

# Internet Electronic Journal\*

# Nanociencia et Moletrónica

Junio 2011, Vol. 9, N°1, pp. 1655-1670

## **Mecánica Cuántica de Electrones en Nano-montículos y Nano-arreglos semiconductores**

**R. Gómez Puerto\*, A. Ramírez Solís**

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
Facultad de Ciencias de la Electrónica (FCE),  
Laboratorio de Nanotrónica \*Becario Posgrado,  
Ciudad Universitaria, 72550 Puebla, México  
e-mail: [arami@ece.buap.mx](mailto:arami@ece.buap.mx)

recibido: 16.04.11

revisado: 22.05.11

publicado: 31.07.11

Citation of the article;

R. Gómez Puerto, A. Ramírez Solís, Mecánica Cuántica de Electrones en Nano-montículos y Nano-arreglos semiconductores, Int. Electron J. Nanoc. Moletrón, 2011, Vol. 9, N°1, pp 1655-1670

---

Copyright © BUAP 2011

## Mecánica Cuántica de Electrones en Nano-montículos y Nano-arreglos semiconductores

**R. Gómez Puerto\*, A. Ramírez Solís**

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
Facultad de Ciencias de la Electrónica (FCE),  
Laboratorio de Nanotrónica \*Becario Posgrado,  
Ciudad Universitaria, 72550 Puebla, México  
e-mail: [aramirs@siu.buap.mx](mailto:aramirs@siu.buap.mx)

recibido: 16.04.11

revisado: 22.05.11

publicado: 31.07.11

---

*Internet Electron. J. Nanoc. Moletrón., 2011, Vol.9 , N° 1, pp 1655-1670*

**Resumen:** Los resultados de las observaciones a través del Microscopio de Fuerza Atómica de la morfología del Carburo de Silicio, han permitido encontrar regiones en la superficie que presentan nano-montículos de forma individual y en arreglo lineal de una cadena de puntos cuánticos con separación periódica, cuya distancia es menor que la longitud de onda De Broglie de electrones térmicos dentro del material semiconductor. Por las dimensiones geométricas, que muestran los montículos dentro de los arreglos lineales localizados, decimos que la estructura energética de bandas de los electrones, común en los materiales volumétricos, debe sustituirse por niveles discretos propios para puntos cuánticos. Se presenta un mecanismo de transporte eléctrico a través de un pozo cuántico con potencial de forma V encerrado en una barrera doble, que nos indica la acción de un campo eléctrico variable en la formación de un proceso de tunelamiento por resonancia y una comparación con superredes  $\Delta i \Delta i$ , propuestas y descritas por Zehe et al [1] para una nanoestructura en GaAs. Una característica esencial de este tipo de superred, y así muy probablemente del arreglo de pozos cuánticos en SiC, es la formación de minibandas energéticas de electrones, que atraviesan la estructura compacta.

**Palabras clave:** Carburo de Silicio, puntos cuánticos, arreglo lineal de montículos,  $\Delta i \Delta i$  superred.

## 1. Introducción

Para describir un nanocristal, en nuestro caso de un material semiconductor como lo es el Carburo de Silicio (SiC), utilizamos el término de nano-montículo o bien punto cuántico el cual presenta confinamiento cuántico en las tres dimensiones espaciales [2]. Este confinamiento da lugar a propiedades inusuales que no se manifiestan en materiales de tamaño macroscópico. El confinamiento de los portadores de carga se puede ajustar variando las dimensiones de los nano-montículos, y si tenemos nano-arreglos se podría aprovechar de forma grupal las propiedades que de ese arreglo se generen [3].

La situación característica para un cristal extendido (referente al camino libre medio de un electrón) se cambia drásticamente cuando su extensión geométrica llega a ser comparable con la longitud de onda De Broglie,  $\lambda_e^{DB}$ . Consecuencia de tal reducción de tamaño es la formación de valores energéticos discretos dentro de regiones restringidas, hablamos de “Puntos Cuánticos” (PC) cuyo tamaño es del orden de magnitud de longitud de onda De Broglie [4].

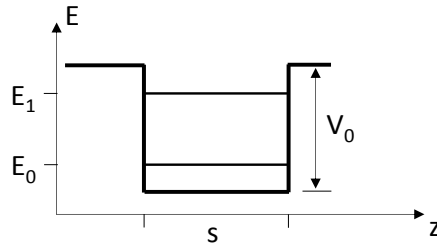
Para un electrón con la masa efectiva  $m_e^*$  en temperatura ambiental de  $T=300$  K se calcula la longitud de onda de De Broglie. La energía corresponde aquí a la energía térmica  $E=k_B \cdot T_{300K}$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta. Este valor depende obviamente del material, que se considera, dado que la masa efectiva  $m_e^*$  varía en diferentes materiales [5].

En un punto cuántico con dimensiones geométricas en este rango de  $\lambda_e^{DB}$  serán restringidos en su movilidad los electrones en las tres direcciones del espacio tal, que su energía puede adoptar valores discretos solamente. Es decir, su energía ya no puede tener valores continuos como es el caso para electrones libres. Los puntos cuánticos se comportan semejantes a átomos, sin embargo es posible influir en su tamaño y forma, tanto como el número de electrones. El efecto positivo consiste en que se dejan “esculpir”, es decir, definir su forma y tamaño a conveniencia, para obtener propiedades eléctricas y ópticas deseadas [6,7].

## 2. Estados energéticos en un pozo cuántico

Un pozo cuántico es la denominación que recibe un pozo de potencial que confina, en dos dimensiones (1D) partículas que originalmente tenían libertad para moverse en tres dimensiones, forzándolas a ocupar una zona que limita sus movimientos. Los efectos del confinamiento cuántico se producen cuando el espesor del pozo cuántico es comparable a la longitud de onda de De Broglie de las partículas portadoras de energía

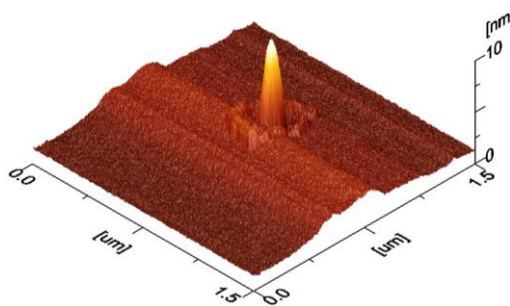
(generalmente electrones y huecos de electrones), generando así niveles de energía llamadas "subbandas energéticas". Los electrones están restringidos a moverse libremente en la dirección  $-z$ , que es la dirección de crecimiento del pozo cuántico y ocupando solamente niveles de energía discretos 1D [8].



**Figura 1.** Estructura de un pozo cuántico, donde  $V_0$  es la profundidad del pozo,  $s$  el ancho del pozo,  $E$  – energía,  $E_0$ ,  $E_1$  los estados energéticos permitidos dentro del pozo.

Los pozos angostos y las bajas densidades de portadores ocasionan una deflexión completa de las subbandas más altas y solamente el nivel de energía  $E_1$  contiene electrones, suministrando a la muestra la temperatura suficiente como para que la redistribución térmica de los portadores debido a  $T_{300K} = 25.9$  meV sea despreciable.

Se puede suponer, que un punto cuántico sencillo, como previamente lo encontramos en la superficie de una muestra de GaP, representa la geometría adecuada para la generación de estados electrónicos discretos. Su comprobación experimental requeriría una espectroscopia óptica detallada en espacio [9,10].



**Figura 2.** Punto cuántico en una superficie de GaP, cuya altura es de 10 nm [11].

### 3. Efecto de tunelamiento cuántico

El traslape de las funciones de onda de electrones en dos regiones geométricas separadas por una barrera de potencial  $\phi$  resulta en una transmisión de electrones a través de un espacio, que por las leyes de la física clásica está prohibido cruzar. Entre dos metales o semiconductores, que están separados por vacío o por un óxido aislante, fluye una corriente  $I$  de tunelamiento [4].

Aplicado a una situación semejante que ocurre en el Microscopio de Tunelamiento (STM), la corriente túnel es:

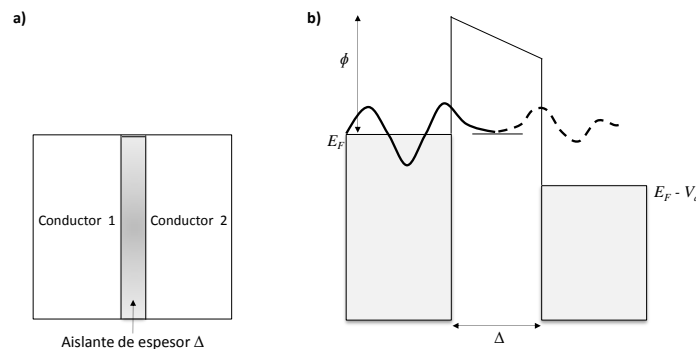
$$I = \exp(-A\sqrt{\phi} \cdot \Delta), \quad (1)$$

donde  $\Delta$  es la distancia entre muestra y punta,  $f(u)$  la función de la estructura electrónica de la muestra y la punta de electrón libre  $f(u) \sim V_a$ ,  $\phi$  es la altura de barrera,

$$\phi \approx \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}, \quad (2)$$

donde  $\phi_1, \phi_2$  es la función de trabajo del conductor 1 y conductor 2, respectivamente,

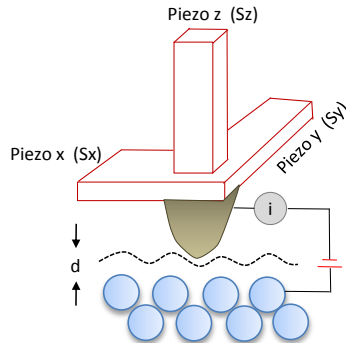
mientras que  $A = 2 \sqrt{2m_e/\hbar^2} = 1.025 \text{ \AA}^{-1} \text{ eV}^{-1/2}$ .



**Figura 3.** a) Estructura de tunelamiento, b) Efecto de tunelamiento cuántico,  $\phi$  es la altura de barrera del potencial,  $E_F$  energía Fermi y  $V_a$  el voltaje aplicado [12,13].

La corriente túnel depende exponencialmente de la distancia  $\Delta$ . Para las funciones típicas de trabajo  $\phi=4.5$  eV los cambios son aproximadamente un orden de magnitud si la distancia se cambia por 1 Å.

Debido a la naturaleza del efecto túnel, el STM es muy sensible a la distancia  $d$  de la superficie (figura 4). Para distancias  $d > 1 \text{ nm}$ , en esencia no ocurre efecto túnel.



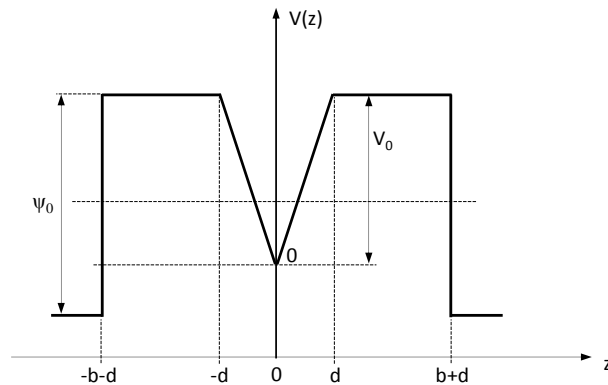
**Figura 4.** Vista esquemática de un STM. La punta, mostrada como un cono redondeado, está montada sobre un explorador piezoeléctrico. Una exploración de la punta sobre la muestra puede revelar contornos de la superficie debajo del nivel atómico [14].

La punta de la sonda es conducida de modo que siempre permanezca a una distancia  $d$  constante por sobre la superficie de la muestra. Tal exactitud se logra sujetando la punta de metal a un trípode de cerámica piezoeléctrico. La tensión que se aplica en el poste SZ es regulada permanentemente por la corriente de túnel de modo que la distancia  $d$  se mantenga exactamente constante durante el movimiento de traslación de la punta sobre la superficie de la muestra [14,15].

#### 4. Tunelamiento cuántico a través de un pozo cuántico encerrado entre dos barreras

La existencia de niveles electrónicos discretos en un pozo cuántico, que se encuentra encerrado entre dos regiones de barrera y conectado a un depósito externo de electrones (contacto metálico) deja esperar, que la corriente de tunelamiento a través de tal nanoestructura sea afectada por un voltaje externo tal que al alinear el nivel electrónico del pozo cuántico con el nivel Fermi  $E_F$  del contacto eléctrico la corriente de tunelamiento crece considerablemente.

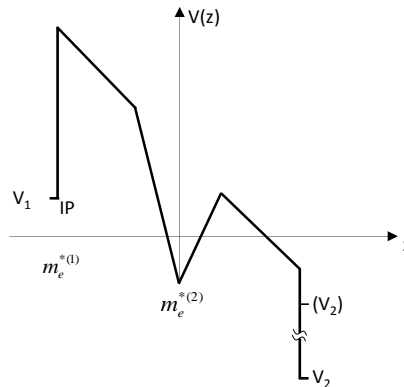
Para fines de demostración de este efecto resonante en la transmisión de electrones utilizamos una estructura dada en la siguiente figura.



**Figura 5.** Diagrama de energía potencial de una sola barrera 1D-doble cuántica en forma de  $V$  con estructura túnel (sin campo aplicado). El ancho de la barrera en la parte superior es  $b$ , lo ancho y profundo del potencial (en forma  $V$ ) es  $2d$  y  $V_0$ , respectivamente.  $\Psi_0$  es el potencial interno de la heteroestructura,  $z$  la dirección de crecimiento.

Tomado de [16].

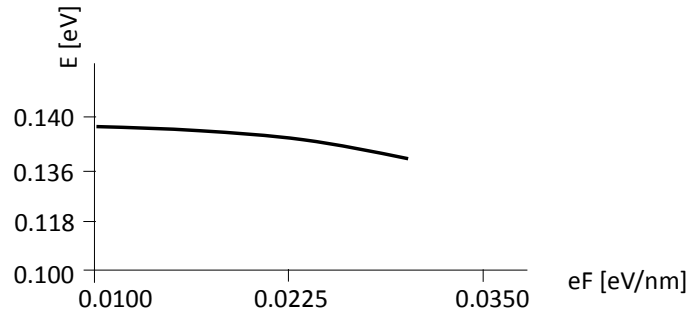
Los cálculos teóricos fueron publicados por Zehe et al. [16] en la revista *Superlattices and Microstructures* en el año 1990, se presentan los resultados importantes en forma de gráficas. Si se aplica un voltaje a través de tal estructura, el diagrama de la energía potencial se deforma como se muestra en la Figura 6.



**Figura 6.** Diagrama de energía potencial según Figura 3.6 con campo eléctrico aplicado en dirección  $z$ , causando una deformación asimétrica de la barrera y el potencial.  $IP$  es el punto de inyección. El potencial  $\Phi_0=400$  meV.

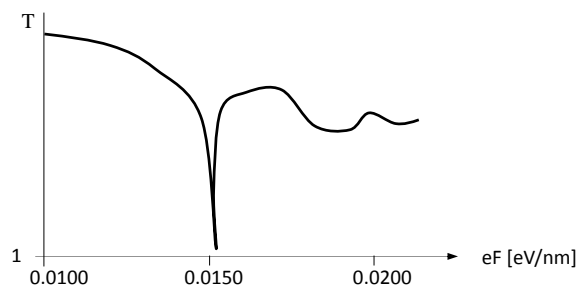
Tomado de [16].

Para el nivel más bajo de energía electrónica en el pozo cuántico reportaron un valor de 140 meV en el pozo de profundidad de  $V_0=350$  meV, que al aplicar un voltaje externo se reduce por varios meV (ver Figura 7).



**Figura 7.** El nivel energético más bajo en el pozo con  $V_0=350$  meV,  $d=5$  nm,  $b=8$  nm, se sitúa sin campo eléctrico externo en  $E_0=140$  meV. Con la aplicación de un campo eléctrico de entre  $eF=0.001$  eV/nm y  $0.035$  eV/nm (correspondiente a  $10^4$  V/cm,  $10^5$  V/cm,  $3.5 \cdot 10^5$  V/cm) se nota un pequeño desplazamiento de  $E_0$  por hasta 6 meV.

De particular importancia resultó el coeficiente de transmisión  $T$ , que bajo la misma condición descrita en la anterior figura muestra un pronunciado pico, que significa una corriente de tunelamiento máximo, y por la forma en pico de  $T$  es un valor muy discreto del campo eléctrico, se habla de un tunelamiento resonante (Figura 8).



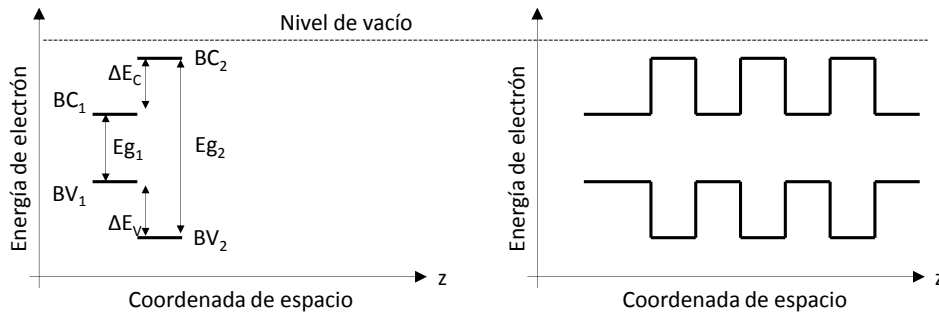
**Figura 8.** Coeficiente de transmisión  $T$  calculado para el mismo caso como en la anterior figura. Se nota un pico pronunciado en un campo eléctrico externo de  $eF=0.0148$  eV/nm (correspondiente a  $1.48 \cdot 10^5$  V/cm), que indica una alta transmisión.

Este resultado tiene relevancia en casos prácticos, que presentan al procesar tecnológicamente puntos cuánticos en la superficie de materiales como el SiC con posibles aplicaciones en sensores y otros dispositivos nanotrónicos, que afectan el estado de resonancia.



### 5. Equivalencia entre una $\Delta i \Delta i$ superred y un arreglo lineal de puntos cuánticos

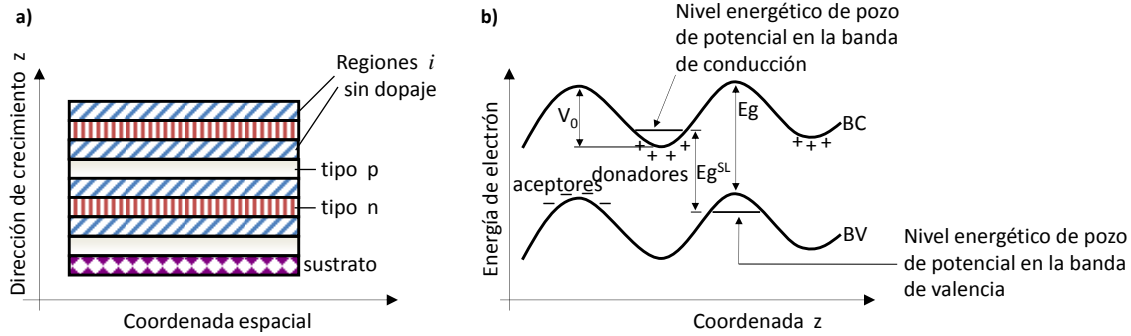
Las superredes en semiconductores son realizadas por una variación periódica de la fracción molar  $x$  en una aleación de tipo  $A_{1-x}B_xC$  (por ejemplo:  $Ga_{1-x}Al_xAs$ ) durante el proceso de crecimiento capa por capa, que típicamente ocurre en un reactor de vacío por la técnica de MBE (del inglés *Molecular Beam Epitaxy*) [4,17]. De esta forma se produce un potencial periódico uno-dimensional, como se muestra en la Figura 9.



**Figura 9.** Localización de las bandas conducción  $BC_1$ ,  $BC_2$  y de valencia  $BV_1$ ,  $BV_2$  relativo al nivel de vacío para dos compuestos semiconductores que forman la superred. a) sin contacto, b) en contacto a nivel atómico. Dirección de crecimiento en  $z$ .

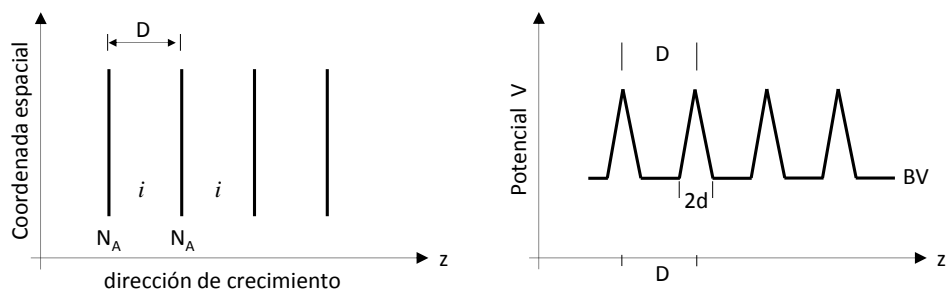
Fenómenos inusuales (respecto a semiconductores homogéneos) de transporte eléctrico y de transiciones ópticas ocurren tan pronto que el periodo de la superred es menor que el camino libre medio de los electrones.

En lugar de variar la composición química a través de la fracción molar  $x$  a lo largo de la dirección de crecimiento  $z$ , se puede fabricar una superred en un semiconductor homogéneo intrínseco (por ejemplo GaAs) simplemente por introducir periódicamente átomos de dopamiento. Tal superred lleva el nombre de superred por dopamiento alterna entre donadores de concentración  $N_D$  y aceptores de concentración  $N_A$ . El potencial periódico de superred que se produce, está esquematizado en la siguiente figura.



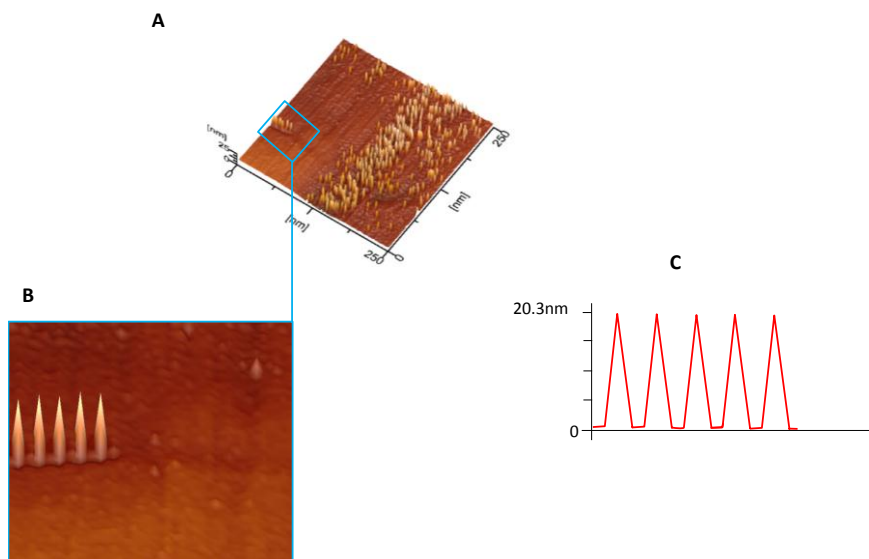
**Figura 10.** a) Representación esquemática de la secuencia de capas  $i$  (sin dopamiento),  $n$  (dopamiento con donadores), y  $p$  (dopamiento con aceptores); b) El perfil de las bandas energéticas de los electrones en espacio real.  $V_0$  es el potencial de los pozos,  $E_g$  – la energía del gap del semiconductor, y  $E_g^{SL}$  es la energía del gap de la estructura de superred.

Los aparatos MBE más sofisticados permiten un control absoluto de la composición química en una sola capa cristalina. Dicho sea de paso, un equipo MBE es un producto auténtico de la Mecatrónica. Este avance tecnológico ha llevado a la posibilidad de un dopamiento delta, que significa, que al crecer un semiconductor intrínseco (sin dopamiento), se puede dopar con alta concentración de átomos donadores en una sola capa, para seguir después con el crecimiento intrínseco. Tal estructura periódica lleva el nombre de  $\Delta i \Delta i$  superred y fue construida por Zehe [16], con la finalidad de realizar una función de distribución de pares donadores-aceptores predeterminada [4], útil en la fotoluminiscencia con espectros particulares para memorias controlables de ocupación y relajación en computadoras cuánticas [17]. La estructura geométrica de tal superred y su potencial periódico sobre la banda de valencia, se muestra en la siguiente figura.



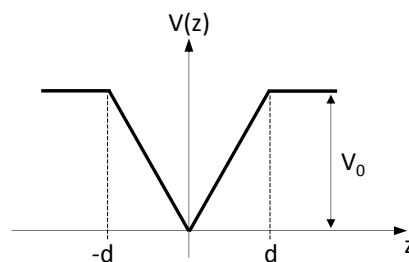
**Figura 11.** Secuencia de monocapas altamente dopadas con aceptores ( $N_A$ ) entre regiones intrínsecas. La distancia  $D$  entre las monocapas dopadas se refleja en la periodicidad del potencial  $V$  con un ancho  $2d$  a lo largo de la dirección de crecimiento  $z$ .

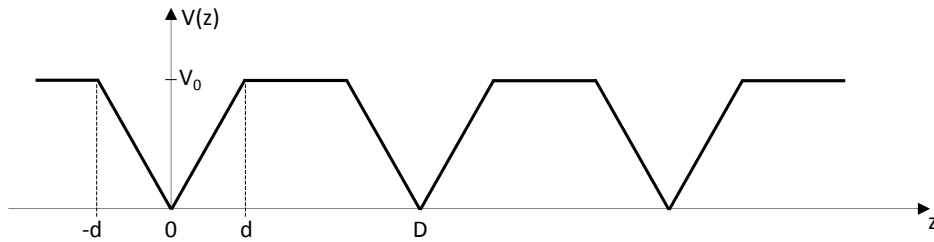
La similitud entre los potenciales periódicos con forma de “picos”, a un lado generados por el dopamiento delta de una  $\Delta i \Delta i$  superred a lo largo de su dirección de crecimiento  $z$ , y al otro lado generados por las cargas eléctricas localizadas en el arreglo de puntos cuánticos nos permiten incluir las conclusiones físicas acerca de los estados electrónicos en las superredes al mecanismo de transporte, es decir, el tunelamiento cuántico de los electrones entre los puntos cuánticos en estrecha vecindad. Si se colocan varios puntos cuánticos en vecindad cercana tal que los electrones puedan llegar de un punto cuántico al otro a través del proceso de tunelamiento cuántico, hablamos de una “Molécula de Puntos Cuánticos”, o de “Puntos Cuánticos Acoplados”, o incluso de una superred unidimensional formado por puntos cuánticos (ver Figura 12).



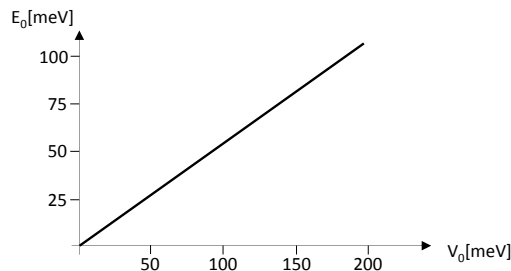
**Figura 12.** Muestra de la superficie de SiC en topografía-3D **B** que nos deja ver una superficie con una region casi plana con montículos aislados, y otra zona con montículos con un crecimiento aparentemente aleatorio. Localizamos un arreglo lineal de montículos **B** donde se aprecia de forma clara un arreglo lineal de Puntos Cuánticos Acoplados, cuya altura es de 20.3nm tan como observamos en el perfil de corte vertical **C**.

La representación esquemática del arreglo de puntos cuánticos como los mostrados en la Figura 11, deja ver una fuerte semejanza a un tipo de superred delta, descrito anteriormente, que fue calculado por Zehe et al. [16], la llamada  $\Delta i \Delta i$  superred por su secuencia picuda de los potenciales, generados con la técnica MBE por un dopamiento secuencial de mono capas ilustrado en el punto anterior. El potencial esquematizado de tal estructura con delta-dopamiento por átomos donadores (ver Figura 13).

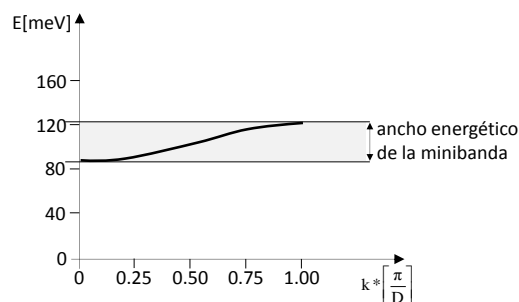


**Figura 13.** Potencial simétrico  $V(z)$  en forma de  $V$ , con profundidad  $V_0$  y ancho  $2d$ .**Figura 14.** Potencial de una superred  $\Delta i \Delta i$ ,  $d$  es el dopamiento con donadores de concentración  $N_D$  con la periodicidad  $D$ . El potencial tiene una profundidad  $V_0$  y un ancho de  $2d$ .

Sin entrar aquí en detalles del cálculo, los autores reportan un nivel energético base  $E_0$  en dependencia de la profundidad  $V_0$  del pozo de potencial de forma  $V$ , y un ancho de  $2d=5$  nm, como se señala en la Figura 15.

**Figura 3.15.** Energía del estado base  $E_0$  como función de la profundidad  $V_0$  del pozo de potencial con un ancho de  $2d=5$  nm sin vecindad cercana de otro pozo.

El acoplamiento entre pozos cuánticos vecinos a través de sus funciones de onda electrónica individuales genera sub bandas en dirección del arreglo. Esto significa, que los electrones en los puntos cuánticos tienen facilidad de moverse dentro de esta sub banda [16]. Es una situación conocida también de la banda de conducción en semiconductores cristalinos.



**Figura 16.** Doblamiento de la subbanda  $E_0$  en el espacio de momento  $k^*$  para la estructura de potencial dado. Se usó como parámetros de cálculo para  $D=6$  nm,  $2d=3$  nm y  $V_0=160$  meV.

Se puede extraer de la Figura 16 que la minibanda para los estados permitidos de los electrones en los pozos alcanza aproximadamente 40 meV para los valores dados de la periodicidad  $D=6$  nm y el ancho de cada potencial del arreglo de  $2d=3$  nm, con una profundidad de  $V_0=160$  meV.

En la medida que los pozos de potencial se acercan más, es decir,  $D$  se hace más pequeño, y dejando los otros parámetros sin cambio, el ancho energético de la minibanda crece. Al otro lado resultó en el cálculo reportado, que para valores  $D/d$  mayores de 6 a 7, la minibanda se reduce a su valor base  $E_0$ , característico para pozos de potencial individuales y sin interacción mutua, como se mostró en la Figura 15.

## 6. Conclusiones

El efecto de tunelamiento, como mecanismo de transporte electrónico a través de un punto cuántico, y el acoplamiento de pozos cuánticos permitirán el movimiento de los electrones. Sin lugar a duda, la posibilidad de crecer este tipo de estructuras (Puntos Cuánticos Acoplados) y aprovechando las propiedades físicas de los puntos cuánticos hacen que estos sistemas sean fuertes candidatos para aplicaciones futuras novedosas. Su fabricación se puede realizar mediante un proceso de auto ensamblado, por ejemplo, empleando la técnica de Epitaxia por Haces Moleculares.

La  $\Delta i \Delta i$  superred construida por Zehe tiene la finalidad de realizar una función de distribución de pares donadores-aceptores predeterminada, aprovechando la similitud entre los potenciales periódicos con forma de "picos", y las regiones en la superficie del SiC donde encontramos estructuras con igual similitud nos deja ver que es posible un tunelamiento cuántico de los electrones entre los puntos cuánticos en estrecha vecindad, a lo que también se le conoce como banda de conducción en semiconductores cristalinos.

En la medida que los pozos de potencial se acercan más, el ancho energético de la minibanda crece, lo que nos permite pensar que si nosotros adoptamos esa condición al momento de implementar una estrategia de diseño a través de la técnica MBE será posible obtener una estructura con un ancho energético elevado.

## Agradecimiento

Los autores dan su profundo agradecimiento por numerosas discusiones del presente trabajo con el Dr. Alfred Zehe

## Bibliografía

- [1] Zehe A., (1998) "Electronic structure of atomic-plane doped superlattice in GaAs". Superlattices and Microstructures. Vol. 6. N°3. pp. 259-263.
- [2] D. Gammon, (1998) "The evidence of small things". *Science*. Vol. 280. N°5361. pp.225.
- [3] A. Ekimov, A. Onushchenko, (1981) "Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals". *JETP Lett.* 34: 345–349
- [4] Zehe A., (2002) "Moletronica" (Documentos Microsoft Word) <http://www.moletronica.buap.mx>.
- [5] Zehe A., (1996) *Tecnologías y sistemas en alto vacío – Volumen 3*. TecnoPlus. Primera edición. México-Alemania. 16-17, 54.
- [6] Zehe A., (1996) *Tecnologías y sistemas en alto vacío – Volumen 3*. TecnoPlus. Primera edición. México-Alemania. 16-17, 54.
- [7] Zehe A., (1988) "Physics and technology of microstructures in solids motivation for molecular beam epitaxy". *Crystal growth and characterization of advanced materials*. World Scientific. Singapore. pp. 216-233.
- [8] Juárez A., Tello T., Röpke G., Zehe A., (1991) "Caracterización de interfaces en pozos cuánticos de GaAlAs-GaAs usando la transición excitónica". *Revista Mexicana de Física*. Vol. 37. N°2. pp. 294-302.
- [9] Zehe A., Ramírez A., Patiño A., (2005) "Electron wind induced mass transport in sub-micrometer size wires". *Materials Science Forum*. Vols. 480-481. pp. 463-468.
- [10] Zehe A., (1999) *Microelectrónica – Materiales y tecnologías – Diseño de circuitos integrados*. Textos científicos BUAP. Primera edición. México. 117-118, 141-156.
- [11] Ramírez L., Ramírez A., (2006) "Análisis de Superficies de un Diodo Fotoluminiscente tipo FABRY-PEROT con Microscopía de Fuerza Atómica (AFM)", *Internet Electrón. J. Nanocs. Moletrón*. Vol.4, N°3. pp. 855-864
- [12] Zehe A., (2000) *Exploración en Sólidos – Recopilación de Publicaciones Científicas*, Vol. 1, Parte 1 (1968...1985), ISBN 968-7763-06-x, Editorial APRESYS, Dresden Alemania.
- [13] Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., and Weibel E., (1982) "Surfaces studies by scanning tunneling microscopy". *Physical Review Letters*. Vol. 49. pp. 57-61.
- [14] Howland R., Benatar L., (2000) *A practical guide to scanning probe microscopy*. ThermoMicroscopes. Primera edición. California E. U. 2-13

- [15] Zehe A., (2002) Herramientas analíticas de interfaces sólidas. Intercon Verlagsgruppe. Primera edición. Norderstedt Alemania 141-144
- [16] Zehe A., Estenoz C., López J., (1990) "Resonant tunneling through a doble barrier single V- shaped quantum well". Superlattices and Microstructures. Vol. 7. N°1. pp.75-79.
- [17] Zehe A., Ramírez A., (2001) "Photon energy shift in the luminescence of highly excited Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As:Si due to AUGER effect involvement", Superficies & Vacío, Vol.12.

