



Revista EIA
ISSN 1794-1237
e-ISSN 2463-0950
Año XIX/ Volumen 20/ Edición N.39
Enero-Junio de 2023
Reia3920 pp. 1-15

Publicación científica semestral
Universidad EIA, Envigado, Colombia

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

Mora-Rey, F.; López Aristizábal, A.;
Morales, A.; Duque, C.
Punto cuántico cónico doble
verticalmente acoplado de GaAs/
 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ bajo efectos de presión
hidrostática y temperatura.
Revista EIA, 20(39), Reia3920.
pp. 1-15.
<https://doi.org/10.24050/reia.v20i39.1652>

 *Autor de correspondencia:*

Mora-Rey, F. (Fernanda)
Est. Preg. Física
Correo electrónico:
fernanda.morar@udea.edu.co

Recibido: 27-10-2022

Aceptado: 30-11-2022

Disponible online: 01-01-2023

Punto cuántico cónico doble verticalmente acoplado de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ bajo efectos de presión hidrostática y temperatura

 F. MORA-REY¹

A. M. LÓPEZ ARISTIZÁBAL¹

A.L. MORALES¹

C. A. DUQUE¹

1. Universidad de Antioquia

Resumen

Partiendo de una estructura compuesta de dos pozos cuánticos cónicos (CQDs) verticalmente acoplados de GaAs rodeados de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en una concentración de 0,3, se estudia en primer lugar como las dimensiones del sistema causan un cambio en el confinamiento, para esto se varía la altura del pozo cuántico superior y se encuentra la óptima para trabajar, con esto definido, se evalúan los efectos de la presión hidrostática (entre 0 GPa y 3 GPa) y la temperatura (entre 0 K y 300 K) en la masa efectiva, el ancho de banda prohibida (Gap), la constante dieléctrica y su impacto sobre las autoenergías y autofunciones del sistema. Además, se evalúan los efectos al incluir la presencia de una impureza en la estructura ubicada en el pozo cuántico inferior. Haciendo uso del método de elementos finitos, se evidencian variaciones en las energías y funciones de onda del sistema, las cuales se deben a la alteración de la masa efectiva y de la nueva energía potencial. Analizando el comportamiento de la energía de enlace se nota un cambio en la constante dieléctrica cuando el sistema se encuentra sometido a una temperatura alrededor de 200 K debido a que sobre este valor el Gap pasa de ser directo a ser indirecto. Finalmente, la presencia de la impureza en el sistema genera un potencial adicional, en consecuencia, las energías en la estructura disminuyen bajo los efectos evaluados, haciendo cambios más contundentes en las funciones de onda y energías debido a este potencial.

Palabras clave: Puntos cuánticos cónicos verticalmente acoplados, presión hidrostática, temperatura, impureza, energía de enlace, constante dieléctrica, masa efectiva, ancho de banda prohibida.

Vertically coupled double conical quantum dot of GaAs/Al_xGa_{1-x}As under hydrostatic pressure and temperature effects

Abstract

Starting from a structure composed of two conical quantum dots (CQDs) vertically coupled of GaAs surrounded by Al_xGa_{1-x}As at a concentration of 0.3, it is first studied how the dimensions of the system cause a change in the confinement, for this the height of the upper quantum well and the optimal one is found to work with, with this defined, the effects of hydrostatic pressure (between 0 GPa and 3 GPa) and temperature (between 0 K and 300 K) on the effective mass, the width band gap (Gap), the dielectric constant and its impact on the self-energies and self-functions of the system. In addition, the effects of including the presence of an impurity in the structure located in the lower quantum well will be evaluated. Making use of the finite element method, variations in the energies and wave functions of the system are evidenced, which are due to changes of the effective mass and the new potential energy. Analyzing the behavior of the binding energy, a change in the dielectric constant is noted when the system is subjected to a temperature around 200 K, since above this value the Gap changes from being direct to being indirect. Finally, the presence of the impurity in the system generates an additional potential, consequently, the energies in the structure decrease under the evaluated effects, making more forceful changes in the wave functions and energies due to this potential.

Keywords: Conical quantum dots vertically coupled, coupled, hydrostatic pressure, temperature, impurity, bond energy, dielectric constant, effective mass, bandgap.

1. Introducción

En las últimas tres décadas las nanoestructuras han tenido gran impacto en investigaciones de semiconductores debido a sus propiedades y aplicaciones. Una de estas estructuras son los puntos cuánticos (QDs) los cuales han sido fundamentales en el avance de diversas áreas del conocimiento tanto teórica como experimentalmente. En cuanto a los estudios experimentales, Gil *et al.* (2018), Pulgar-Velásquez *et al.* (2021) y Heyn *et al.* (2021) afirman que se han utilizado técnicas de crecimiento de heteroestructuras semiconductoras las cuales se han mostrado atractivas para el desarrollo de nuevas tecnologías. Teóricamente se han estudiado los QDs bajo efectos de campos magnéticos, campos eléctricos, presión hidrostática, temperatura y láser; además, sus propiedades ópticas, estados electrónicos, momento de dipolo y absorción electrónica (Heyn *et al.*, 2021; Aouami *et al.*, 2020; Mommadi *et al.*, 2020; Sali *et al.*, 2019; Khachatryan *et al.*, 2021; Osorio *et al.*, 2020; Chnafi *et al.*, 2021). En primer lugar, se mencionan trabajos sobre excitones en puntos cuánticos.

Heyn *et al.* (2018) estudiaron excitones en puntos cuánticos cónicos bajo la acción de campos magnéticos y eléctricos, los principales resultados muestran que el campo magnético incrementa el tiempo de vida del excitón y produce un corrimiento al rojo de la energía; por otro lado, el campo eléctrico produce que la estructura cambie de un punto cuántico a un anillo cuántico. Mommadi *et al.* (2020) estudiaron excitones en puntos cuánticos cilíndricos bajo la acción de un campo eléctrico, ellos encontraron que la contribución de los fonones incrementa la energía de enlace y decrece el cambio de la energía por efecto Stark. En segundo lugar, se describen trabajos relacionados con propiedades ópticas. Aouami *et al.* (2020) investigaron las propiedades ópticas no lineales de puntos cuánticos cónicos de GaN, con una tapa, los autores encontraron que el coeficiente de absorción y el índice de refracción disminuye la energía del electrón a medida que el radio aumenta; también, que los coeficientes de segundo y tercer armónico disminuyen en energía y luego aumentan al incrementar el radio. Parzivi (2015) estudió transiciones ópticas interbanda en puntos cuánticos cónicos, de GaAs rodeados de InGaAs, encontrando que la fotoluminiscencia disminuía en energía al aumentar el espesor de la capa de soporte del punto (wetting layer), lo cual concuerda con resultados experimentales. Zeiri *et al.* (2019) investigaron la susceptibilidad no lineal en puntos cuánticos esféricos de CdTe-CdS-ZnS, coraza-capa-capa, encontrando que la susceptibilidad se desplaza hacia el rojo al aumentar el ancho de las capas y su magnitud aumenta al aumentar la energía del fotón incidente.

Por último, se presentan trabajos que incluyen diferentes efectos. Sali *et al.* (2019) realizaron un estudio sistemático de un punto cuántico cónico de InAs/GaAs considerando efectos de la capa de soporte, de un láser intenso, de la no parabolicidad de la banda de conducción, de la energía de enlace de una impureza donadora; el principal resultado es que la energía de enlace depende fuertemente de el radio, la altura, el espesor de la capa de soporte, y el láser intenso. Khachatryan *et al.* (2021) resolvieron el problema de puntos cuánticos cónicos, prolata y oblate, de InAs en un campo eléctrico externo, el resultado más importante es que la frecuencia de la transición entre la banda de huecos pesados y la banda de conducción pertenece al infrarrojo, y que la transición entre la banda de huecos livianos y la banda de conducción se presenta en el visible. Osorio *et al.* (2020) resuelven el problema de un punto cuántico piramidal, coraza-capa de GaAs/AlGaAs, inspirado en un estudio experimental. Los autores estudiaron el sistema bajo efectos de campos eléctricos y magnéticos, y cambios en la geometría, encontrando que algunas transiciones que son prohibidas son activadas por los campos externos. Chnafi *et al.* (2021) investigaron un punto cuántico cónico de GaAs, con una tapa esférica, con una impureza donadora fuera del eje de la estructura

y considerando confinamiento finito (rodeado con AlGaAs) e infinito; además, incluyeron efectos de presión y temperatura, los resultados más relevantes indican que la energía de enlace aumenta con la presión y disminuye con la temperatura, y la distancia promedio electron-impureza depende fuertemente de la presión, la temperatura, y la posición de la impureza.

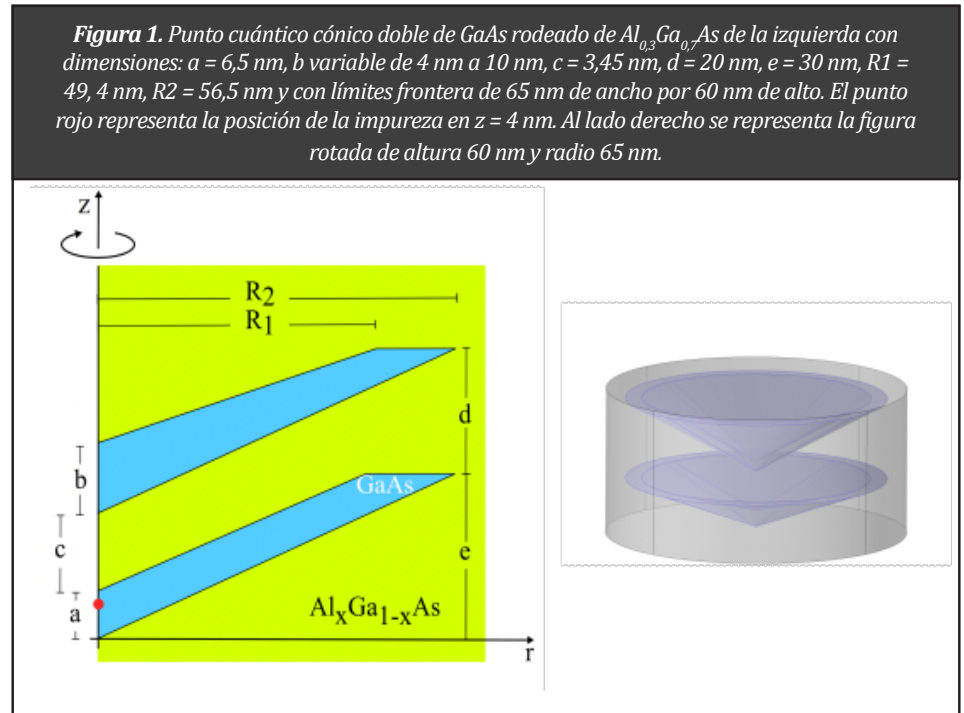
Dependiendo de la geometría trabajada para los QDs se estudiaron en anteriores trabajos los efectos de la presión hidrostática y la temperatura, los cuales pueden producir de manera combinada cambios en las propiedades de los QDs. En un punto cuántico en forma de lente, se encuentra que la susceptibilidad de rectificación óptica y las energías de subbanda son sensibles a la presión hidrostática y la temperatura (Bouzaïene *et al.*, 2013); para un punto cuántico esférico de GaAs, los efectos combinados de temperatura y presión hidrostática afectan las energías de correlación para tamaños específicos del punto cuántico (Sivakami *et al.*, 2010); en el caso de un punto cuántico en forma de disco con una impureza hidrogenoide, la presión y temperatura cambian los índices de refracción y los coeficientes de absorción óptica (Liang *et al.*, 2011); en puntos cuánticos esféricos multicapa, de GaAs/AlGaAs, con impureza hidrogenoide, la temperatura y la presión hidrostática tienen una gran influencia sobre los cambios en los coeficientes de absorción óptica y los índices de refracción (Karimi *et al.*, 2014). Este artículo estudia los efectos de la temperatura y la presión hidrostática de un punto cónico, formado por dos capas cónicas verticalmente acopladas, de GaAs rodeado de Al_xGa_{1-x}As, $x = 0,3$. Resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método de elementos finitos se analiza el comportamiento del sistema con una impureza y sin ella, para así estudiar la energía de enlace, los autovalores de la energía, y las funciones de onda, bajo los efectos de la presión hidrostática y la temperatura.

2. Materiales y métodos

En esta investigación se modela un punto cuántico cónico doble de GaAs rodeado de Al_xGa_{1-x}As tal como se muestra en la Figura 1, donde vemos un corte bidimensional del sistema el cual muestra la simetría azimutal. Al girar la figura con respecto al eje z se presentan dos pozos cónicos de GaAs dentro de un cilindro de Al_xGa_{1-x}As, $x = 0,3$, de altura 65 nm y radio 60 nm. Se estudió el comportamiento de la energía en el sistema en función del parámetro b, el cual es una dimensión controlable, y se obtuvieron valores de b donde el sistema presenta comportamientos notables; de manera análoga, se analizó el sistema

en presencia de la temperatura, la cual se suministró entre 0 K y 300 K, y la presión hidrostática que fue variada entre 0 GPa y 3 GPa con dimensiones fijas para ambos pozos. Para solucionar la ecuación de Schrödinger se impusieron condiciones de frontera de Dirichlet, las cuales garantizan que la función de onda se anula en los límites de la nanoestructura.

Asimismo, se analizaron los cambios en las energías en presencia de una impureza localizada en $R = 0$ y $Z = 4$ nm, ver la Figura 1, región que pertenece al dominio del pozo cuántico inferior, más los efectos generados al implementar presión y temperatura al sistema.



Haciendo uso del software COMSOL Multiphysics 5.6 se resolvió la ecuación de Schrödinger para este sistema utilizando el método de elementos finitos.

$$\hat{H}\psi(r, z) = E\psi(r, z), [1]$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano del sistema el cual para la simetría de esta estructura se representa en coordenadas cilíndricas como: :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(r, z) - \frac{ke}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}, [2]$$

el segundo término representa el potencial de confinamiento y el tercer término es el potencial de interacción entre el electrón y la impureza. En este caso, la función de onda tiene la forma $\psi(r, z, \phi) = f(R, Z) e^{il\phi}$. Teniendo en cuenta la simetría azimutal y la aproximación de la masa efectiva del problema nos queda que el Hamiltoniano del sistema lo podemos representar como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{(il)^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(r, z) - \frac{ke}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}, [3]$$

donde l es el número cuántico principal tomado como $l = 0$ para este estudio. La masa efectiva en términos de la temperatura (T) y la presión hidrostática (P) corresponde a la expresión (Aspnes, 1976):

$$m^*(T, P) = m_0 \left[1 + E_p \left(\frac{2}{E_\Gamma(T, P)} + \frac{1}{E_\Gamma(T, P) + \Delta_0} \right) \right]^{-1} [4]$$

En esta ecuación, m_0 corresponde a la masa del electrón libre, $EP = 7,51$ eV, $\Delta_0 = 0,341$ eV y E_Γ es la banda de energía prohibida (Welber et al., 1975; Duque et al., 2007), la cual es diferente para cada material del sistema y se define como:

$$E_\Gamma(T, P) = E_j(T, P) + \frac{\alpha T^2}{T + \beta} + \gamma P + \zeta P^2, [5]$$

donde $\alpha = -5,405 \times 10^{-4}$ eV/K $\beta = 204$, $\gamma = 107 \times 10^{-3}$ eV/kbar, $\zeta = -3,77 \times 10^{-3}$ eV/kbar² y $E_j(T, P) = 1,519$ eV para el GaAs y $E_j(T, P) = 1,8988$ eV para el Al_xGa_{1-x}As cuanto $T=0$ K y $P=0$ GPa.

Para estudiar los efectos de la temperatura, la ecuación correspondiente a la constante dieléctrica estudiada también por Chafi *et al.* (2021) y Samara (1982) es:

$$\epsilon_0(T, P) = \mu_1 \exp(\mu_2 P) \exp(\mu_3 (T - \mu_4)), [6]$$

en este caso, $\mu_1 = 12,74$, $\mu_2 = -1,67 \times 10^{-2}$, $\mu_3 = 9,4 \times 10^{-5}$ y $\mu_4 = 75,6$ para $T \leq 200\text{K}$, por otro lado, cuando $T > 200\text{K}$ $\mu_1 = 13,18$, $\mu_2 = -1,7 \times 10^{-2}$, $\mu_3 = 20,4 \times 10^{-5}$ y $\mu_4 = 300$.

Por otro lado, la energía de enlace para el estado fundamental, con $l = 0$, se define como:

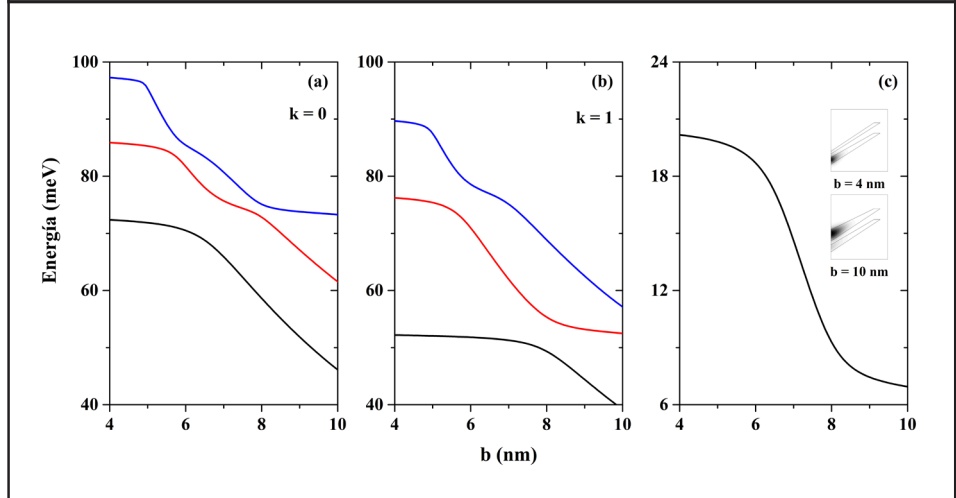
$$E_e = E_{k=0} - E_{k=1}, [7]$$

donde k representa la ausencia ($k = 0$) y presencia de la impureza ($k = 1$).

3. Resultados y discusión

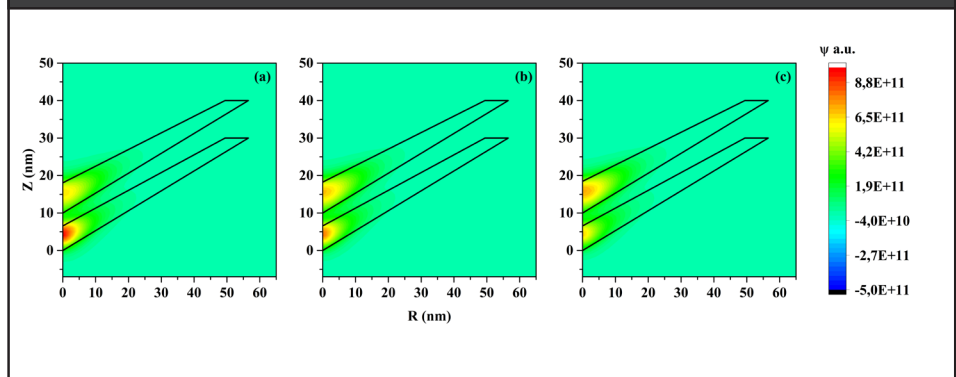
Inicialmente se definieron las dimensiones de cada uno de los pozos de potencial. Para el pozo cuántico inferior las dimensiones se mantuvieron fijas a diferencia del pozo cuántico superior para el cual se varió el parámetro b definido en la Figura 1, esto para identificar el comportamiento de las energías las cuales en las escalas trabajadas de orden de magnitud nanométrica se comportan como discretas. Para este caso se analizaron las energías para el estado fundamental y dos estados excitados, con $l = 0$, ver la Figura 2(a), con el fin de estudiar su evolución con el parámetro b . En general, la energía decrece con el incremento del parámetro b , pero se pueden apreciar decrecimientos debidos a diferentes aspectos físicos. En primer lugar, se observó que la distribución de energías, en todos los casos, disminuye al aumentar el parámetro b , debido al aumento en el volumen del sistema, lo que implica un confinamiento menor del electrón. En segundo lugar, cuando se incluyó la impureza, Figura 2(b), se encontró un comportamiento similar de las energías, pero con un decrecimiento adicional con respecto a la Figura 2(a) debido al potencial Coulombiano que genera la presencia de la impureza. Además, alrededor de $b = 8$ nm, Figura 2(b), se presenta un decrecimiento abrupto de la energía del estado fundamental debido a que el electrón migraba del pozo inferior al superior a medida que este aumentaba de volumen. Como consecuencia de esta migración, la energía de enlace de la Figura 2(c) decreció abruptamente ya que el electrón se alejaba de la posición de la impureza. Este hecho se puede deducir del recuadro de la figura 2(c), el cual muestra la función de onda del estado fundamental para $b = 4$ nm, el electrón en el pozo inferior, y para $b = 10$ nm, el electrón en el pozo superior.

Figura 2. Estado fundamental y los dos estados excitados en función del ancho b del pozo superior cuando (a) no hay impureza y (b) hay impureza. (c) Energía de enlace con respecto al estado fundamental junto con la función de onda, con impureza, en el momento inicial ($b = 4$ nm) y final ($b = 10$ nm). Se desprecian los efectos de la temperatura y la presión.



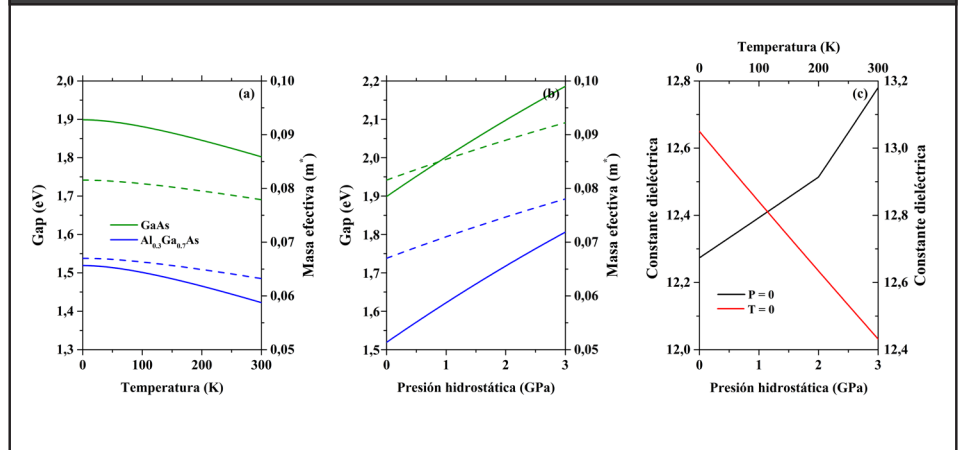
Otra manera en la cual la mecánica cuántica nos permitió analizar el sistema y los diferentes efectos a causa del cambio en el tamaño del pozo ha sido a partir de las funciones de onda, estas se analizaron tomando diferentes valores convenientes para b extraídos a partir de los resultados obtenidos en la Figura 2.

Figura 3. Representación de las funciones de onda normalizadas, en el estado fundamental, en la estructura, con presencia de la impureza, variando la longitud del pozo cuántico superior (a) $b = 8,05$ nm, (b) $b = 8,25$ nm y (c) $b = 8,45$ nm. La escala de colores situada a la derecha muestra la magnitud de la función de onda, nótese los valores positivos y negativos. La magnitud de la función de onda está en unidades arbitrarias.



La Figura 3(a) muestra la función de onda del electrón en el pozo inferior, para $b = 8,05$ nm, este punto coincide con el inicio de la disminución abrupta de la energía en la Figura 2(b). La Figura 3(a) muestra la función de onda para $b = 8,05$ nm; se nota que, esta se extiende por todo el punto cuántico acoplado, y su máximo, la región roja (ver la barra de magnitudes a la derecha), se encuentra en la zona inferior y, por lo tanto, el electrón se encuentra cerca de la impureza, $z = 4$ nm. La Figura 3(b) muestra la función de onda para $b = 8,25$ nm, se observan dos máximos de la función de onda tanto en la zona inferior como en la zona superior (regiones naranjas en la figura). Esto significa que el electrón empezó a migrar del pozo inferior al pozo superior. En la Figura 3(c) se presenta la función de onda del electrón, la cual presenta una magnitud mayor en el pozo superior, $b = 8,45$ nm, una región más oscura, de mayor magnitud, donde se puede afirmar que el electrón migró a la parte superior. Esta situación coincide con el resultado de la Figura 2(c), energía de enlace, la cual tiende a un mínimo porque el electrón se aleja de la impureza. Cuando el ancho tiene un valor igual o superior a 8,25 nm Figura 3(b) y 3(c) la carga se trasladó del pozo inferior al superior a causa del aumento en su volumen, lo que generó un menor confinamiento. Con base en estos resultados se fijó como ancho óptimo para el análisis $b = 8,25$ nm, con estas dimensiones para la estructura se realizaron todos los análisis posteriores.

Figura 4. Ancho de banda prohibida (línea sólida) y masa efectiva (línea punteada) para GaAs y $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ (a) con temperatura de 0 K a 300 K despreciando los efectos de la presión hidrostática y (b) con presión hidrostática de 0 GPa a 3 GPa, despreciando los efectos de la temperatura. La constante dieléctrica bajo los efectos de presión hidrostática despreciando la temperatura (línea roja) y bajo los efectos de la temperatura despreciando la presión hidrostática (línea negra) se muestra en (c).



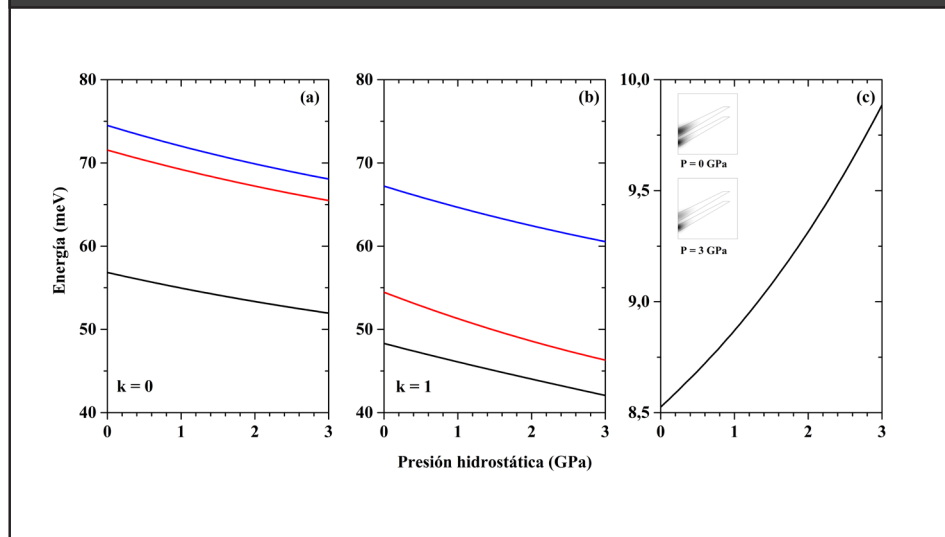
Se analizó, como se muestra en la Figura 4, el comportamiento de la banda prohibida (Gap) y la masa efectiva para todo el dominio del sistema, es decir, dentro de los pozos compuestos por GaAs y fuera de estos donde tenemos Al_{0,3}Ga_{0,7}As con respecto a los efectos de la presión hidrostática y la temperatura, los cuales fueron relevantes para el desarrollo del estudio. Comparando las Figuras 4(a) y 4(b), se notó que en el rango de presión utilizado y la temperatura suministrada a la estructura se hicieron más evidentes los cambios debidos a la presión. En cuanto a la Figura 4(c), bajo los efectos de la temperatura, se notó que el valor de la constante dieléctrica en general aumenta y en 200 K cambió abruptamente debido a que el ancho de banda prohibida pasó de ser directo a indirecto mientras que la constante dieléctrica debido a la suministración de presión disminuyó con un comportamiento lineal.

Tabla 1. Análisis de los valores de el Gap y la masa efectiva bajo los efectos de la temperatura y presión hidrostática de las Figuras 4(a) y 4(b).

Material	Efecto					
	Temperatura			Presión		
Al _{0,3} Ga _{0,7} As		Gap (eV)	Masa efectiva (m [*])		Gap (eV)	Masa efectiva (m [*])
	T= 0 K	1,519	0,0670	P= 0 GPa	1,519	0,0670
	T = 300 K	1,4225	0,0632	P = 3 GPa	1,8061	0,0780
GaAs	T= 0 K	1,8988	0,0815	P= 0 GPa	1,8988	0,0815
	T = 300 K	1,8022	0,0779	P = 3 GPa	2,1859	0,0922
Diferencia entre materiales	T= 0 K	0,3798	0,0145	P= 0 GPa	0,3798	0,0145
	T = 300 K	0,3798	0,0146	P = 3 GPa	0,3798	0,0141

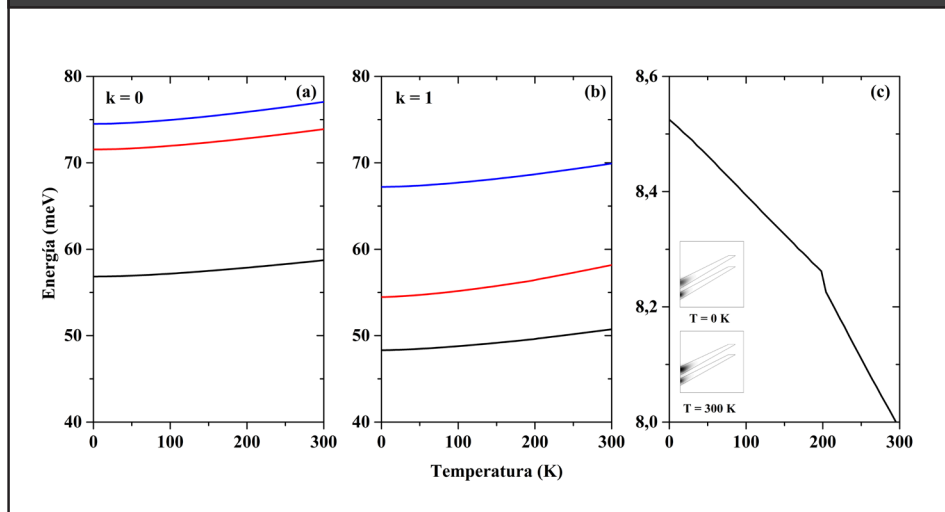
De esta manera se observó en la Tabla 1 que hay un aumento en la masa efectiva y la banda de energía prohibida (Gap) a medida que se incrementaba la magnitud de la presión suministrada al sistema. Se pudo notar que el desplazamiento de banda tiene un valor de 0,3798 eV. Se encontró que la altura de la barrera no cambiaba ni con la temperatura ni con la presión hidrostática.

Figura 5. Energía del sistema en función del cambio de la presión con $b = 8,25$ nm cuando (a) no hay impureza, (b) hay impureza y (c) la energía de enlace con respecto al estado fundamental junto con la función de onda en el momento inicial y final. Se desprecian los efectos de la temperatura.



El decrecimiento de la energía en la Figura 5(a) y 5(b) se debe al aumento de la masa efectiva visualizado en la Figura 4(b), lo cual provocó menor confinamiento en el sistema a medida que hay incremento en la presión hidrostática, además, se evidenció que la altura de la barrera no cambia con la presión según los resultados de la Tabla 1. En la Figura 5(b), se notó una disminución general en la energía del sistema respecto a la Figura 5(a), esto se debe al potencial adicional que genera la presencia de la impureza en el sistema, efecto que es congruente con la Figura 2. Teniendo en cuenta los estados fundamentales de (a) y (b) de la Figura 5, se evidenció que la pendiente de la curva de (b) es mayor que la de (a) y a medida que la presión aumenta la diferencia entre las energías de (a) y (b) es mayor, esto se evidenció directamente en el comportamiento de la Figura 5(c), ya que provocó que la energía de enlace se incrementara a medida que aumentaba la magnitud de la presión hidrostática suministrada al sistema y además indica que la carga se encuentra con la impureza, es decir, el electrón se mantiene en el pozo inferior, ver el recuadro de la figura 5(c), el cual muestra que cuando $P = 3$ GPa la función de onda está concentrada en el pozo inferior; diferente al recuadro con $P = 0$ GPa, el cual muestra que la función de onda está distribuida en ambos pozos.

Figura 6. Energía del sistema en función del cambio de la temperatura con $b = 8,25$ nm cuando (a) no hay impureza, (b) hay impureza y (c) la energía de enlace con respecto al estado fundamental junto con la función de onda en el momento inicial y final. Se despreciaron los efectos de la temperatura. El recuadro en (c) muestra las funciones de onda en los valores extremos de la temperatura.



En la Figura 6(a) se evidencia que la energía es mayor que en el caso de (b), esto se debe a que la presencia de la impureza genera un potencial adicional. En la Figura 4(a) se muestra la disminución de la masa efectiva a medida que aumenta la temperatura, lo que provocó el crecimiento de la energía en la Figura 6(a) y 6(b) porque genera un mayor confinamiento en el sistema a medida que aumenta la temperatura, además, la altura de la barrera no cambia bajo este efecto. Por otro lado, la Figura 6(c) muestra en 200 K un cambio súbito en la energía de enlace y además un comportamiento decreciente y el electrón se aleja de la impureza, este comportamiento se relaciona directamente con los resultados de la Figura 4(c) y del mismo modo, con la ecuación de Schrödinger.

4. Conclusiones

Con base en los resultados teóricos obtenidos para las dos capas cónicas verticalmente acopladas de GaAs rodeado de Al_{0,3}Ga_{0,7}As, implementado el método de elementos finitos y la aproximación de la masa efectiva, se evidencia que debido a la escala en la que se construyó el sistema, los estados de energía de un electrón en un punto cuántico son discretos. Al variar el ancho del pozo superior se nota que la carga tiende a ubicarse en el espacio de menor confinamiento, es decir, el tamaño de los pozos define la ubicación de la carga. En un ancho de 8,25 nm para b se evidencia una migración del electrón del pozo

cuántico inferior al superior, debido a que para esta dimensión en cada una de las regiones se encuentra un máximo de la función de onda.

En cuanto a la energía de enlace, puede apreciarse que esta es menor a medida que la altura del pozo cuántico superior aumenta ya que la impureza está más alejada del electrón, generando el decrecimiento de la energía. Es posible evidenciar que cuando se encuentra una impureza en el sistema el comportamiento de la energía es igual a cuando no se encuentra la impureza, pero los valores que toma son distintos, es decir, se presentan energías menores, esto se debe a que la impureza genera un potencial adicional.

A medida que se va incrementando la temperatura y la presión hidrostática, se evidencia que a pesar que el Gap va cambiando para cada uno de los materiales trabajados, la diferencia entre ellos permanece igual (0,3798 eV). Esto permite notar que los cambios en el sistema corresponden significativamente a la masa efectiva y la constante dieléctrica. Considerando los efectos de la presión hidrostática, notamos que a medida que la presión va aumentando también lo hace la masa efectiva, provocando un menor confinamiento y por ende, una disminución en la energía. Por otro lado, bajo los efectos de la temperatura, la masa efectiva disminuye cuando la temperatura va incrementando, generando mayor confinamiento y un aumento en la energía. Además, es posible notar que el sistema es más sensible a uno de los dos efectos aplicados a la estructura. En las Figuras 4, 5 y 6, es notorio que bajo la presión hidrostática, las magnitudes de las energías son mayores que bajo el efecto de la temperatura.

Teniendo en cuenta los cambios de temperatura, cuando esta toma el valor de 200 K se evidencia un cambio de propiedades electrónicas en el sistema. Esto es análogo al comportamiento de la constante dieléctrica bajo los efectos de la temperatura y de la ecuación de Schrödinger, ya que el cambio alrededor de la temperatura anteriormente mencionada y el decrecimiento de la energía de enlace se debe a estos dos factores respectivamente.

5. Agradecimientos

Los autores agradecen a las siguientes instituciones colombianas: CODI-Universidad de Antioquia (Estrategia de Sostenibilidad de la Universidad de Antioquia y los proyectos “Efectos de capas delta dopadas en pozos cuánticos como fotodetectores en el infrarrojo”, “Propiedades magneto-ópticas y óptica no lineal en superredes de Grafeno”, “Efectos ópticos intersubbanda, no lineales de segundo orden y dispersión Raman, en sistemas asimétricos de pozos

cuánticos acoplados”, “Estudio de propiedades ópticas en sistemas semiconductores de dimensiones nanoscópicas”, “Propiedades de transporte, espintrónicas y térmicas en el sistema molecular zinc-porfirina”), y Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-Universidad de Antioquia (CAD y ALM proyectos de dedicación exclusiva 2021-2022). Los autores también agradecen el apoyo financiero de

El Patrimonio Autónomo Fondo Nacional de Financiamiento para la Ciencia, la Tecnología y la Innovación Francisco José de Caldas (proyecto: Nanoestructuras semiconductoras con dopamiento modulado y aplicaciones a láseres de estado sólido, CD 111580863338, CT FP80740-173-2019).

6. Referencias

- Aouami, A.; Bikerouin, M.; Feddi, H.; Aghoutane, N.; El-Yadri, M.; Feddi, E.; Dujardin, F.; Radu, A.; Restrepo, R.L.; Vinasco, A.; Morales, A.L.; Duque, C.A.; Mora-Ramos, M.E. (2020). Linear and nonlinear optical properties of a single dopant in GaN conical quantum dot with spherical cap. *Philosophical Magazine*, **100** (19), 2503-2523. <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1766711>
- Ashrafi-dalkhani, Vahid; Ghajarpour, Sajad; Karimi Mohammad Javad. (2019). Effects of spin-orbit interactions, external fields and eccentricity on the optical absorption of an elliptical quantum ring. *The European Physical Journal*, **92**, 19(6pp). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90691-5>
- Aspnes, D.E. (1976). GaAs lower conduction-band minima: Ordering and properties, *Physical Review B*, **14** (12), 5331-5343. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.5331>
- Bouzaïene, L.; Ben Mahrsia, R.; Baira, M.; Sfaxi, L.; Maaref, H. (2013). Hydrostatic pressure and temperature effects on nonlinear optical rectification in a lens shape InAs/GaAs quantum dot, *Journal of Luminescence*, **135**, 271-275. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2012.09.032>
- Chnafi, M.; Belamkadem, L.; Mommadi, O.; Boussetta, R.; El Hadi, M.; El Moussaouy, A.; Falyouni, F.; Vinasco, J.A.; Mora-Rey, F.; Duque, C.A. (2021). Hydrostatic pressure and temperature effects on spectrum of an off-center single dopant in a conical quantum dot with spherical edge, *Superlattices and Microstructures*, **159**, 107052 (14pp). <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2021.107052>
- COMSOL. Multiphysics, v. 5.6; COMSOL AB: Stockholm, Sweden, 2021.
- Duque, C.A.; López, S.Y.; Mora-Ramos, M.E. (2007). Hydrostatic pressure effects on the Γ -X conduction band mixing and the binding energy of a donor impurity in GaAs-GaAlAs quantum wells, *Physica Status Solidi b*, **244**, (6), 1964-1970. <https://doi.org/10.1002/pssb.200642377>
- Gil-Corrales, J.A.; Morales Aramburo, A.L.; Duque Echeverri, C.A. (2018). Estados electrónicos de puntos cuánticos piramidales y cónicos. *Revista EIA*, **15**(30), 161-175. <https://doi.org/10.24050/reia.v15i30.1257>
- Heyn, C.; Radu, A.; Vinasco, J.A.; Laroze, D.; Restrepo, R.L.; Tulupenko, V.; Hieu Nguyen, N.; Phuc Huynh, V.; Mora-Ramos, M.E.; Ojeda, J.H.; Morales, A.L.; Duque, C.A. (2021). Exciton states in conical quantum dots under applied electric and magnetic fields. *Optics and Laser Technology*, **139**, 106953 (13pp). <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2021.106953>

- Karimi, M.J.; Rezaei, G.; Nazari, M. (2014). Linear and nonlinear optical properties of multilayered spherical quantum dots: Effects of geometrical size, hydrogenic impurity, hydrostatic pressure and temperature. *Journal of Luminescence*, **145**, 55-60. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.07.046>
- Khachatryan, K.S.; Mkrtchyan, M.A.; Hayrapetyan, D.B.; Kazaryan, E.M.; Sarkisyan, H.A. (2021). Adiabatic description of the electroabsorption in strongly prolate and oblate conical quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **134**, 114887 (9pp). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2021.114887>
- Liang, Shijun.; Xie, Wenfang. (2011). Effects of the hydrostatic pressure and temperature on optical properties of a hydrogenic impurity in the disc-shaped quantum dot, *Physica B*, **406**, 11 (7pp). <https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.03.035>
- Mommadi, O.; El Moussaouy, A.; Chnafi, M.; El Hadi, M.; Nougaoui, A.; Megrez, H. (2020). Exciton-phonon properties in cylindrical quantum dot with parabolic confinement potential under electric field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **118**, 113903 (7pp). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113903>
- Osorio, J.A.; Caicedo-Paredes, D.; Vinasco, J.A.; Morales, A.L.; Radu, A.; Restrepo, R. L.; Martínez-Orozco, J.C.; Tiutiunnyk, A.; Laroze, D.; Hieu, Nguyen N.; Phuc, Huynh V.; Mora-Ramos, M. E.; Duque, C.A. (2020). Pyramidal core-shell quantum dot under applied electric and magnetic fields, *Scientific Reports*, **10**, 8961 (14pp). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-65442-x>
- Pulgar-Velásquez, L.; Sierra-Ortega, J.; Vinasco, J. A.; Laroze, D.; Radu, A.; Kasapoglu, E.; Restrepo, R. L.; Gil-Corrales, J. A.; Morales, A. L.; Duque, C. A. (2021). Shallow Donor Impurity States with Excitonic Contribution in GaAs/AlGaAs and CdTe/CdSe Truncated Conical Quantum Dots under Applied Magnetic Field. *Nanomaterials*, **11**, 2832 (19pp). <https://doi.org/10.3390/nano11112832>
- Roghaieh Parvizi. (2015). Interband optical transitions of a strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dot/wetting layer with various In mole fractions. *Physica B: Condensed Matter*, **456**, 87-92. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.08.029>
- Samara, G.A. (1983). Temperature and pressure dependences of the dielectric constants of semiconductors, *Physical Review B*, **27**, 6 (12pp). <https://doi.org/10.1103/physrevb.27.3494>
- Sivakami, A.; Mahendran, M. (2010). Hydrostatic pressure and temperature dependence of correlation energy in a spherical quantum dot, *Superlattices and Microstructures*, **47**, 4(8pp) <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2009.12.010>
- Vinasco, J.A.; Radu, A.; Tiutiunnyk, A.; Restrepo, R.L.; Laroze, D.; Feddi, E.; Mora-Ramos, M.E.; Morales, A.L.; Duque, C.A. (2020). Revisiting the adiabatic approximation for bound states calculation in axisymmetric and asymmetrical quantum structures. *Superlattices and Microstructures*, **138**, 106384(13pp). <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106384>
- Welber, B.; Cardona, M.; Kim, C.K.; Rodriguez, S. (1975). Dependence of direct energy gap of GaAs on hydrostatic pressure, *Physical Review B*, **12**, 12 (10pp). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.5729>
- Zeiri, N.; Naifar, A.; Abdi-Ben Nasrallah, S.; Said, M. (2019). Theoretical studies on third nonlinear optical susceptibility in CdTe-CdS-ZnS core-shell-shell quantum dots. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, **36**, 100725 (11pp). <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2019.100>