MOMENTO DIPOLAR DINÁMICO Y TUNELAMIENTO EN UN POZO CUÁNTICO DOBLE ASIMÉTRICO

Jaime Bohórquez-Ballén

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
BOGOTÁ, D.C.

MOMENTO DIPOLAR DINÁMICO Y TUNELAMIENTO EN UN POZO CUÁNTICO DOBLE ASIMÉTRICO

Jaime Bohórquez-Ballén

Trabajo presentado al comité de postgrado del Departamento de Física de la Universidad de los Andes como un requisito para el grado de Maestría en Física.

Director
Angela Camacho, Dr. rer nat

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
BOGOTÁ, D.C.

Índice general

Introducción **6**

1. Pozo Cuántico Doble Asimétrico **8**
1.1. Hibridación de estados de pozos aislados 9
1.2. Pozo doble asimétrico de paredes de potencial infinitas 13
1.3. Pozo cuántico doble asimétrico con paredes de potencial finitas 16
1.4. Conclusiones del capítulo 17

2. Momento dipolar dinámico **21**
2.1. Influencia geométrica 21
2.2. Oscilaciones coherentes 25
2.3. Conclusiones del capítulo 29

3. Efectos geométricos en un pozo doble asimétrico **31**
3.1. Energías propias 31
3.2. Momentos de dipolo eléctrico 34
3.3. Factores de forma electrón-bosón y tasas de scattering electrón-fonón LO 39
3.3.1. Interacción electrón- fonón LO 40
3.3.2. Factores de forma 45
3.3.3. Tasas de scattering 47
3.4. Conclusiones del capítulo 48

4. Conclusiones **51**

A-Funciones de onda del pozo asimétrico doble **53**

B-Artículos **54**

Índice de figuras

1.1. **Esquema del sistema de pozo doble cuántico asimétrico** . . . 8
1.2. **Funciones de onda del primer estado excitado de un pozo de** 100**Å de ancho y del estado base de un pozo de** 50**Å, ambos con barreras de potencial simétricas de** $90meV$**.** 13
1.3. **Estados hibridizados provenientes de la combinación de las funciones mostradas en la Figura 1.2.** 13
1.4. **Función de onda para el estado base de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å** 16
1.5. **Función de onda para el primer estado excitado de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å** 16
1.6. **Función de onda para el segundo estado excitado de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å** 17
1.7. **Funciones de onda para el estado base de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.** 18
1.8. **Funciones de onda para el primer estado excitado de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.** 18
1.9. **Funciones de onda para el segundo estado excitado de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.** 19

1.10. **Comportamiento de la energía del estado base al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.** 19
1.11. **Comportamiento de la energía del primer estado excitado al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.** 19
1.12. **Comportamiento de la energía del primer estado excitado al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.** 20

2.1. **Probabilidad de encontrar al electrón en el pozo ancho (curva continua) y probabilidad de encontrar al electrón en el pozo delgado como función del tiempo cuando la barrrera mide** 60**Å** 24
2.2. **Probabilidad de encontrar al electrón en el pozo ancho (curva continua) y probabilidad de encontrar al electrón en el pozo delgado como función del tiempo cuando la barrera mide** 80**Å** 25
2.3. **Tiempo de tunelamiento como función del tamaño de la barrera de potencial. Pozo ancho** 140**Å, pozo delgado** 60**Å, altura de barrera** $90meV$ 25
2.4. **Evolución temporal de las poblaciones de un sistema de tres niveles al aplicar un campo eléctrico ultra-rápido. La curva azul representa la población del estado base del sistema, curvas negra y roja las poblaciones de los estados excitados.** . . 26
2.5. **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación del campo eléctrico ultra-rápido.** 27
2.6. **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación de dos campo eléctrico ultra-rápidos en fase** 28
2.7. **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación de dos campo eléctrico ultra-rápidos fuera de fase en** πrad . . 28
2.8. **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación del campo eléctrico ultra-rápido, teniendo en cuenta términos de decaimiento.** 29

3.1. **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función del ancho relativo del pozo delgado.** 32
3.2. **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función del ancho relativo de la barrera de potencial central.** 33
3.3. **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados cuando se varía el tamaño del pozo ancho.** 33

3.4. **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función de la altura de la barrera de potencial central.** 34
3.5. **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda como función del tamaño relativo del pozo delgado.** 35
3.6. **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda como función del tamaño relativo del pozo delgado.** . 36
3.7. **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda como función del tamaño relativo de la barrera de potencial.** 37
3.8. **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda como función del tamaño relativo de la barrera de potencial.** 37
3.9. **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda cuando se varía el tamaño del pozo ancho.** 38
3.10. **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda cuando se varía el tamaño del pozo ancho.** 38
3.11. **Momentos de dipolo eléctrico intrasub-banda como función de la altura de la barrera de potencial.** 39
3.12. **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda cuando se varía la altura de la barrera de potencial.** . 39
3.13. **Contribuciones al factor de forma $F_{0000}(q)$ para un pozo asimétrico con pozo ancho de 140Å barrera de 60Å y pozo delgado de 60Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. Curva verde: contribución del pozo ancho, curva azul: contribución de la barrera central, curva roja: contribución barrera izquierda, curva beige: contribución pozo delgado y curva negra: contribución barrera derecha.** 46
3.14. **Contribuciones al factor de forma $F_{1111}(q)$, para un pozo asimétrico con pozo ancho de 150Å y barrera de potencial de 75Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. (A)$d_R/d_L = 0{,}1$, (B)$d_R/d_L = 0{,}3$ y (C)$d_R/d_L = 0{,}5$. Se utiliza la misma convención de colores que en la figura (3.13).** 47
3.15. **Contribuciones al factor de forma $F_{2222}(q)$, para un pozo asimétrico con pozo ancho de 150Å y barrera de potencial de 75Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. (A)$d_R/d_L = 0{,}1$, (B)$d_R/d_L = 0{,}3$ y (C)$d_R/d_L = 0{,}5$. Se utiliza la misma convención de colores que en la figura (3.13)** 47
3.16. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el estado base, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).** . . 48

3.17. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el primer estado excitado, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).** 48
3.18. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el segundo estado excitado, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).** 49
3.19. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el estado base, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).** 49
3.20. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el primer estado excitado, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).** 50
3.21. **Tazas de scattering de emisión y absorción para el segundo estado excitado, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).** 50

Introducción

Las transiciones mas estudiadas en semiconductores son las transiciones interbandas , especialmente entre las bandas de valencia y conducción y los efectos resultantes de la interacción entre los electrones que pasan a la banda de conducción y los correspondientes huecos dejados en la banda de valencia separados por la energía de la conocida brecha típica de los semiconductores en el rango de 1 a 5 eV a frecuencias del ultravioleta al visible.
En este trabajo, el interés está en las transiciones intersub-banda, es decir, las subbandas de conducción en un pozo cuántico, lo que significa que cada una de las energías propias en el pozo en realidad consta de un gas bidimensional con electrones libres en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. Las energías de los pozos están en el rango de los meV y son interesantes para dispositivos que funcionen entre las micro-ondas y el infrarojo ofreciendo así la posibilidad de llenar el gap de los THz para las fuentes de luz a esas frecuencias.
Por otro lado, si el pozo cuántico es doble existe una barrera de potencial entre los pozos individuales que además permite el tunelamiento. Este efecto combinado con las transiciones intersub-bandas abre nuevas opciones de aplicaciones y a la vez nuevos caminos para estudiar efectos fundamentales que hasta ahora se están haciendo accesibles con el avance de las técnicas experimentales.
Un sistema muy sencillo que permite estudiar la interrelación entre el tunelamiento y transiciones intersub-banda es el pozo doble asimétrico. La interpretación de las transiciones intersub-bandas como un dipolo dinámico, juega un papel importante en procesos ultra-rápidos del orden de picosegundos. Un estudio sistemático del diseño geométrico sobre cada una de las magnitudes relevantes que definen el tunelamiento y transiciones intersub-banda puede abrir nuevos caminos para estudiar efectos cuánticos fundamentales como los detectados en estos sistemas experimentales [1, 2] y tiene que ver con el mecanismo de emisión de ondas coherentes y el proceso de la decoherencia.
Se presenta en este trabajo una introducción al concepto de tunelamiento dinámico, en un diseño de sistema de tres niveles basado en un pozo doble asimétrico, mostrando la interrelación entre dipolo dinámico y transiciones intersub-banda como fuente

de ondas electromagnéticas coherentes [3]. Luego se hace un estudio sistemático de la dependencia geométrica de cada una de las magnitudes físicas necesarias para calcular la interacción del sistema electrónico bidimensional con un sistema bosónico que puede ser un sistema de fotónico que estaría representado por el pulso de luz inicial que produce la emisión de ondas coherenteso el sistema fonónico del semiconductor. Se muestra que el diseño asimétrico brinda la oportunidad de sintonizar las diferencias de energía entre los tres niveles para diferentes aplicaciones en dispositivos [4, 5].
El reporte está dividido así: en el capítulo primero se estudia el sistema de pozo doble asimétrico desde tres modelos utilizados normalmente en la literatura, haciendo una comparación de los resultados obtenidos con cada uno. En el segundo capítulo se hace una introducción sobre el momento dipolar dinámico y sus aplicaciones en el doble pozo cuántico asimétrico como son el almacenamiento de carga y la emisión de ondas electromagnéticas coherentes. En el capítulo tres se estudia sistemáticamente la dependencia de la geometría de las energías propias, las funciones de onda y las componentes intra e inter-sub-banda del dipolo eléctrico. Se encuentra un anticruce entre las dos sub-bandas cuando la razón de las longitudes de los pozos es 1/3, el cual aunque se debe únicamente a la geometría, permite obtener un momento dipolar intersub-banda máximo en una situación de tunelamiento resonante.
En el siguiente capítulo se estudia la interacción entre el sistema electrónico bidimensional y un sistema bosónico tridimensional. En particular se usa un método de perturbaciones de muchos cuerpos [11] y se calcula el primer término de la corrección a la autoenergía electrónica debida a interacción electrón-fonón LO via interacción de Fröehlich, la cual es exacta en el límite de acoplamiento débil y se presentan resultados para el sistema de fonones longitudinales ópticos tridimensionales mostrando que en la geometría del anticruce, se tiene un mínimo de las tasas de scattering intrasub-banda que predice un efecto polarónico o de cuello de botella como el detectado en los puntos cuánticos [6] y que tendría efecto en las aplicaciones prácticas de este dispositivo.

Capítulo 1

Pozo Cuántico Doble Asimétrico

Un *pozo cuántico doble asimétrico* (asymmetric double quantum well-$aDQW$) es un dispositivo que consta de dos pozos cuánticos de alturas de potencial v_1, uno ancho de longitud d_L y otro delgado de longitud d_R separados por una barrera de potencial de altura v_2 y longitud w (ver figura 1.1). Este tipo de sistemas son importantes de estudiar ya que en ellos se puede crear una superposición coherente macroscópica de estados de sub-banda de conducción por la aplicación de campos electromagnéticos ultra-rápidos. En particular, el pozo asimétrico doble se modela como un sistema de tres niveles (todos en la banda de conducción) de tal forma que la aplicación del campo eléctrico ultra-rápido acople coherentemente los niveles excitados del sistema.

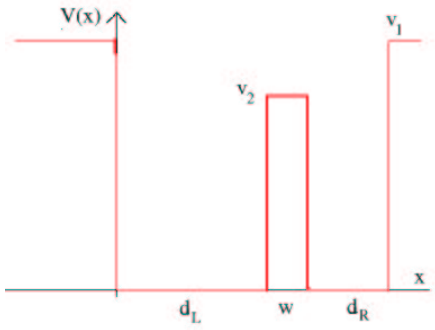


Figura 1.1: **Esquema del sistema de pozo doble cuántico asimétrico**

Se comparan los resultados obtenidos al solucionar el pozo asimétrico bajo tres aproximaciones utilizadas en la literatura. Dichas aproximaciones son:

- Hibridación de los estados de dos pozos cuánticos independientes.
- Pozo cuántico doble asimétrico de paredes de potencial infinitas.
- Pozo cuántico doble asimétrico de paredes de potencial finitas.

Los dos primeros modelos son muy utilizados al realizar cálculos con pozos asimétricos y el último es un modelo un poco mas realista.

1.1. Hibridación de estados de pozos aislados

Se hallan las funciones de onda del pozo doble cuántico asimétrico, como la superposición de funciones de onda de pozos cuánticos aislados con barreras de potencial finitas y diferentes entre si, tal como se hace en [3], pero en lugar de combinar estados base de ambos pozos, se combinan primer estado excitado del pozo izquierdo con estado base del pozo derecho. Las funciones y energías propias del pozo cuántico simple se hallan solucionando

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \tag{1.1}$$

para el potencial $V(x)$ de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} v_1 & : \quad x < 0 \\ 0 & : \quad 0 \leq x < d \\ v_2 & : \quad x \geq d \end{cases}$$

Donde d es el tamaño del pozo cuántico, v_1 y v_2 son los potenciales del pozo.
La ecuación (1.1), en este caso, tiene una solución de la forma:

$$\phi(x) = \begin{cases} A\, exp(k_1 x) & : \quad x < 0 \\ B\, Sin(kx) & : \quad 0 \leq x < d \\ C\, exp(-k_2 x) & : \quad x \geq d \end{cases}$$

con $k_1 = \sqrt{2m(v_1 - E)}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(v_2 - E)}/\hbar$ y $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, donde E es la enegía del electrón confinado en el pozo.
La función de onda debe ser continua en las interfases ($x = 0$ y $x = d$) así como su derivada. Aplicando estas condiciones de frontera se obtiene un sistema de ecuaciones para las incognitas A, B, C y D.

- Continuidad de función de onda en $x = 0$

$$A = C \tag{1.2}$$

- Continuidad de la derivada de la función de onda en $x = 0$

$$A\,k_1 = B\,k \tag{1.3}$$

- Continuidad de la función de onda en $x = d$

$$B\,Sin(kd) + C\,Cos(k\,d) = D\,\exp(-k_2\,d) \tag{1.4}$$

- Continuidad de la derivada de la función de onda en $x = d$

$$B\,k\,Cos(k\,d) - C\,k\,Sin(k\,d) = -D\,k_2\,\exp(-k_2\,d) \tag{1.5}$$

Una forma de construir la ecuación trascendental para las energías es formar la matriz de los coeficientes que acompañan a las incognitas A, B, C y D en las ecuaciones (1.2),(1.3),(1.4)y (1.5). Para que el sistema tenga solución, el determinante de esta matriz debe ser igual a cero.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ k_1 & -k & 0 & 0 \\ 0 & Sin(k\,d) & Cos(k\,d) & -\exp(-k_2\,d) \\ 0 & k\,Cos(k\,d) & -k\,Sin(k\,d) & k_2\,\exp(-k_3\,d) \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

El determinante de (1.6) es:

$$Det(\mathbf{X}) = \exp(-k_2 d)((k^2 - k_1 k_2)\,Sin(kd) - k(k_1 + k_2)Cos(kd)) \tag{1.7}$$

De donde la ecuación para las energías propias del sistema es:

$$Tan(kd) = \frac{k(k_1 + k_2)}{(k^2 - k_1 k_2)} \tag{1.8}$$

De las ecuaciones (1.2),(1.3),(1.4)y (1.5) se dejan los coeficientes B, C y D en términos del coeficiente A, de donde:

$$B = \frac{k_1}{k} A$$

$$C = A$$

$$D = g\,A$$

Con

$$g = \frac{\exp(k_2 d)}{k(1 - k_2)}(k_1(Sin(kd) + kCos(kd)) + k(Cos(kd) - kSin(kd)).$$

Aparte de las condiciones de continuidad para la función de onda y su derivada, tambien se debe tener en cuenta la normalización de la función de onda, esto es, $|\phi(x)|^2 = 1$. En este caso

$$\int_{-\infty}^{0} A^2 \exp(2k_1 x)\mathrm{d}x \; + \; \int_0^d |B\, Sin(kx) \; + C\, Cos(k\, x)|^2 \mathrm{d}x$$

$$+ \int_d^{\infty} D^2 \; \exp(-2k_2 x)\mathrm{d}x = 1$$

La primera integral de esta expresión da:

$$\int_{-\infty}^{0} A^2 exp(2k_1 x)\mathrm{d}x \; = \; \frac{A^2}{2k_1}$$

La segunda integral:

$$\int_0^d |B\, Cos(k\, x) + C\, Cos(k\, x)|^2 \mathrm{d}x \; =$$

$$\frac{2BC \; + \; 2(B^2 + C^2)k\, d \; - 2\, B\, C\, Cos(2kd) + (C^2 - B^2)Sin(2kd)}{4k}$$

Y la tercera:

$$\int_d^{\infty} D^2 \exp(-2k_2 x)\mathrm{d}x \; = \; \frac{D^2}{2k_2} \exp(-2k_2 d)$$

De la condición de normalización:
Y en términos de A:

$$A^2(\frac{1}{2k_1} + \frac{2\frac{k_1}{k} + 2(\frac{k_1^2}{k^2} + 1)kd - 2\frac{k_1}{k}\, Cos(2kd) + (1 - \frac{k_1^2}{k^2})Sin(2kd)}{4k}$$

$$+ \frac{g^2 \exp(-2k_2 d)}{2k_2}) = 1 \tag{1.9}$$

El procedimiento a seguir para encontrar las energías y las funciones de onda propias para el pozo sencillo es:

- Solucionar numéricamente la ecuación (1.8), lo que provee las energías propias del sistema.
- Reeplazando las energías propias halladas en la ecuación (1.9) se halla el valor del coeficiente A.
- Con A se hallan el resto de coeficientes (B, C y D) para contruir la función de onda.

Supongamos que se tiene un pozo asimétrico doble conformado por dos pozos simples: uno ancho de longitud d_L y otro delgado de longitud d_R, separados por una barrera de potencial de longitud w. Ambos pozos estan a potenciales v_1 y v_2.
Para algunos parámetros geométricos establecidos se encuentra que el pozo ancho solo tiene dos estados ligados, con energías propias de valor ϵ_{L0} (para el estado base) y ϵ_{L1} (para el primer estado excitado) y que el pozo delgado solo tiene un estado ligado con energías propia ϵ_{R0}.
Si las energías ϵ_{R0} y ϵ_{L1} son muy parecidas, las funciones de onda correpondientes se combinarán para formar los dos estados excitados del sistema.
Para encontrar las energías propias de los estados combinados se utiliza el coeficiente de trasmisión definido en [3]:

$$T = \frac{\bar{\epsilon}}{k\sqrt{d_L d_R}} exp(-k\, w)$$

con $\bar{\epsilon} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2m d_L\, d_R}$ y $k \approx \sqrt{2\, m\ v_2}/\hbar$.
Las energías de los estados excitados del pozo asimétrico doble serán:

$$\epsilon^{\pm} = \epsilon_p \mp \frac{\Delta_T}{2}$$

con $\epsilon_p = (\epsilon_{L1} + \epsilon_{R0})/2$, $\Delta_T = \sqrt{\Delta^2 + (2T)^2}$ y $\Delta = |\epsilon_{L1} - \epsilon_{R0}|$.
Una vez calculadas las energías propias, las funciones de ondas, de los estados excitados, se encuentrán con:

$$\psi^{\pm} = C_L^{\pm}\phi_{L1} + C_R^{\pm}\phi_{R0}$$

donde ϕ_{L1} y ϕ_{R0} son las funciones de onda del estado excitado del pozo izquierdo y del estado base del pozo derecho, además:

$$\begin{bmatrix} C_L^+ \\ C_R^+ \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \sqrt{1 - \Delta/\Delta_T} \\ \sqrt{1 + \Delta/\Delta_T} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} C_L^- \\ C_R^- \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \sqrt{1 + \Delta/\Delta_T} \\ \sqrt{1 - \Delta/\Delta_T} \end{bmatrix}$$

La figura (1.2) muestra la función de onda correspondiente al primer estado excitado de un pozo de 100Å de ancho y la función de onda del estado base de un pozo de 50Å, ambos con barreras de potencial simétricas de $90meV$.

La figura (1.3) muestra los estados hibridos provenientes de la combinación de los estados mostrados en la figura (1.2).

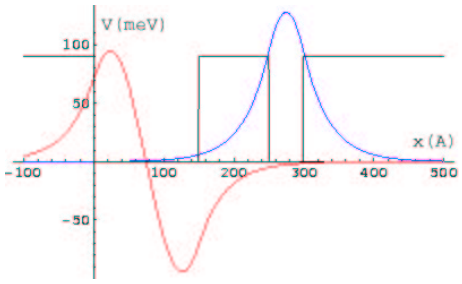


Figura 1.2: **Funciones de onda del primer estado excitado de un pozo de 100Å de ancho y del estado base de un pozo de 50Å, ambos con barreras de potencial simétricas de $90meV$.**

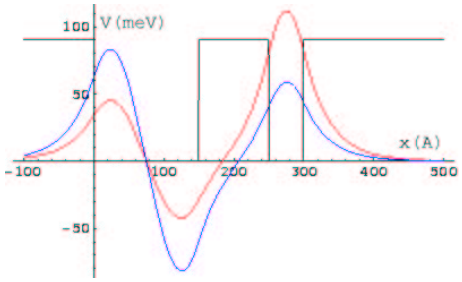


Figura 1.3: **Estados hibridizados provenientes de la combinación de las funciones mostradas en la Figura 1.2.**

1.2. Pozo doble asimétrico de paredes de potencial infinitas

Se aproxima el pozo doble asimétrico a un pozo cuántico infinito con una barrera de potencial dentro. Se soluciona la ecuación (1.1) para estados ligados (energías de la partícula menores a la energía potencial). El potencial es en este caso:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & : \quad x < 0 \\ 0 & : \quad 0 \leq x < a \\ v_1 & : \quad a \leq x < b \\ 0 & : \quad b \leq x < c \\ \infty & : \quad x \geq c \end{cases}$$

La solución de (1.1) se asume una de la forma:

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ A\,Sin(kx) & : \quad 0 \leq x < a \\ B\,exp(k_1 x) + C\,exp(-k_2 x) & : \quad a \leq x < b \\ D\,Sin(k(x-c)) & : \quad b \leq x < c \\ 0 & : \quad x \geq c \end{cases}$$

con $k_1 = \sqrt{2m(v-E)}/\hbar$ y $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.
Aplicando condiciones de continuidad de la función de onda y su derivada en las interfases $x = a$ y $x = b$ se encuentra un sistema de ecuaciones para las incognitas A, B, C, D y E.

- Continuidad de función de onda en $x = a$

$$A\,Sin(k_1 a) = B\,exp(k_2 a) + C\,exp(-k_2 a) \tag{1.10}$$

- Continuidad de la derivada de la función de onda en $x = a$

$$A\,Cos(k_1 a)\,k_1 = B\,exp(k_2 a)\,k_2 \; - C\,exp(-k_2 a)\,k_2 \tag{1.11}$$

- Continuidad de la función de onda en $x = b$

$$B\,exp(k_2 b) + C\,exp(-k_2\,b) = D\,Sin(k_1\,(b-c)) \tag{1.12}$$

- Continuidad de la derivada de la función de onda en $x = b$

$$B\,k_2\,exp(k_2\,b) - C\,k_2\,exp(-k_2\,b) = D\,k_1\,Cos(k_1\,(b-c)) \tag{1.13}$$

La ecuación trascendental para las energías se construye formando la matriz de los coeficientes que acompañan a las incognitas A, B, C y D en las ecuaciones (1.10),(1.11),(1.12) y (1.13) y exigiendo que su determinante sea igual a cero:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} Sin(k_1 a) & -exp(k_2 a) & -exp(-k_1 a) & 0 \\ k_1\,Cos(k_1 a) & -k_2\,exp(k_2 a) & k_2\,exp(-k_2 a) & 0 \\ 0 & exp(k_2 b) & exp(-k_2 b) & -Sin(k_1\,(b-c)) \\ 0 & k_2\,exp(k_2\,b) & -k_2\,exp(-k_2\,b) & -k_1\,Cos(k_1\,(b-c)) \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

La ecuación trascendental para las energías propias del sistema es:

$$exp[2k_2(b-a)] = \frac{(k_1\,Cos(k_1\,a) \; - \; k_2\,Sin(k_1\,a))(k_1\,Cos[k_1\,(b-c)] \; + \; k_2\,Sin[k_1\,(b-c)])}{(k_1\,Cos(k_1\,a) \; + \; k_2\,Sin(k_1\,a))(k_1\,Cos[k_1\,(b-c)] \; - \; k_2\,Sin[k_1\,(b-c)])} \tag{1.15}$$

Del sistema de ecuaciones (1.10),(1.11),(1.12) y (1.13) se dejan las variables B, C y D en términos de A obteniendo:

$$\begin{aligned} B &= g_1\, A \\ C &= g_2\, A \\ D &= g_3\, A \end{aligned} \tag{1.16}$$

donde

$$g_1 = \frac{exp(-k_2 a)}{2k_2}\,(k_1\, Cos(k_1 a) \,+\, k_2\, Sin(k_1 a))$$

$$g_2 = \frac{exp(k_2 a)}{2k_2}\,(k_2\, Sin(k_1 a) \,-\, k_1\, Cos(k_1 a))$$

$$g_3 = \frac{1}{2k_2}\left[\frac{exp[k_2(b-a)](1+k_2) - exp[-k_2(b-a)](1-k_2)}{Sin[k_1(b-c)] + k_1 Cos[k_1(b-c)]}\right]$$

Aplicando la condición de normalización a la función de onda propuesta y escribiendo esta condición en términos del coeficiente A, se obtiene:

$$A = \frac{1}{\sqrt{f}} \tag{1.17}$$

donde

$$\begin{aligned} f = {} & \frac{1}{2}\Big(a - \frac{1}{2k_1} Sin(2k_1 a)\Big) + \frac{g_1^2}{2k_2}\Big(exp(2k_2 b) - exp(2k_2 a)\Big) + 2g_1 g_2 (b-a) \\ & + \frac{g_2^2}{2k_2}\Big(exp(-2k_2 b) - exp(-2k_2 a)\Big) + \frac{g_2^2}{2}\Big((c-b) + \frac{1}{2k_1} Sin[2k_1(b-c)]\Big) \end{aligned} \tag{1.18}$$

Para hallar las energías propias del pozo doble asimétrico se soluciona numéricamente la ecuación (1.15). Una vez obtenidas las energías propias se halla el coeficiente A de la función de onda con ayuda de la expresión (1.17) y con el valor numérico de este coeficiente se hallan los coeficientes restantes (B, C y D) con el conjunto de ecuaciones (1.16).
Las figuras (1.4, 1.5, 1.6) muestran las funciones de onda para los tres estados propios de un pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas de longitud de pozo ancho de 140Å , longitud de barrera de 60Å y longitud de pozo delgado de 60Å. La barrera tiene un potencial de $90meV$.

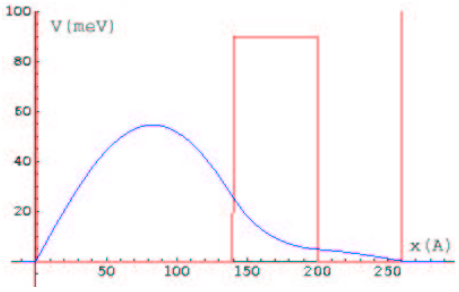


Figura 1.4: **Función de onda para el estado base de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de 140Å longitud de barrera de 60Å y longitud de pozo delgado de 60Å**

1.3. Pozo cuántico doble asimétrico con paredes de potencial finitas

Se soluciona la ecuación (1.1) para un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} v_1 & : \quad x < 0 \\ 0 & : \quad 0 \leq x < a \\ v_2 & : \quad a \leq x < b \\ 0 & : \quad b \leq x < c \\ v_1 & : \quad x \geq c \end{cases}$$

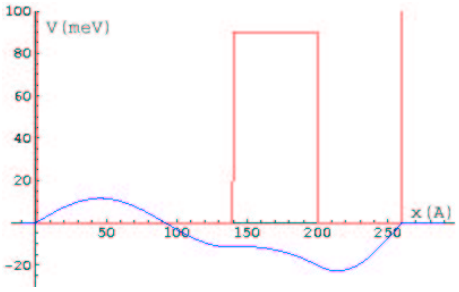


Figura 1.5: **Función de onda para el primer estado excitado de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de 140Å longitud de barrera de 60Å y longitud de pozo delgado de 60Å**

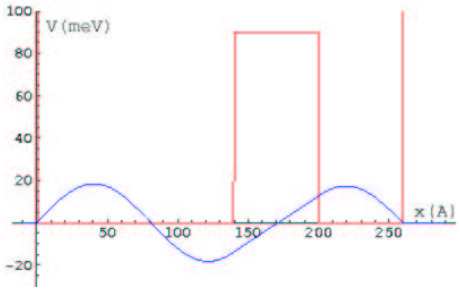


Figura 1.6: **Función de onda para el segundo estado excitado de pozo cuántico doble de paredes de potencial infinitas. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å**

Asumiendo una solución de la forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,exp(k_1 x) & : \quad x < 0 \\ B\,Sin(kx) & : \quad 0 \leq x < a \\ C\,exp(k_2 x) + D\,exp(-k_2 x) & : \quad a \leq x < b \\ E\,Sin(kx) + F\,Cos(kx) & : \quad b \leq x < c \\ G\,exp(-k_1 x) & : \quad x \geq c \end{cases}$$

con $k_1 = \sqrt{2m(v_1 - E)}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(v_2 - E)}/\hbar$ y $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.
Aplicando las condiciones de continuidad para la función de onda y su derivada en las interfases $x = 0$, $x = a$, $x = b$ y $x = c$ se obtiene un sistema de ecuaciones para los coeficientes A, B, C, D, E, F y G. Aplicando la restricción de que el determinante de la matriz característica del sistema de ecuaciones sea igual a cero, para que dicho sistema tenga solución diferente de la trivial, se encuentra la ecuación trascendental para las energías propias del sistema.
Solucionando numéricamente esta ecuación trascendental y teniendo en cuenta la condición de normalización de la función de onda, se pueden encontrar los coeficientes A, B, C, D, E, F y G.

Las figuras (1.7, 1.8, 1.9) muestran las funciones de onda, halladas mediante el procedimiento anterior, para los tres niveles de energía de un pozo cuántico doble de longitud de pozo ancho 140Å, longitud de pozo delgado de 60Å y longitud de barrera de 60Å. El pozo tiene potenciales identicos de valor $90meV$.

1.4. Conclusiones del capítulo

Si se comparan las energías calculadas por medio de los tres métodos propuestos, se encuentra que hay concordancia entre los resultados hallados con hibridación de

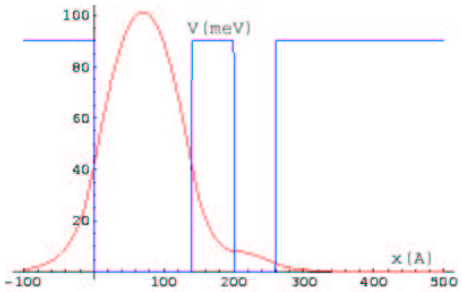


Figura 1.7: **Funciones de onda para el estado base de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.**

estados y los resultados obtenidos con el pozo asimétrico finito. Los valores de energía calculados con el pozo asimétrico infinito siempre toman un valor mas alto de los obtenidos por los otros métodos. Tambien se encuentra que los rangos geométricos en los cuales se obtienen tres niveles en el pozo asimétrico, varian de un método a otro, por ejemplo un pozo asimétrico con longitud de pozo ancho de 140Å barrera de potencial de 70Å y altura de barrera de $90meV$ funciona como sistema de tres niveles para la aproximación de pozo infinito, en el rango de longitud relativa de pozo delgado (d_R/d_L) entre $0,3$ a 0,8, mientras que en la aproximación de pozo finito, el sistema presenta tres niveles de energía para longitudes relativas de pozo delgado entre 0,1 a 0,6 aproximadamente. Las figuras (1.10,1.11,1.12) muestran el comportamiento de las energías propias del sistema cuando se varía el tamaño relativo del pozo delgado. Para las gráficas se usaron $d_L = 140$Å, $w = 70$Å, altura de barrera de potencial $v = 90meV$.

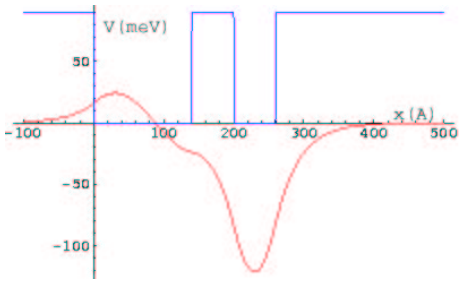


Figura 1.8: **Funciones de onda para el primer estado excitado de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.**

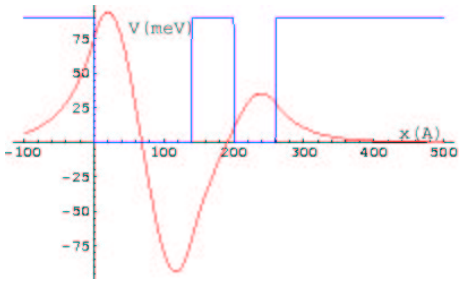


Figura 1.9: **Funciones de onda para el segundo estado excitado de pozo cuántico doble. Longitud de pozo ancho de** 140**Å longitud de barrera de** 60**Å y longitud de pozo delgado de** 60**Å, paredes de potencial idénticas de** $90meV$**.**

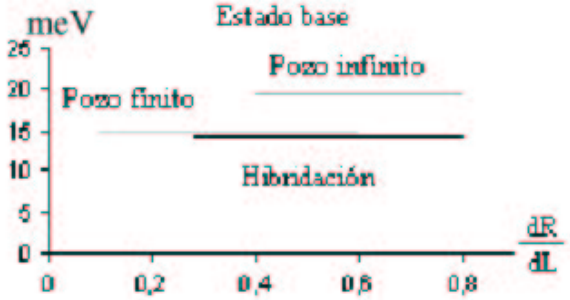


Figura 1.10: **Comportamiento de la energía del estado base al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.**

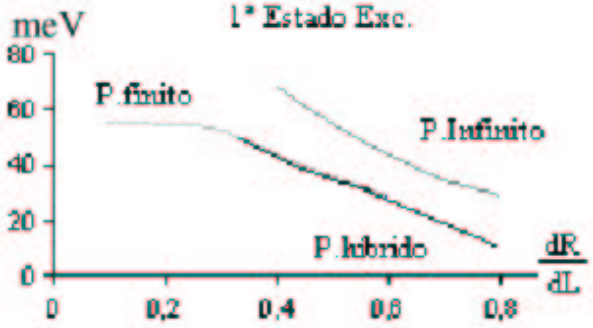


Figura 1.11: **Comportamiento de la energía del primer estado excitado al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.**

Figura 1.12: **Comportamiento de la energía del primer estado excitado al variar el tamaño del pozo delgado bajo las tres aproximaciones utilizadas.**

Capítulo 2

Momento dipolar dinámico

En el sistema de pozo doble asimétrico es posible preparar un estado inicial no estacionario por medio de una foto-excitación. Los electrones oscilarán entre los dos pozos del sistema dando lugar a un momento dipolar oscilante. Esto provee un sistema que es capaz de generar y/o detectar ondas electromagnéticas en el rango de los THz.
En este capítulo se hace un estudio del momento dipolar dinámico presente en sistemas cuánticos al ser excitados por campos eléctricos. Una herramienta útil para hacer esto es el operador densidad.
En principio se soluciona la evolución temporal del operador densidad sin tener en cuenta procesos de decaimiento. Los procesos de decaimiento se consideran como términos de amortiguamiento para las coherencias del sistema de tres niveles.

2.1. Influencia geométrica

Un pozo doble asimétrico está conformado por dos pozos cuánticos, uno ancho y otro delgado separados por una barrera de potencial. Esta estructura puede ser modelada como un sistema de tres niveles. El estado base del sistema (notado por 0) se acopla a los dos estados excitados (1 y 2) mediante la aplicación de un campo eléctrico externo cuyo espectro de frecuencias sobrelapa las frecuencias de transición. Una forma eficaz de describir la respuesta óptica de un gas de electrones dentro de un semiconductor es por medio del operador densidad. Cuando se escribe en forma matricial, sus elementos diagonales ρ_{nn} dan la probabilidad de que el sistema esté en el estado propio n, por lo tanto dan información sobre las poblaciones de los estados del sistema. Los elementos no-diagonales ρ_{nm} dan información sobre las coherencias entre los estados n y m del sistema [12], o dicho de otra forma, el elemento ρ_{nm}

será diferente de cero si el sistema se encuentra en una superposición coherente de los estados propios n y m. Además, estos elementos no diagonales del operador densidad, serán proporcionales al momento dipolar eléctrico inducido en el sistema.

El pozo cuántico doble asimétrico, en este caso, está diseñado como un sistema de tres estados de energía $\mid 0\rangle, \mid 1\rangle$ y $\mid 2\rangle$ con energías propias ϵ_0, ϵ_1y ϵ_2.
Se halla la evolución temporal del operador densidad para el sistema de pozo cuántico doble cuando esta perturbado por la aplicación de un campo eléctrico externo. Sea H_0 el Hamiltoniano del pozo doble asimétrico y $H_I(t) = -e\,x\,E(t)$ el Hamiltoniano que representa la perturbación debida a un campo eléctrico $E(t)$ linealmente polarizado en la dirección x, la cual se supone que es la dirección de confinamiento de la heteroestructura, escrito en la aproximación *dipolar*, donde e es la carga del electrón.

Los elementos matriciales de H_0 en la base de sus estados propios son:

$$\begin{aligned} H_{00} &= \epsilon_0 \\ H_{11} &= \epsilon_1 \\ H_{22} &= \epsilon_2 \end{aligned}$$

Donde ϵ_i representa la energía propía del estado i. Con $d_{ij} = e\,\langle i \mid x \mid j\rangle$ para $i, j = 0, 1, 2$, los elementos matriciales del *momento de dipolo eléctrico*, los elementos matriciales del Hamiltoniano de interacción toman la forma:

$$H_{Iij} = -E(t)\,d_{ij}$$

para $i, j = 0, 1, 2$.
La evolución temporal del sistema está caracterizada por la evolución temporal del operador densidad. Las ecuaciones de movimiento para los elementos matriciales del operador densidad son:

$$\dot{\rho_{ij}} = -\frac{i}{\hbar}\sum_k (\, H_{ik}\,\rho_{kj} \,-\, \rho_{ik}\,H_{kj}\,) \tag{2.1}$$

Además, el operador densidad cumple con las condiciones:

$$tr\{\rho\} = \rho_{00} + \rho_{11} + \rho_{22} = 1$$

$$\rho_{ij} = \rho^*_{ji}$$

Los elementos diagonales del operador densidad son reales y los elementos no diagonales son complejos. Además, en nuestro caso, las funciones propias del pozo doble asimétrico son reales por lo que $d_{ij} = d_{ji} \in \Re$.

Es usual encontrar en la literatura la evolución de las componentes de polarización ρ_{01} y ρ_{02}, descritas por las ecuaciones de Bloch, las cuales en el límite de baja excitación pueden escribirse como:

$$i\,\hbar\,\frac{d}{dt}\,\rho_{01} \;=\; (\epsilon_1 - \epsilon_0)\rho_{01} \;-\; d_{01}E(t)$$
$$i\,\hbar\,\frac{d}{dt}\,\rho_{02} \;=\; (\epsilon_2 - \epsilon_0)\rho_{02} \;-\; d_{02}E(t)$$

donde ϵ_i es la energía propia del estado i $(i = 0, 1, 2)$, d_{01} y d_{02} son los elementos matriciales de la matriz de dipolo de las dos trasiciones, $E(t)$ es el campo eléctrico externo.
Excitar electrones del estado base simultaneamente a los niveles superiores, requiere de un pulso de excitación corto cuyo espectro sea mas ancho que el desdoblamiento entre los estados finales.
Los dos estados finales están coherentemente acoplados al mismo estado inicial, esto significa que cuando los elementos matriciales de transición interbanda d_{01} y d_{02} son distintos de cero, las polarizaciones intrabanda ultrarápidas crean un acoplamiento coherente entre los estados finales.
La matriz densidad intrabanda ρ_{ij} caracteriza completamente la dinámica de los electrones en los niveles coherentemente acoplados:

$$i\,\hbar\,\frac{d}{dt}\,\rho_{12} \;=\; (\epsilon_2 - \epsilon_1)\rho_{12} \;-\; d_{02}E^*(t)\rho_{01} - d_{01}E(t)\rho_{02}$$

En particular, se puede expresar el momento dipolar de los electrones de la banda de conducción entre los estado 1 y 2 a través de su matriz densidad.
Denotando por d_{ij} a los elementos matriciales dipolares entre los estados de la banda de conducción i y j, se puede escribir el momento dipolar de los electrones de conducción como:

$$D(t) \;=\; \sum_{i,j=1,2} d_{ij}\rho_{ij}$$

lo cual muestra que la coherencia intrabanda hace que el momento dipolar del sistema oscile con la frecuencia $(\epsilon_2 - \epsilon_1)/\hbar$. En el caso del pozo doble asimétrico, estas oscilaciones de momento dipolar son completamente equivalentes a las oscilaciones del tunelamiento debido a que los electrones inicialmente ubicados en uno de los pozos tunelarán al otro pozo y regresarán de manera periódica. La dependencia temporal del momento dipolar se produce por estas oscilaciones de carga en el espacio real [9].
La radiación creará una superposición lineal de los estados 1 y 2 de la forma:

$$\psi(z,t) \;=\; \psi_1(z)\,exp(-i\epsilon_1\,t/\hbar) \;+\; \psi_2(z)\,exp(-i\epsilon_2\,t/\hbar)$$

con probabilidad:

$$P(z,t) \;=\; |\psi_1(z)|^2 \;+\; |\psi_2(z)|^2 \;+\; 2Re(\psi_1(z)\psi_2^*(z)exp(-i(\epsilon_2-\epsilon_1)\,t/\hbar)))$$

en este caso la densidad de probabilidad oscila entre los valores: $(|\psi_1(z)| - |\psi_2(z)|)^2$ y $(|\psi_1(z)| + |\psi_2(z)|)^2$ con periodo $\tau_{coh} = \hbar/\Delta\epsilon$ con $\Delta\epsilon = \epsilon_2 - \epsilon_1$. $\tau_{coh}/2$ es el llamado tiempo de tunelamiento.
Con el tamaño de la barrera se puede controlar tanto la proporción de carga acumulada en cada pozo así como el tiempo que tarda la carga en tunelar a través de la barrera. A medida que aumenta el tamaño de la barrera, el tiempo que tardan los electrones en tunelar aumenta, disminuyendo la frecuencia de oscilación de la carga eléctrica. La dependencia del tiempo de tunelamiento con el tamaño de la barrera no es una función lineal, para valores pequeños de barrera de potencial el tiempo de tunelamiento crece lentamente. Luego el tiempo de tunelamiento crece más rápido con el tamaño de la barrera hasta tender a un valor constante para longitudes de barreras grandes, comparados con el tamaño del pozo ancho. Las figuras (2.1,2.2) muestran la probabilidad de que la carga eléctrica este en el pozo ancho (línea continua) y que la carga este en el pozo delgado (línea punteada) como función del tiempo. Esto fué calculado para un pozo asimétrico con pozo ancho de 140Å, un pozo delgado de 60Å y barreras de potencial simétricas de altura $90meV$.

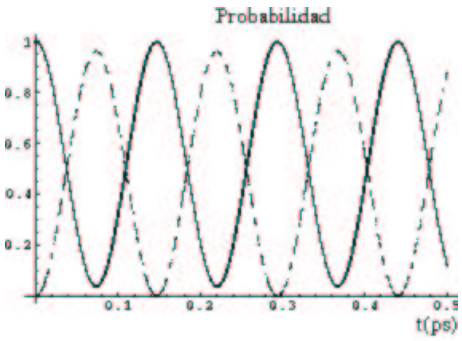


Figura 2.1: **Probabilidad de encontrar al electrón en el pozo ancho (curva continua) y probabilidad de encontrar al electrón en el pozo delgado como función del tiempo cuando la barrrera mide** 60**Å**

Se calcula, a partir de las energías propias del sistema el tiempo de tunelamiento de la carga en el pozo como función de la longitud de la barrera de potencial (figura 2.3). Este tipo de curvas son importantes a la hora de diseñar dispositivos que emitan o reciban ondas electromagnéticas.

2.2. Oscilaciones coherentes

Para acoplar coherentemente los estados excitados de tres niveles se requieren campos eléctricos que cumplan con las siguientes condiciones:

- Frecuencia central del pulso igual a la energía media entre los niveles excitados ($\hbar\,\omega_0 = (\frac{\epsilon_2+\epsilon_1}{2}) - \epsilon_0$).
- Ancho en frecuencias por lo menos de la diferencia de energías de los estados excitados del sistema ($\Delta\omega \geq (\epsilon_2 - \epsilon_1)/\hbar$).

La primera condición se requiere para poblar los estados excitados desde el estado base del sistema y la segunda condición es necesaria para que los estados excitados queden acoplados coherentemente entre si.

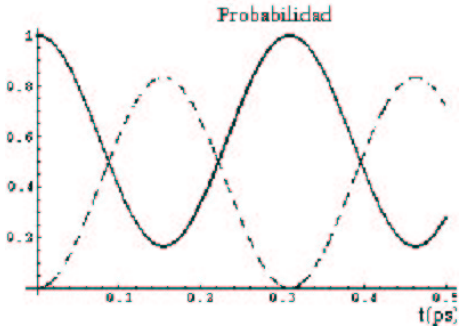


Figura 2.2: **Probabilidad de encontrar al electrón en el pozo ancho (curva continua) y probabilidad de encontrar al electrón en el pozo delgado como función del tiempo cuando la barrera mide** 80**Å**

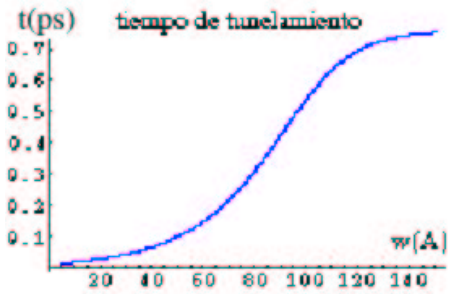


Figura 2.3: **Tiempo de tunelamiento como función del tamaño de la barrera de potencial. Pozo ancho** 140**Å, pozo delgado** 60**Å, altura de barrera** $90meV$

Los campos eléctricos que cumplen con estas condiciones pueden ser modelados como:

$$E(t) = E_0\, F(t)\, Cos(\omega_0 t)$$

Con E_0: amplitud constante del campo, $F(t)$: factor de forma del pulso, ω_0: frecuencia central del pulso.
Como se quiere campo eléctrico en forma de pulso, el factor de forma se modela como una *gaussiana*:

$$F(t) = exp(-(\Delta\omega)^2\,(t - t_0)^2)$$

esto es, una gaussiana con ancho $1/\Delta\omega$ en el tiempo (ancho $\Delta\omega$ en frecuencia), con máximo en t_0.

Se soluciona numéricamente las ecuaciones de evolución temporal del operador densidad para el sistema de tres niveles al aplicar un pulso eléctrico ultra-rápido. Se muestran los resultados obtenidos para un pozo asimétrico con longitud de pozo ancho de 150Å, longitud de barrera de potencial de 150Å y longitud de pozo delgado de 60Å y altura de potencial de $90meV$.

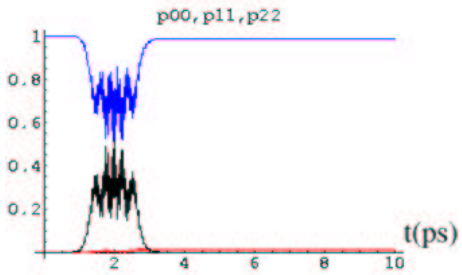


Figura 2.4: **Evolución temporal de las poblaciones de un sistema de tres niveles al aplicar un campo eléctrico ultra-rápido. La curva azul representa la población del estado base del sistema, curvas negra y roja las poblaciones de los estados excitados.**

El pulso ultra-rápido está centrado en $t = 2ps$, en este caso se nota la absorción del campo por el estado base del sistema, el cual interactua preferentemente con el primer estado excitado. Después de la aplicación del pulso el sistema relaja tendiendo a regresar a su estado inicial. Uno de los esquemas de control propuestos en la literatura, tiene que ver con controlar la forma como el sistema relaja a sus condiciones iniciales. En [10] se propone acoplar los estados excitados del sistema de tres niveles por un campo continuo de micro-ondas, controlando la fase entre este campo y el pulso inicial de bombeo ultra-rápido se puede controlar la velocidad con la que el sistema relaja a sus condiciones iniciales.

El momento dipolar inducido presenta un comportamiento oscilante, como es de esperar, ya que se acoplan coherentemente los estados excitados del sistema. En este caso no se observa un decaimiento en la oscilación debido a que en la solución de la matriz densidad no se tuvieron en cuenta términos de decaimiento que tienen que ver con procesos de scattering. Estos procesos hacen que las coherencias del sistema decaigan con cierto tiempo característico.

Un proceso de interés es poder controlar las oscilaciones coherentes producidas por la acción del campo eléctrico. En varios artículos se han propuesto esquemas de control para el momento dipolar dinámico en este sistema de tres niveles. Uno de los mas utilizados es la aplicación de dos pulsos ultra-rápidos sobre la muestra, tal que la fase entre ellos se pueda controlar. Se realizó una simulación de este proceso, obteniendo resultados concordantes con los reportados en [2] y [7].
La figura (2.6) muestra el dipolo dinámico resultante al aplicar dos pulsos eléctricos ultra-rápidos, la curva en la parte superior del gráfico representa el dipolo inducido por el primer pulso solo, la curva del medio representa el dipolo inducido por el segundo pulso solo y la curva en la parte inferior del gráfico representa el dipolo resultante por la acción de los dos pulsos cuando entre ellos hay una diferencia de fase de 0 rad. La figura (2.7) muestra la misma situación, salvo que en este caso, la diferencia de fase entre los pulsos es de π rad. Notese que en el primer caso el momento de dipolo inducido permanece en el tiempo por la acción de los dos pulsos. En el segundo caso se puede cancelar completamente el momento dipolar, efecto producido por la interferencia cuántica de trayectorias. Este esquema de control ha sido comprobado experimentalmente [2] y desarrollado un modelo basado en formalismo de matriz densidad para explicar los resultados experimentales [7].

Los términos de amortiguamiento se le atribuyen a las interacciones de muchos cuerpos que ocurren en la heteroestructura, principalmente electrón-fonón. Teniendo

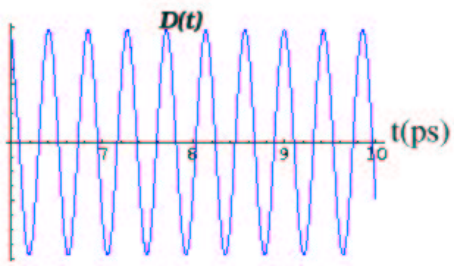


Figura 2.5: **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación del campo eléctrico ultra-rápido.**

en cuenta esto, la evolución temporal para las coherencias toman la forma:

$$\dot{\rho}_{nm} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k (H_{nk}\rho_{km} - \rho_{nk}H_{km}) - \gamma_{nm}\rho_{nm}$$

y para las poblaciones:

$$\dot{\rho}_{nn} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k (H_{nk}\rho_{kn} - \rho_{nk}H_{km}) + \sum_{\epsilon_m > \epsilon_n} \Gamma_{mn}\rho_{mm} - \sum_{\epsilon_m < \epsilon_n} \Gamma_{mn}\rho_{mm}$$

Donde γ_{nm} es la taza a la cual relaja al equilibrio ρ_{nm} y Γ_{nm} da la taza a la cual la población del nivel m decae al nivel n.

Si se calculan las tasas de scattering de la interacción electrón- fonón LO y con ellas se construyen los términos de decaimiento para las coherencias, se puede encontrar, por lo menos de una forma cualitativa, el comportamiento observado para el

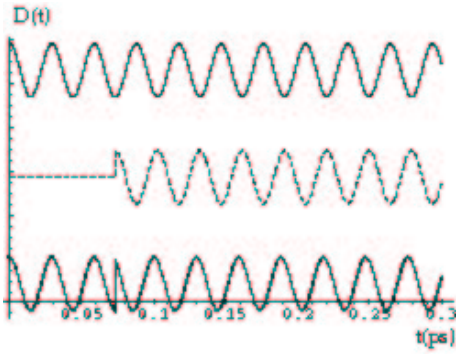


Figura 2.6: **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación de dos campo eléctrico ultra-rápidos en fase**

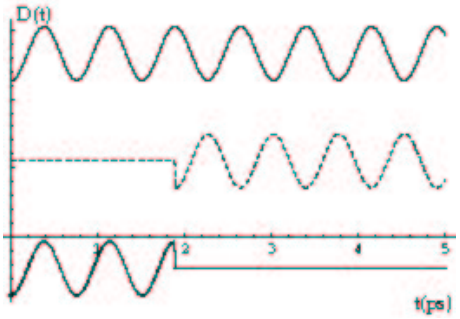


Figura 2.7: **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación de dos campo eléctrico ultra-rápidos fuera de fase en πrad**

momento dipolar inducido en la heteroestructura. La figura (2.8) muestra el dipolo calculado para los parámetros del ejemplo anterior, pero introduciendo términos de amortiguamiento.

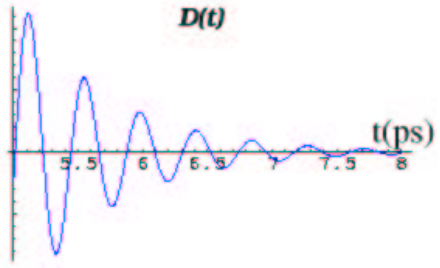


Figura 2.8: **Dipolo inducido en el sistema de tres niveles por la aplicación del campo eléctrico ultra-rápido, teniendo en cuenta términos de decaimiento.**

2.3. Conclusiones del capítulo

Se muestra como a partir de los parámetros geométricos (en este caso el tamaño de la barrera de potencial) se puede controlar la carga dentro del sistema de pozo cuántico doble asimétrico. Aumentando el tamaño de la barrera se logra que la probabilidad de que la carga este en el pozo ancho del sistema aumente y que el tiempo que tarda la carga en tunelar a través de la barrera de potencial aumente. La dependencia del tiempo de tunelamiento con la longitud de la barrera de potencial no es una función lineal, para tamaños de barrera pequeños (comparados con el tamaño del pozo ancho) el tiempo de tunelamiento crece lentamente. A medida que aumenta el tamaño de la barrera, el tiempo de tunelamiento aumenta mas rápidamente hasta tender a un valor constante. En este caso no se han tenido en cuenta efectos de dispersión de electrones por interacción con fonones longitudinales ópticos (LO). Al hacer cálculos de tiempos de tunelamiento con efectos polarónicos, se observa que el tiempo de tunelamiento es una función siempre creciente con el tamaño de la barrera de potencial, tal como se reportó en [8].
A partir de la evolución temporal de los elementos matriciales del operador densidad, se obtienen los comportamientos de las poblaciones del pozo asimétrico doble, así como el momento dipolar dinámico producido por el acoplamiento coherente entre los estados excitados del pozo al aplicar un pulso eléctrico ultra-rápido. Se observa que este momento dipolar dinámico tiene una frecuencia igual a la diferencia de energías entre estados excitados o equivalentemente a la frecuencia de tunelamiento de la carga eléctrica a través de la barrera de potencial del sistema.

Se simuló un proceso de control del momento dipolar, que consiste en aplicar dos pulsos ultra-rápidos al sistema de pozo asimétrico. Se observó la cancelación o el refuerzo de la señal eléctrica proveniente del pozo dependiendo de la fase relativa entre los pulsos ultra-rápidos.
Se observa como incluyendo los efectos del scattering electrón-fonón LO en la matriz densidad del sistema se atenua el momento de dipolo dinámico de la forma reportada por los experimentos.

Capítulo 3

Efectos geométricos en un pozo doble asimétrico

En este capítulo se hace un estudio detallado de la dependencia con la geometría del pozo asimétrico (longitudes de pozos delgado, ancho, longitud de barrera de potencial y altura de barrera de potencial) de las magnitudes físicas de interés en el estudio de la dinámica de un sistema cuántico.

3.1. Energías propias

Se analiza la posición de las energías propias del pozo asimétrico como función de los parámetros geométricos, esto es, longitudes de pozos ancho, delgado y barrera de potencial, así como altura de barrera de potencial. El interés principal de este estudio es encontrar configuraciones geométricas de pozo asimétrico que puedan ser modeladas como sistemas de tres niveles.

Se varió el tamaño del pozo delgado dejando como parámetros fijos del pozo el tamaño del pozo ancho (d_L), el tamaño de la barrera de potencial (w). Las alturas de las barreras de potencial se han dejado simétricas ($v_1 = v_2$). Para las gráficas que se muestran a continuación los parámetros son:

- $d_L = 150$Å
- $w = 75$Å,$(w/d_L = 0{,}5)$
- $v_1 = v_2 = 90\, meV$

Todos los resultados mostrados se calcularon con la masa efectiva del GaAs ($m_e \sim 0{,}07$).
Con respecto a la posición de los niveles de energía, para el pozo doble asimétrico de

paredes finitas, se observa que el estado base del sistema no varían notablemente su valor de energía a medida que se aumenta el tamaño del pozo delgado en comparación con los niveles excitados.
Para valores de tamaño realtivo de pozo delgado (d_R/d_L) menores a 1/3, la energía correspondiente al primer estado excitado no varía apreciablemente mientras que la energía del segundo estado excitado disminuye a medida que aumenta el tamaño del pozo delgado. Para $d_R/d_L \sim 1/3$ los estados excitados tienen la mínima separación posible y para valores de tamaño relativo de pozo delgado mayores a 1/3 el valor de energía del segundo estado excitado permanece constante mientras que el valor de energía del primer estado excitado disminuye a medida que aumenta el tamaño del pozo delgado.
Este comportamiento puede ser explicado en términos de las funciones de onda del sistema. La función de onda correspondiente al primer estado excitado tiene su contribución principal en el pozo ancho del sistema para valores bajos de longitud de pozo delgado ($< 30\,\%$ del pozo ancho) mientras que la función de onda del segundo estado excitado tiene su mayor contribución en el pozo delgado. A medida que aumenta el tamaño del pozo delgado parte de la función de onda del primer estado excitado pasa al pozo delgado y al contrario para el segundo estado excitado. Al valor crítico $d_R/d_L \sim 1/3$ las componentes de las funciones de onda de los estados excitados tienen las mismas componentes en ambos pozos y estos niveles están separados por el mínimo gap de energía posible, dependiendo este gap únicamente de la longitud de la barrera de potencial. Cuando el tamaño del pozo sobrepasa el valor crítico, la función de onda del primer estado excitado tiene su principal componente en el pozo delgado y la función de onda del segundo estado excitado tiene su componente principal es el pozo ancho (*ver Anexo A*).
La figura (3.1) muestra los niveles de energía como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L). En el gráfico ϵ_0 representa la energía del estado base, ϵ_1 y ϵ_2 representan las energías de los estados excitados.

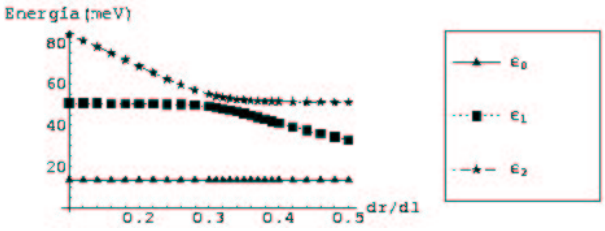


Figura 3.1: **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función del ancho relativo del pozo delgado.**

Cuando se varía el tamaño relativo de la barrera de potencial central, dejando fijo los valores de tamaños de pozos delgado, ancho y altura de barrera de potencial los valores de energía para los tres estados del sistema no cambian apreciablemente, es decir, las energías propias del sistema no dependen de una forma importante con el tamaño de la barrera de potencial central.
La figura (3.2) muestra los valores de energías propias cuando se dejan, como parámetros fijos: tamaño del pozo ancho (150Å), tamaño del pozo delgado (30Å o $d_R/d_L =$ 0,2), barreras de potencial simétricas ($v_1 = v_2 = 90\,meV$) y se varía el tamaño relativo de la barrera de potencial central (w/d_L).

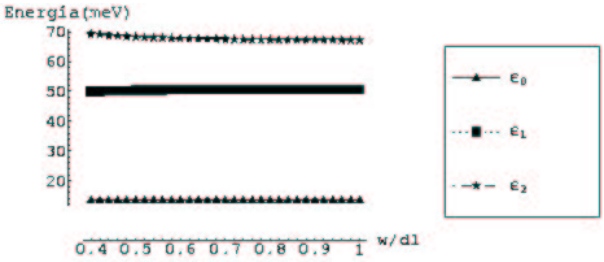


Figura 3.2: **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función del ancho relativo de la barrera de potencial central.**

Al variar el tamaño del pozo ancho, dejando los demás parámetros fijos, se observa que los tres valores de energía propia tienden a disminuir a medida que aumenta el tamaño del pozo ancho.
Este comportamiento se observa en la figura (3.3), donde se han dejado como parámetros fijos: tamaño de pozo delgado 30Å, tamaño de barrera central 60Å y alturas de potencial de barreras simétricas a un valor $v1 = v2 = 90\,meV$. El tamaño de pozo ancho se varió como multiplos del tamaño del pozo delgado (d_L/d_R) entre 4 y 5.

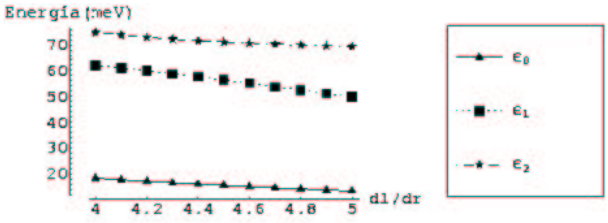


Figura 3.3: **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados cuando se varía el tamaño del pozo ancho.**

Al variar la altura de las barreras de potencial, dejando los demás parámetros

fijos, se observa que la energía correspondiente al estado base no cambia su valor apreciablemente, mientras que las energías correspondientes a los estados excitados tienden a aumentar a medida que aumenta la altura de las barreras de potencial. La diferencia de energías entre estados excitados tambien aumenta con la altura de las barreras de potencial.
La figura (3.4) muestra el comportamiento de las energías propias como función de la altura de la barrera de potencial central. Los parámetros fijos en este caso son: tamaño de pozo delgado 150Å, tamaño de pozo delgado 30Å y tamaño de la barrera central 75Å.

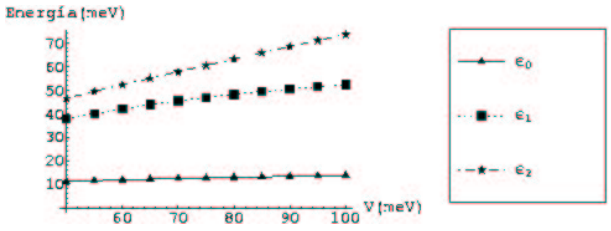


Figura 3.4: **Energías de estado base, primer y segundo estados excitados como función de la altura de la barrera de potencial central.**

3.2. Momentos de dipolo eléctrico

En el capítulo 2 se estudia la dinámica del sistema de pozo doble asimétrico al aplicar una perturbación electromagnética. El campo eléctrico se estudia desde un punto de vista clásico y su interacción con la heteroestructura se hace mediante la aproximación dipolar. Toda la interacción con el campo eléctrico está pesada por los parámetros denominados momentos de dipolo eléctrico.
Se evaluaron los momentos de dipolo $d_{ij} = e \int \psi_i(x) x \psi_j(x) dx$, donde $\psi_i(x)$ son las funciones de onda del sistema. Debido a la dependencia de los momentos de dipolo eléctrico con la función de onda, estos parámetros varían fuertemente con la geometría del sistema.
Ya que el sistema estudiado es asimétrico, se le puede asignar un momento de dipolo eléctrico a cada estado, esto es un momento de dipolo de índices iguales. Estos momentos de dipolo eléctrico de índices iguales resultan distintos de cero y diferentes entre sí, debido a que la carga eléctrica se distribuye de forma diferente a lo largo de la heteroestructura para cada uno de los estados propios del sistema.
Los momentos de dipolo eléctrico de índices diferentes darán información de la probabilidad de transición entre niveles por la interacción con campos eléctricos.
En general, al realizar los cálculos, los momentos de dipolo eléctrico para índices

iguales (intrasub-banda) resultan tener magnitudes más grandes que las calculadas para momentos de dipolo de índices diferentes (intersub-banda), cerca de un orden de magnitud.
Al variar el tamaño del pozo delgado, dejando el resto de parámetros geométrico fijos, el momento de dipolo eléctrico correspondiente al estado base (d_{00}) permanece constante debido al poco cambio que sufre la función de onda del estado base al variar el tamaño del pozo delgado. Ya que los estados excitados son mas sensibles al cambio en el tamaño del pozo delgado, los momentos de dipolo de dichos estados (d_{11} y d_{22}) sí presentan cambios. El momento correspondiente al primer estado excitado toma valores bajos para longitudes de pozo delgado pequeñas y va aumentando a medida que aumenta el tamaño del pozo delgado. Esto ocurre ya que para pozos delgados pequeños la contribución principal a la función de onda está en el pozo ancho (x pequeños) y ya que el momento de dipolo depende de la coordenada x, la principal contribución del estado al momento de dipolo se minimiza. A medida que aumenta el tamaño del pozo delgado, la contribución principal de la función de onda del primer estado excitado se desplaza hacia el pozo delgado (x grandes) por lo que el momento de dipolo se maximiza. Caso contrario ocurre con el momento de dipolo correspondiente al segundo estado, el cual es grande para valores de pozo delgado pequeños y disminuye a medida que aumenta el tamaño del pozo delgado. La función de onda para el segundo estado excitado tiene su contribución principal en el pozo delgado para valores de este pequeños y dicha contribución se va desplazando hacia el pozo ancho al aumentar el tamaño del pozo delgado, lo que explica el comportamiento observado. Además, se observa que para un valor de tamaño de pozo delgado relativo al pozo ancho (d_R/d_L) cercano a 0,3 los momentos correspondientes a los estados excitados toman el mismo valor. En este caso, las contribuciones de las funciones de onda, en cada región del pozo son las mismas (ver gráfica (3.5)).

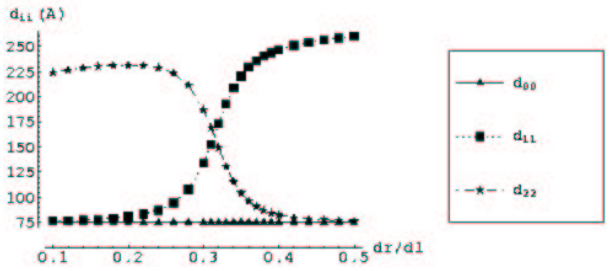


Figura 3.5: **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda como función del tamaño relativo del pozo delgado.**

La magnitud del momento de dipolo correspondiente a la transición entre estado

base y primer estado excitado (d_{01}) tiene un comportamiento parecido al momento de dipolo d_{11}, esto es, toma valores pequeños para tamaños pequeños de pozo delgado y aumenta a medida que aumenta el tamaño del pozo delgado. De forma contraria se comporta la magnitud del momento de dipolo de la transición entre estado base y segundo estado excitado (d_{02}) el cual toma valores grandes para tamaños de pozo delgado pequeños y va disminuyendo a medida que aumenta el tamaño de pozo delgado. Como en el caso anterior, las magnitudes de estos momentos de dipolo toman el mismo valor para un tamaño relativo de pozo delgado cercano a 0,3.
Para el momento de dipolo correspondiente a la transición entre estados excitados (d_{12}), su magnitud se comporta como una función creciente cuando el tamaño relativo del pozo delgado es menor a 0,3, en este punto la magnitud del momento de dipolo toma su valor máximo y para valores de tamaño relativo de pozo delgado mayores a 0,3 la magnitud del momento de dipolo decrece al aumentar el tamaño del pozo delgado (ver gráfica (3.6)).

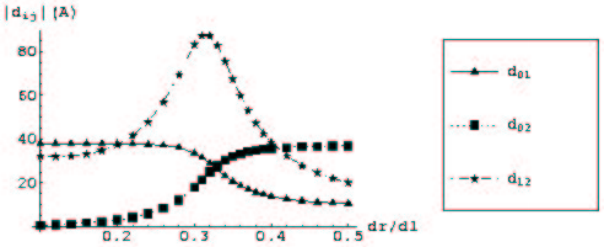


Figura 3.6: **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda como función del tamaño relativo del pozo delgado.**

Al variar el tamaño de la barrera de potencial central, dejando los parámetros restantes fijos, se observa que para los momentos de dipolo eléctrico intrasub-banda, de los estados base y primer excitado, su valor permanece constante a medida que aumenta el tamaño de la barrera mientras que el momento de dipolo correspondiente al segundo estado excitado aumenta a medida que aumenta el tamaño de la barrera (ver figura (3.7).

Con respecto de la magnitud de los momentos de dipolo intersub-banda, los dipolos d_{01} y d_{02} permanecen constantes con la variación de la longitud de la barrera central, mientras que el momento de dipolo correspondiente a la transición entre estados excitados toma valores altos para anchos de barrera pequeños y decrece a medida que aumenta el tamaño de la barrera (ver figura (3.8)). Los momentos se comportan de esta forma ya que las funciones de onda de estado base y primer estado excitado no cambian su forma apreciablemente con la variación del tamaño de la barrera central. En este caso, la principal contribución de estas funciones de onda se presenta en le

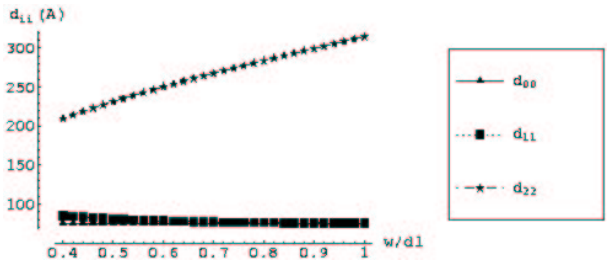


Figura 3.7: **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda como función del tamaño relativo de la barrera de potencial.**

pozo ancho. La función de onda correspondiente al segundo estado excitado tiene su contribución principal en el pozo delgado pero para tamaños de barrera pequeños tiene una contribución menor en el pozo ancho. Dicha contribución se va atenuando a medida que aumenta el tamaño de la barrera.
La magnitud del momento de dipolo correspondiente a la transición entre estados excitados toma valores altos para tamaños pequeños de barrera de potencial y va disminuyendo con el aumento del tamaño de la barrera. Ya que la contribución principal de la función de onda del primer estado excitado está en el pozo ancho y la mayor contribución de la función de onda del segundo estado excitado está en el pozo ancho, una transición entre estados excitados se puede ver como el tunelamiento de los portadores a través de la barrera de potencial. En este caso, que el momento de dipolo d_{12} decresca con el tamaño de la barrera, se puede interpretar como que a medida que aumeta el tamaño de la barrera la probabilidad de tunelar a través de la barrera es menor.

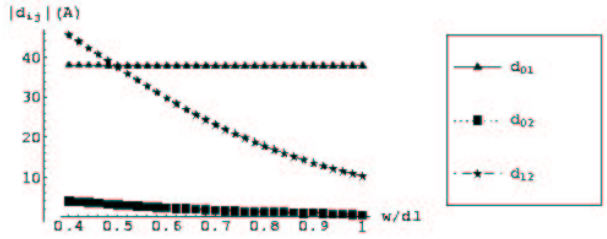


Figura 3.8: **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda como función del tamaño relativo de la barrera de potencial.**

Al variar el tamaño del pozo ancho, dejando los demás parámetros geométricos fijos, se observa que los momentos de dipolo d_{11} y d_{22} toman prácticamente el mismo valor cuando el pozo ancho tiene un tamaño igual a cuatro veces el pozo delgado. A partir de este valor d_{11} decrece a medida que aumenta el tamaño del pozo ancho mien-

tras que d_{22} aumenta. El momento d_{00} siempre aumenta con el aumento del tamaño del pozo delgado, pero siempre su valor es menor que los momentos d_{11} y d_{22}.

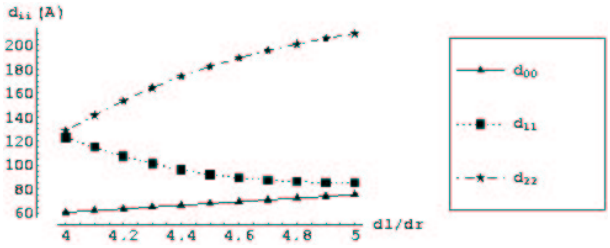


Figura 3.9: **Momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda cuando se varía el tamaño del pozo ancho.**

Los momentos de dipolo intersub-banda d_{02} y d_{12} disminuyen con el tamaño del pozo ancho, el valor de los momentos d_{12} siempre es mayor que el valor de los momentos d_{02}. El momento de dipolo d_{01} aumenta con el tamaño del pozo ancho pero lo hace con una razón menor que los otros momentos de dipolo de índices diferentes.

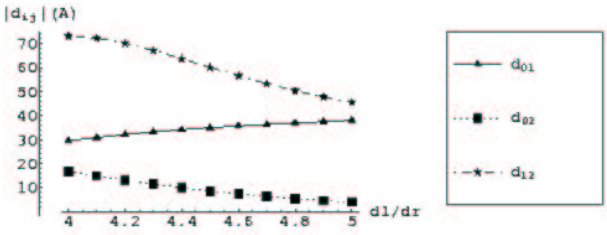


Figura 3.10: **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intersub-banda cuando se varía el tamaño del pozo ancho.**

El comportamiento de los momentos de dipolo al variar la atura de la barrera de potencial es similar al comportamiento observado al variar el tamaño del pozo ancho, esto es: el momento de dipolo d_{00} permanece constante al aumentar la altura de la barrera de potencial, el momento d_{11} disminuye al aumentar la altura de la barrera mientras que d_{22} tiende a aumentar (ver figura (3.11)).

Como en el caso anterior, los momentos d_{02} y d_{12} disminuyen con el aumento de la altura de la barrera de potencial, pero en este caso, el momento d_{12} cae a una razón mayor a como lo hace d_{02}. El momento d_{01} no varía apreciablemente con la altura de la barrera de potencial (ver figura (3.12)).

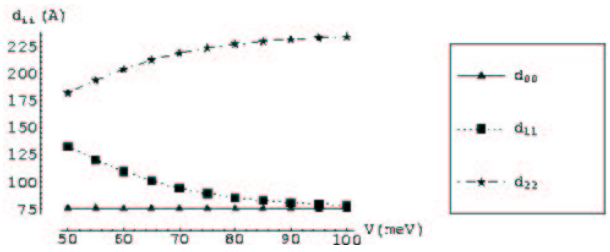


Figura 3.11: **Momentos de dipolo eléctrico intrasub-banda como función de la altura de la barrera de potencial.**

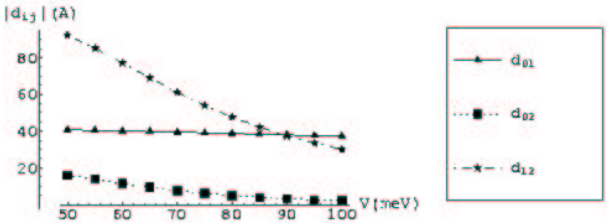


Figura 3.12: **Valor absoluto de los momentos de dipolo eléctrico de intrasub-banda cuando se varía la altura de la barrera de potencial.**

3.3. Factores de forma electrón-bosón y tasas de scattering electrón-fonón LO

Se estudia la influencia de los parámetros geométricos en las tasas de absorción y emisión de fonones longitudinales ópticos (LO) por un electrón en los estados propios del pozo asimétrico doble.
Para hallar las tasas de scattering de fonones LO se utiliza un modelo en el que se considera la interacción de electrones bidimensionales confinados con fonones LO tridimensionales a través del Hamiltoniano de Fröhlich. Para esto, no se tiene en cuenta el acoplamiento entre electrones y otras clases de fonones, así como el apantallamiento efectivo de la interacción electrón-fonón por electrones libres. En la obtención de las tasas de scattering de absorción y emisión de fonones LO se ha utilizado el modelo desarrollado por *B.A. Manson* y *S.Das Sarma* publicado en [11] y [13].

3.3.1. Interacción electrón- fonón LO

El acoplamiento polar de un electrón 2D a el campo eléctrico creado por fonones LO puede ser escrito por la interacción electrostática:

$$H_{e-f} = e \int \mathrm{d}^2 r \int \mathrm{d}x\, \rho(x,\mathbf{r})\; V(x,\mathbf{r}) \tag{3.1}$$

donde $\rho(x,\mathbf{r})$ representa el operador densidad de electrones y $V(x,\mathbf{r})$ es el potencial electro-estático creado por los fonones LO, x es la dirección de confinamiento y $\mathbf{r}$ es el vector de posición en las otras dos direcciones
La densidad de electrones se puede expandir en operadores de segunda cuantización:

$$\rho(x,\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{R})\,\psi(\mathbf{R}) = \sum_{\lambda,\lambda'} \phi^*_{\lambda'}(x)\;\phi_\lambda(x)\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}\; C^\dagger_{\lambda'}(\mathbf{k}')\, C_\lambda(\mathbf{k}) \tag{3.2}$$

con $\psi(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi_\lambda(x)$ la función de onda de un electrón donde $\mathbf{R} = (x,\mathbf{r})$ es el vector de posición en las tres dimensiones y $\phi_\lambda(x)$ es la parte de la función de onda confinada para la λ-ésima banda asociada con el movimiento cuantizado en x. El movimiento es completamente libre en el plano definido por $\mathbf{r}$. $\mathbf{Q} = (q_x,\mathbf{q})$ es el vector de onda tridimensional del fonón longitudinal LO, $\mathbf{q}$ es el vector de onda bidimensional conservado. $C^\dagger_\lambda(\mathbf{k})$, $C_\lambda(\mathbf{k})$ son los operadores que crean o destruyen un electrón con vector de onda bidimensional $\mathbf{k}$ en la sub-banda λ, respectivamente.
El potencial electrostático $V(\mathbf{R})$ debido a la polarización de la red es:

$$V(x,\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{Q}} i\, e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \left[\frac{2\pi e^2\omega_{LO}}{({q_x}^2+q^2)}\Big(\frac{1}{\epsilon_\infty}-\frac{1}{\epsilon_0}\Big)\right]^{1/2} [b(\mathbf{Q}) + b^\dagger(-\mathbf{Q})] \tag{3.3}$$

donde $b(\mathbf{Q})$, $b^\dagger(-\mathbf{Q})$ son los operadores de destrucción y creación de fonones. ϵ_0, ϵ_∞ son las constantes dieléctricas de baja y alta frecuencia respectivamente. En este caso no se tiene en cuenta dispersión en la frecuencia del fonón LO y por lo tanto esta frecuencia se asume constante de valor ω_{LO}.
Reemplazando (3.2) y (3.3) en (3.1) e integrando sobre el espacio bidimensional definido por $\mathbf{r}$, se obtiene:

$$H_{e-f} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\lambda,\lambda',\mathbf{k},\mathbf{q}} \sum_{q_x}\; M_{\lambda,\lambda'}(q_x,\mathbf{q})(b(\mathbf{Q}) + b^\dagger(-\mathbf{Q}))\, C^\dagger_{\lambda'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\, C_\lambda(\mathbf{k}) \tag{3.4}$$

Ω es un volumen de normalización que se tomará como igual a uno de aqui en adelante. $M_{\lambda,\lambda'}(q_x,\mathbf{q})$ es un elemento matricial dado por:

$$M_{\lambda,\lambda'}(q_x,\mathbf{q}) = i\left[\frac{2\,\pi\,\omega_{LO}\,e^2}{(q_x^2+q^2)}\Big(\frac{1}{\epsilon_\infty}-\frac{1}{\epsilon_0}\Big)\right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \phi_\lambda(x)\, e^{iq_x\,x}\, \phi^*_{\lambda'}(x) \tag{3.5}$$

Se acostumbra a escribir este elemento matricial en términos de la constante de acoplamiento de Fröhlich, definida por:

$$\alpha = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)\left(\frac{e^2}{\omega_{LO}}\right)(2\,m\,\omega_{LO})^{1/2} \tag{3.6}$$

Usando (3.6) en (3.5) se obtiene:

$$M_{\lambda,\lambda'}(q_x,\mathbf{q}) = i\left[\frac{2\,\pi\,\alpha}{(q_x^2+q^2)}\left(\frac{2\,\omega_{LO}^3}{m}\right)^{1/2}\right]\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\phi_\lambda(x)\,e^{iq_x\,x}\,\phi^*_{\lambda'}(x) \tag{3.7}$$

El problema de interés consiste en un electrón moviéndose libremente en un plano interactuando con una red polar. Escribiendo el Hamiltoniano (3.4) en su forma equivalente para dos dimensiones:

$$H_{e-f} = \sum_{\lambda,\lambda',\mathbf{q},q_x} M_{\lambda,\lambda'}(q_x,\mathbf{q})\,e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}(b(\mathbf{Q}) + b^\dagger(-\mathbf{Q})) \tag{3.8}$$

Las correcciones principales a la auto-energía $\Sigma_{\lambda_1\lambda_2}(\mathbf{k}, i\omega_n)$, debido a la interacción electrón-fonón, representada por (3.8), es:

$$\Sigma_{\lambda_1\lambda_2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\left(\frac{1}{\beta}\right)\sum_{\mathbf{q}}\sum_{i\nu_m}\sum_{\lambda_3,\lambda_4} V'_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{q}, i\nu_m)\,G_{\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{k}-\mathbf{q}; i\omega_n - i\nu_m) \tag{3.9}$$

En la ecuación (3.9), $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ y $\nu_m = 2m\pi/\beta$ con $n, m = 0, \pm1, \pm2, ...$ son las frecuencias de Matsubara ($\beta = 1/k_BT$ donde T es la temperatura y k_B es la constante de Boltzmann), $G_{\lambda_1\lambda_2}(\mathbf{q}, i\nu_m)$ es la función de Green de un electrón y $V'_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{q}, i\nu_m)$ es la interacción efectiva electrón-electrón mediada por un fonón LO. Dicha interacción está dada por:

$$V'_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{q}, i\nu_m) = \sum_{q_x} M_{\lambda_1\lambda_2}(q_x,\mathbf{q})\,M^*_{\lambda_3\lambda_4}(q_x,\mathbf{q})\,D_{LO}(\mathbf{Q}, i\nu_m) \tag{3.10}$$

donde

$$D_{LO}(\mathbf{Q}, i\nu_m) = \frac{2\,\omega_{LO}}{(i\nu_m)^2 - \omega_{LO}^2} \tag{3.11}$$

es el propagador para el fonón LO con un vector de onda tridimensional $\mathbf{Q} = (q_x, \mathbf{q})$.

Usando (3.7) en (3.10) y realizando la suma sobre q_x, se obtiene la interacción efectiva electrón-electrón:

$$V'_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{q}, i\nu_m) = (2\pi\alpha)\left(\frac{2\,\omega_{LO}^3}{m}\right)^{1/2}\left(\frac{2\omega_{LO}}{(i\nu_m)^2 - \omega_{LO}^2}\right)\left(\frac{1}{2q}\right)$$
$$\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\,\phi_{\lambda_1}(x)\;\phi^*_{\lambda_2}(x)\,e^{-q|x-x'|}\,\phi_{\lambda_3}(x')\;\phi^*_{\lambda_4}(x')\right] \tag{3.12}$$

El término entre paréntesis cuadrados se denomina *Factor de Forma* y aparece siempre que se quiera calcular la interacción electrón-electrón mediada por un bosón. Toda la información acerca de las funciones de onda sub-banda está contenida en el factor de forma. Es impotante ya que determina la magnitud relativa de la dispersión electrón-electrón y muestra que las transiciones intrasub-banda tienen un mayor peso que las transiciones intersub-banda [15].
Las funciones de onda de los estados ligados $\phi_\lambda(x)$ son reales y por lo tanto el *factor de forma* en los paréntesis cuadrados será:

$$f_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\, \phi_{\lambda_1}(x)\ \phi_{\lambda_2}(x)\, e^{-q|x-x'|}\, \phi_{\lambda_3}(x')\ \phi_{\lambda_4}(x') \tag{3.13}$$

y la interacción electrón-electrón :

$$V'_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{q}, i\nu_m) = (2\pi\alpha)\Big(\frac{2\,\omega_{LO}^3}{m}\Big)^{1/2} \left(\frac{2\omega_{LO}}{(i\nu_m)^2 - \omega_{LO}^2}\right)\left(\frac{1}{2q}\right) f_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(q) \tag{3.14}$$

Reemplazando (3.10) en (3.9)

$$\Sigma_{\lambda_1\lambda_2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\Big(\frac{1}{\beta}\Big) \sum_{\mathbf{q}} \sum_{i\nu_m} \sum_{\lambda_3,\lambda_4} f_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(q)\ |g(q)|^2 \\ G_{\lambda_3\lambda_4}(\mathbf{k}-\mathbf{q}; i\omega_n - i\nu_m)\, D_{LO}(i\nu_m) \tag{3.15}$$

donde:

$$g(q) = \left[\Big(\frac{\pi\alpha}{q}\Big)\Big(\frac{2\,\omega_{LO}^3}{m}\Big)^{1/2}\right] \tag{3.16}$$

es el acoplamiento electrón-fonón LO para el problema de polarón en dos dimensiones, con $\mathbf{q}$ el vector de onda conservado. Todas las sumas sobre los posible valores de q_x (el vector de onda del fonón LO en la dirección de confinamiento) se han realizado para obtener las ecuaciones (3.12)-(3.16). También $D_{LO} = 2\omega_{LO}((i\nu_m)^2 - \omega_{LO}^2)^{-1}$ es independiente del vector de onda del fonón ya que no se ha tenido en cuenta la dispersión del fonón LO.
En principio, la función de Green electrónica G que entra en la ecuación (3.15) debe ser determinada de la ecuación de Dyson $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$ donde $G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ es la función de Green no-interactuante, dada por:

$$G_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_0(k)} \tag{3.17}$$

con

$$\epsilon_0(k) = E_0(k) - \mu \tag{3.18}$$

donde $E_0(k)$ es la energía del electrón no interactuante y μ es el potencial químico. La ecuación (3.15) junto con la ecuación de Dyson definen un conjunto de ecuaciones acopladas que deben ser solucionadas auto-consistentemente. Para el problema del fonón tridimensional, se encuentran peores resultados si se soluciona la ecuación de Dyson y la ecuación (3.15) auto-consistentemente que si simplemente se reemplaza G_0 por G en la ecuación (3.15). En este caso se sustituye G_0 por G en (3.15) para obtener una buena aproximación a la correción de la auto-energía para el problema del polarón.

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\alpha\,\omega_{LO}^{3/2}}{2\,\pi(2m)^{1/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \times \left[\frac{n_B + n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})}{i\omega_n + \omega_{LO} - \epsilon_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})} + \frac{n_B + 1 - n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})}{i\omega_n - \omega_{LO} - \epsilon_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})} \right] \tag{3.19}$$

con $f(q)$ el factor de forma. Los factores n_B y n_F que aparecen en (3.19) representan las factores de ocupación de Bose (para fonón LO) y de Fermi (para electrón), que en general son:

$$\begin{aligned} n_B &= (e^{\beta\,\omega_{LO}} - 1)^{-1} \\ n_F(k) &= (e^{\beta[E_0(k)-\mu]} + 1)^{-1} \end{aligned} \tag{3.20}$$

La auto-energía dada por (3.19) puede ser evaluada numéricamente para un vector de onda arbitrario y frecuencia arbitrarios.
De la expresión (3.19) se obtienen las partes real e imaginaria de la auto-energía. La parte real da información de la corrección a la energía del electrón y la parte imaginaria se relaciona con el ensanchamiento de la energía del electrón y las tasas de scattering. En este caso, las partes real e imaginaria de la auto-energía son:

$$\mathrm{Re}\Sigma(\mathbf{k}, E) = \frac{\alpha\,\omega_{LO^{3/2}}}{2\pi(2m)^{1/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \times \left[\frac{n_B + n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})}{E + \omega_{LO} - E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})} + \frac{n_B + 1 - n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})}{E - \omega_{LO} - E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})} \right] \tag{3.21}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\Sigma(\mathbf{k}, E) = -\frac{\alpha\,\omega_{LO^{3/2}}}{2\pi(2m)^{1/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \\ \times\{[n_B + n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\ \delta(E + \omega_{LO} - E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})) \\ +[n_B + 1 - n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\ \delta(E - \omega_{LO} - E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}))\} \end{aligned} \tag{3.22}$$

Los vectores bidimensionales $\mathbf{k}$ y $\mathbf{q}$ son los vectores de onda del electrón y el fonón, respectivamente, en el plano, mientras que θ es el ángulo de scattering en el plano definido por:

$$|\mathbf{k}-\mathbf{q}| = (k^2+q^2-2kq\cos\theta)^{1/2} \tag{3.23}$$

La cantidad $E_0(k) = k^2/2m$ es la masa del electrón *desnudo* sin tener en cuenta los efectos de no parabolicidad.
Para calcular las tasas de scattering polar $\Gamma(k)$ para cuasi-partícula, se calcula $\mathrm{Im}\Sigma(k,E)$ el la aproximación de *mass shell*. Sustituyendo $E = k^2/2m + E_0(\mathbf{k})$ en la ecuación (3.22):

$$\begin{aligned}\Gamma(k) &= -\mathrm{Im}\Sigma(k, E = k^2/2m)\\ &= \frac{\alpha\,\omega_{LO}{}^{3/2}}{2\pi(2m)^{1/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\\ &\times\{[n_B + n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\;\delta(E_0(\mathbf{k})+\omega_{LO}-E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}))\\ &+[n_B+1-n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\;\delta(E_0(\mathbf{k})-\omega_{LO}-E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}))\}\end{aligned} \tag{3.24}$$

El primer término en la ecuación (3.24) denota la absorción de un fonón LO por un electrón mientras que el segundo término denota la emisión de un fonón LO. Separando los términos que tienen que ver con la absorción con los que tienen que ver con la emisión, se obtiene:

$$\begin{aligned}\Gamma_a(k) &= \frac{\alpha\,\omega_{LO}{}^{3/2}}{2\pi(2m)^{1/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\\ &\times[n_B + n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\,\delta(E_0(\mathbf{k})+\omega_{LO}-E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}))\end{aligned} \tag{3.25}$$

$$\begin{aligned}\Gamma_e(k) &= \frac{\alpha\,\omega_{LO}{}^{3/2}}{2\pi(2m)^{1/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}q\, f(q)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\\ &\times[n_B + 1 - n_F(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\,\delta(E_0(\mathbf{k})-\omega_{LO}-E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}))\end{aligned} \tag{3.26}$$

La dependencia de las tasas absorción y la emisión en las ecuaciones (3.25) y (3.26) de la energía del electrón se obtiene utilizando $k = (2mE_0)^{1/2}$. La integración sobre el ángulo de dispersión se hace usando:

$$\delta(E_0(\mathbf{k}) \pm \omega_{LO} - E_0(\mathbf{k}-\mathbf{q})) = \delta(kq\cos\theta/m - q^2/2m \pm \omega_{LO}) \tag{3.27}$$

Finalmente:

$$\Gamma_a(k) = (\alpha\gamma\omega_{LO})[n_B + n_F(k^2+\gamma^2)^{1/2}]$$
$$\int_{-k+(k^2+\gamma^2)^{1/2}}^{k+(k^2+\gamma^2)^{1/2}} \mathrm{d}q\ f(q)[4k^2q^2 - (q^2-\gamma^2)^2]^{-1/2} \tag{3.28}$$

y

$$\Gamma_e(k) = (\alpha\gamma\omega_{LO})H(k-\gamma)[1 + n_B - n_F(k^2-\gamma^2)^{1/2}]$$
$$\int_{k-(k^2-\gamma^2)^{1/2}}^{k+(k^2-\gamma^2)^{1/2}} \mathrm{d}q\ f(q)[4k^2q^2 - (q^2-\gamma^2)^2]^{-1/2} \tag{3.29}$$

donde

$$\gamma^2 = 2m\omega_{LO} \tag{3.30}$$

Y

$$n_F(k^2 \pm \gamma^2)^{1/2} = (1 + e^{\beta(k^2/2m \pm \omega_{LO} - \mu)})^{-1} \tag{3.31}$$

con $n_B = (e^{\beta\,\omega_{LO}} - 1)^{-1}$. El potencial químico μ de los electrones está determinado por la densidad de electrones N_S y la temperatura absoluta T:

$$\mu = \beta^{-1}\ln(e^{\beta\,E_F} - 1), \tag{3.32}$$

donde

$$E_F = \pi\,N_S/m \tag{3.33}$$

es la energía de Fermi del sistema. $H(x)$ es la función de paso unitario de Heaviside. De esta forma se obtienen las tasas de scattering de emisión y absorción de fonones LO a partir de un fomalismo de teoría de muchos cuerpos.

3.3.2. Factores de forma

Como ya se mencionó, toda la información acerca de las funciones de onda subbanda está contenida en el factor de forma, que además determina la magnitud relativa de la dispersión electrón-electrón. Se muestra como influye la geometría del pozo en el factor de forma.
En problemas que tienen que ver con pozos cuánticos asimétricos, es usual en los cálculos (momentos de dipolo, factores de forma, etc) utilizar solo la contribución del pozo ancho. Esta aproximación es útil siempre que se trabaje con cantidades que dependan de la función de onda del estado base y en algunos casos de la función de onda del primer estado excitado. Pero si la cantidad a calcular depende de la función

de onda de los estados excitados esta aproximación carece de validez.

Se calcularon las contribuciones al factor de forma por cada una de las regiones que componen el pozo, esto es; barrera de potencial de la izquierda, pozo ancho, barrera de potencial central, pozo delgado y barrera de potencial derecha. Se encontró que para el factor de forma $F_{0000}(q)$ efectivamente la contribución principal proviene del pozo ancho, le siguen (con dos ordenes de magnitud por debajo, aproximadamente) las contribuciones de las barreras central y de la izquierda, la contribución del pozo delgado (cerca de seis órdenes de magnitud por debajo) y por último la contribución de la barrera de la derecha (ver figura (3.13)).
Ya que las funciones de onda de los estados excitados cambian su forma de manera mas notoria al variar el tamaño del pozo delgado, las contribuciones a los factores de forma correspondientes a estos estados cambian dependiendo el tamaño del pozo delgado. El factor de forma del primer estado excitado tiene su contribución principal en el pozo ancho y el pozo delgado contribuye de una forma al segundo estado excitado cuando el tamaño relativo de pozo delgado es menor de 1/3. A medida que el tamaño relativo del pozo delgado aumenta a valores superiores de 1/3 la situación se invierte, el pozo delgado contribuye de una forma mas importante al factor de forma del primer estado excitado y el pozo ancho contribuye de una forma notoria al factor de forma correspondiente al segundo estado excitado, tal como se observa en las figuras (3.14) y (3.15).

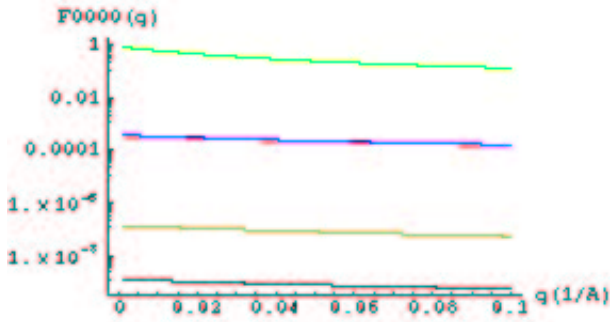


Figura 3.13: **Contribuciones al factor de forma $F_{0000}(q)$ para un pozo asimétrico con pozo ancho de 140Å barrera de 60Å y pozo delgado de 60Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. Curva verde: contribución del pozo ancho, curva azul: contribución de la barrera central, curva roja: contribución barrera izquierda, curva beige: contribución pozo delgado y curva negra: contribución barrera derecha.**

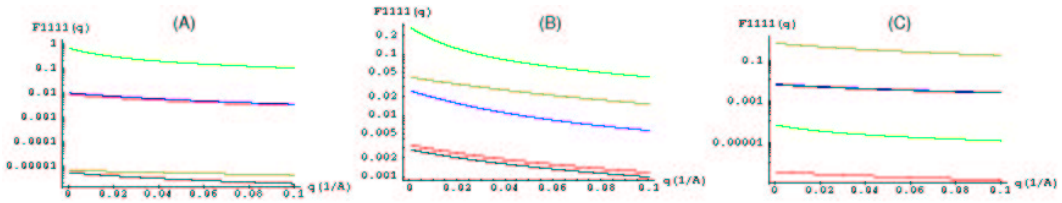


Figura 3.14: **Contribuciones al factor de forma $F_{1111}(q)$, para un pozo asimétrico con pozo ancho de 150Å y barrera de potencial de 75Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. (A)$d_R/d_L = 0{,}1$, (B)$d_R/d_L = 0{,}3$ y (C)$d_R/d_L = 0{,}5$. Se utiliza la misma convención de colores que en la figura (3.13).**

3.3.3. Tasas de scattering

Al calcular las tasas de scattering se observa en general que la tasa de emisión siempre es más alta que la tasa de absorción. Se encuentran comportamientos interesantes de las tasas de scattering con la geometría del sistema. Todos los calculos se hicieron para una temperatura de $300K$ y utilizando una densidad de portadores de $5 \times 10^{11} cm^{-2}$. Como energía del fonón LO se tomó $36meV$. Al variar el tamaño del pozo delgado, se observa que las tasas de scattering para el estado base permanecen constantes (ver figura (3.16)), mientras que las tasas de scattering de los estados excitados presentan un mínimo cerca del valor de tamaño relativo de pozo delgado a pozo ancho (d_R/d_L) de 0,3 (ver figuras ((3.17) y (3.18)).

Calculando las tasas de scattering de emisión y absorción como función del ancho relativo de la barrera de potencial se encuentra que para el estado base dichas tasas no varian al aumentar el tamaño de la barrera (ver figura (3.19)) mientras que las tasas correspondientes a los estados excitados crecen con el aumento del tamaño de

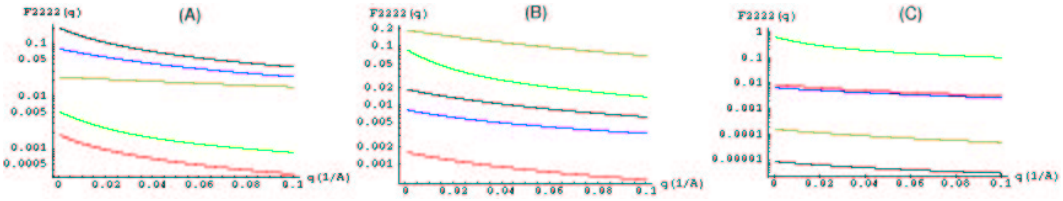


Figura 3.15: **Contribuciones al factor de forma $F_{2222}(q)$, para un pozo asimétrico con pozo ancho de 150Å y barrera de potencial de 75Å. Barreras de potencial simétricas de $90meV$. (A)$d_R/d_L = 0{,}1$, (B)$d_R/d_L = 0{,}3$ y (C)$d_R/d_L = 0{,}5$. Se utiliza la misma convención de colores que en la figura (3.13)**

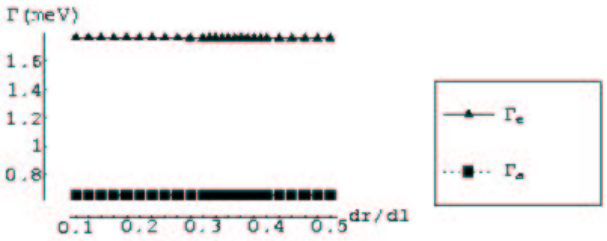


Figura 3.16: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el estado base, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).**

la barrera, aunque lo hacen muy lentamente (ver figuras (3.20) y (3.21)).

Un comportamiento similar a este se observa cuando se varian tanto el tamaño del pozo ancho como cuando se varia la altura de la barrera de potencial, esto es, las tasas de emisión y absorción del estado base permanecen prácticamente constantes, las tasas correspondientes a los estados excitados y a la transición entre estado base y primer excitado aumentan con el tamaño del pozo ancho o la altura de la barrera de potencial y las tasas correspondientes a las transiciones entre estado base y segundo excitado y la transición entre estados excitados decrecen con el aumento del tamaño del pozo ancho o el aumento de la altura de la barrera de potencial.

3.4. Conclusiones del capítulo

Se muestra como los valores de las energías propias del pozo asimétrico doble dependen fuertemente de los tamaños del pozo delgado. Para tamaño de pozo delgado relativo al pozo ancho menores de 1/3 los valores de las energías del estado base y del primer estado excitado no varían apreciablemente mientras que la energía del estado base va disminuyendo con el tamaño del pozo delgado. Para tamaño relativo de 1/3 las energías propias de los estados excitados tienen su mínima separación y para longitudes relativas de pozo delgado mayores a 1/3 la energía del segundo estado ex-

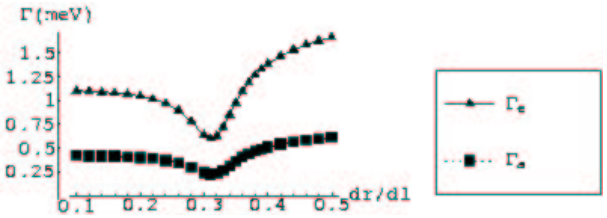


Figura 3.17: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el primer estado excitado, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).**

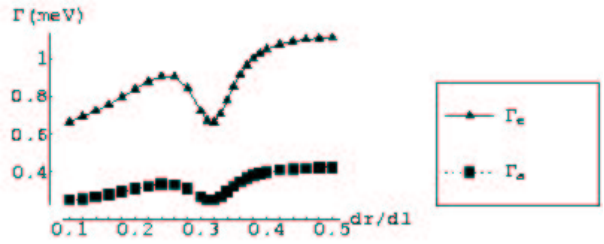


Figura 3.18: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el segundo estado excitado, como función del ancho relativo del pozo delgado (d_R/d_L).**

citado no cambia apreciablemente mientras que la del primer estado excitado tiende a decrecer con el tamaño del pozo delgado. Este comportamiento se explica a partir de las funciones de onda del sistema, ya que para el valor de $d_R/d_L = 1/3$ se encuentra un anti-cruce de las funciones de onda, esto es, la función de onda para longitudes de pozo delgado relativa menores de 1/3 es el primer estado excitado, para longitudes mayores de 1/3 pasa a ser el segundo estado excitado y viceversa.
Tambien se observa que las funciones de onda no cambian su forma apreciablemente al variar el tamaño de la barrera de potencial y por lo tanto el valor de las energías propias se mantiene prácticamente constante con el tamaño de la barrera.
Con respecto a los momentos de dipolo eléctrico, que dan información de las posibles transiciones por acción de campos eléctricos, tambien se observa una dependencia fuerte con el tamaño del pozo delgado. Para el valor $d_r/d_L = 1/3$ se observa un valor máximo en el momento de dipolo correspondiente a la transición entre estados excitados. Además, para este valor crítico, lo restantes momento de dipolo intersub-banda toman el mismo valor.
Analizando los factores de forma de la interacción electrón-bosón intrasub-banda en términos de cada una de las contribuciones de los contituyentes del pozo asimétrico, esto es, barrera de potencial de la izquierda, pozo ancho, barrera de potencial cen-

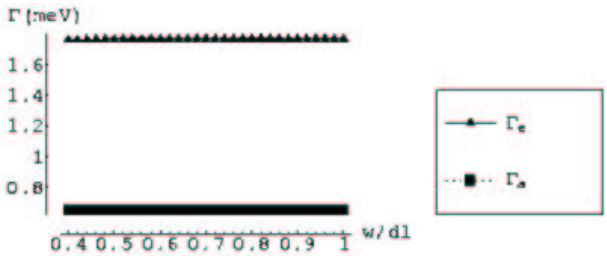


Figura 3.19: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el estado base, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).**

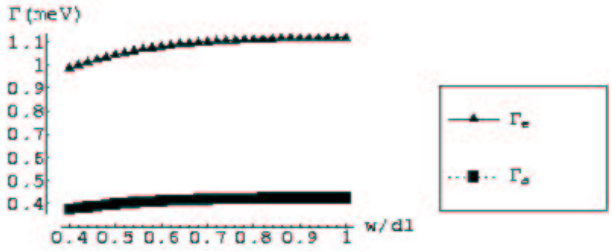


Figura 3.20: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el primer estado excitado, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).**

tral, pozo delgado y barrera de potencial de la izquierda, se observa que la principal contribución depende del estado propio que se esté considerando. Si se está hablando del factor de forma corrspondiente al estado base del sistema, su contribución principal corresponde al pozo ancho mientras que para los estados excitados esto va depender del tamaño de pozo delgado. Para pozos delgados pequeños, comparados con el tamaño de pozo ancho, el factor de forma correspondiente al primer estado excitado tiene su contribución principal en el pozo ancho mientras que el factor de forma del segundo estado excitado tiene su contribución principal en el pozo delgado, la situación se invierte a medida que aumenta el tamaño de pozo delgado.
Con respecto a las tasas de scattering de absorción y emisión de fonones LO, se observa una dependencia importante con el tamaño del pozo delgado, para el valor crítico de $d_R/d_L = 1/3$ las tasas intersub-banda de estados excitados presentan un mínimo, lo que implicaría la creación de un polarón de larga vida para esta geometría.

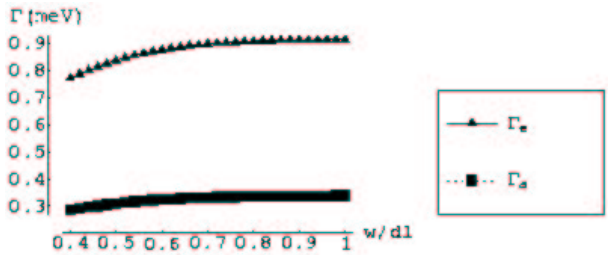


Figura 3.21: **Tazas de scattering de emisión y absorción para el segundo estado excitado, como función del ancho relativo de la barrera de potencial (w/d_L).**

Capítulo 4

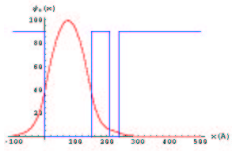
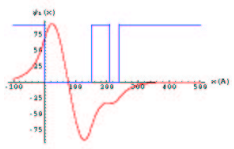
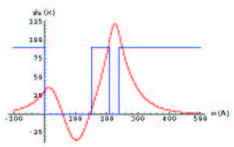
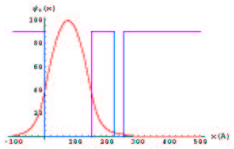
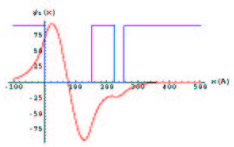
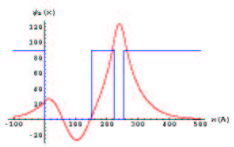
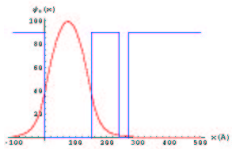
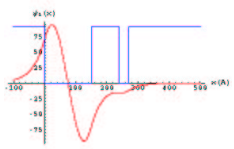
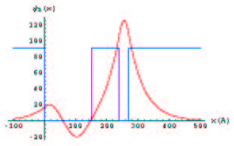
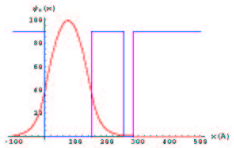
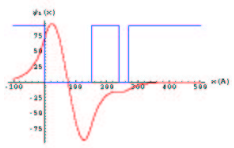
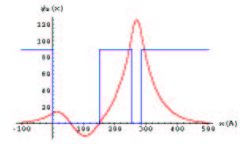
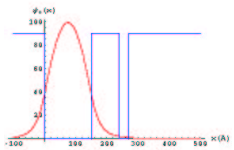
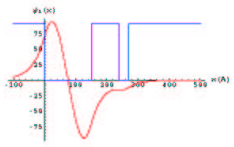
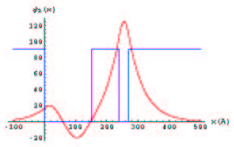
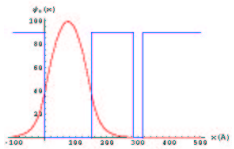
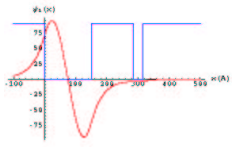
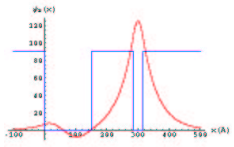
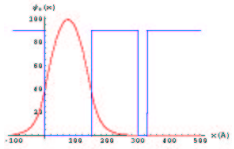
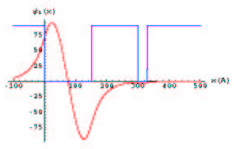
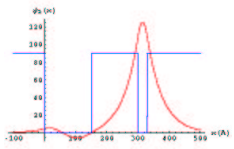
Conclusiones

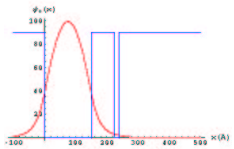
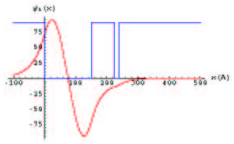
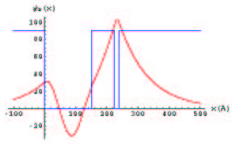
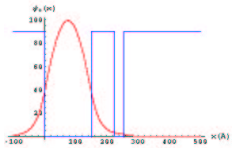
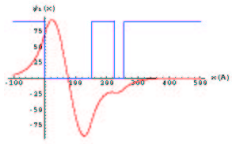
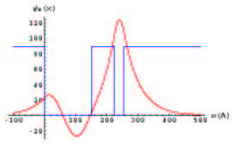
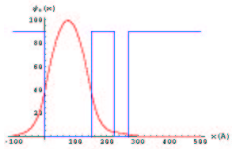
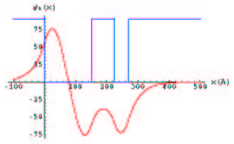
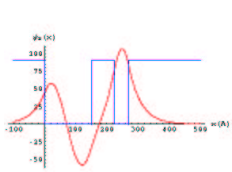
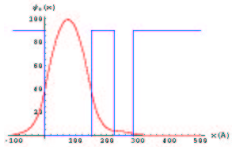
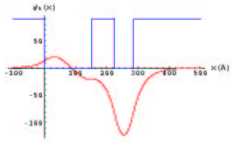
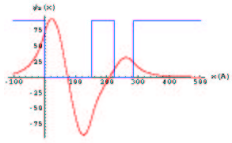
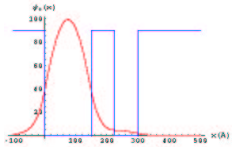
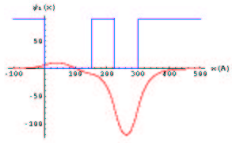
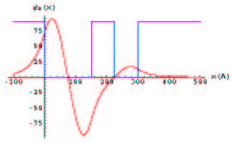
Se estudia el sistema doble pozo asimétrico como modelo de un sistema de tres niveles en el cual es posible usar la geometría para diseñar sus propiedades ópticas y dinámicas. En particular se estudia la posibilidad de producir ondas electromagnéticas coherentes a partir de un pulso de luz con una composición de frecuencias mas ancha que la diferencia de energías de los dos estados excitados y con una frecuencia central igual a la diferencia de energía entre el estado base y la energía media de los dos estados excitados. Este sistema es capaz de producir ondas electromagnéticas coherentes que pueden ser moduladas con un campo externo al cual se le puede variar la fase.
Con el ánimo de establecer el rango de los principales parámetros que intervienen en el cálculo del tunelamiento dinámico y sus consecuencias en las transiciones intra e intersub-bandas se hace un estudio sistemático de las variaciones de las energías del doble pozo al usar confinamiento finito e infinito. Se encuentra que el sistema de tres niveles solamente se obtiene en el primer caso para anchos del pozo delgado mayores al 40 % de la longitud del pozo ancho, mientras que el confinamiento finito permite estudiar pozos de anchos aún menores del 10 % del pozo ancho. La función de onda del segundo estado del sistema o primero excitado va mostrando un peso mayor debido al pozo delgado a medida que el tamaño de este último aumenta, mientras que la función de onda del segundo estado excitado disminuye esta componente a medida que aumenta la longitud del pozo delgado. Una gráfica de la variación de las tres energías con la razón de los anchos de los pozos muestra un mínimo en $d_R/d_L = 1/3$ y las funciones de onda de los estados excitados se intercambian como se puede observar en los pesos que se le asignan a los dos pozos separados. Es decir, se encuentra un anticruce para la geometría que corresponde al tunelamiento resonante con un dipolo máximo.
Al construir el factor de forma de la interacción electrón-bosón para este sistema a partir de las funciones de onda obtenidas en el capítulo 1 para los electrones y considereando solamente bosones tridimensionales se observa la composición geométrica del

factor de forma y se encuentra que al igual que para un pozo sencillo los factores de forma de las transiciones intrasub-banda son por lo menos de un orden de magnitud mayores que los correspondientes a transiciones intersub-banda. Finalmente usando un modelo de muchos cuerpos para la interacción electrón-fonón LO se obtiene el primer término de la autoenergía, cuya parte imaginaria es la tasa de scattering debida a esta interacción. Como resultado interesante se encuentra que para la geometría de tunelamiento resonante las tasas de scattering intersub-bandas presentan un mínimo, lo que se interpreta como un efecto cuello de botella que debe influenciar la dinámica del dispositivo ya que significa la creación de un polarón de larga vida para esta geometría.

Anexo A

Se muestran las funciones de onda propias de los tres estados confinados para un pozo asimétrico doble con pozo ancho de 150Åcon barreras de potencial simétricas de valor $90\,meV$.
Las gráficas de la primera tabla se obtuvieron dejando el tamaño relativo de la barrera de potencial fijo a un valor de $w/d_L = 0{,}5$ y variando el tamaño relativo del pozo delgado.
Las gráficas de la segunda tabla se obtuvieron dejando fijo el tamaño relativo del pozo delgado a un valor de $d_R/d_L = 0{,}2$ y variando el tamaño relativo de la barrera de potencial.

Funciones de onda para aDQW cuando se varía el tamaño de la barrera			
	Estado Base	**Primer Estado Excitado**	**Segundo Estado Excitado**
w/dl=0.4 dr/dl=0.2			
w/dl=0.5 dr/dl=0.2			
w/dl=0.6 dr/dl=0.2			
w/dl=0.7 dr/dl=0.2			
w/dl=0.8 dr/dl=0.2			
w/dl=0.9 dr/dl=0.2			
w/dl=1 dr/dl=0.2			

Funciones de onda para pozo asimétrico doble cuando se varía el tamaño del Pozo delgado			
	Estado Base	Primer Estado Excitado	Segundo Estado Excitado
w/dl=0.5 dr/dl=0.1			
w/dl=0.5 dr/dl=0.2			
w/dl=0.5 dr/dl=0.3			
w/dl=0.5 dr/dl=0.4			
w/dl=0.5 dr/dl=0.5			

Anexo B

Se recopilan las presentaciones y artículos producto del desarrollo del presente trabajo.

- *Coherent Control of dynamical tunneling in quantum wells.* Trabajo presentado en International Conference on Non-Linear Optics (ICONO 2001) realizado en Minsk, Bielorusia en Julio del 2001
- *Study of dynamical dipole moment in an asymmetric double quantum well.* Brazilian Journal of Physics, vol 32, No. 2A, June 2002.
- *Polaronic effect in the cahrge dynamics of quantum wells.* Physica E, vol 17, 2003.
- *Optical effects based on intersub-band-transitions in quantum wells.* Aceptada en Micro-electronics Journal.
- *Diseño electrónico y óptico de heteroestructuras semiconductoras.* Presentado en el Simposio Latinoamericano de Física de la Materia Condensada (SLAFES 2002) realizado en Mérida, Venzuela en diciembre del 2002.

Coherent Control of dynamical tunneling in quantum wells

By
J. Bohórquez. and A. S. Camacho B.
Departamento de Física, Universidad de los Andes, Santafé de Bogotá, Colombia,
Fax:57 1 3324516, e-mail:acamacho @uniandes.edu.co

The dynamic coherent behavior of the charge in an asymmetric double quantum well is studied through the time dependent intraband dipole moment, which is induced by ultrafast optical excitation. The initial coherent stage lasts until the coherent optical polarization created by the excitation has decayed. A suitable engineered asymmetric double quantum well can be treated as a three level system by designing two conduction band levels, closed lying, and one ground state conduction band. The two upper levels are coherent coupled after they are optically populated by transitions from the ground state band level. The dipole moment oscillations are completely equivalent to the tunneling oscillations, which are the source of electromagnetic radiation in the range of THz as has been detected [1]. The dephasing times for different electronic states in a given heterostructure can be very different and typically range from a few tens of femtoseconds to as long as few picoseconds.
The polarization relaxation time is estimated by taken into account both microscopically calculated intraband scattering rates and cross-relaxation rates. The former relaxation rates for the transitions are calculated by a many body perturbative formalism with phonon emission and absorption self-energy terms obtained explicitly. Furthermore, the electron-LO-phonon scattering rates are discussed for each level and for the possible transitions between them as function of temperature, carrier density and geometrical design (barrier width) for quasi-two dimensional LO-phonons and also for three dimensional or bulk LO-phonons. In addition control mechanisms such as screening effects, geometric design and external electric field to couple the two levels are analyzed.

Introduction

The understanding of the dynamics of the ultrafast optical generation of carriers in semiconductor systems is essential for the proper analysis of any time resolved experiment [1-3]. Quantum dynamical tunneling is one of the important processes occurring in many different physical systems. Electronic states in heterostructures are inhomogeneous in real space. Ultrafast optical excitation of such states can therefore result in real space redistribution of electric charge density on a time scale shorter than all relevant relaxation times. Studies of

the ultrafast real space movement of carriers in this collisionsless regime reveal fundamental quantum mechanical properties of heterostructures electrons [4].

One of the simplest systems in which a complete study is possible, is an asymmetric double quantum well (a-DQW) engineered such that the three lowest conduction band levels set a three level system. In this system, it is possible to created macroscopically coherent superposition of the two lowest excited conduction sub-band states 1 and 2 [5]. The components eigenstates of the wave packet so created subsequently evolve at different rate leading to quantum beats and an oscillating dipole moment, which can also be understood as tunneling between the two wells.

In this work is calculated the tunneling time as function of barrier width for realistic a-DQW's chosen from previous calculation [6] and from experiments [1-2]. The dephasing time or polarization relaxation time in quantum wells is usually taken to be the intraband relaxation time, which is set by LO-phonon carrier scattering at low densities [3]. Dephasing times are also predicted by taken into account a more classical point of view, cross-relaxation rates, which has giving good results in single quantum wells and a more fundamental quantum theoretical description for calculating the scattering rates by a perturbative many-body self-energy method.[7], which is outlined in this report and some numerical results for the polaron lifetime and electron-LO-phonon scattering rates are discussed.

1. Dynamic Tunneling

The radiation will create a linear superposition of states 1 and 2. in such a way that the probability density oscillate between the values:

$\left(|\psi_1(z)| - |\psi_1(z)|\right)^2$ and $\left(|\psi_1(z)| + |\psi_1(z)|\right)^2$ with a period $\tau_{coh} = \frac{\hbar}{\Delta E}$, where $\tau_{coh}/2$ is called tunneling time. This tunneling time is in our case of the order of tens to hundreds of femtoseconds depending on the geometry as shown in Fig.1

The electronic density of the a-DQW exhibits temporal oscillations with the frequency of the splitting between the two levels, which are the source of the Thz radiation [1]

In particular the dipole moment of the electrons in the two upper states can be understood as distributed between the 1 y 2 through their density matrix fij. The intraband density matrix f_{ij} completely characterizes the dynamics of the conduction band electrons.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f_{12} = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)f_{12} + d_{01}E^*(t)p_{01} - d_{02}E(t)p_{02} \qquad (1)$$

assuming a $\delta(t)$ – type excitation pulse in the time domain , the intrabband optical polarization is then given by

$$f_{12}(t) = d_{01}d_{02}\left(\frac{E_0^2\tau_p^2}{\hbar^2}\right)\theta(t)e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_2-\varepsilon_1)t} \qquad (2)$$

oscillating with the frequency $(\varepsilon_2-\varepsilon_1)/h$. Denoting by D_{ij} the matrix elements of the dipole moment between states i and j, the dipole moment of the electrons in the conduction sub-band is then

$$D(t) = \sum_{i,j=1,2} D_{ij} f_{ij}$$

where the diagonal density matrix elements are constants [4]. In the case of an a-DQW these dipole moment oscillations are equivalent to the tunneling oscillations due to the fact that electrons initially in one well tunnel to the other one and back periodically. The initial coherent stage of carrier relaxation lasts until the coherent optical polarization creating by the excitation pulse has decayed. This initial non-equilibrium carrier distribution relaxes to the equilibrium distribution through various scattering mechanisms, mainly carrier-LO-phonon.

2. Carrier -LO-phonon scattering rates

A systematic study of carrier-LO-phonon absorption and emission rates from ground and the two lower excited states as a three levels system in a-DQW's is presented by using a many body perturbative formalism as function of geometry, temperature and density. The main steps of the calculations are as following.

The basic electron-LO-phonon interaction Hamiltonian

$$H_{e-f} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda,\lambda',k,q} \sum_{q_z} M_{\lambda,\lambda'}(q,q_z)(b(Q)+b^{+}(-Q))C_{\lambda'}^{+}(k+q)C_{\lambda}(k) \tag{3}$$

where b(Q) and b^{+}(-Q) are annihilation and creation phonon operators as function of Q=(q,q_z) and c(k) and c^{+}(k) are the corresponding electron operators. $M_{\lambda\lambda'}$ represents the electron-LO-phonon matrix element between states λ and λ'. The central quantity is the leading order electronic self-energy correction due to polar electron-LO phonon via the Froehlich interaction, which is exact in the limit of small polar coupling.

$$\Sigma(k,i\omega_{\nu}) = -\frac{1}{\beta}\sum_{\nu}\sum_{\omega} V(q,i\nu_m)G(k-q,i\omega_n - i\nu_m) \tag{4}$$

where ω_n y ν_m are the Matsubara frequencies, G(k, iω_n) is the electronic Green´s function V(q, iν_m) is the electron-electron interaction mediated by a LO-phonon, which is related with $M_{\lambda\lambda'}$. The absorption Γa(k) and emission Γe(k) scattering rates are obtained as the imaginary part of the self-energy. The calculation follows ref.[7]

$$\Gamma_a(k) = \frac{\alpha\omega_{LO}^{3/2}}{2(2m)^{1/2}} \int_0^{\infty} dq f(q) \int_0^{2\pi} d\theta [n_B + n_F(k-q)]\delta(E_0(k)+\omega_{LO} - E_0(k-q))$$

$$\Gamma e(k) = \frac{\alpha\omega_{LO}^{3/2}}{2(2m)^{1/2}} \int_0^{\infty} dq f(q) \int_0^{2\pi} d\theta [n_B + 1 - n_F(k-q)]\delta(E_0(k)+\omega_{LO} - E_0(k-q)) \tag{5}$$

with n_B= $(e^{\beta\omega}-1)^{-1}$ and n_F= $(e^{\beta(E(\kappa)-\mu)}+1)^{-1}$, N_s is the carrier concentration and f(q) is the electronic form factor associated with sub-band quantization. $f(q) = \int_0^a dz \xi_n^{*}(z)\varphi_m(z)\xi_{n'}(z)$.

The units used in this calculation are bulk optical phonon energy ω_{LO} and polaron momentum defined as $\gamma=(2m\omega_{LO})^{1/2}$. Starting from the imaginary part of self-energy for a confined electron gas interacting with LO-phonons absorption and emission scattering rates are obtained.

3. Dephasing and Relaxation

Intraband scattering results in Boltzmann like equations for the carrier populations, where the scattering terms couple the different states [3]. Since an infinite set of coupled nonlinear differential equations with non-trivial solution is obtained, then, one way to approximate the intraband scattering is by writing

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i = -\Gamma_i (n_i - n_0) \tag{6}$$

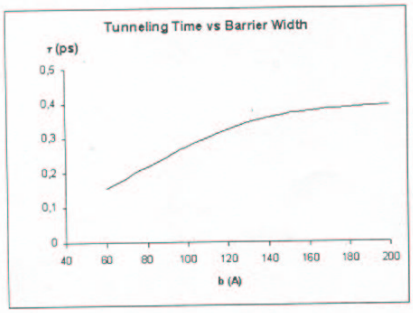
where n_i are the populations of level i and n_0 the equilibrium population of the level i and Γ_i are the rates at which a perturbed carrier distribution return to equilibrium. They are referred to as cross-relaxation rates. The above approximation is consistent with the polarization decay approximation

$$\frac{\partial}{\partial t} p_i = -\Gamma_i p_i \tag{7}$$

where the value for the polarization decay is the average damping between the damping of both levels. In this work a comparison is made between the cross relaxation rates and the microscopically calculated scattering rates for the corresponding transitions.

4. Results

A previous calculation in single quantum wells [6] has been found that electron-quasi-2D-LO-phonons real and imaginary self-energy parts have a maximum for quantum wells with a width equal to three times the polaron radius in both wells. This is a dimensionality effect, which permits tuning relaxation times with well-widths. The well-widths in the present calculation were chosen in this region in which are also the experimental systems. The wide well width (WWW) is 140 A^0, the narrow well–width is 60 A^0, the height of the barrier is 90 meV, at 100K and with low electron density $3x10^{11}/cm^2$.



The dynamic tunneling in an a-DQW is studied by obtaining the dependence of tunneling time with the barrier width as geometrical important parameter. It shows a nonlinear behavior. For very narrow barriers up to a width of the order of 1/3 of WWW, there are only two discrete levels. For thicker barriers tunneling time increases with WWW as can be seen in Fig.1. The tunneling time varies between 100 and 500 fs as it has been reported.

Polaron emission and absorption scattering rates in a-DQW are strongly dependent of geometry, in Fig.2a and 2b are shown the scattering rates as function of barrier width, where can be observed that the interaction electron- 3D-LO-phonon for different electronic states in a given heterostructure can be very different. Emssion rates are larger than absorption rates in all three states, however in ground state is larger the absorption than in the other two states, while emission in ground state is so small that it could not be shown in the Figure 2b. The

absorption rates are a bit smaller than the emission ones indicating a slower decay of about 9 to 15 ps for emission and 20 ps for absorption. The predicted dephasing times agree with experimental measurements [1]

In single quantum wells has been reported [6] that absorption scattering rates become important for temperatures below T=100 K and $N_s=3.10^{11}/cm^2$, which are the parameters in the present calculation, however in a-DQW's they are still one order of magnitude smaller than emission scattering rates.

Screening is also studied and as expected it is found that it diminishes the electron-LO-phonon interaction opening the possibility of controlling the dephasing time by adding carrier to the system. As carrier concentration increases absorption rates increase and emission rates decrease at low temperatures (T=30 K)

Coherent control for these structures has been propossed [5] by applying a microwave electric field such that the period of Rabi oscillations induced by mw field is longer than the polaron lifetime, in this way the phase of the mw determines the magnitude of the intersubband polarization during the phonon emission process. Since polaron lifetimes can be tuned with barrier width, this coherent control mechanism will be optimized.

THz emission in a-DQW has been reported [8] where the dominant mechanism involve the beating of either continuum or exciton states. An extension to Exciton –LO-phonon scattering rates is now in progress.

5. Conclusions

After an ultrafast optical excitation from ground state to the doublet in the aDQW, the charge density oscillates with the frequency of the splitting in the tunnel-couple system. As the barrier width increases the charge probability changes from equal distribution in both wells to a complete transfer in only on well, which is only possible for very thick barrier widths. This means, charge storage can be achieved.

The dependence of the THz frequency with the barrier width is followed showing that barrier width is an important parameter for frequency tuning.

Since barrier width is playing the role of confinement concerning electron-LO-phonon interaction in an a-DQW, both polaron formation and electron-LO-phonon scattering rates for the transitions are strongly dependent on barrier width. The scattering rates allow us to estimate the dephasing time of the optical polarization from a microscopic point of view.

A comparison is also made for two approximations, the cross relaxation rates and the self-energy scattering rates.

The dephasing time obtained in the calculations is of the order of tens of picoseconds, which corresponds to measurements [1-2]

Acknowledgments. This work has been supported by Fundación para la Promoción de la Ciencia y la Tecnología del Banco de la República de Colombia , Grant 1189.

References

[1] Paul C.M. Planken, Igal Brener and Martin Nuss and Marie S.C. Luo and Shun Lien Phys. Rev.B48(7),4903(1993-I)
[2] K.Leo, C.Damen, J.Shah, E;O Goebel and K,Koehler, Appl.Phys. Letter.57, 19 (1990).
[3] Weng W. Chow,Stephan W.Koch and Murray Sargent III, .Semiconductor-Laser Physics, Springer Verlag, (1994) and Shah, Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures, Springer Verlag, New York, (1996)
[4] Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures, FedorT.vasko, Alex V. Kuznetsov, Springer Verlag, 1998
[5] Xuedong Hu and Walter Poetz, Phys.Rev.Letters,82,15, 4116 (1999)
[6] A.S.Camacho B., Phys.status solidi(b) 220,53,(2000)
[7] B.A. Mason and S.Das Sarma, Phys.Rev.B31,(8),5223,(1985-I)); B.A. Mason and S.Das Sarma Phys.Rev.B35,8,3890,(1987-I).
[8] P.G.Huggard, C.J.Shaw, S.R.Andrews, J.A.Cluff and R.Grey, Phys.Rev.Lett. 84,(5), 1023, (2000)

Study of Dynamical Dipole Moment in an Asymmetric Double Quantum Well

J. Bohórquez and A. S. Camacho B.
Departamento de Física Universidad de los Andes
Bogotá, Colombia

Received on 23 April, 2001

A study of the dynamical behavior of the charge in an asymmetric double quantum well is presented. In particular, the time behavior of intrasub-band dipole moment which is induced by intersub-band optical excitation is analyzed in two aspects: first, design of the quantum wells in order to spatially separate the charge and store it and second study the dynamic tunneling effect between the two wells. Since both conduction band levels are optically populated by transitions from a single band level, they are coherently coupled. The intrasub-band density matrix completely characterizes the dynamics of the conduction band electrons. These dipole moment oscillations are entirely equivalent to the tunneling oscillations between the two wells. The time dependent dipole moment produced by these real-space charge oscillations is obtained as a source of dipole electromagnetic radiation in THz region, which has been detected experimentally. The calculations show the geometry dependence of the emitted radiation. Based on the reported decoherence time for this process a coherent control mechanism of the THz radiation is introduced by varying the phase of a second laser.

Semiconductor heterostructures are a perfect laboratory to study coherent optical effects in condensed matter systems due to their high quality and the possibility to engineer the structure of energy levels. Tunneling is a fundamental quantum mechanically phenomenon of interest in many branches of physics specially in quantum wells. In order to study tunneling without the influence of transport, one should study an isolated structure in which transport effects are not important: an asymmetric double quantum well structure (a-DQW) Coherent oscillations of a wave packet in a semiconductor double quantum well structure were detected using time resolved degenerate four wave mixing and pump and probe spectroscopy [1]. The early observation of THz radiation from an oscillating wave packet in a semiconductor nanostructure, using an asymmetric quantum well structure (a-DQW) was reported in [2]. In this work a systematic study of the dynamic behavior of the charge in an a-DQW is presented, in which particularly the dynamic tunneling effect between the two wells is examined in the following way: An appropiated design of heterostructure can show coherence between two conduction band levels, coupled to one and the same ground state level (a valence band level or another conduction sub-band). Such structure behave qualitatively like a three level system. In the present calculation we choose the three levels in the conduction band. The intrasub-band density matrix completely characterizes the dynamics of the conduction band electrons, the total dipole moment of conduction electrons distributed between both upper states can be expressed through their density matrix [3]. The time dependent dipole moment produced by these real-space charge oscillations is obtained and a detailed calculation of the time evolution process as function of the barrier width is presented. Such time dependent dipole moment is a source of dipole electromagnetic radiation, which can be detected [2] and can be coherently controlled by phase-shift of two pump pulses as shown in [4]. This technique has also been sugested for controling decoherence effects [5] and [6].

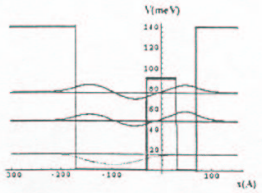


Figure 1. Transition diagram of a three level system excited from the lower level to both upper levels simultaneously with a pulse whose spectrum overlaps both transition frequencies.

The charge dynamic behavior of an a-DQW designed as a three level system is studied. A double quantum well consists of two wells separated by a nar-

row barrier whose width b is comparable to the tunneling decay exponent. The wave functions of the two levels are now coupled and strong modification of them is expected if the energies of the confined levels in both wells are close to each other, which means tunneling resonance. The two resonance levels hybridize and form a new wave function for the asymmetric quantum well. The wave functions of the a-DQW are obtained from a linear superposition of the wave functions of the two wells entering in the structure [7].

The electronic density of the a-DQW exhibits temporal oscillations with the frequency of the splitting in the tunnel-coupled system. Fig.2 shows the charge probability in both wells with the electron initially localized in the wide well (WW). The transfer is complete only in exact tunneling resonance case, as can be seen in Fig.2 for narrow barriers the charge is equally distributed in both wells, but as barrier width increases the charge will prefer to be in the WW. In this way a charge storage in the WW is reached, which can be controlled varying the barrier width.

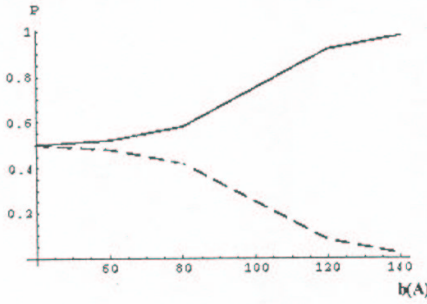


Figure 2. Charge probability as function of time in both wells. The well parameters are WW width 140 A, NW width 60 A for several barrier widths with electronic mass of GaAs

Coherent coupling

Intersub-band transitions in the wide well (WW) occur at lower energy than in the narrow well (NW). A short laser pulse can excite an electronic wave packet that is mostly localized in the WW between the final states (1 and 2). The laser spectrum should be wider than the energy splitting of the upper states. Since both excited levels are optically populated by transitions from the same ground state (0) of the wide well, they are coherently coupled. Moreover, the ground state of the wide well is optically coupled to both excited levels. The temporal evolution of the polarization components p_{01} and p_{02} is described by the Bloch equations. Quantum beats occur when the electrons from the lower level are simultaneously excited into both upper levels. Assuming the excitation pulse to be a δ function in the time domain $E(t) = E_0\tau_p\delta(t)$, the polarizations p_{01} and p_{02} for positive times are:

$$p_{01}(t) = \frac{i}{\hbar}(E_0\tau_p d_{01} exp(\frac{i}{\hbar}(\epsilon_1 - \epsilon_0)t) \quad (1)$$

$$p_{02}(t) = (\frac{i}{\hbar}(E_0\tau_p d_{02} exp(\frac{i}{\hbar}(\epsilon_2 - \epsilon_0)t) \quad (2)$$

where d_{01} and d_{02} are the corresponding dipole transition matrix elements and ϵ_1 and ϵ_2 are the energies of the upper levels. These two polarizations interfere giving a quantum beat and coupling the two upper states through a new polarization obtained from the equation of motion of the intrasub-band density matrix component.The intrasub-band non diagonal element of the density matrix f_{ij} is

$$f_{12}(t) = d_{01}d_{02}(\frac{E_0\tau_p}{\hbar})^2\theta(t)e^{\frac{i}{\hbar}((\epsilon_2-\epsilon_1)t)} \quad (3)$$

The two final states are coherently coupled to the same initial state, it means, when both interband transition matrix elements d_{01} and d_{02} are nonzero, ultrafast intersub-band optical polarization creates coherent coupling between the two final states, it means an intraband coupling. In particular we can express the total dipole moment of conduction electrons distributed between states 1 and 2 through their density matrix. Denoting $D_{i,j}$ the matrix elements of the dipole moment between conduction band states i and j, we can write the total dipole moment of the conduction electrons as

$$D(t) = \sum_{j=1,2} D_{ij} f_{ij} \quad (4)$$

so that the intraband coherence causes the dipole moment of the system to oscillate with the quantum beat frequency $(\epsilon_2 - \epsilon_1)t/\hbar$. In the case of a DQW system, these dipole moment oscillations are entirely equivalent to tunneling oscillations because an electron initially localized in one of the two wells of a DQW structure will tunnel into the other well and then back into the first in a periodic fashion. The time dependent dipole moment is produced by these real space charge oscillations. The tunneling time as function of the barrier width is shown in Fig. 3, where it is observed that tunneling time is a non-linear function of the barrier width. This time increases fast for narrow barriers and very slow for wide barriers.

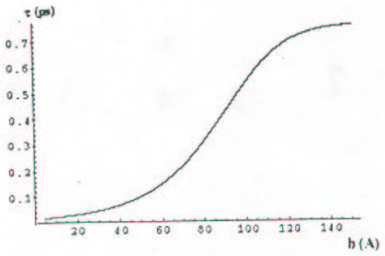


Figure 3. Tunneling time as function of barrier width. It shows a linear region for widths between 80 A^0 and 120 A^0 for the chosen WW width of 140 A^0 and NW width of 60 A^0.

Moreover these oscillations are the source of electromagnetic radiation in the THz region. Cohêrent charge oscillations can be controlled by a sequence of two pulses because the driven term in the matrix density equation is the product of the polarization created by the first pulse with the field of the second pulse. When both excitation pulses are present, the amplitude and phase of the charge oscillations become dependent on the relative phase-shift between the two pulses as shown in figure 4. The driving term in the density matrix equation for a two-pulse excitation contains the product of optical polarization of the first pulse and the electric field of the second pulse, which is a second order effect in nonlinear susceptibility χ^2 of the three level system. The time separation of the phase locked pulse pair must be shorter than the time it takes for the THz signal to decay completely This effect shows the coherent control of THz waves produced by an a-DQW by simply changing the phase between the pulses.The time separation of the phase locked pulse pair must be shorter than the time it takes for the THz signal to decay completely.

In this work the dynamic dipole moment for a special heterostructure, an asymmetric double quantum well, as a three level system in the coherent regime, is studied. The charge wave function packet is described as a superposition of the eigenstates of both wells. The time dependent charge probability shows the relevant role played by the barrier width in this system, which can be used to control the charge distribution, for example to store it. In order to deeply understand this process the polarizations (non diagonal matrix elements) are studied in the simple case that they are produced by a δ -like excitation pulse by calculating all dipole moment transitions d_{01} , d_{02} and D(t) in this process. In particular the temporal variation of the dipole moment D(t) is the source of the THz radiation. The corresponding polarizations p_{01} and p_{02} give rise to a quantum beat and to f_{12} which is responsible for the coherent coupling between states 1 and 2.

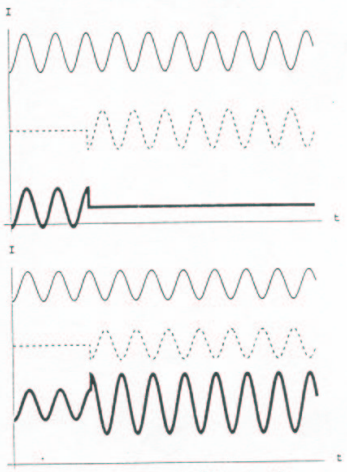


Figure 4. The signals from a-DQW excited by a sequence of two mutual coherent optical pulses with phase difference zero and $\pi/2$.

Acknowledgments

This work was partially supported by COLCIENCIAS grant RC 428 -2000 and by Fundación para la Promoción de la Investigación y la Tecnología del Banco de la República, grant 1189

References

[1] Karl Leo, Jagdeep Shah, Ernst Goebel and Theodore C.Damen and Stefan Schmitt-Rink and Wilfrid Schaefer, Phys. Rev. Lett. **66**, 201 (1991).

[2] H.G. Roskos, M.C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D.A.B. Miller, A.M. Fox, S. Schmitt-Rink, and K. Koehler, Phys. Rev. Lett. **69**, 3800 (1992).

[3] H. Haug, S.W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, Singapure, 3 edition, 1994).

[4] M.S.C. Luo, S.L. Chuang, P.C.M. Planken, I. Brener, and M.C. Nuss, Phys. Rev. B **48**, 11043 (1993).

[5] W. Poetz, Appl. Phys. Lett.**71**, (3),395 (1997).

[6] Xuedong Hu and W. Poetz, Phys. Rev. Lett. **82**, 3116 (1999).

[7] Fedor T. Vasko and Alex V. Kuznetsov, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductors Heterostructures* (Springer Verlag, 1998).

Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
Physica E 17 (2003) 297–299
PHYSICA E
www.elsevier.com/locate/physe

Polaronic effect in the charge dynamics of quantum wells

A.S. Camacho B[a,*], J. Bohórquez[a], R.M. Gutiérrez[b]

[a] Departamento de Fisica, Universidad de los Andes, Carrera 1 18a-10 Bogotá-Colombia
[b] Centro de investigaciones, Universidad Antonio Nariño, Bogotá-Colombia

Abstract

The dynamical behavior of the charge in quantum wells is studied. We obtain the tunneling time as function of geometric parameters. Since at low carrier density the intraband relaxation time is determined by LO-phonon-carrier scattering, we calculate, as a function of several parameters, the energy corrections and the scattering rates within each band, this is done by using a many body perturbative formalism, considering both screened and unscreened potentials. We compare results for GaAs and CdTe double quantum wells.
© 2002 Published by Elsevier Science B.V.

PACS: 68.85.–k; 68.85.Fg; 71.38.Fp; 73.21.Fg

Keywords: Quantum wells; Phonon interaction; Tunneling time

The self-energy correction due to polar electron-LO phonon via the Froehlich interaction is calculated:

$$\Sigma(k, i\omega_\nu) = -\frac{1}{\beta}\sum_{\nu}\sum_{\omega} V(q, i\nu_m) \times G(k-q, i\omega_n - i\nu_m), \quad (1)$$

where ω_n and ν_m are the Matsubara frequencies, $G(k, i\omega_n)$ is the electronic Green's function $V(q, i\nu_m)$ is the electron–electron interaction mediated by an LO-phonon. We use the standard mass shell approximation [1] and obtain the energy corrections as the real part of Σ and the scattering rates as its imaginary part. Two heterostructures are studied, a single quantum well (SQW) and an asymmetric double quantum well (ADQW) designed as a three level system. In the SQW the dependence on geometry and temperature is examined and in ADQW is also studied the tunneling time related with THz emission [2]. In a single quantum well was found that damping lowers to half-values as static screening is introduced. The polaron effect, shown in Fig. 1, is more important in CdTe. The values for GaAs are one order of magnitude smaller than in CdTe [3].

In an ADQW the time-dependent dipole moment produced as consequence of beating between the ground state and each one of the two excited states (closed in energy), is equivalent to the tunneling oscillations, which are studied as function of barrier width. Therefore, it is expected that in ADQWs, where coherent tunneling has been detected [1], polarons could play an important role. The electron states show a slightly linear dependence on barrier width with their energy difference lowers as barrier increases, while polaron states show a nonlinear variation as barrier width increases as in Fig. 2.

* Corresponding author. Tel.: +57-1-3394949; fax: +57-1-3324516.
E-mail address: acamacho@uniandes.edu.co (A.S. Camacho B).

1386-9477/03/$ - see front matter © 2002 Published by Elsevier Science B.V.
doi:10.1016/S1386-9477(02)00810-X

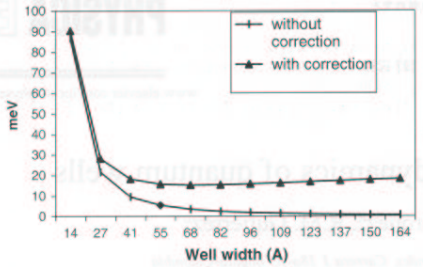


Fig. 1. Energy of the ground state in a CdTe single quantum well as a function of well width (without and with polaron correction).

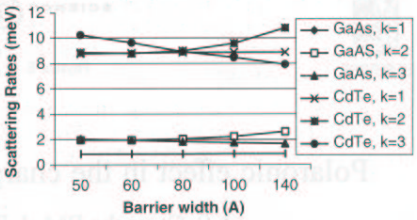


Fig. 3. Scattering rates as a function of barrier width.

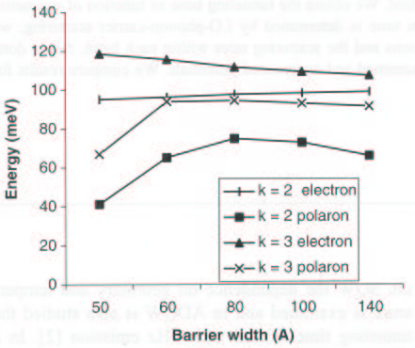


Fig. 2. Excited energy levels in a CdTe ADQW as a function of barrier thickness.

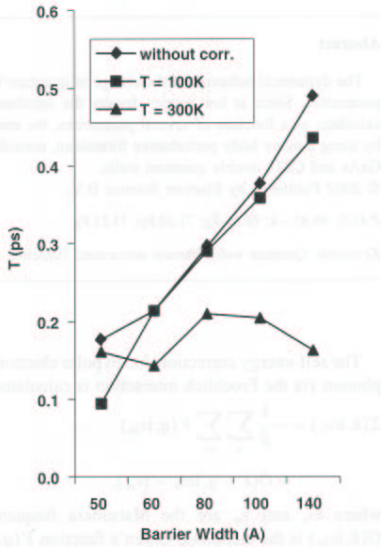


Fig. 4. Tunneling time as a function of barrier thickness at 300 K with and without polaron correction and at 100 K with correction.

Also scattering rates are strongly dependent on temperature and screening. Screening can vary the scattering rates and the polaron lifetimes in three orders of magnitude. Also scattering rates are strongly dependent on temperature and screening. It is interesting to note that in CdTe ADQWs the scattering rates of all three lowest bands cross over at barrier width of 80 Å and therefore, only in this case, they have the same polaron lifetime (Fig. 3). This means that microscopic calculation of scattering rates is important for the kinetic description of populations in these systems.

Finally, it is also obtained the tunneling time for the two excited states with and without polaron effect as shown in Fig. 4.

The polaron effect is relevant for THz emission due to the different energy corrections and scattering rates for each level. Polaron formation gives rise to a different tunneling time dependence on barrier width. After

our results screening is also very important and can control THz emission by diminishing the polaron effect. Another important parameter for controlling the THz emission is geometry.

This work was partially financed by Instituto Colombiano para el Fomento de la Ciencia y la Tecnologia "Francisco José de Caldas" (COLCIENCIAS)-Grant No. 1204-05-11405.

References

[1] X. Hu, W. Poetz, Phys. Rev. Lett. 82 (15) (1999) 4116.
[2] B.A. Mason, S. Das Sarma, Phys. Rev. B 35 (8) (1987-I) 3890.
[3] A.S. Camacho B, Phys. Stat. Sol. B 220 (2000) 53.

OPTICAL EFFECTS BASED ON INTERSUB-BAND-TRANSITIONS IN QUANTUM WELLS

A.S.Camacho B.[1], J.Bohórquez, R.M. Gutiérrez* and J.L.Carrillo**

Departamento de Física, Universidad de los Andes

Bogotá-Colombia

*Centro de Investigaciones, Universidad Antonio Nariño

Bogotá-Colombia

** Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla

Puebla-México

Abstract

Unipolar intersub-band transitions lasers at mid-infrared wave lengths were developed only recently at Bell laboratories. However, this technique will be not directed applicable for the longer wavelengths corresponding to Terahertz frequencies. In this work we analyze a THz device based on the intersub-band-transitions of an asymmetric double quantum well. We first study the intersub-band optical absorption in superlattice made of asymmetric double quantum wells (aDQW) taylored as a three level system. By applying an external electric field we obtain the Wannier–Stark ladder and can tune the transition energies between the sub-bands to reach the THz absorption between the two excited sub-bands. Although the dipole moments are big the relative THz absorption to the other frequencies is small. However, reported lifetimes for this system encourage the possibility of getting population inversion, which is the main condition to design a laser. With this goal it is presented a detailed study of the geometric design of the asymmetric double quantum well by performing an accurate calculation of the energies and wave functions, the dipole moments and the electron-LO-phonon interaction form factors, which are important ingredients of the scattering rates results. Furthermore, we analyze the role of electron-LO-phonon scattering in THz devices.

Keywords: Quantum wells, ultrafast light pulses, electron.LO-phonon scattering rates, absorption, laser design

[1] acamacho@uniandes.edu.co, fax:57 1 3324516

Introduction

Semiconductor nanostructures have attracted interest for many years due to their applications in microelectronics devices [1-2]. The carrier-phonon interaction governs the transport and optical properties in semiconductors. One of the important issues in the study of electron tunneling in nanostructures is the scattering through the electron-phonon interaction. The double barrier resonant tunneling device has received special attention because of its properties in high-speed electronics in the last decade. The effect of electron-phonon interaction on tunneling has been theoretically treated by several investigators [3-5]. It has been shown that the boundary conditions uniquely determine the transmission and reflected plane waves. On the other hand, it is known that intrawell intersub-band transitions yield a large radiative dipole moment and a lesser sensitivity to interface roughness, to properly design of THz lasers. Recently it has been reported measurements of narrow line width THz intersub-band emission resulting from interwell-intersub-band transitions from a three level system [6-7]. Moreover, the second level can be emptied by fast LO-phonon scattering. A novel tailoring of a three level system is presented, in which the interwell transition with the features of intrawell transition is proposed. It is an asymmetric double quantum well in which we have already estimate the charge buildup time by calculating the probability of finding the electron in each one of the two wells [8] and study a macroscopic coherent superposition of two different conduction subbands created by femto-seconds intersub-band photo-excitation of sufficient band width [9]. In this paper an asymmetric double quantum well superlattice is analyzed as a possible THz device and a systematic study of the role of geometry on the dipole moments and scattering rates is presented. The paper is organized as following: In sec.2 the calculated absorption spectra are shown for an asymmetric double quantum well superlattice, which is designed to behave as the active region of a THz laser based on the resonant tunneling that can be tuned with an external electric field. Sec.3 is devoted to the study of the optimal geometric design of the basic device. Starting with a comparison of the results for the infinite confined system and the one with finite confinement the most accurate eigen-energies values and wavefunctions are presented. Then the corresponding dipole moments are analyzed and also the form factor for electron-LO-phonon interaction is examined

before the electron-LO-phonon scattering rates are obtained. Summary and conclusions are presented in the sec.4.

2. The three level double quantum well as active region of a laser

In the region of THz radiation, between high-frequency electronics and mm-wave photonics, the electronic techniques rapidly roll off as these super high frequencies are reached, as semiconductor electron relaxation rates are approached and also photonics techniques fail at these low frequencies, partly because relative linewidths, which are narrow in the optical part of the spectrum become huge down in the THz. Solid state systems also bear many resonances in these region which render most materials opaque to THz radiation. In figure 1 is shown the superlattice design to be studied, where the most relevant parameters are: layer thickness, applied electric field, lifetimes, tunneling probabilities of each level to obtain population inversion between two sub-bands. The absorption coefficient where the line-width Γ is a Lorentzian function is given by:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\omega}{n_r c \varepsilon_0} |\vec{\mu}_{21}|^2 \frac{\Gamma/2}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\Gamma/2)^2} (N_1 - N_2) \qquad [1]$$

where ω is the frequency of the light, n_r is the refraction index, μ_{12} is the dipole moment between states1 and 2 and N_i is the number of electrons per unit volume in the sub-band i

$$N_i = \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2 L} \ln\left(1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T}\right) \qquad [2]$$

where T is the temperature and L is total well width and E_F is the Fermi level, which is in the conduction band. The top two sub-bands are E_1 and E_2 and they form the radiative pair for resonant tunneling. This device is examined as function of geometry and strength of the external electric field. In figure 1 is shown the schematic diagram of the device with the sub-band-widths and wave functions corresponding to an electric field of 10V/cm with the frequency ω_{12} tuned to 7 THz and the transition 0-1 in resonance with the LO-phonon of the bulk material (GaAs) with following values

$\Delta E_{10} = 36.27meV \Rightarrow LO - phonon$
$\Delta E_{20} = 65.99meV \Rightarrow 16THz$
$\Delta E_{21} = 29.73meV \Rightarrow 7.2THz$

Because we use a perturbation theory to obtain the effect of electric field, we limit ourselves to fields less than 9 kV/cm. The corresponding optical absorption spectrum for this device is shown in figure 2 for an electric field of 100 V/cm, where we observe the three transitions and their relative absorption after optical excitation. The transition 0-2 is more robust than the other two, specially the 1-2, which lies in the THz region and is one order of magnitude smaller. Thus the possible operation of this device in THz region as absorber is negligible. Instead of that, we can populate the third level by direct carrier injection. Since it is energetically allowed, the fast electron-LO-phonon scattering will keep the population of E_1 low and maintain the population inversion between E_2 and E_1. Since the wave functions of E_2 and E_1 are primarily located in different wells, the transition is diagonal. This design offers great selectivity in injection into E_2 and removal from E_1 because of the spatial separation of the two wave functions. Furthermore, transition scattering rates reported for an a-DQW give following values for the corresponding transition times: τ_{20}=11,5 ps, τ_{21}=3,9 ps, τ_{10}=1,2 ps and, which fulfill $\tau_{20} >> \tau_{21} >> \tau_{10}$ and therefore the population inversion condition

The proposed device should work as active region in a THz laser, where the radiative transition is taking place between levels 2 and 1. Another important feature obtained in our design based on interwell transition is the value of the optical dipole moment, which reaches 20 eA^0 comparing very well with values obtained in intrawell transitions [6]. However, this dipole moment is very sensitive to the barrier width and it decreases as the barrier width increases. The aim of its report is to show the importance of very accurate calculations. In a previous work [8] it has been calculated the tunneling time as function of barrier width for realistic a-DQW's and compared with experiments and the polaronic effect in the charge dynamics of this system is reported by analyzing the scattering rates using a perturbative many-body self-energy method [9]. Efficient depletion of the lower sub-band is achieved with resonant LO-phonon transition. Long lifetimes of the upper level are highly desirable, we found lifetimes one order of magnitude smaller for unscreened interaction than for screened interaction. By taking into account the scattering rates in screened case the possibility of lasing is open. Our calculations of polaron lifetimes give rise to following values.

	screened	unscreened
n=0	4,4 ps	0,5 ps
n=1	3,47 to 4,10 ps	0,17 to 0,20 ps
n=2	10 ps	0,18 to 0.08 ps

These values suggest that the electron-LO-phonon scattering rate is weak within the second excited level, whereas in the first one and ground state is stronger. Thus polaron formation is more probable inn sub-band 2 as in the other two. This finding is encouraging because the first excited state could be emptied very fast. Since these scattering rates are fundamental parameters in the carrier dynamics model, they depend on the geometry, temperature, electron density and screening and therefore should be calculated as accurate as possible. In order to accurately examine these conclusions we present in the next section a detailed calculation of each necessary step to obtain the scattering rates in the simple design of one asymmetric double quantum well.

3.Optimization Procedure

As a first step to choose the optimal geometric design of the three level device we compare the infinite confined asymmetric double quantum well with and the finite confined aDQW. For the infinite confined well the eigen-energies are higher than in the finite walls device as expected. When varying the ratio: narrow well width to wide well width, the condition of only three solutions for both designs is obtained in the range 0, 4 to 0,6. For the finite well there are solutions from wells ratio 0,1. In the rest of the paper we only analyze the finite confined quantum well by varying the wells ratio. In figure 4 is shown the energy dependence of the three levels, finding at 0,3 a minimum energy difference between states E_2 and E_1 for any barrier width to wide well width ratio. A comparison of the wave functions for wells ratio of 0,1 and 0,5 shows that the states labeled as 1 and 2 crossed exactly at the wells ratio 0,3. Above dl/dr = 0,3 both excited levels are well separate in energy and only ΔE_{10} is equal to the LO-phonon energy, but near 0,3 both excited states are almost at the same energy difference from the ground state, at one LO-phonon energy. They could decay simultaneously by LO-phonon emission.

3.1. Dipole moments for the three levels in two designs

In figure 5 are the dipole moments dependence on barrier to wide well width ratio and on wells width ratio. The dipole between states 1 and 2 is strong for barrier widths less than half wide well width. At this limit we vary the wells ratio and find a strong peak at 0,3. Again this resonant value shows a maximal dipole moment, which is proportional to absorption coefficient and thus it is expected for this especial case a very efficient optical absorption at about 1 THz, which is the energy difference between the two excited levels for this wells ratio. The tunneling dipole moment for the second excited state is very strong and it increases slightly with barrier width, while for fixed barrier width the dipole moments corresponding to the two excited levels cross each other at wells ratio 0.35, due to the anticrossing effect. For values smaller than 0,35 is the dipole moment of the second excited state the strongest, while for values greater than 0,35 is the first excited state the strongest as expected from the anti-crossing of the wave functions. This special design should be useful as a THz detector

3.2. Form factor contributions for all three levels and scattering rates

The form factor f(q) is very sensible to the geometry since it also is associated with sub-band quantization

$$f(q) = \int_0^a dz \xi_n^*(z) \varphi_m(z) \xi_{n'}(z)$$

where ξ_ν are the electronic wave functions and ϕ is the phonon wave function

A comparison between a single quantum wells and an a-DQW with the same total width shows that the latter form factor is several times bigger than for a single quantum well, although the dependence on the barrier width is again negligible. However, the contributions of each part of the double well to the form factor of each level is very different for each level. For the ground state is the wide well width the most important, but for the second excited state is the narrow well the main contribution followed by the left and central barriers. The first well contributes more to the first excited state. All these contributions correspond to the wells ratio smaller than 0,3. If wells ratio is bigger than 0,3 the composition of both excited states interchange due to the crossing of the wave functions.

The scattering rates for the electron–electron interaction mediated by a LO-phonon are obtained by calculating the leading order electronic self-energy correction due to polar electron-LO phonon via the Froehlich interaction, which is exact in the limit of small polar coupling. A systematic study of carrier-LO-phonon absorption and emission rates from ground state and the two lower excited states as a three levels system in a-DQW's is presented in [6] by using a many body perturbative formalism taking into account geometry, temperature and carrier density. From the imaginary part of self-energy for a confined electron gas interacting with LO-phonons absorption and emission scattering rates are obtained:

$$\Gamma_a(k) = \frac{\alpha\omega_{LO}^{3/2}}{2(2m)^{1/2}} \int_0^\infty dq f(q) \int_0^{2\pi} d\theta [n_B + n_F(k-q)] \delta(E_0(k) + \omega_{LO} - E_0(k-q))$$
$$\Gamma e(k) = \frac{\alpha\omega_{LO}^{3/2}}{2(2m)^{1/2}} \int_0^\infty dq f(q) \int_0^{2\pi} d\theta [n_B + 1 - n_F(k-q)] \delta(E_0(k) + \omega_{LO} - E_0(k-q)) \quad (3)$$

where the first term means absorption and the second term emission of one phonon. n_B and n_F are Bose-Einstein and Fermi-Dirac occupation factors: $n_B = (e^{\beta\omega}-1)^{-1}$ and $n_F = (e^{\beta(E(\kappa)-\mu)}+1)^{-1}$, which are valid in equilibrium and the chemical potential is to be determined from the total electron density N_s. Carrier relaxation is a result of inelastic carrier-phonon and carrier-carrier collisions. Elastic collisions can disturb the phase of the carrier wave functions without changing the populations of the carrier energy levels and the spectral lines can be broadened. Carriers can virtually absorb and then emit LO-phonons. This second order process does not change the final energy of the carrier but it does change the phase of the carrier wave function. The scattering rates show especial features, presented in [8], as function of barrier width, temperature and screening. The absorption and emission scattering rates as function of barrier width and narrow well width are presented in figures 7 and 8. As expected they are almost independent on the barrier width but the dependence on the narrow well width is remarkable. At the special value of 0.3 for the wells ratio appears again a minimum for the scattering rates in both excited states, which means the electronic system is less sensible to LO-phonon and correspond to the wave functions well distributed in both wells with very similar distribution in both wells. The two states are almost degenerate and their energy difference is much smaller than the LO-phonon energy. They form long lived polarons, which close the relaxation channel to the ground state. The

transitions scattering rates between the excited states and the ground state show a slope change at 0,3 indicating the anti-crossing of the two states.

4. Summary and Conclusions

An asymmetric double quantum well designed as a three level resonant tunneling system working in the THz region of the electromagnetic spectrum is chosen to study the role of geometry on the optical properties by calculating very accurately the eigen-energies, eigen-functions, dipole moments, electron-LO-phonon from factors and scattering rates. The optical absorption of an asymmetric double quantum well superlattice, designed to work in the THz region, in the presence of an electric field is studied and it is found that it is inadequate as absorber due to the small relative absorption intensity of the THz peak compared with the other two peaks. In order to obtain population inversion we design the device so that the energy difference between levels 0 and 1 is exact the energy of the LO-phonon in GaAs to ensure the fast depopulation of level 1 provide that the transition times between the three levels calculated from the scattering rates fulfill the condition for population inversion in lasers. Next we present an accurate analysis of the geometry effect on the tuning of the THz radiation emission or detection in this nanostructured devices. The main parameters are the ratio of the barrier width to the wide well width and the ratio of the narrow well width to the wide well width. The suitable values for the former one are below 0,5 and for the latter is a very special value of 0,3 interesting because at this value the two excited levels cross each other and the characteristic dipole moments and electron-LO-phonon form factors are exchanged. It is an anti-crossing of the two excited states at resonance with the LO-phonon of the GaAs. Then a strong electron-LO-phonon interaction between the two electronic states for this particular geometry and the LO-phonon is expected. LO-phonon is offering a relaxation channel for the electron gas. However as it is shown in this report the LO-phonon scattering rate in the two excited states present a minimum, which means that the related lifetime is larger, a quasi-particle is created. This is a new effect very similar to the famous bottleneck in quantum dots, where many electronic states interact simultaneously with the LO-phonons, giving rise to long lived polarons.

References

[1] J. Shah, Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures, Springer Verlag, New York, (1996) and references therein.

[2] S.M.Sze, Semiconductor Devices, Physics and Technology (Wiley, New York,2002)

[3] B.Y.Gelfand, S. Schmitt-Rink and A.F.J.Levi, Phys.Rev.Lett.62,1683,(1989)

[4] N.S.Wingreen, K.W.Jacobson and J.W.Wilkins,Phys.Rev.Lett.61,1396(1988)

[5] W.Cai, T.F.Zheng, P.Hu, B.Yudanin and M.Lax, .Rev.Lett.63,418(1989)

[6] H. C. Liu, Iva W. Cheung, A. J. SpringThorpe, C. Dharma-wardana, Z. R. Wasilewski, D. J. Lockwood and G. C. Aers, Appl.Phys.Lett. 78(23),3580,(2001)

[7] B. S. Williams, Q. Hu., J. Appl. Phys., 90, 5504 (2001)

[8] A.S.Camacho B., J.Bohórquez, Brazilian Journal of Physics, vol.32, no.2A, 356,(2002)

[9] A.S.Camacho B., J.Bohorquez and R.M.Gutierrez, Physica E17,297 (2003)

Figure captions

Figure1.
Schematic view of the superlattice based on asymmetric double quantum wells

Figure 2.
The intersub-band absorption in the superlattice as function of energy. The three peaks corresponding to the three expected transition in the superlattice are obtained. Their relative intensity is to be observed.

Figure 3.
Eigen-energies of the asymmetric double quantum well as function of the wells ratio

Figure 4.

Radiative dipole moments and tunneling dipole moments as function of wells ratio

Figure 5.

Polaron and transitions scattering rates as function of wells ratio

Acknowledgements

This work was partially supported by Instituto Colombiano para el Fomento de las Ciencias y la Tecnología Francisco José de Caldas-COLCIENCIAS, Grant 1204-05-11405 and Fundación para la Promoción de la Ciencia y la Tecnología del Banco de la República, Grant 200302

Figure 4a

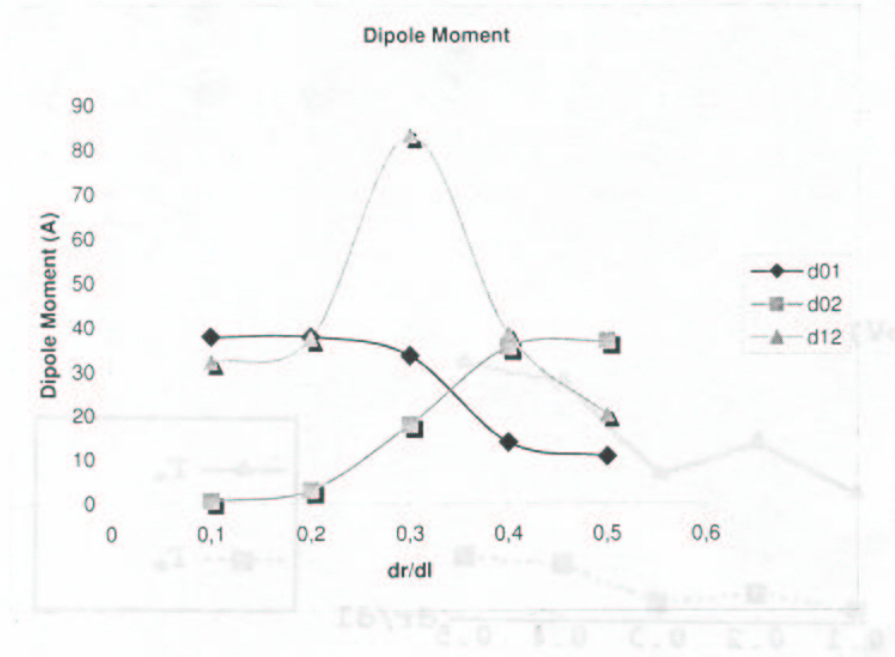


Figure 4b.

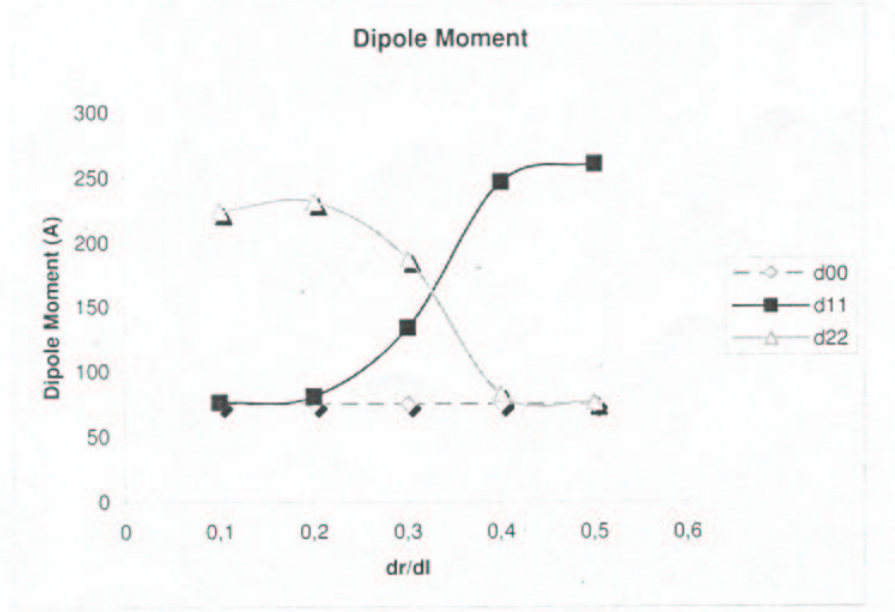
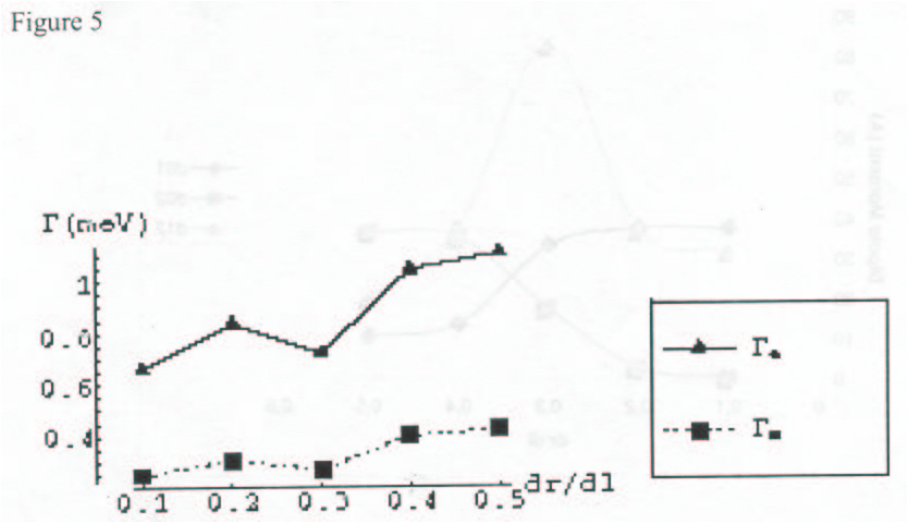


Figure 5



Abstract

Electronic and Optical Design of Semiconductor Heterostructures

J. Bohórquez, A.S. Camacho and R. Gutierrez*
Departamento de Física, Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia
*Centro de Investigaciones, Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia

In this work we study in three different approximations the geometric design of semiconductor heterostructure chosen as asymmetric double quantum well. Particularly we are interested in three level system, in which has been detected coherent radiation related to tunnelling effects. We present a detailed estimation of energy levels, wave functions and oscillator strengths in these systems. We obtain parameters ranges for designing the heterostructure as a suitable emitter from infrared of Terahertz radiation by using intersubband transition in doped quantum wells. As control parameters are proposed the geometric design, which decides about the LO-phonon scattering, the overlap of the wave functions which defines the oscillator strengths. Both processes are important for the evolution of the populations in the three levels and the optical polarization.

Resumen

Diseño Electrónico y Óptico de Heteroestructuras Semiconductoras

J. Bohórquez, A.S. Camacho and R. Gutierrez*
Departamento de Física, Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia
*Centro de Investigaciones, Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia

En este trabajo estudiamos el diseño geométrico de estructuras semiconductoras, escogidas como un pozo cuántico doble asimétrico, en tres diferentes aproximaciones. Particularmente estamos interesados en sistemas de tres niveles, en los cuales se ha detectado radiación coherente relacionada con efectos de tunelamiento. Presentamos una estimación detallada de los niveles de energía, las funciones de onda y los momentos bipolares en estos sistemas. Se obtienen rangos de parámetros para el diseño de heteroestructuras que funcionen adecuadamente como emisores de radiación infrarroja de Terahertz usando transiciones intersub-banda, en pozos cuánticos dopados. Como parámetros de control se proponen: el diseño geométrico, el cual es importante en la dispersión fonón LO y el sobrelapamiento de las funciones de onda tiene que ver con el momento dipolar. Ambos procesos son importantes para la evolución de las poblaciones en el sistema de tres niveles y para las polarizaciones ópticas.

Diseño Electrónico y Óptico de Heteroestructuras Semiconductoras

J. Bohórquez, A.S. Camacho and R. Gutierrez[*]
Departamento de Física, Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia
[*]Centro de Investigaciones, Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia

Introducción

El comportamiento dinámico de la carga en un pozo cuántico doble asimétrico (*aDQW*) da lugar a fenómenos tales como almacenamiento de carga, oscilaciones del momento dipolar y emisión de radiación. El momento dipolar intersub-banda inducido por una excitación óptica y producido por oscilaciones de carga en el espacio real, es fuente de radiación electromagnética en la región de los THz, lo cual ha sido reportado experimentalmente [1,2]. La radiación producida es función tanto de los parámetros geométricos como de los materiales del pozo cuántico y las transiciones eléctricas del sistema están gobernadas por los momentos dipolares eléctricos.
En el presente trabajo se calcula las energías propias de un sistema *aDQW* y sus funciones de onda utilizando tres aproximaciones, centrándonos en aquellos que presenten tres niveles de energía, los cuales han sido estudiados exhaustivamente desde el punto de vista experimental. También se obtienen los momentos dipolares y su dependencia a la geometría en las tres aproximaciones escogidas.

Marco Teórico

Un pozo cuántico doble asimétrico consiste de dos pozos cuánticos separados por una barrera de potencial.
dl: es la longitud del pozo ancho, *dr*: es la longitud del pozo delgado y *w*: longitud de la barrera, que se escoje de tal forma que el sistema solo tenga tres niveles discretos de energía. Calculamos las energías y funciones propias por tres métodos: *Hibridación de funciones de onda de dos pozos cuánticos, pozo cuántico doble asimétrico de paredes de potencial infinitas y método exacto.*
Hibridación de Funciones de Onda: Se trata al sistema de pozo doble como conformado de dos pozos cuánticos de potencial finito e independiente. Si algún nivel de energía de uno de los pozos está muy cerca de un nivel de energía del otro pozo los niveles resonantes hibridizan y forman una nueva función de onda para el sistema completo, esto es, la función de onda del aDQW se obtiene como una combinación lineal de las funciones de onda de los pozos separados. Esta aproximación es válida si se cumple que *w* sea comparable al exponente de tunelamiento, donde *U*: es el potencial de la barrera [3].
aDQW con paredes infinitas: Se soluciona es sistema de aDQW con barreras de potencial infinitas, definiendo la función de onda por regiones y exigiendo la continuidad de la función de onda y de su primera derivada en todas las interfases. El conjunto de ecuaciones se resuelve numéricamente..
Método Exacto: Se define la función de onda por regiones y se le exige continuidad a la función de onda y su primera derivada en todas las interfases. Al igual que en el

caso anterior, se soluciona numéricamente el conjunto de ecuaciones resultante. En Heteroestructuras reales, el potencial en las interfases dista mucho de ser infinito por lo cual este es un método más cercano a la realidad.

Energías

Se estudia la variación de los tres niveles de energía del aDQW como función de la razón entre el tamaño del pozo delgado y el tamaño del pozo ancho (*dr/dl*) y la razón entre tamaño de barrera (*w/dl),* para varios tamaños de pozo ancho. Los rangos de variación fueron: *dl* 100A-160A, *dr/dl*: 0.1-0.9 y *w/dl* 0.1-1. Todos los resultados mostrados se calcularon con la masa efectiva del GaAs y para pozos de potencial 90meV.

Con respecto a la posición de los niveles de energía, se observa que el estado base y el segundo estado excitado del sistema no varían notablemente su valor de energía a medida que se aumenta el tamaño del pozo delgado. El primer estado excitado si varía su valor de energía como función del ancho del pozo delgado (fig 1). Para valores de *dr/dl* menores de 0.4 el primer estado excitado está muy cerca del segundo estado excitado presentando una estructura tipo *V.* Para valores mayores dicho estado se acerca al estado base del sistema y la heteroestructura tiene una configuración tipo . Ambas configuraciones tienen en la actualidad aplicaciones en óptica cuántica. El comportamiento es el mismo visto desde las tres aproximaciones propuestas.

Con respecto a los valores de las energías (fig. 3), los tres métodos arrojan resultados diferentes, presentando diferencias apreciables en la posición del estado base. Para el primer y segundo estado excitados (fig.4-5) las diferencias son notorias cuando dr/dl es menor de 0.4.

Mas importante que la posición de los estados de energías, para estudiar la evolución del la heteroestructura cuando se perturba con agentes externos (p.e. campos electromagnéticos), es la diferencia de energías entre los niveles. Así cuando se quiere que el sistema funciones como emisor y receptor de ondas electromagnéticas de frecuencia del orden de Thz, se busca que la diferencia en energía entre los estados sea del orden de 10meV y para que se presente dispersión de fonones LO, la diferencia entre el estado base y los estados excitados sea del orden de 36meV.

En este caso se observan dos comportamientos generales, las diferencias de energías (figura 5) siempre se cortan cuando el ancho relativo del pozo delgado es aproximadamente 0.6 y la diferencia entre los estados excitados tiene un mínimo cuando el ancho relativo es 0.3 aproximadamente. Esto es válido para todos los pozos estudiados.

Para observar esto mejor, se realizaron gráficos tridimensionales de la diferencia de energías como función del ancho relativo del pozo delgado y de la barrera (fig 6).

Momentos de Dipolo

Se evaluaron los momentos de dipolo , donde : son las funciones de onda del sistema. En cada una de las diferentes aproximaciones, el momento permanece constante pero su valor varía dependiendo de la aproximación., para los momentos y para anchos

relativos de pozo delgado mayores a 0.4, los momentos de dipolo son esencialmente del mismo valor (fig.7).
Para momentos de índice diferente y su valor es el mismo en la aproximación de pozo infinito y solución exacta. En el momento los métodos difieren para anchos relativos de pozo delgado menores a 0.4, valor a partir del cual son prácticamente iguales (fig. 8).

Conclusiones

La aproximación de aDQW de paredes infinitas de potencial tiene una buena concordancia con el método exacto cuando el ancho relativo del pozo delgado es mayor a 0.4. En este rango, las posiciones de los niveles de energía, las diferencias de energía y los momentos de dipolo son, para fines prácticos, los mismos.

Si se esta interesado en estudiar la emisión de ondas de THz en este tipo de heteroestructura, el ancho relativo del pozo delgado no puede ser inferior a 0.4, ya que en este rango la diferencia de energías entre los estados excitados, supera ampliamente 10meV. Se observó que la diferencia de energías entre los estados excitados y entre estado base y los estados excitados toman el mismo valor para el valor de ancho relativo de pozo delgado de 0.6, independientemente del tamaño del pozo ancho y del tamaño de la barrera. También, la diferencia de energías entre los estados excitados tienen un mínimo en ancho relativo de pozo delgado de 0.3 independiente del tamaño del pozo ancho.

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente financiado por el *Instituto Colombiano para el fomento de la Ciencia y la tecnología "Francisco José de Caldas"* COLCIENCIAS, grant Nº 1204-05-11405 y el Comité de Investigaciones de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Los Andes, Bogotá, Colombia.

Bibliografía

[1] P.Planken, I.Brener, M. Nuss, L.Luo and S. Lien Chuang, *Phys.Rev.B,* **48**(7),4803(1993-I)
[2] N. Garro,M.J. Snelling, S.P. Kennedy, R.T. Phillips and K.H. Ploog, *Phys.Rev.B,* **60**(7),4497(1999-I)
[3] F. Vasko and V. Kuznetsov, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterstructures,* Springer-Verlag, New York, 1999.

FIGURE CAPTION

Figura 1. Niveles de energía para el aDQW como función del ancho relativo del pozo delgado. En el gráfico E0 representa el estado base, E1 y E2 los estados excitados.

Figura 2. Estado base del aDQW como función del ancho relativo del pozo delgado para dos aproximaciones: línea continua: método exacto, línea punteada: aDQW de paredes infinitas.

Figura 3. Primer estado excitado del aDQW como función del ancho relativo del pozo delgado para dos aproximaciones: línea continua: método exacto, línea punteada: aDQW de paredes infinitas.

Figura 4. Segundo estado excitado del aDQW como función del ancho relativo del pozo delgado para dos aproximaciones: línea continua: método exacto, línea punteada: aDQW de paredes infinitas.

Figura 5. Diferencia de energías entre estado base y primer estado excitado (delta 01) y entre estados excitados (delta12) como función del ancho relativo del pozo delgado, calculado por el método exacto.

Figura 6. Diferencia de energías entre estados excitados como función del ancho relativo del pozo delgado y la barrera. a) Pozo ancho de 110A, b) Pozo ancho de 120A.

Figura 7. Momento de Dipolo d_{11} como función de lancho relativo del pozo delgado, línea punteada calculo con aDQW infinito, línea continua calculo exacto.

Figura 8. Momento de Dipolo d_{01} como función de lancho relativo del pozo delgado, línea punteada calculo con aDQW infinito, línea continua calculo exacto.

Bibliografía

[1] H.Roskos, M.Nuss, J.Shah, K.Leo, and D.Miller, *Phys.Rev.Lett* **68**(14) 2216 (1992).

[2] P.Planken,I.Brener, M.Nuss,M.Luo and S.Lien Chuang, *Phys.Rev.B* **48** (7),4803(1993-I).

[3] F.Vasko and V.Kuznetsov, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures*, Springer-Verlag, New York, 1999.

[4] C.Sirtori, *Nature***417**,(May),132-133 (2002).

[5] R.Köhler, A.Tredicucci, F.Beltram, H.Beere, E.Linfield, A.G.Davies, D.A.Ritchie, R.C.Iotti and F.Rossi, *Nature*, **417**,(May),156-159, 2002.

[6] S.Hameau, Y.Guldner, O.Verzelen, R.Ferreira and G.Bastard, *Phys.Rev.Lett.*, **83** (20),4152 (1999).

[7] M.S.C.Luo, S.L.Chuang, P.C.M.Planken, I.Brerner and M.N.Nuss, *Phys.Rev.Lett.* **48**(15) 11043 (1993-I).

[8] A.S.Camacho, J.Bohórquez and R.M.Gutierrez, *Physica E***17**,297 (2003).

[9] S.Luryi,*IEEE Journal of Quantum electronics*, **27**(1), 54-60 (1991).

[10] X.Hue and W.Pötz, *Phys.Rev.Lett.* **82**(15),3116 (1999).

[11] S.Das Sarma and B.A.Manson, *Ann.Phys*, 163,78 (1995).

[12] M.Scully and S.Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press 1997.

[13] B.A.Manson and S.Das Sarma, *Phys. Rev. B*, **35**,8,(1987), 3890-3899.

[14] G. Mahan, *Many-particle physics*Plenum Press, 1990.

[15] Goognick,S.M. and Luigi, P., *Phys Rev B*,**37,**5(1988), 2578-2588.