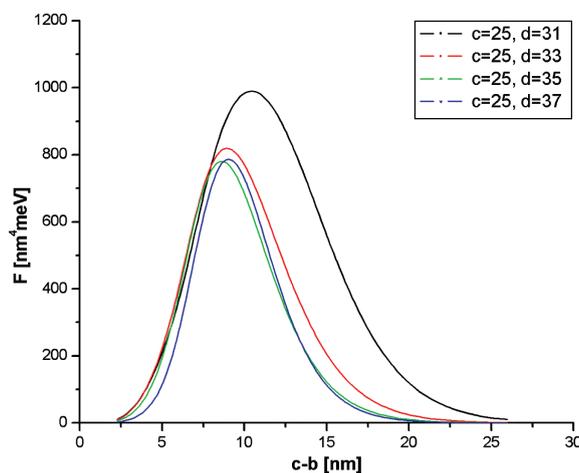


Fig. 4. Factor F (main factor of the gain) for different values of b and c .

where $z_{ij} = \langle i|z|j \rangle$ with $i, j = 1, 2, 3$. If we scale the values of a, b, c, d and f , in such a way that all of the linear segments of each QWP divided by $(c - b)$ retain its value, we can calculate the variation of the factor F for a family of similar QWP's with respect to the width of the first parabolic segment ($c - b$); this is shown in Figure 4, where we show the factor F for different values of f , which equals the total length of each QWP including the separation with its neighbor.

At the design of a laser diode device, it is always desirable to obtain a maximum gain. In a laser diode, the gain may change due to factors as the height of the potential or the width of the wells.¹⁹ Also, the structure of the bands can be shaped.

5. STRUCTURES OF THREE AND FIVE DOUBLE PARABOLIC QUANTUM WELLS

Now let us suppose that we have a structure or chain formed by three or more QWP's, considering that there exist the

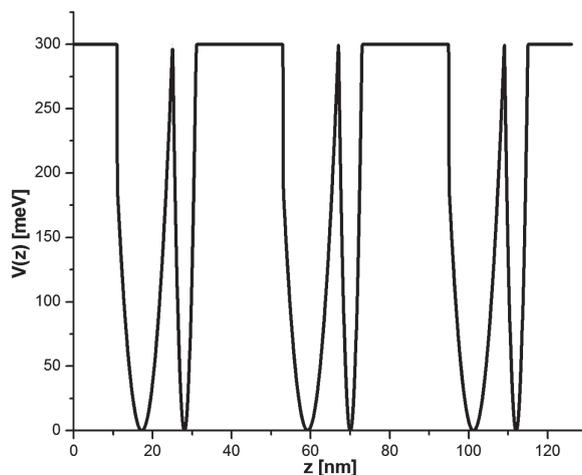


Fig. 5. The potential $V(z)$ for three QWP's, bounded by infinite potential walls at $z = 0$ and $z = 126.0$ nm.

Table I. Energies for ground state, and the two first excited states.

State	Energy (meV)
$n = 1$ (ground state)	50.527710
$n = 2$	117.369463
$n = 3$	156.513093

Table II. Eigenvalues for three potential pairs closed by infinite potential walls.

State	Energy (meV)
$n = 1$ (ground state)	50.527954
$n = 2$	50.538993
$n = 3$	50.539036
$n = 4$	117.284667
$n = 5$	117.285883
$n = 6$	117.371527
$n = 7$	156.507818
$n = 8$	156.574771
$n = 9$	156.581485

Table III. Eigenvalues for five potential pairs closed by infinite potential walls.

State	Energy (meV)
$n = 1$ (ground state)	50.5282320
$n = 2$	50.5391844
$n = 3$	50.5391859
$n = 4$	50.5391862
$n = 5$	50.5392262
$n = 6$	117.2857216
$n = 7$	117.2869194
$n = 8$	117.2869217
$n = 9$	117.2869231
$n = 10$	117.3718060
$n = 11$	156.5091574
$n = 12$	156.5756547
$n = 13$	156.5756694
$n = 14$	156.5756806
$n = 15$	156.5823269

same distance Dsep of separation between each two of them. If we consider that we have three such pairs and Dsep is equal to 22.0 nm, solving the Schrödinger equation, with the values that we have used for a, b, c, d and f , we'll have a potential energy as it's shown in Figure 5.

The solution of the Schrödinger equation, with a position depending effective mass, gives us the eigenvalues shown in Table II:

We note in Table II, how a quasi-degeneration appears when we form a chain with two or more structures of QWP's. In Table IV we can also observe the rising of subbands for an arrangement of 5 QWP's.

In Figure 6 is shown for a sequence of 3 QWP's, the probability density for the ground state and its two quasi-degenerated states. As we can see, when the electron is in the ground state, the probability density must be a Gaussian centered on the symmetry axis of the wider parabola.

Table IV. Eigenvalues for five potential pairs closed by infinite potential walls, separated by different Dsep.

State	Energy (meV)		
	Dsep = 22.0 nm	Dsep = 10.0 nm	Dsep = 5.0 nm
First subband			
$n = 1$	50.5282320	50.5228795	50.5172258
$n = 2$	50.5391844	50.5269867	50.5199986
$n = 3$	50.5391859	50.5270458	50.5234253
$n = 4$	50.5391862	50.5271122	50.5261988
$n = 5$	50.5392262	50.5271602	50.5658317
$n = 6$	117.2857216	117.3740249	117.2923978
Second subband			
$n = 7$	117.2869194	117.3763484	117.3634928
$n = 8$	117.2869217	117.3793240	117.4520374
$n = 9$	117.2869231	117.3818105	117.5242189
$n = 10$	117.3718060	117.4361165	118.0282928
$n = 11$	156.5091574	156.4920306	156.1584231
Third subband			
$n = 12$	156.5756547	156.5009798	156.3677072
$n = 13$	156.5756694	156.5123226	156.6272491
$n = 14$	156.5756806	156.5223317	156.8379533
$n = 15$	156.5823269	156.5283717	157.2159270

We conclude this analysis with the study of a chain formed by five QWP's. For the used values of a, b, c, d and f , and a Dsep of 22.0 nm, the solution of the Schrödinger Eq. (4), gives us the eigenvalues shown in Table III.

The graphics for the probability density exhibit now a behavior that can be explained in a similar way as we did for the previous cases. We have studied the changes on these energies for several values of the separation between any two QWP's (22.0 nm, 10.0 nm, 5.0 nm and 1×10^{-15} nm); the energies are shown in the Table IV.

If Dsep is very small or tends to zero, we could suppose that we would have a structure formed with 5 consecutive

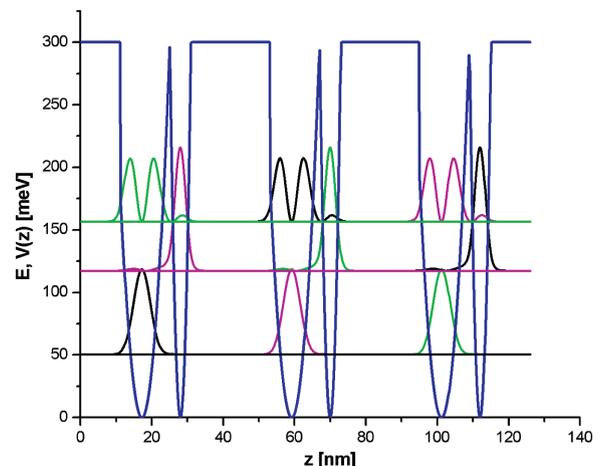


Fig. 6. Potential $V(z)$, bounded by infinite potential walls at $z = 0$ and $z = 126.0$ nm. Probability density and energy level for ground state and the two first excited states are also illustrated.

QWP's and for this case the subbands would tend to disappear. This effect can be appreciated in Table IV.

We can still add more parabolic QWP's or work with different separation between them, but as we didn't find much difference between the arrays of three and five pairs, we can infer that if we do that, there will not be any relevant modification of the energy spectrum.

6. CONCLUSIONS

We may say that for a semiconductor laser realized according to the geometry that we are proposing, it is possible to obtain almost any lasing frequency in the mid infrared region. With respect to the value of the gain, it is higher for an asymmetrical parabolic QWP than that resulting from a design based on square potential wells. Also it can be easily optimized by repeating the calculations for different values of the widths of the parabolas and barriers which appear in its definition. Figure 4 shows how the factor representative of the gain reaches a greater value when the parabolas have a similar width (these widths are the segment $c - b$ for one of the parabolas, and the segment $d - c$ for the other).

As was pointed out before, there is a relationship between the effective mass and the potential on the electron. We have handled the concept of an effective mass that depends on the position of the electron inside the semiconductor. This potential varies according to a parabolic shape, so, the effective mass must have a similar behavior. This point is important because if the potential is created by different concentrations of Al, As and Ga, the effective mass must be a consequence of this.

An important aspect of this kind of structure is that it offers the possibility of choosing specific values for a , b , c , d and f , in order to generate a certain desired emission frequency of the laser diode.

When some structures of double parabolic quantum wells, separated a certain given distance are coupled, the

rise of energy subbands can be observed. This subbands change their width when the separation distance is modified. If someone considers two, three, four, five or more pairs of wells, the study is closer to the real behavior of the crystal and given the energy values observed in the subbands, one can conclude that there will be a coherence in the emission. The value of D_{sep} can be chosen according to the needs that the laser is going to confront.

References

1. O. Gauthier-Lafaye, P. Boucaud, F. H. Julien, S. Sauvage, S. Cabaret, J. M. Lourtioz, V. Thierry-Mieg, and R. Planel, *Appl. Phys. Lett.* 71, 3649 (1997).
2. G. Sun, J. B. Khurgin, L. Friedman, and R. A. Soref, *J. Opt. Soc. Am. B-Optical Physics* 15 (1998).
3. J. B. Khurgin, G. Sun, L. R. Friedman, and R. A. Soref, *J. Appl. Phys.* 78 (1995).
4. P. Kinsler, P. Harrison, and R. W. Kensall, *J. Appl. Phys.* 85 (1999).
5. L. Zhang and H.-J. Xie, *Phys. Rev. B* 68, 235315 (2003).
6. L. Zhang, *Superlattices Microstruct.* 37, 261 (2005).
7. B. Chen, K.-X. Guo, R.-Z. Wang, Y.-B. Zheng, and B. Li, *Chinese J. Phys.* 47 (2009).
8. I. Marín-Enríquez, G. Campoy-Güereña, J. L. Marín-Flores, and R. Riera-Aroche, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 4, 1 (2007).
9. A. Sanz-Hervás, S. Cho, A. Majerfeld, and B. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000).
10. C. Mailhiot and D. L. Smith, *Phys. Rev. B* 35 (1987).
11. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley.
12. P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley.
13. L. Dekar, L. Chetouani, and T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* 39 (1998).
14. J. J. Peña, G. Ovando, J. Morales, J. García-Ravelo, and C. Pacheco-García, *Int. J. Quantum Chem.* 107, 3039 (2007).
15. J. J. Peña, G. Ovando, J. Morales, J. García-Ravelo, and C. Pacheco-García, *Int. J. Quantum Chem.* 108, 2906 (2008).
16. J. Morales, G. Ovando, J. J. Peña, and G. A. De Parga, *Int. J. Quantum Chem.* 109, 3171 (2009).
17. B. Midya and B. Roy, *Phys. Lett. A* 373, 4417 (2009).
18. I. Lyubomirsky and Q. Hu, *Appl. Phys. Lett.* 73 (1998).
19. D. Ahn, T.-K. Yoo, E. Mendez, and S. L. Chuang, *J. Appl. Phys.* 70 (1991).

Received: 21 January 2010. Accepted: 6 March 2010.

Date: Tue, 12 Jul 2011 09:11:05 +0200

From: "Schommers, Wolfram" <wolfram.schommers@kit.edu>

To: "'molinar@posgrado.cifus.uson.mx'"
molinar@posgrado.cifus.uson.mx

Subject: Journal of Computational and Theoretical Nanoscience (CTN)
Nachricht

Dear ProfessorMartín E. Molinar-Tabares,

this is to acknowledge receipt of the article

Hydrogen molecular ion confined by a prolate spheroid

for publication in theJournal of Computational and Theoretical Nanoscience (CTN).

The paper has been refereed by two of our experts; the judges are positive.

The article is herewith accepted for publication in CTN.

There are some minor formal points which have to be changed and added, respectively:

- we need your signedCopyright Transfer Agreement. Please fax the attached form directly to W. Schommers (+49 7247 82 4972),

or scan the signed document and send it by E-mail to the Editor-in-Chief.

Please, let us have the material as soon as possible.

Best regards,

Wolfram Schommers

Editor-in-Chief

Journal of Computational and Theoretical Nanoscience

Prof. Dr. Wolfram Schommers

Forschungszentrum Karlsruhe,

Institute for Scientific Computing

D-76021 Karlsruhe, GERMANY

Phone: +49-7247-82-2432

Fax: +49-7247-82-4972

E-mail: wolfram.schommers@kit.edu

and

wolfram.schommers@iwr.fzk.de