

EFFECTOS DE CORRELACIÓN EN EXCITONES CONFINADOS EN QDs DE
 $\text{GaAs}/(\text{Ga},\text{Al})\text{As}$

BRUCE LEHMANN SÁNCHEZ VEGA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2004

EFFECTOS DE CORRELACIÓN EN EXCITONES CONFINADOS EN QDs DE
 $\text{GaAs}/(\text{Ga},\text{Al})\text{As}$

BRUCE LEHMANN SÁNCHEZ VEGA

Trabajo de grado para optar al título de Físico

DIRECTOR
Ph.D. ILIA D. MIKHAILOV

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2004

A mis padres

Jorge Omar Sánchez y Ana Vega de Sánchez

AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mis más sinceros agradecimientos al Doctor y amigo Ilia Mikhailov, por sus grandes enseñanzas durante mis años de estudio de pregrado. A mi amigo Pedro Rafael Sánchez, por hacer posible mi sueño de estudiar. A mis amigas Sonia Sánchez, Erika Jaimes por su incondicional compañía y a mi hermana Karina Sánchez mi eterna compañera de juegos.

TITULO*: EFECTOS DE CORRELACIÓN EN EXCITONES CONFINADOS EN QDs DE GaAs/(Ga,Al)As

AUTORr: BRUCE LEHMANN SANCHEZ VEGA **

PALABRAS CLAVES: Heterojunturas, heteroestructuras, dimensión fractal, puntos cuánticos, excitones, método de disparo, método variacional.

DESCRIPCION

El contenido de la tesis es el siguiente. En el primer capítulo se introducen conceptos fundamentales de heterojunturas semiconductoras y las aproximaciones que se utilizan en el análisis teórico de espectros de electrón, hueco y excitón en estos sistemas. Se analizan diferentes modelos de confinamiento y otros parámetros del hamiltoniano de un excitón en un punto cuántico. En el capítulo 2 se describe el procedimiento matemático llamado método de dimensión fractal aplicado a excitones en puntos cuánticos y se deducen ecuaciones diferenciales para la función envolvente y la función de correlación. En el capítulo 3 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace en puntos, discos y anillos cuánticos utilizando el software elaborado y algoritmos propuestos en esta tesis. Una descripción de los procedimientos numéricos que se utilizan para realizar el algoritmo elaborado en el capítulo 2 relacionados con solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional a través del método de disparos y con el cálculo de los jacobianos expresados en forma de las integrales múltiples se presenta en el anexo.

El objetivo principal de esta tesis es elaborar dentro del marco del método de dimensión fractal un nuevo software en base del algoritmo de disparos (diferente del barrido trigonométrico utilizado en los trabajos anteriores) para analizar el estado base de los excitones confinados en puntos cuánticos con una forma de potencial de confinamiento arbitraria en un espacio de D dimensiones, considerando D como un parámetro. De esta manera se hace posible analizar en una forma unificada la energía del excitón en puntos, discos y anillos cuánticos con diferentes formas de potencial. Una posible ventaja del método de disparos consiste en mayor estabilidad (comparado con el método de barrido trigonométrico) en el cálculo de la función de onda y de la función de correlación de par electrón-hueco. Para comprobar lo anterior, se analizan los efectos de correlación a través del cálculo de la función de correlación del par (electro-hueco) y de la energía de correlación en condiciones de confinamiento producido por diferentes formas de potencial.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias. Física. Director: Ph D. ILIA D. MIKHAILOV

TITLE : EFFECTS OF CORRELATION IN CONFINED EXCITONES IN QDs OF GaAs/(Ga,Al)As*

AUTHOR : BRUCE LEHMANN SANCHEZ VEGA**

KEY WORDS : Heterojunctions, heterostructures, fractal dimension, quantum dots, excitons, shot method, method variacional.

DESCRIPTION

The content of this thesis is as follow. In the first chapter it introduces the fundamental concepts of semiconductor heterojunctions and the approaches that it uses in the theoretical analysis of the electron, hole and exciton spectra. Furthermore, the different confinement models and the other Hamiltonian parameters of exciton in the quantum well are analyzed. In the second chapter it describes the mathematical procedure called fractal dimension Method for the enveloped and correlation function. In the third chapter it presents the calculus of the energy binding in quantum dots, quantum rings and quantum disks, using the software and algorithms elaborated in this thesis. One description of the numerical procedures that we use for to solve the Schrodinger one dimensional equation through the shooting Method and the calculus of Jacobian given in multiple integral for are shown in the appendice.

The main objective of this thesis is to elaborate inside the mark of the method of dimension fractal a new software in base of the algorithm of shots (different from the trigonometrical sweeping used in the previous works) to analyze the state it bases of the excitones confined in quantum points with a form of potential of arbitrary confinement in a space of D dimensions, considering D like a parameter. This way it becomes possible to analyze in an unified form the energy of the exciton in points, disks and quantum rings with different potential forms. A possible advantage of the method of shots consists on more stability (compared with the method of trigonometrical sweeping) in the calculation of the wave function and of the function of correlation of couple electron-hole. To check the above-mentioned, the correlation effects are analyzed through the calculation of the function of correlation of the couple (electro-hole) and of the correlation energy under confinement conditions taken place by different potential forms.

* Proyect of Grade.

** Facultad de Ciencias. Física. Director: Ph D. ILIA D. MIKHAILOV

CONTENIDO

	Pag.
INTRODUCCIÓN	1
1. MODELO	6
1.1 HETEROJUNTURAS Y HETEROESTRUCTURAS.	6
1.2 BANDAS DE ENERGIA EN UN SEMICONDUCTOR	8
1.3 EXCITONES	8
1.4 MODELO DE CONFINAMIENTO	10
1.5 HAMILTONIANO	11
2. MÉTODO DE DIMENSION FRACTAL APLICADO A LOS EXCITONES EN PUNTOS CUÁNTICOS	14
2.1 ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA LA FUNCIÓN ENVOLVENTE	14
2.2 JACOBIANO	16
2.3 ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA LA FUNCIÓN DE CORRELACIÓN	19
2.4 EXCITÓN EN UN ESPACIO DE DIMENSIÓN FRACCIONARIA	20
3. RESULTADOS DE CÁLCULO	23
3.1 EXCITONES EN PUNTOS Y CASCARONES ESFÉRICOS ($D=3$)	23
3.2 DISCOS Y ANILLOS CUÁNTICOS ($D=2$)	26
4. CONCLUSIONES	32
BIBLIOGRAFÍA	33
ANEXO : PROCEDIMIENTOS NUMÉRICOS	34

LISTA DE FIGURAS

	Pag.
Figura 1. Heterojuntura	6
Figura 2. Heteroestructura	6
Figura 3. Tipo I	7
Figura 4. Tipo II	7
Figura 5. Tipo III	7
Figura 6. Tipo IV	8
Figura 7. Bandas de energía	8
Figura 8. Excitón	9
Figura 9. Niveles de energía de un excitón	10
Figura 10. Potencial de confinamiento suave	11
Figura 11. Distancia entre el electrón y el hueco	17
Fig. 12. Energía de correlación de un excitón en un QD esférico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As con $R_{int}=0.15 a_0^*$ y diferentes formas de potencial de confinamiento	24
Fig. 13. Energía de correlación de un excitón en un QD esférico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As con $R_{int}=0.5 R_{ext}$ para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}	24
Fig. 14. Jacobiano para un QD esférico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As con $R_{int}=0.5 R_{ext}$ y $R_{ext}=1 a_0^*$ para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}	25
Fig. 15. Energía de correlación de un excitón en un disco cuántico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As con diferentes formas de potencial de confinamiento	27
Fig. 16. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As para diferentes formas de potencial	28
Fig. 17. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}	29
Fig. 18. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}	30
Fig. 19. Jacobiano para un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga _{0.6} Al _{0.4} As con $R_{int}=0.5 R_{ext}$ para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}	31

INTRODUCCIÓN

Recientes progresos en la nanotecnología han hecho posible la fabricación de nuevos tipos de heteroestructuras de semiconductores (pozos, hilos, puntos cuánticos y superredes), cuyas dimensiones características (unos pocos nanómetros) llegan a ser comparables con la longitud de Onda de Broglie de los portadores de carga. Por lo tanto, los efectos de confinamiento cuántico en estos llegan a ser apreciables y restringen la movilidad del electrón y el hueco. El mayor interés en nanotecnología se presenta en las estructuras de "dimensión cero" (0D), microcristales y puntos cuánticos donde el efecto de confinamiento cuántico restringe el movimiento de los electrones y huecos en todas las tres dimensiones espaciales y es mucho mas significativo que en pozos e hilos cuánticos. Este interés reside esencialmente en nuevas propiedades ópticas no lineales de los puntos cuánticos que pueden ser adquiridas en forma controlada para utilizarlos como dispositivos en láseres de alto desempeño.

El espectro óptico de los puntos cuánticos en mayor parte depende del número y tipo de portadores de carga que están confinados dentro de este. Este número depende del tamaño, forma geométrica y de la concentración de compuestos que forman el punto cuántico, el cual capturando los portadores de carga se transforma en un átomo artificial. Hay varias posibilidades para formar estos átomos artificiales, al capturar, uno, dos o más electrones o huecos, o diferentes combinaciones de estas partículas. Pero debido al pequeño tamaño de estas estructuras (comparado con la longitud de onda de Broglie) el número de los portadores capturados por un punto cuántico siempre es pequeño y es más probable que sean partículas con diferentes signos de carga. En este sentido, el mayor interés se presenta en el estudio de un par electrón-hueco (excitón) localizado dentro de un punto cuántico.

Varios autores han hecho estudios sobre excitones en diferentes tipos de heteroestructuras, tales como pozos cuánticos (QW), hilos cuánticos (QWW), y puntos cuánticos (QD) utilizando el método variacional. Entre los trabajos que utilizan este método cabe resaltar los trabajos de Bastard [1], en este se calcula la energía del estado base de un excitón en un pozo cuántico de barrera infinita en función del ancho del pozo; los trabajos de Bajaj y coinvestigadores [2], en el cual calculan los niveles de energía de enlace del estado base y

de algunos pocos estados excitados (bajos) del excitón como función del ancho del pozo cuántico para varios valores de la altura de la barrera potencial; el trabajo de B Stébé [3] donde se calcula la energía del estado base de un excitón en un punto cuántico cilíndrico con potencial de barrera finita utilizando el método variacional dentro de la aproximación de la función envolvente. Otra investigación fue hecha por S. V. Nair y coinvestigadores [4] donde se analiza la dependencia del estado base de un electrón y un hueco en un microcristal semiconductor de forma esférica. La función de prueba tiene tres parámetros variacionales. Cuando la separación de las dos partículas es muy pequeña comparada con el radio de Bohr efectivo tratan el potencial coulombiano como una perturbación y cuando la separación es grande entonces calculan la energía utilizando el método variacional. Otro trabajo importante que utiliza este método es el de D.B Tran Thoai y coinvestigadores [5] en el cual calculan la energía del estado 1S y 2S de un par electrón hueco en microcristales semiconductores. En este se utilizan funciones de prueba de un solo parámetro variacional. Calculan numéricamente la energía de enlace en función del radio del punto cuántico, en función de la altura de la barrera y de la razón de las masas en el interior y en el exterior del punto cuántico. También se encuentra la investigación de Y. Kayanuma y H. Momiji [6] en la cual se reportan los resultados del cálculo variacional de la energía del estado base de un electrón y un hueco confinados en un microesfera semiconductor por un potencial de barrera rectangular finita. En este trabajo se desprecia la diferencia de la masa efectiva del electrón y el hueco dentro y fuera del punto cuántico, también las diferencias de la constante dieléctrica. La investigación hecha por C. F Lo y R. sollie [7] en la cual ellos utilizando el método variacional con una función de onda de prueba con dos parámetros, uno que describe la correlación entre las dos partículas mientras el otro describe la localización de la partícula más pesada, estudian la dependencia de los parámetros del estado base (energía de enlace, separación promedio de las partículas, etc.) de la razón de las masas de las dos partículas.

Entre las investigaciones hechas con otros métodos se pueden mencionar la de Y. Kayanuma [8], donde se estudia los efectos de confinamiento cuántico de un electrón y un hueco en un pozo esférico de barrera infinita tanto analíticamente como numéricamente. El cálculo numérico es llevado a cabo con la técnica variacional de Ritz. El estado de movimiento de los niveles más bajos es clasificado dentro de tres regiones (confinamiento fuerte, intermedio y débil), además se calculan la fuerza de oscilador de las interbandas ópticas de transición. La investigación hecha por I. D. Mikhailov y coinvestigadores [9] donde utilizando el método de dimensión fractal calculan la energía del estado base del excitón confinado en un punto cuántico esférico, la función de onda del excitón es tomada como el

producto de la función de onda del electrón y el hueco desacoplados confinados en el punto cuántico, con una función de correlación que solo depende de la separación del electrón y el hueco. Los cálculos numéricos son llevados a cabo con el método de barrido trigonométrico. Se utiliza un potencial de confinamiento suave. Otro trabajo importante es el de T. Uozumi y Y. Kayanuma [10], en el cual se investigan teóricamente la estructura de los niveles energéticos y sus propiedades ópticas de un par electrón hueco correlacionados confinados completamente (barrera infinita) en un punto cuántico con simetría esférica. Cálculos numéricos son presentados para estados excitados (S, P, D) para el electrón y el hueco con un momentum angular total arbitrario. Algunos otros métodos también muy utilizados son diagonalización exacta [11-19], dimensión fraccionaria [20-23].

Resumiendo se puede decir que en el método variacional se escoge una función de prueba de tipo gaussiana o hidrogenoide con varios parámetros los cuales se encuentran minimizando la energía del exciton. Los resultados de este método dependen fuertemente del tipo de función de prueba escogida y del grado de su posible flexibilidad con el cambio de forma y de tamaño del punto cuántico. El método de la diagonalización exacta permite resolver el problema solo en los casos cuando se conoce todo el conjunto de funciones propias para el problema uní-particular (electrón y hueco desacoplados). Los estados excitónicos en este caso se encuentran como una combinación lineal de los estados uniparticulares y el problema se reduce a la diagonalización de una matriz de los órdenes suficientemente grandes. Las desventajas de este método están relacionadas tanto con el gran costo computacional como con las restricciones de los modelos para los cuales se puede aplicar este método. Esto es una de las razones por las que este método solo se aplica para los puntos cuánticos de una forma simple (esférico o disco) y con modelos de confinamiento de barrera infinita. Para evitar estos cálculos suficientemente tediosos recientemente fue propuesto utilizar el método de dimensión fraccionaria en el cual el problema real en el espacio tridimensional para un exciton confinado en la heterojuntura se reemplaza por un problema de un exciton en un espacio libre pero de dimensión reducida (menor que tres) la cual es generalmente fraccionaria (entre dos y tres en QW, entre uno y dos en QWW y entre cero y uno en QD). Para justificar este método hace poco en el grupo de Física Computacional de Materia Condensada de la UIS se utilizó el principio variacional de Schrödinger, en el cual la función de onda del exciton se presenta en el forma de un producto de las funciones uniparticulares del electrón y del hueco con una función envolvente que describe las propiedades intrínsecas del excitón y depende sólo de la separación electrón-hueco. Partiendo del principio variacional de Schrödinger se logró encontrar una ecuación diferencial para esta función envolvente la cual tiene una forma de

ecuación de onda para un átomo hidrogenoide en un espacio con una dimensión variable. Para resolverla se utilizó un algoritmo numérico en base del método de barrido trigonométrico. Todo el conjunto de estos procedimientos fue nombrado por los autores como el método de dimensión fractal.

Entre otros métodos que se utilizan en los últimos años en Mecánica Cuántica para resolver los problemas de pocas partículas hay que mencionar el método llamado escalamiento dimensional [24]. Este método en términos generales, consiste en tres pasos: primero, en generalizar el problema real tridimensional a un problema similar en un espacio de D dimensiones considerando D como un parámetro, en el segundo paso se busca un valor particular del parámetro D para el cual el problema puede resolverse en una forma exacta (por ejemplo, cuando $D \rightarrow \infty$ o $D \rightarrow 1$) y por último considerando este resultado exacto como una aproximación nula y utilizando el método de la teoría de perturbaciones se construye una serie respecto a un parámetro que es menor que uno (por ejemplo $1/D$ o $(D-1)/D$) que permite encontrar la solución para una dimensión D arbitraria, particularmente cuando $D=3$. El método escalamiento dimensional fue aplicado anteriormente para analizar los problemas de donadora neutra y de dos electrones confinados en puntos cuánticos [25-27].

El objetivo principal de esta tesis es elaborar dentro del marco del método de dimensión fractal un nuevo software en base del algoritmo de disparos [28] (diferente del barrido trigonométrico utilizado en los trabajos anteriores) para analizar el estado base de los excitones confinados en puntos cuánticos con una forma de potencial de confinamiento arbitraria en un espacio de D dimensiones, considerando D como un parámetro. De esta manera se hace posible analizar en una forma unificada la energía del excitón en puntos, discos y anillos cuánticos con diferentes formas de potencial. Una posible ventaja del método de disparos consiste en mayor estabilidad (comparado con el método de barrido trigonométrico) en el cálculo de la función de onda y de la función de correlación de par electrón-hueco. Para comprobar lo anterior, se analizan los efectos de correlación a través del cálculo de la función de correlación del par (electro-hueco) y de la energía de correlación en condiciones de confinamiento producido por diferentes formas de potencial.

El contenido de la tesis es el siguiente. En el primer capítulo se introducen conceptos fundamentales de heterojunturas semiconductoras y las aproximaciones que se utilizan en el análisis teórico de espectros de electrón, hueco y excitón en estos sistemas. Se analizan diferentes modelos de confinamiento y otros parámetros del hamiltoniano de un excitón en

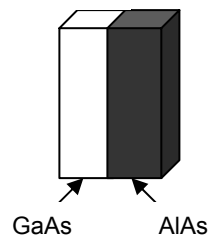
un punto cuántico. En el capítulo 2 se describe el procedimiento matemático llamado método de dimensión fractal aplicado a excitones en puntos cuánticos y se deducen ecuaciones diferenciales para la función envolvente y la función de correlación. En el capítulo 3 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace en puntos, discos y anillos cuánticos utilizando el software elaborado y algoritmos propuestos en esta tesis. Una descripción de los procedimientos numéricos que se utilizan para realizar el algoritmo elaborado en el capítulo 2 relacionados con solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional a través del método de disparos y con el cálculo de los jacobianos expresados en forma de las integrales múltiples se presenta en el anexo.

1. MODELO

1.1 HETEROJUNTURAS Y HETEROESTRUCTURAS.

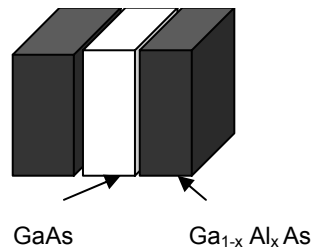
Cuando dos materiales semiconductores son puestos adyacentes uno del otro se forma lo que se conoce con el nombre de heterojunturas. Como se puede observar en la figura 1 (por ejemplo: GaAs/AlAs).

Figura 1. Heterojuntura



Una heteroestructura es formada por múltiples heterojunturas como se muestra en la figura 2

Figura 2. Heteroestructura



Algunos autores consideran IV tipos de heteroestructuras. Para entender la diferencia entre estos tipos primero definimos la banda de conducción ΔE_c , como la diferencia de las energías de las bandas de conducción de los materiales. La banda de valencia ΔE_v se define análogamente como la diferencia de las energías de las bandas de valencia de los materiales. Los diferentes tipos de heteroestructuras se clasifican así:

i) Si ΔE_c y ΔE_v tienen signos opuestos, como se ilustra en la figura 3, se dice que son del tipo I.

ii) Si ΔE_c y ΔE_v tienen el mismo signo, como se muestra en la figura 4, se dice que son del tipo II.

iii) Si ΔE_c y ΔE_v tienen mismo signo pero sus magnitudes son mas grandes que la banda prohibida pero no se traslapan, figura 5, se dice que son del tipo III.

iv) Un ejemplo de estructura del tipo IV, esta formada por dos materiales, uno que no tiene brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción (HgTe) y otro formado por una brecha finita entre las bandas de valencia y de conducción (CdTe), figura 6.

Figura 3. Tipo I

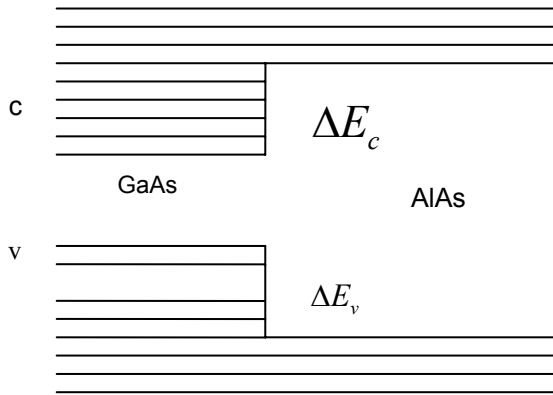


Figura 4. Tipo II

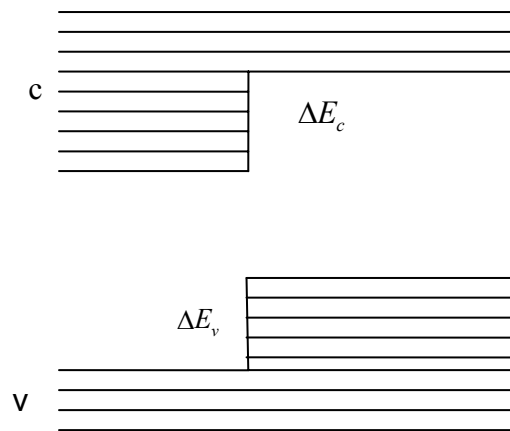


Figura 5. Tipo III

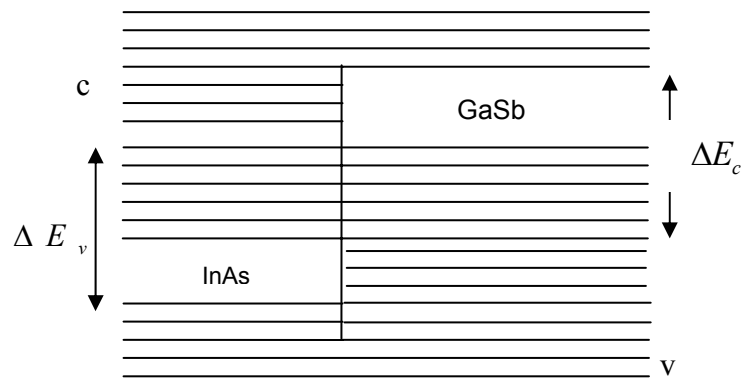
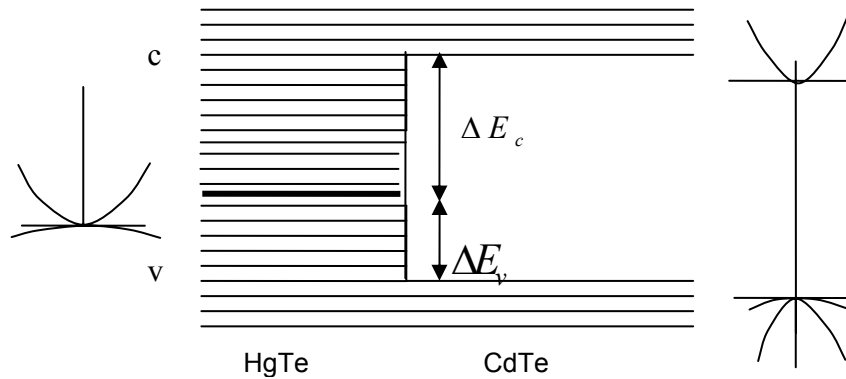


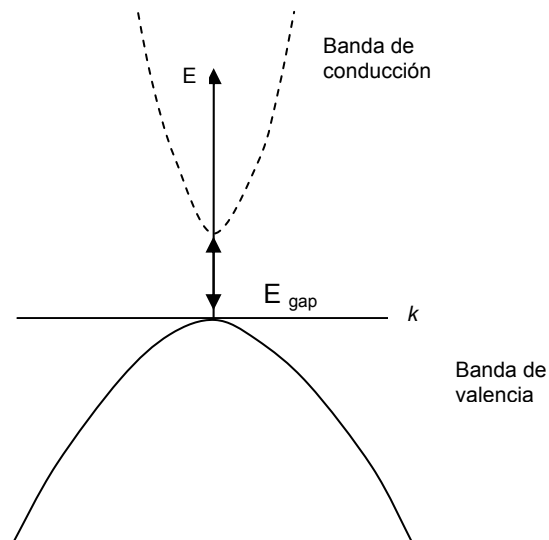
Figura 6. Tipo IV



1.2 BANDAS DE ENERGÍA EN UN SEMICONDUCTOR

Existen dos bandas diferentes de energía en los semiconductores. La banda más baja de energía llamada la banda de valencia y la banda de conducción, como se muestra en la figura 7. La diferencia de energía entre las dos bandas es conocida como brecha de energía o 'bandgap', denotada en la figura 7 por E_{gap} .

Figura 7. Bandas de energía



1.3 EXCITONES

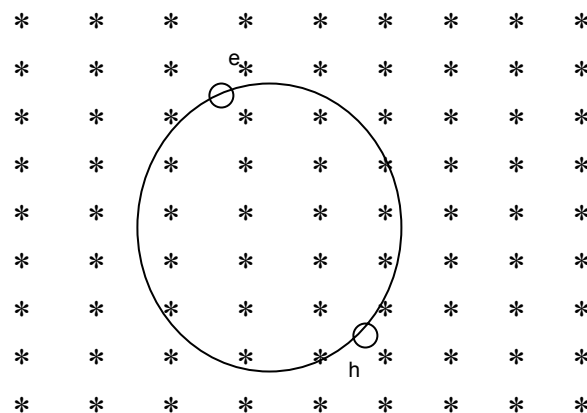
Los espectros de reflectancia y de absorción muestran con frecuencia una estructura para las energías de los fotones que está inmediatamente por debajo de la banda de energía

prohibida, en donde es de suponer que el cristal sea transparente. Esta estructura está producida por la absorción de un fotón con la creación de un par electrón-hueco ligado. Un electrón y un hueco pueden ligarse juntos por su interacción de Coulomb atractiva de la misma forma que un electrón está ligado a un protón para formar un átomo de hidrógeno neutro.

El par electrón-hueco ligados se denomina excitón, figura 8. Un excitón puede moverse a través del cristal y transportar energía; no transporta carga puesto que es eléctricamente neutro. Es semejante al positronio, que está formado por un electrón y un protón.

Los excitones pueden formarse en todo cristal aislante. Cuando la banda prohibida es indirecta, los excitones cerca de la banda prohibida directa pueden ser inestables respecto a su desintegración en un electrón libre y un hueco libre. Todos los excitones son inestables respecto al proceso de recombinación final en el que el electrón cae dentro del hueco. Los excitones también pueden formar complejos, tales como un biexcitón a partir de dos excitones.

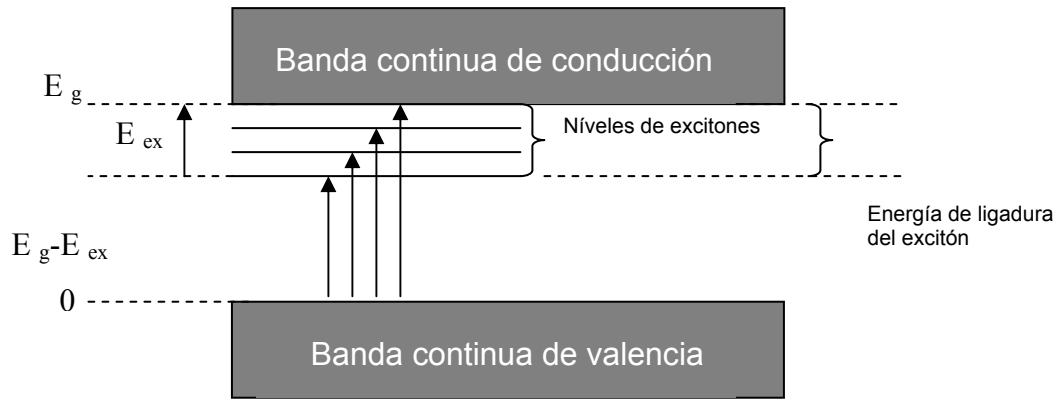
Figura 8. Excitón



En la figura 9, se indican las transiciones que conducen a la formación de excitones por debajo del intervalo prohibido de energía.

Existen varias aproximaciones para los excitones, pero dos muy conocidas son: La aproximación de Frenkel en el cual el excitón es pequeño y fuertemente ligado y la otra debida a Mott y Wannier en el cual el excitón está débilmente ligado, con una separación electrón-hueco grande en comparación de la constante de red. También se conocen ejemplos intermedios.

Figura 9. Niveles de energía de un excitón



1.4 MODELO DE CONFINAMIENTO

Se considerará el tipo de potencial de confinamiento suave con núcleo repulsivo. Esta función de potencial se puede definir utilizando la función de paso modificada:

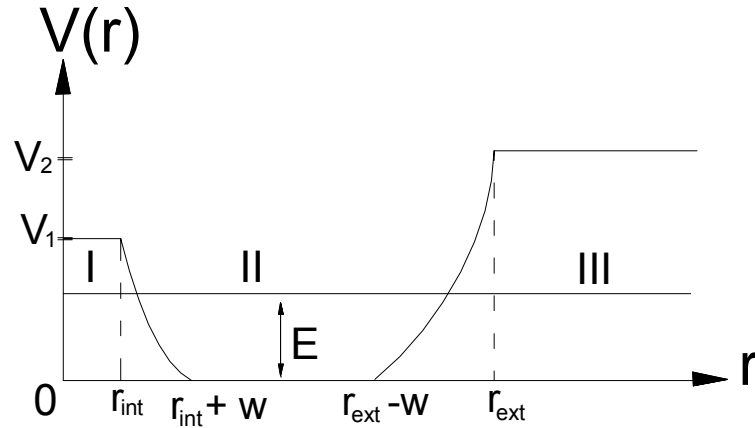
$$\theta(r, r_0, w) = \begin{cases} 0 & r < r_0 - w \\ \left[\frac{(r - r_0)^2}{w^2} - 1 \right]^2 & r_0 - w \leq r < r_0 \\ 1 & r \geq r_0 \end{cases} \quad (1)$$

Haciendo una combinación lineal

$$V(r) = V_1 \theta(-r, r_{int}, w) + V_2 \theta(r, r_{ext}, w) \quad (2)$$

Como se aprecia en la gráfica el parámetro w determina el ancho de la región de transición.

Figura 10. Potencial de confinamiento suave



1.5 HAMILTONIANO

En la aproximación de masa efectiva de la ecuación de Schrödinger para un excitón confinado en heteroestructuras semiconductoras presenta un caso particular del problema de dos cuerpos en espacios no homogéneos y anisotrópicos. Ya que no es posible resolver este problema exactamente, el camino más simple para encontrar su solución aproximada es tratar de separar el movimiento del centro de masa y el movimiento relativo del electrón y del hueco, partiendo del principio variacional. Este método da la verdadera función de onda del excitón en dos casos particulares, cuando el excitón se encuentra libre (movimiento en bloque) o cuando la posición del centro de masa es fija (confinamiento fuerte). En ambos casos la verdadera función de onda para el movimiento relativo es similar a un átomo de hidrógeno. Para excitones en un QD el movimiento del centro de masa debido al confinamiento es esencialmente más lento que el movimiento relativo y por consiguiente para todas las direcciones la verdadera función de onda será más sensible a las coordenadas relativas que a las coordenadas del centro de masa. Basándose en este argumento asumimos que la función de prueba del excitón puede ser presentada como un producto de la función de onda del electrón libre, del hueco libre y una función de correlación para el electrón-hueco ligado que depende de las coordenadas relativas. Para minimizar la energía variacional uno puede llevar a cabo una ecuación diferencial para esta función variacional.

Para esto, se considerará un modelo simplificado con parámetros iguales (constante dieléctrica ϵ , valores e isotropía de las masa efectivas del electrón y hueco) en los

diferentes tipos de potenciales de confinamiento. El Hamiltoniano adimensional para el par electrón-hueco confinados en SQD D-dimensional puede ser escrito como:

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) = H_e(\mathbf{r}_e) + H_h(\mathbf{r}_h) - 2\tau/r_{eh}; \quad \tau = 0, 1 \quad (3)$$

$$H_e = -\eta_e \Delta_e^{(D)} + V_e(r_e); \quad H_h = -\eta_h \Delta_h^{(D)} + V_h(r_h); \quad (4)$$

En estas relaciones H_e y H_h describen un movimiento libre del electrón y hueco confinados en QDs D-dimensional, $\mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_h$ son el vector posición del electrón y el hueco en el espacio D-dimensional, $V_e(r_e)$ y $V_h(r_h)$ son potenciales de confinamiento isotrópicos para el electrón y hueco, respectivamente, $\Delta^{(D)}$ -es el Laplaciano D-dimensional, r_{eh} es la distancia entre el electrón y hueco y $-2/r_{eh}$ es la energía de la interacción electrón-hueco. El parámetro τ en la ecuación (3) es igual a 1 para el excitón y 0 para el movimiento libre del electrón y el hueco. Todas las longitudes en (3) han sido escaladas en términos del radio de Bohr electrónico $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / \mu e^2$ ($a_0^* \approx 147 \text{ \AA}$), y todas las energías en Rydberg efectivos $Ry^* = e^2 / 2\epsilon a_0^*$ ($Ry_{eh}^* \approx 3.92 meV$) para electrones en GaAs siendo $m_e^* = 0.067 * m_0$ y $m_h^* = 0.135 * m_0$ la masa efectiva del electrón y hueco y $\mu = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*) = 0.047 * m_0$ la masa reducida del el par electrón-hueco y $\eta_e = \mu / m_e^* = 0.668$, $\eta_h = \mu / m_h^* = 0.33$.

Para deducir las ecuaciones del electrón y el hueco libre desacoplados se utiliza la definición del Laplaciano en D-dimensiones y se desarrolla de la siguiente manera:

El Hamiltoniano está dado por:

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = H_e(\mathbf{r}_e) + H_h(\mathbf{r}_h) \quad (5)$$

$$H_i = -\eta_i \Delta_i^{(D)} + V_i(r_i) \quad i = e, h \quad (6)$$

donde D es la dimensión del espacio físico y el Laplaciano es:

$$\Delta_i^{(D)} = \frac{1}{r_i^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(r_i^{D-1} \frac{\partial}{\partial r_i} \right) - \frac{L_{D-1}^2}{r_i^2} \quad (7)$$

L_{D-1} es el momento angular, que satisface la siguiente relación de recurrencia

$$L_{D-1}^2 Y_{D-1} = l(l + D - 2) Y_{D-1} \quad (8)$$

En la ausencia de la interacción entre el electrón y el hueco (movimiento libre, $\tau = 0$) el Hamiltoniano (3) puede ser separado y la solución exacta $f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ de la ecuación de Schrödinger para el estado base ($l = 0$) del par electrón-hueco no acoplado puede encontrarse como una solución de la siguiente ecuación

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_0 f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h); \quad f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = f_e(r_e) f_h(r_h); \quad E_0 = E_e + E_h, \quad (9)$$

$$(H_e + H_h) f_0 = E_0 f_0 \quad (10)$$

$$f_h H_e f_e + f_e H_h f_h = E_0 f_h f_e \quad (11)$$

$$\frac{H_e f_e}{f_e} + \frac{H_h f_h}{f_h} = E_0 \quad (12)$$

$$\frac{H_e f_e}{f_e} = E_e \text{ y } \frac{H_h f_h}{f_h} = E_h, \text{ donde } E_0 = E_e + E_h \quad (13)$$

$$H_i f_i = E_i f_i; \quad i = e, h \quad (14)$$

$$-\eta_i \frac{1}{r_i^{D-1}} \frac{d}{dr_i} \left(r_i^{D-1} \frac{d}{dr_i} f_i \right) + V_i f_i = E_i f_i \quad (15)$$

$$-\eta_i \frac{1}{r_i^{D-1}} \left[r_i^{D-1} \frac{d^2}{dr_i^2} f_i + (D-1) r_i^{D-2} \frac{df_i}{dr_i} \right] + V_i f_i = E_i f_i \quad (16)$$

$$-\eta_i \frac{d^2}{dr_i^2} f_i + \eta_i \frac{D-1}{r_i} \frac{df_i}{dr_i} + V_i f_i = E_i f_i; \quad i = e, h \quad (17)$$

Entonces la función de onda de la partícula libre electrón y hueco son soluciones de la siguiente ecuación unidimensional:

$$-\eta_e f_e''(r_e) - \eta_e \frac{D-1}{r} f_e'(r_e) + V_e(r_e) f_e(r_e) = E_e f_e(r_e) \quad (18)$$

$$-\eta_h f_h''(r_h) - \eta_h \frac{D-1}{r} f_h'(r_h) + V_h(r_h) f_h(r_h) = E_h f_h(r_h) \quad (19)$$

2. MÉTODO DE DIMENSION FRACTAL APLICADO A LOS EXCITONES EN PUNTOS CUÁNTICOS

2.1 ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA LA FUNCIÓN ENVOLVENTE

Una vez las ecuaciones (18) y (19) se resuelve y la función de onda para el par electrón-hueco no acoplado, $f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$, se encuentra la solución de la ecuación de Schrödinger para el excitón.

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1)\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_{ex}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (20)$$

podemos representar la solución de la ecuación (20) como el producto de la función $f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ con una función de correlación $\Phi(r_{eh})$:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = f_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)\Phi(r_{eh}); \quad r_{eh} = |\bar{\mathbf{r}}_e - \bar{\mathbf{r}}_h| \quad (21)$$

$$F[\Phi] = \int f_0 \Phi \left[H_e + H_h - \frac{2\tau}{r_{eh}} - E_{ex} \right] f_0 \Phi d^3r_e d^3r_h \rightarrow \min \quad (22)$$

$$\eta_e = \frac{\mu}{m_e}, \quad \eta_h = \frac{\mu}{m_h}, \quad \eta_e + \eta_h = 1 \quad (23)$$

Deducción de la ecuación diferencial para la función Φ

$$F[\Phi] = \left\langle f_e f_h \Phi \left| \hat{H}_e + \hat{H}_h - \frac{2\tau}{r_{eh}} - E \right| f_e f_h \Phi \right\rangle \quad (24)$$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e f_h \Phi \left| -\eta_e \Delta_e + r_e - \eta_h \Delta_h + V_h - \frac{2\tau}{r_{eh}} - E \right| f_e f_h \Phi \right\rangle \quad (25)$$

$$\begin{aligned} F[\Phi] = & \left\langle f_e f_h \Phi \left| -\eta_e \Delta_e f_e + r_e f_e \right| f_h \Phi \right\rangle + \left\langle f_e f_h \Phi \left| -\eta_h \Delta_h f_h + V_h f_h \right| f_e \Phi \right\rangle \\ & - \eta_e \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi \left| \Delta_e \Phi \right\rangle - 2\eta_e \left\langle f_h^2 f_e \Phi \left| (\nabla_e f_e) \nabla_e \Phi \right\rangle - \eta_h \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi \left| \Delta_h \Phi \right\rangle \right. \\ & \left. - 2\eta_h \left\langle f_e^2 f_h \Phi \left| (\nabla_h f_h) \nabla_e \Phi \right\rangle + \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi \left(-\frac{2\tau}{r_{eh}} - E \right) \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} F[\Phi] = & \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi \left(E_e + E_h - E - \frac{2\tau}{r_{eh}} \right) \right\rangle - \eta_e \left\langle f_h^2 \left| f_e^2 \Phi \Delta_e \Phi + 2f_e \Phi \nabla_e f_e \nabla_e \Phi \right\rangle \right. \\ & \left. - \eta_h \left\langle f_e^2 \left| f_h^2 \Phi \Delta_h \Phi + 2f_e \Phi \nabla_e f_e \nabla_e \Phi \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (27)$$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left(E_e + E_h - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right\rangle - \eta_e \left\langle f_h^2 \left| \Phi \nabla_e \left(f_e^2 \nabla_e \Phi \right) \right| \right\rangle - \eta_h \left\langle f_e^2 \left| \Phi \nabla_h \left(f_h^2 \nabla_h \Phi \right) \right| \right\rangle \quad (28)$$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left(E_e + E_h - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right\rangle - \eta_e \left\langle f_h^2 f_e^2 \left(\nabla_e \Phi \right)^2 \right\rangle - \eta_h \left\langle f_e^2 f_h^2 \left(\nabla_h \Phi \right)^2 \right\rangle \quad (29)$$

Pero como $\Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)$

$$\text{Entonces } (\nabla_e \Phi)^2 = (\nabla_h \Phi)^2 = (\nabla_{eh} \Phi)^2 \quad (30)$$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left(E_e + E_h - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right\rangle + (\eta_e + \eta_h) \left\langle f_h^2 f_e^2 \left(\nabla_{eh} \Phi \right)^2 \right\rangle \quad (31)$$

ya que $\eta_e + \eta_h = 1$ y $E_0 = E_e + E_h$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left(E_0 - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right\rangle + \left\langle f_e^2 f_h^2 \left(\nabla_{eh} \Phi \right)^2 \right\rangle \quad (32)$$

$$F[\Phi] = \left\langle f_e^2 f_h^2 \left\{ \left(\nabla_{eh} \Phi \right)^2 + \Phi^2 \left(E_0 - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right\} \right\rangle \quad (33)$$

$$F[\Phi] = \iint f_e^2 f_h^2 \left[\left(\nabla_{eh} \Phi \right)^2 + \Phi^2 \left(E_0 - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right] d^3 r_e d^3 r_h \quad (34)$$

$$F[\Phi] = \int_0^\infty \left[\int d\vec{r}_e \int d\vec{r}_h f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \left[\left(\nabla_r \Phi(r) \right)^2 + \Phi^2(r) \left(E_0 - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right] \right] \cdot \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) dr \quad (35)$$

$$F[\Phi] = \int_0^\infty \left[\int d\vec{r}_e \int d\vec{r}_h f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) \right] * \left[\left(\nabla_r \Phi(r) \right)^2 + \Phi^2(r) \left(E_0 - E - 2\tau/r_{eh} \right) \right] dr \quad (36)$$

$$F[\Phi] = \int_0^\infty J_0(r) \left\{ \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 + \left[E_0 - E - 2\tau/r \right] \Phi^2(r) \right\} dr \quad (37)$$

donde

$$J_0(r) = \int d\vec{r}_e \int d\vec{r}_h f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) \quad (38)$$

Haciendo:

$$L = \left\{ J_0(r) \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 + \left[E_0 - E_{ex} - \frac{2\tau}{r} \right] J_0(r) \Phi^2(r) \right\} \quad (39)$$

Del principio de Euler-Lagrange se sigue que:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty L(r, \Phi, \Phi', \dots) dr \rightarrow \min \quad (40)$$

minimizar el funcional anterior es equivalente a:

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi} - \frac{d}{dr} \frac{\partial L}{\partial \Phi'} = 0 \quad (41)$$

por tanto:

$$\frac{\partial}{\partial \Phi} \left\{ J_0(r) \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 + \left[E_0 - E_{ex} - \frac{2\tau}{r} \right] J_0(r) \Phi^2(r) \right\} = 2 \left[E_0 - E_{ex} - \frac{2\tau}{r} \right] J_0(r) \Phi(r) \quad (42)$$

$$\frac{\partial}{\partial \Phi'} \left\{ J_0(r) \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 + \left[E_0 - E_{ex} - \frac{2\tau}{r} \right] J_0(r) \Phi^2(r) \right\} = 2 J_0(r) \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right] \quad (43)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left\{ 2 J_0(r) \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right] \right\} = 2 \left\{ J_0(r) \frac{d^2\Phi(r)}{dr^2} + \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right] \frac{dJ_0(r)}{dr} \right\} \quad (44)$$

$$2 \left[E_0 - E_{ex} - \frac{2\tau}{r} \right] J_0(r) \Phi(r) - 2 \left\{ J_0(r) \frac{d^2\Phi(r)}{dr^2} + \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right] \frac{dJ_0(r)}{dr} \right\} = 0 \quad (45)$$

$$- \left\{ \frac{d^2\Phi(r)}{dr^2} + \frac{1}{J_0(r)} \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right] \frac{dJ_0(r)}{dr} \right\} - \frac{2\tau}{r} \Phi(r) = [E_{ex} - E_0] \Phi(r) \quad (46)$$

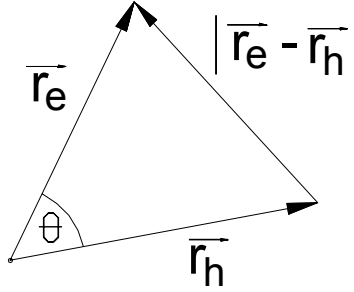
$$- \frac{1}{J_0(r)} \frac{d}{dr} J_0(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} - \frac{2\tau}{r} \Phi(r) = [E_{ex} - E_0] \Phi(r); \quad \tau = 0, 1 \quad (47)$$

Se ve que para el electrón y el hueco libre, $\tau = 0$ y $E_{ex} = E_0$, la solución de esta ecuación es trivial $\Phi(r) = 1$ y para el excitón $\tau = 1$, la ecuación es similar a la de un átomo de hidrógeno en un espacio isotrópico con la parte radial del Jacobiano igual a $J_0(r)$. Si en esta ecuación la dependencia del Jacobiano $J_0(r)$ de r fuera una ley de potencia, $J_0(r) = Cr^{D-1}$ entonces el parámetro D puede ser considerado como la dimensión del espacio efectivo.

2.2 JACOBIANO

Para encontrar la expresión explícita para el Jacobiano $J_0(r)$ se debe calcular la integral (38) en D -dimensiones usando la función de onda $f_0(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$. Denotando θ el ángulo entre $\vec{r}_e$ y $\vec{r}_h$ y teniendo en cuenta que el factor Jacobiano está dado por $(\vec{r}_e \vec{r}_h)^{D-1} \sin^{D-2} \theta$.

Figura 11. Distancia entre el electrón y el hueco



Se puede reducir la expresión (38) de la siguiente manera:

$$J_0(r) = \int d\vec{r}_e \int f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) d\vec{r}_h \quad (48)$$

$$J_0(r) = \int_0^\infty f_e^2(r_e) r_e^{D-1} dr_e \int_0^\infty f_h^2(r_h) r_h^{D-1} dr_h \int \delta\left(\sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta} - r\right) \text{sen}^{D-2} \theta d\theta \quad (49)$$

La integral $I = \int \delta\left(\sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta} - r\right) \text{sen}^{D-2} \theta d\theta$

$$\varphi(\theta) = \sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta}; \quad \delta[\varphi(\theta)] = \frac{\delta(\theta - \theta_0)}{|\varphi'(\theta_0)|}; \quad \varphi(\theta_0) = 0 \quad (50)$$

$$\varphi(\theta_0) = \sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta} - r = 0 \quad (51)$$

$$r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta = r^2 \quad (52)$$

$$\cos \theta_0 = \frac{r^2 - r_e^2 - r_h^2}{-2r_e r_h} = \frac{r_e^2 + r_h^2 - r^2}{2r_e r_h} \quad (53)$$

$$\text{sen} \theta_0 = \frac{\sqrt{(2r_e r_h)^2 - (r_e^2 + r_h^2 - r^2)^2}}{2r_e r_h} \quad (54)$$

$$\varphi'(\theta_0) = \frac{2r_e r_h \text{sen} \theta_0}{2\sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos \theta_0}} = \frac{r_e r_h \text{sen} \theta_0}{r} \quad (55)$$

$$I = \int r \frac{\delta(\theta - \theta_0)}{r_e r_h \text{sen} \theta_0} \text{sen}^{D-2} \theta d\theta = \frac{r \text{sen}^{D-3} \theta_0}{r_e r_h} \quad (56)$$

$$I = \frac{r}{r_e r_h} \cdot \left[\frac{\sqrt{(2r_e r_h)^2 - (r_e^2 + r_h^2 - r^2)^2}}{2r_e r_h} \right]^{D-3} \quad (57)$$

El término $(2r_e r_h)^2 - (r_e^2 + r_h^2 - r^2)^2$ se puede manipular algebraicamente de la siguiente manera:

$$(2r_e r_h)^2 - (r_e^2 + r_h^2 - r^2)^2 = [2r_e r_h - (r_e^2 + r_h^2 - r^2)][2r_e r_h + (r_e^2 + r_h^2 - r^2)] \quad (58)$$

$$= [r^2 - (r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h)][r_e^2 + r_h^2 + 2r_e r_h - r^2] = [r^2 - (r_e - r_h)^2][(r_e + r_h)^2 - r^2] \quad (59)$$

$$= [r - r_e + r_h][r + r_e - r_h][r_e + r_h - r][r_e + r_h + r] \quad (60)$$

$$= [r_h - (r_e - r)][r_h + r_e - r][r_e + r - r_h][r_e + r + r_h] = [r_h^2 - (r_e - r)^2][(r_e + r)^2 - r_h^2] \quad (61)$$

Por lo tanto $J_0(r)$ se puede escribir como:

$$J_0(r) = r \int_0^\infty f_e^2(r_e) r_e^{D-1} dr_e \int_{|r_e-r|}^{r_e+r} f_h^2(r_h) r_h^{D-2} \left\{ \frac{[r_h^2 - (r_e - r)^2][(r_e + r)^2 - r_h^2]}{(2r_e r_h)^{D-3}} \right\}^{(D-3)/2} dr_h \quad (62)$$

Los límites de la integral con respecto a r_h se encuentran de la siguiente manera:

$$r_h^2 - (r_e - r)^2 \geq 0; r_h \geq |r_e - r| \quad (63)$$

$$\text{y } (r_e + r)^2 - r_h^2 \geq 0; r_h \leq |r_e + r| = r_e + r \quad (64)$$

$$J_0(r) = \frac{r}{2^{D-3}} \int_0^\infty f_e^2(r_e) dr_e \int_{|r_e-r|}^{r_e+r} f_h^2(r_h) \left\{ [r_h^2 - (r_e - r)^2][(r_e + r)^2 - r_h^2] \right\}^{(D-3)/2} dr_h \quad (65)$$

El significado físico de la función $J_o(r)$ y $\Phi(r)$ puede ser entendido por la función de correlación espacial del par electrón-hueco (SPCF) $P(r)$ el cual da la densidad de probabilidad de encontrar un electrón y un hueco separado una distancia r

$$P(r) = \langle \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) \rangle \quad (66)$$

Para el movimiento libre del electrón y e hueco la función (SPCF) coincide con la parte radial del Jacobiano $J_o(r)$.

$$P_0(r) = \int d\vec{r}_e \int f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) d\vec{r}_h = J_o(r) \quad (67)$$

Ahora para el estado acoplado $P(r)$ es:

$$P(r) = \int d\vec{r}_e \int f_0^2(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \Phi^2(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|) \delta(|\vec{r}_e - \vec{r}_h| - r) d\vec{r}_h \quad (68)$$

$$P(r) = J_0(r) \Phi^2(r) = \chi^2(r) \quad (69)$$

2.3 ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA LA FUNCIÓN DE CORRELACIÓN

En la ecuación (69), la función $\chi(r) = \Phi(r)\sqrt{J_0(r)}$ puede ser considerada como la función de onda de una partícula la cual describe la coordenada relativa en el excitón, cuyo cuadrado coincide con la SCPF.

De tal manera la función $J_0(r)$ es una medida de la probabilidad de encontrar el electrón y el hueco separados por una distancia r en un movimiento libre en la heteroestructura y el valor del cuadrado de la función $\Phi(r)$ da la razón $\Phi^2(r) = P(r)/P_0(r)$ de la SCPFs del par electrón hueco en el estado acoplado y libre. Sustituyendo la relación entre $\Phi(r)$ y $\chi(r)$ en la ecuación (47) se tiene

$$-\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \left[-\frac{2\tau}{r} + \frac{(\sqrt{J_0(r)})''}{\sqrt{J_0(r)}} \right] \chi(r) = [E_{ex} - E_0] \chi(r); \quad P(r) = \chi^2(r); \quad \tau = 0,1 \quad (70)$$

$$-\frac{1}{J_0(r)} \frac{d}{dr} J_0(r) \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} \right) - \frac{2\tau}{r} \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} = [E_{ex} - E_0] \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} \quad (71)$$

$$-\frac{1}{J_0(r)} \frac{d}{dr} \left[J_0(r) \frac{\chi(r)' \sqrt{J_0(r)} - \chi(r) \sqrt{J_0(r)'}}{J_0(r)} \right] - \frac{2\tau}{r} \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} = [E_{ex} - E_0] \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} \quad (72)$$

$$-\frac{1}{J_0(r)} \left[\chi(r)'' \sqrt{J_0(r)} + \chi(r)' \sqrt{J_0(r)'} - \chi(r)' \sqrt{J_0(r)'} - \chi(r) \sqrt{J_0(r)''} \right] - \frac{2\tau}{r} \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} = [E_{ex} - E_0] \frac{\chi(r)}{\sqrt{J_0(r)}} \quad (73)$$

$$-\chi(r)'' + \left[\frac{\sqrt{J_0(r)''}}{\sqrt{J_0(r)}} - \frac{2\tau}{r} \right] \chi(r) = [E_{ex} - E_0] \chi(r) \quad (74)$$

2.4 EXCITÓN EN UN ESPACIO DE DIMENSIÓN FRACCIONARIA

Una interpretación diferente de los resultados obtenidos surge del análisis de las propiedades de las soluciones del problema de valores propios (47). Como la ecuación (47) es auto adjunta las funciones propias correspondientes a diferentes valores deben ser ortogonales:

$$\int_0^{\infty} \Phi_n(r) \Phi_{n'}(r) J_0(r) dr = \int \Phi_n(r) \Phi_{n'}(r) dV = \delta_{n,n'} \quad (75)$$

donde $dV = J_0(r) dr$ representa un elemento de volumen infinitesimal del espacio efectivo por lo tanto, el Jacobiano puede ser considerado como la medida del área de la superficie de una esfera de radio r y $r + dr$ en el espacio efectivo correspondiente a las coordenadas relativas.

De otra manera de acuerdo a la relación (67) este Jacobiano es igual a la SCPF para el movimiento libre del electrón y el hueco ya que todos los valores de separaciones tienen igual probabilidad. Por lo tanto, la SCPF está dada por el área de una esfera de radio r , la cual en el espacio homogéneo de D -dimensiones es igual a $J_0(r) = P(r) = 2\pi^{D/2} r^{D-1} / \Gamma(D/2)$. Por ejemplo, para un espacio homogéneo de uno, dos y tres dimensiones la función $J_0(r)$ será igual a 2, $2\pi r$ y $4\pi r^2$, respectivamente. Si la ecuación para la dependencia de $J_0(r)$ sobre r fuera una ley de potencia, por ejemplo $J_0(r) = Cr^{D-1}$, entonces la ecuación (47) coincidiría con la ecuación de Schrödinger para el estado S del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo de D -dimensiones siendo D un entero o fraccionario. En las heteroestructuras reales la función $J_0(r)$ definida por la ecuación (66), no depende de la ley de potencia de la separación del electrón hueco r debido al confinamiento, y la ecuación (48) puede ser considerada como la función de onda para un átomo de hidrógeno en un espacio isotrópico y no homogéneo con una dimensión fraccionaria que depende de la distancia del electrón hueco r .

Se puede dar una interpretación geométrica de la ecuación (47) basado en el concepto de Mandelbrot de la dimensión fraccionaria considerando esta ecuación como un modelo matemático para un problema de una fuerza central, para las coordenadas relativas del excitón dentro de un espacio efectivo con dimensión fraccionaria que resulta de las coordenadas del centro de masa y de las coordenadas relativas de las partículas. Las

propiedades de este espacio son descritas por la parte radial del Jacobiano $J_0(r)$ que depende de la coordenada relativa r . Esta dependencia de r es una ley de potencia cuando el espacio es homogéneo, en otro caso no lo es. En el primer caso como la dependencia de la ley de potencia no es parabólica uno puede asociar este caso al espacio real tridimensional como un objeto autosimilar fractal cuya dimensión fraccionaria D^* esta relacionada con la dependencia del jacobiano sobre el radio $J_0(r) = Cr^{D^*-1}$. Ya que esta dependencia en el caso general debido al confinamiento no es una ley de potencia, la dimensión fractal podría ser únicamente definida localmente debido a que es imposible definir una dimensión fraccionaria, la cual sea la misma en todas las parte del espacio, por lo tanto se asume que el Jacobiano varía de la siguiente manera:

$$J_0(r) = C(r)r^{D^*(r)-1} \quad (76)$$

donde las funciones $C_0(r)$ y $D^*(r)$ varían mas suavemente que cualquier función potencial. Se asume que la relación entre el Jacobiano y a dimensión fraccionaria correcta es:

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J_0(r)}{dr} \quad (77)$$

la misma que para fractales.

Para entender las propiedades generales de la dependencia del Jacobiano y la dimensión fractal, se puede analizar el comportamiento asintótico de la ecuación (49) para pequeños y grandes separaciones del electrón y hueco. Para pequeños valores de r ,

$$J_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^{D-1}; \quad C = 2^{D-1} \int_0^\infty f_e^2(r_e) f_h^2(r_e) r_e^{D-1} dr_e; \quad D^*(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} D \quad (78)$$

y para grandes valores,

$$J_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0; \quad D^*(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (79)$$

Las dos relaciones anteriores se pueden entender considerando que para pequeños valores de separación de electrón-hueco con respecto al tamaño de la heteroestructura las partículas se comportan como si estuvieran en el espacio real en estado libre.

Cuando la distancia se aproxima o se hace mayor al tamaño de la heteroestructura, las partículas se comportan como si estuvieran en un espacio de una dimensión que tiende a cero.

3. RESULTADOS DE CÁLCULO

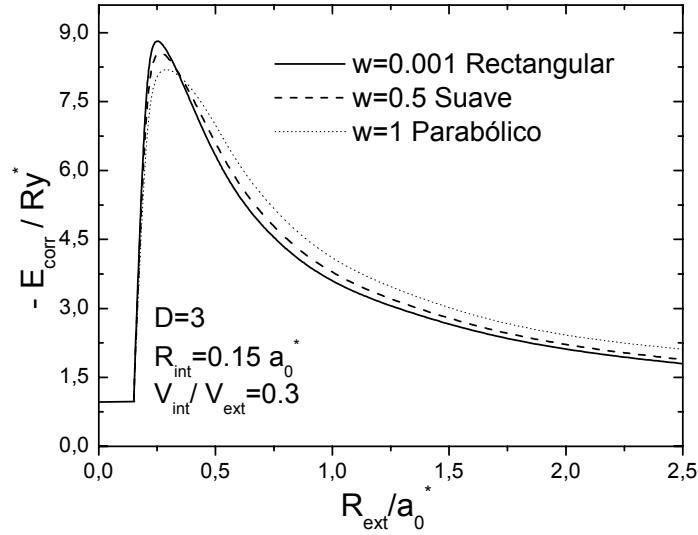
Mas adelante se presentan los resultados de cálculo obtenidos para excitones en puntos, anillos y discos cuánticos de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con diferentes formas de potencial. Para esta heteroestructura la altura de la barrera es de orden 66 Ry^* . Para analizar las diferentes formas de potencial se introduce el parámetro $w = 2W / (R_{ext} - R_{int})$, donde R_{ext} , R_{int} , W son los radios del punto cuántico, del núcleo repulsivo y del ancho de la capa transitoria en las junturas respectivamente. Es evidente que cuando el parámetro w tiende a cero el potencial dado por la fórmula (2) describe el modelo de confinamiento con el potencial rectangular, y cuando w tiende a uno con el piso casi parabólico, en ambos casos los potenciales son de barrera finita de altura $V_{ext} \approx 66 \text{ Ry}^*$. Variando el parámetro w desde 0 hasta 1 se obtienen diferentes potenciales, a mayor valor de w más suave es el potencial de confinamiento.

3.1 EXCITONES EN PUNTOS Y CASCARONES ESFÉRICOS (D=3)

En la figura 12 se muestra la energía de correlación un par electrón-hueco confinados en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con el radio del núcleo repulsivo fijo e igual a $R_{int} = 0.15 a_0^*$ en función del radio externo, R_{ext} , para los potenciales de confinamiento rectangular, suave y parabólico. Cuando se empieza a reducir el radio del punto, la energía de enlace se incrementa debido a que el confinamiento cuántico reduce la separación promedio del electrón y el hueco haciendo que la atracción Coulombiana aumente. La energía aumenta hasta alcanzar un máximo que corresponde al confinamiento máximo. Luego a medida que se sigue disminuyendo el radio del punto la energía de enlace disminuye por que la función de onda del excitón desborda en las barreras y por lo tanto el excitón se sale del punto cuántico recuperando su estado libre en un espacio tridimensional donde su energía tiende a un 1 Ry^* correspondiente a la energía en el bloque del semiconductor. Un similar comportamiento muestra la energía de correlación ($E_{corr} \rightarrow 1 \text{ Ry}^*$) cuando el radio externo tiende al infinito. En las curvas presentadas en la figura 12 se observa una región en la cual las energías de enlace para los diferentes potenciales de confinamiento se cruzan. En la región del cruce de las curvas hacia la derecha la energía del potencial de confinamiento parabólico es mayor, esto se puede entender debido a que en esta región el potencial de confinamiento parabólico presenta un

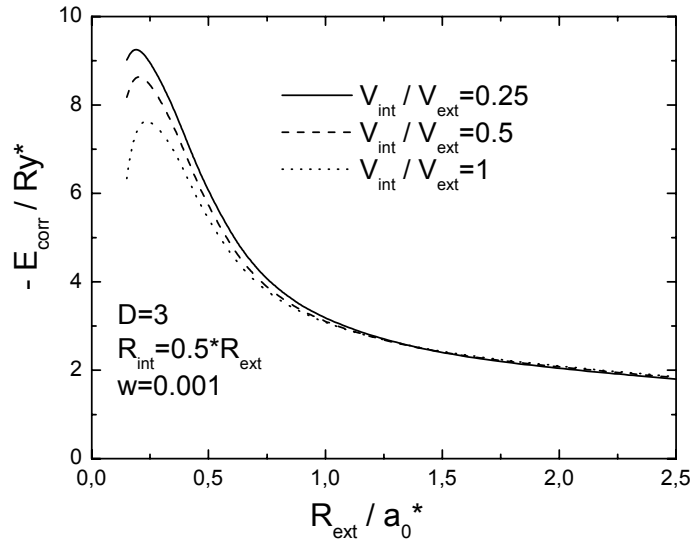
mayor confinamiento que el potencial suave y rectangular. En la región del cruce hacia a la izquierda se observa que la energía del potencial de confinamiento parabólico es más baja y decrece con mayor rapidez que las demás, esto es porque el potencial parabólico presenta un mayor confinamiento y esto hace que la función de onda desborde más rápido.

Fig. 12. Energía de correlación de un excitón en un QD esférico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $R_{int}=0.15 a_0^*$ y diferentes formas de potencial de confinamiento



En la figura 13, se muestra la energía de correlación de un excitón en un QD de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $R_{int}=0.5 \cdot R_{ext}$ y diferentes alturas de potencial del núcleo repulsivo correspondiente a diferentes razones V_{int}/V_{ext} .

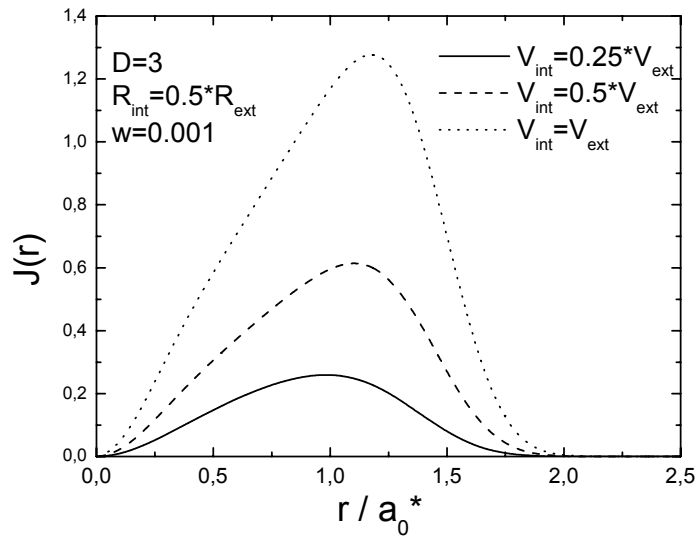
Fig. 13. Energía de correlación de un excitón en un QD esférico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $R_{int}=0.5 \cdot R_{ext}$ para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}



El comportamiento general de las curvas es muy parecido al de las curvas en la figura 12. Se puede ver que con el aumento de la altura de la barrera de potencial del núcleo repulsivo el máximo de las curvas disminuye. Las diferencias en la energía máxima se pueden explicar por el efecto de tunelamiento de las partículas en la región del núcleo repulsivo. El punto cuántico con una barrera de potencial menor en el núcleo repulsivo permite que el excitón penetre en esta región con mayor facilidad y así se permite que se pueda confinar el excitón más y obtener una mayor energía de correlación que para los demás potenciales.

Por último, en la figura 14 se presenta la dependencia de los Jacobianos de la separación electrón-hueco en los puntos cuánticos con diferentes formas del potencial de confinamiento. Esta función puede ser interpretada como la densidad de probabilidad no normalizada de encontrar el electrón y el hueco separado una distancia de r en su movimiento no correlacionado dentro del punto cuántico.

Fig. 14. Jacobiano para un QD esférico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $R_{int}=0.5 \cdot R_{ext}$ y $R_{ext}=1 \cdot a_0^*$ para diferentes razones de V_{int}/V_{ext}



En el espacio libre tridimensional el Jacobiano es proporcional a r^2 (dependencia parabólica), en el espacio bidimensional a r (dependencia lineal) y en el espacio unidimensional es una constante. Además, en la teoría de dimensión fraccionaria se supone que el Jacobiano en un espacio cero-dimensional es cero. Analizando las curvas presentadas en la figura 14 se puede ver que para todas las formas del potencial de confinamiento, el Jacobiano tiene la forma parabólica para pequeñas separaciones electrón-hueco, después al aumentar la separación la curva sucesivamente se transforma en una curva casi lineal, una constante y finalmente tiende a cero. Esto se puede interpretar como el cambio de la dimensionalidad

del espacio con el aumento del tamaño del excitón, para pequeños tamaños del excitón mucho menores que el radio exterior del punto cuántico esta dimensionalidad es igual a tres, debido a que el pequeño excitón casi no siente el confinamiento y se comporta como un excitón libre. A medida que el tamaño del excitón crece la dimensionalidad del espacio disminuye desde tres a cero. Además se puede ver que esta transformación de la dimensionalidad del espacio se realiza para mayores separaciones electrón-hueco cuando la altura del potencial del núcleo repulsivo crece, esto es cuando el efecto de confinamiento se hace mayor.

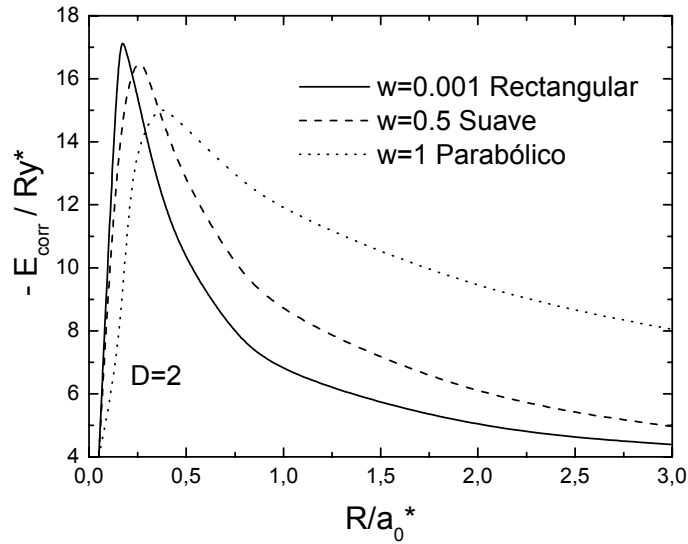
4.2 DISCOS Y ANILLOS CUÁNTICOS (D=2)

Se puede esperar que los efectos de confinamiento sobre los excitones en los discos y anillos cuánticos sean similares a los de los puntos cuánticos esféricos y cascarones; la diferencia no es tanto cualitativa como cuantitativa. Esta última diferencia está relacionada con el hecho que en el espacio bidimensional el efecto de confinamiento es mucho más fuerte comparado con el espacio tridimensional. En la teoría de escalamiento dimensional se conoce que la energía del átomo de hidrógeno en el espacio bidimensional es cuatro veces mayor que en el espacio tridimensional. Similarmente el excitón libre en un bloque de semiconductor con una estructura bidimensional tiene la energía de enlace $4 \cdot Ry^*$, mientras que en las estructuras tridimensionales solo es $1 \cdot Ry^*$. En adelante presentamos algunos resultados de cálculo para discos y anillos cuánticos.

a. Discos cuánticos

Para analizar los excitones en discos cuánticos se hace $V_{int} = 0$ en la fórmula (2). En la figura 15 se presentan resultados de cálculo de la energía de correlación de un par electrón-hueco en función del radio de disco cuántico para diferentes formas de potencial de confinamiento.

Fig. 15. Energía de correlación de un excitón en un disco cuántico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con diferentes formas de potencial de confinamiento

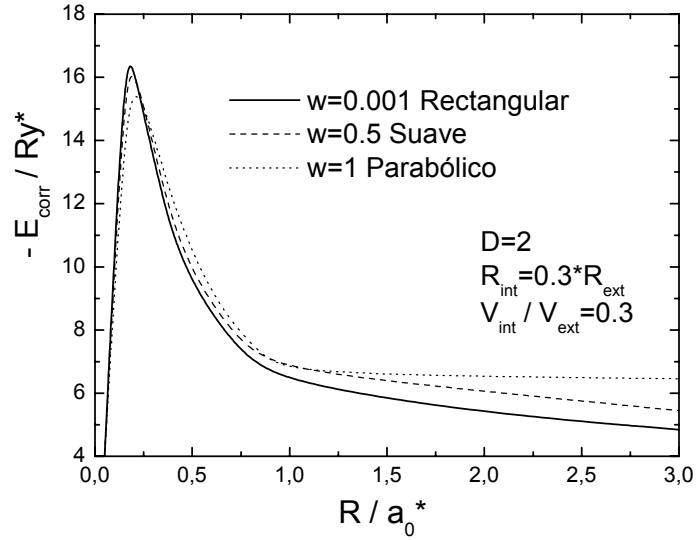


Se puede ver que el comportamiento general de las curvas es similar al de su análogo en el caso $D=3$, pero existen dos diferencias importantes para resaltar. La primera, es que el efecto de la forma de potencial es mucho más pronunciado que en el caso tridimensional. La energía de correlación para el potencial parabólico para grandes radios del disco es mucho mayor que en los discos cuánticos con potencial rectangular y el efecto de desbordamiento de la función de onda en la barrera exterior (el punto correspondiente al máximo de la curva) para el potencial parabólico ocurre para un radio del disco, es mayor que en el caso del potencial rectangular. Segundo, las energías en los máximos de las curvas en el caso de $D=2$ son superiores que en el caso $D=3$ y además la energía del excitón cuando el radio tiende a cero o al infinito (excitón libre) tiende a $4Ry^*$ y no a $1Ry^*$ como en el caso tridimensional.

b. Anillos

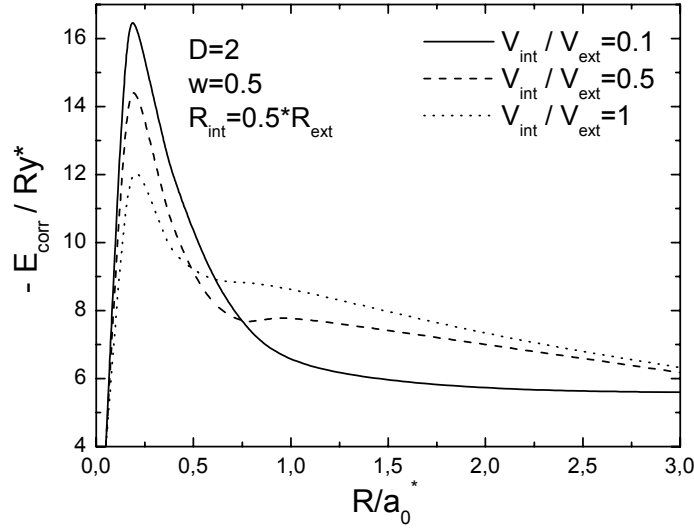
En la figura 16 se presenta la energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico para diferentes formas de potencial cuando el potencial y el radio interno del núcleo repulsivo son relativamente pequeños. El comportamiento de las curvas para este modelo es similar al caso del disco y se puede ver que la forma del potencial no cambia esencialmente el carácter general de estas curvas.

Fig. 16. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As para diferentes formas de potencial



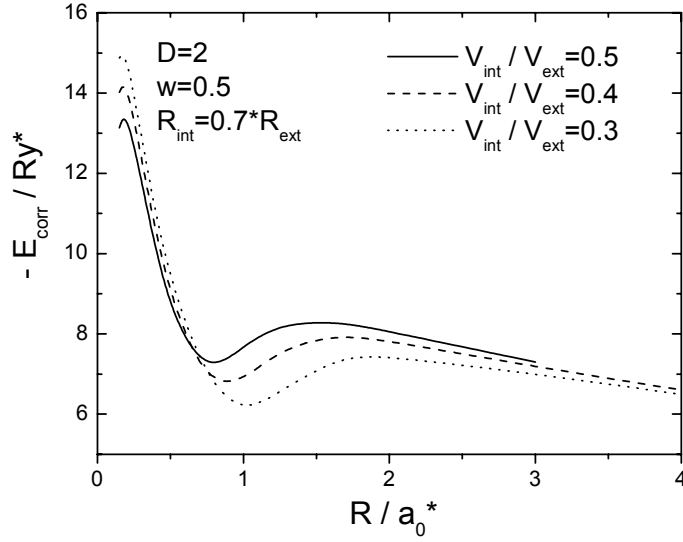
Se puede esperar que el carácter del confinamiento sea más sensible a la altura del potencial y al radio interno del núcleo repulsivo. Para verificar esto se realizaron los cálculos de la energía de correlación en los anillos con mayor radio repulsivo (anillos más estrechos). En las figuras 17 y 18 se presentan los cálculos para los anillos en los cuales el radio del núcleo repulsivo es 50% y 70% respectivamente del radio exterior y se puede ver que el carácter de las curvas es diferente. En la figura 17 en dos curvas con el potencial del núcleo repulsivo 50% y 100% del potencial de la barrera exterior aparece un segundo máximo de la energía, lo cual sucede aproximadamente en la región de $0.75 a_0^* < R_{\text{ext}} < 1.24 a_0^*$.

Fig. 17. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga_{0,6}Al_{0,4}As para diferentes razones de $V_{\text{int}}/V_{\text{ext}}$



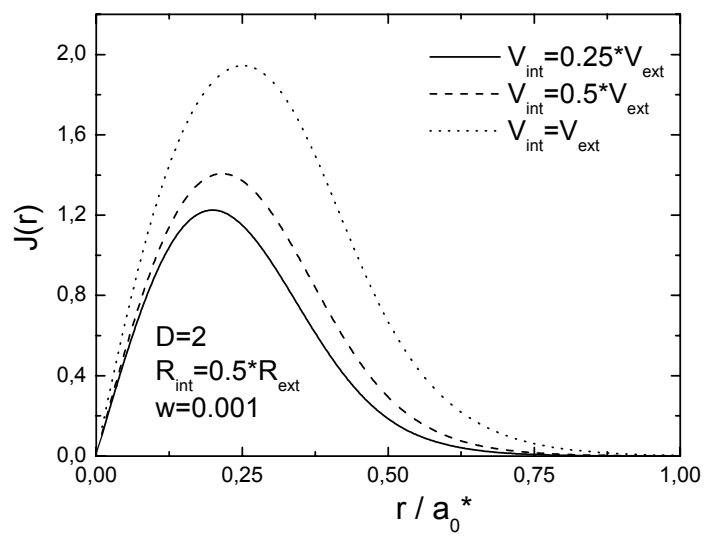
Este efecto es más pronunciado en las curvas de la figura 18 la cual corresponde al modelo con un radio interno más grande debido a que este núcleo produce un mayor confinamiento. En esta figura se puede observar más claramente un segundo máximo en las curvas de la energía en función del radio exterior. Para entender la naturaleza de estos dos máximos en las curvas de las figuras 17 y 18 hay que tener en cuenta que con la disminución del radio exterior se disminuye el ancho del anillo y cuando este ancho se hace suficientemente pequeño en algún momento las funciones de onda del electrón y del hueco se desbordan en la región del núcleo repulsivo y en este momento la separación electrón-hueco aumenta. El aumento de esta separación conduce a un decrecimiento de la energía de correlación y por eso en las curvas de las figuras 17 y 18 aparece el primer máximo situado en la parte derecha de estas curvas. Cuando las partículas se desbordan en la parte interior del núcleo, la posterior disminución del radio exterior conduce otra vez a la disminución de la separación entre las partículas y la energía de correlación empieza nuevamente a crecer hasta que las funciones de onda de las partículas no desbordan en las barreras exteriores y en este momento aparece un segundo máximo en las curvas, el máximo principal.

Fig. 18. Energía de correlación de un excitón en un anillo cuántico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As para diferentes razones de $V_{\text{int}}/V_{\text{ext}}$



Para finalizar el análisis de los efectos de correlación del par electrón hueco confinados en los anillos cuánticos en la figura 19 presentamos los gráficos de los Jacobianos en función de separación electrón-hueco para diferentes formas del potencial de confinamiento. En general, estas curvas son similares al caso tridimensional con una sola pequeña diferencia, en la parte inicial de las curvas, para pequeñas separaciones entre partículas la dependencia del Jacobiano de la distancia no es parabólica como en el caso tridimensional, sino es lineal. Este resultado se puede esperar teniendo en cuenta que los anillos presentan las estructuras bidimensionales y al espacio bidimensional corresponde un Jacobiano con la dependencia de la separación lineal. De esta manera, el exciton en los anillos (y discos) cuánticos se comporta como un sistema bidimensional cuando su tamaño es mucho menor que el ancho del anillo y su comportamiento se cambia con el aumento su tamaño haciéndose similar a un sistema con la dimensión reducida hasta cero cuando el tamaño del exciton se hace mucho mayor que el ancho del anillo.

Fig. 19. Jacobiano para un excitón en un anillo cuántico d GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $r_{\text{int}}=0.5 \cdot R_{\text{ext}}$ para diferentes razones d $V_{\text{int}}/V_{\text{ext}}$



4. CONCLUSIONES

En el marco del método de dimensión fractal se presenta un análisis teórico de los efectos de un par electrón-hueco confinado tridimensionalmente en puntos y cascarones esféricos y bidimensionalmente en discos y anillos cuánticos. Los resultados principales de esta tesis son los siguientes:

- 1) Se encontró una ecuación diferencial para la función de correlación espacial de un par electrón-hueco confinados en sistemas con simetría esférica en un espacio de D dimensiones considerando la dimensión D como un parámetro de la teoría.
- 2) En la base de la teoría desarrollada se elaboraron los algoritmos para calcular la energía de correlación del excitón en los puntos, cascarones esféricos, discos y anillos con simetría axial.
- 3) Se elaboró el algoritmo de disparos y se confeccionó el programa correspondiente para resolver las ecuaciones de onda que aparecen en la teoría de dimensión fractal.
- 4) Se realizaron los cálculos de la energía de correlación de los excitones confinados en los puntos, cascarones esféricos, discos y anillos con simetría axial de $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.
- 5) Se analizaron los efectos de confinamiento sobre la energía de correlación de los excitones para diferentes formas de potencial y diferentes geometrías de los puntos, cascarones esféricos, discos y anillos con simetría axial de $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] G. Bastard, E.E. Méndez, L.L. Chang, and L. Esaki. Phys Rev. B 26, 4 (1982)
- [2] R. L. Greene, K. K. Bajaj and E. D. Phelps, Phys Rev. B 29, 4 (1983)
- [3] S. Le Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B 47, 1383 (1993)
- [4] S. V. Nair, S. Sinha, y K. C. Rustagi, Phys. Rev. B 35, 11261 (1987)
- [5] D. B. Tran Thoai, Y. Z. Hu, S. W. Koch, Phys. Rev. B 42, 4098 (1990)
- [6] Y. Kayanuma y H. Momiji, Phys. Rev. B 41, 10261 (1990)
- [7] C. F. Lo y R. sollie, Solid State Communications, vol. 79, No. 9, 775-778 (1991)
- [8] Y. Kayanuma, Phys. Rev. B 38, 9797 (1988)
- [9] R. A. Escorcia, R. Robayo y I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. 230, No. 2, 431-436 (2002)
- [10] T. Uozumi, Y. Kayanuma, Phys. Rev B 65, 165318 (2002)
- [11] Y. Z. Hu, M. Lindberg, and S. W. Koch, Phys. Rev B 42, 17 13 (1990)
- [12] J.-J. S. De Groote, J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B 46, 12773 (1992)
- [13] D. Pfannkuche, V. Gudmundsson, and P. Maksym, Phys. Rev. B 47, 2244 (1993)
- [14] J. Song and S. E. Ulloa, Phys. Rev B 52, 9015 (1995)
- [15] F. M. Petters, V. A. Schweigert, Phys. Rev. B 55, 1468 (1996)
- [16] T. Garm, J. Phys. Condensed Matter. 8, 5725 (1996)
- [17] J. Song and S. E. Ulloa, Phys. Rev B 63, 125302 (2001)
- [18] B. Szafran, J. Adamowski y S. Bednarek, Phys. Condens matter 14 73-86 (2002)
- [19] T. Uozumi y Y. Kayanuma, Phys. Rev. B 65, 165318 (2002)
- [20] Frank H. Stillinger, Journal of Mathematical Physics, Vol. 18, No. 6, 1977
- [21] H. Mathieu, P. Lefebvre y P. Christol, Phys. Rev. B 4092, 7 (1992)
- [22] A. Matos-Abiague, L. E. Oliveira y M. de Dios-Leyva, Phys. Rev. B 4072, 7 (1998)
- [23] E. Reyes-Gómez, A. Matos- Abiague, L. E. Oliveira, Phys. Stat. Sol. (b) 220, 71 (2002)
- [24] R. H. Dudley, J. Avery and O. Goscinski, Dimensional Scaling in Chemical Physics, Netherlands, Kluwer Academic Publishers (1993)
- [25] Mohammad El-Said, J. Phys., I France 5, 1027 (1995)
- [26] Mohammad El-Said, Phys. Rev. B 61, 13026 (2000)
- [27] M. K. El-said, Chinese Journal of Physics, vol. 40, 315 (2002)
- [28] S. E. Koonin, Computational Physics, Addison Wessley Publishing Company, Inc, California, U.S.A, (1986)

ANEXO

PROCEDIMIENTOS NUMÉRICOS

1. SOLUCIÓN DE ECUACIÓN PARA PARTÍCULAS DESACOPLADOS

Las funciones de onda para el electrón y el hueco libre son soluciones para la siguiente ecuación unidimensional.

$$-\eta_i f_i'' - \eta_i D - 1 f_i' + (V_i - E_i) f_i = 0; \quad i = e, h \quad (80)$$

$$f_i'' - \frac{D-1}{r_i} f_i' + \alpha(r_i) f_i = 0; \quad \alpha(r_i) = \frac{E - V(r_i)}{\eta_i} \quad (81)$$

Las soluciones de estas ecuaciones se van a encontrar numéricamente mediante el método de disparos y por consiguiente para inicializar el proceso de Runge-Kutta se deben encontrar las condiciones de frontera.

Condiciones de frontera:

$$a. \quad r \rightarrow 0 \quad f'(0) = 0; \quad f(0) = 1 \quad \alpha(0) = \frac{E - V_{\text{int}}}{\eta_i} \quad (82)$$

Haciendo

$$f_i = 1 + \beta r_i^2; \quad f' = 2\beta r_i; \quad f'' = 2\beta \quad (83)$$

y sustituyendo en la ecuación (80):

$$2\beta + (D-1)2\beta + \alpha(0) = 0; \quad (84)$$

$$2\beta D = -\alpha(0) \quad (85)$$

$$\beta = \frac{-\alpha(0)}{2D} \quad (86)$$

b. Para $0 < r < \varepsilon$

$$f(r) = 1 + \frac{V_i - E}{2D\eta_i} r_i^2 \quad (87)$$

$$f'(r) = \left[\frac{V_i - E}{D\eta_i} \right] r_i \quad (88)$$

c. $r = \varepsilon$

$$f(\varepsilon) = 1 + \frac{V_i - E}{2D\eta_i} \varepsilon^2 \quad (89)$$

$$f'(\varepsilon) = \left[\frac{V_i - E}{D\eta} \right] \varepsilon \quad (90)$$

d. Cuando $r \rightarrow \infty$; $\alpha = \frac{E - V_e}{\eta_i} = -k^2$; $k = \sqrt{\frac{V_i - E}{\eta_i}}$

$$f'' = - \left[\left(k + \frac{\delta}{r_i} \right) f' + f \left(\frac{-\delta}{r_i^2} \right) \right] \quad (91)$$

$$f'' = \left(k + \frac{\delta}{r_i} \right)^2 f + \frac{\delta}{r_i^2} f \quad (92)$$

Sustituyendo en la ecuación (80)

$$\left(k + \frac{\delta}{r_i} \right)^2 + \frac{\delta}{r_i^2} - \frac{D-1}{r_i} \left(k + \frac{\delta}{r_i} \right) + \alpha = 0 \quad (93)$$

Como $r_i \rightarrow \infty$ entonces se puede despreciar los términos con $\frac{1}{r_i^2}$

$$k^2 + \frac{2k\delta}{r_i} - \frac{D-1}{r_i} k - k^2 = 0 \quad (94)$$

$$\frac{k}{r_i} [2\delta - D - 1] = 0 \Rightarrow \delta = \frac{D-1}{2} \quad (95)$$

Por lo tanto:

$$f(r_i) = \frac{e^{-kr_i}}{r^{(D-1)/2}} \quad (96)$$

$$f' = - \left[k + \frac{D-1}{2r} \right] f(r) \quad (97)$$

Dividiendo $f'(r_i)$ en $f(r_i)$

$$\frac{f'(r_i)}{f(r_i)} = - \left(k + \frac{D-1}{2r} \right) \quad (98)$$

$$\frac{f'(R_{\max})}{f(R_{\max})} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} - \left(k + \frac{D-1}{2R_{\max}} \right) \quad (99)$$

e. Si $\varepsilon < r < R_{\max}$

Haciendo $f = Y_1$; $f' = Y_2$; entonces se puede escribir la ecuación (80) como u problema de Cauchy

$$\frac{dY_1}{dr} = Y_2 \quad (100)$$

$$\frac{dY_2}{dr} = -\frac{D-1}{r_i} Y_2 - \alpha Y_1 \quad (101)$$

$$Y_1(\varepsilon) = 1 + \frac{V_i - E}{2D\eta} \varepsilon^2 \quad (102)$$

$$Y_2(\varepsilon) = \frac{V_i - E}{D\eta} \varepsilon \quad (103)$$

Utilizando la notación anterior se puede escribir una ecuación trascendental

$$Y_2(R_{\max}, E) + \left(k + \frac{D-1}{2R_{\max}} \right) Y(R_{\max}, E) = 0 \quad (104)$$

2. ECUACIÓN DE ONDA PARA EL EXCITON EN UN PUNTO CUANTICO DE GaAs/(GA,Al)As

Para encontrar la función de correlación χ^2 se debe resolver la siguiente ecuación diferencial

$$-\chi'' + V_{\text{eff}}(r)\chi = E\chi; \text{ donde } V_{\text{eff}} = \frac{2\tau}{r} + \frac{(\sqrt{J})''}{\sqrt{J}}; J = rP \quad (105)$$

para resolver esta ecuación numéricamente es conveniente hacer los siguientes cambios:

$$(\sqrt{J_0})'' = \left((\sqrt{J_0})' \right)' = \left(\frac{J_0'}{2\sqrt{J_0}} \right)' = \frac{J_0''}{2\sqrt{J_0}} - \frac{J_0'^2}{4\sqrt{J_0}^3} \quad (106)$$

$$V_{\text{eff}} = \frac{2\tau}{r} + \frac{J_0''}{2J_0} - \frac{1}{4} \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)^2 \quad (107)$$

$$\text{Pero: } \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)' = \frac{J_0''}{J_0} - \frac{J_0'^2}{J_0^2}; \frac{J_0''}{J_0} = \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)' + \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)^2 \quad (108)$$

$$V_{eff} = \frac{2\tau}{r} + \frac{1}{2} \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)' + \frac{1}{4} \left(\frac{J_0'}{J_0} \right)^2 \quad (109)$$

$$J_0' = P + rP \Rightarrow \frac{J_0'}{J_0} = \frac{1}{r} + \frac{P'}{P} = \frac{1}{r} + (\ln P)'; \quad W = \ln P \Rightarrow \frac{1}{r} + W' = \frac{J_0'}{J_0} \quad (110)$$

$$V_{eff} = \frac{2\tau}{r} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} + W' \right)' + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{r} + W' \right)^2 \quad (111)$$

$$V_{eff} = \frac{2\tau}{r} + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{r^2} \right) + \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \frac{W'}{r} + \frac{1}{4} W'^2 \quad (112)$$

$$V_{eff} = \left(2\tau + \frac{1}{2} W' \right) / r - \frac{1}{4r^2} + \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} W'^2 \quad (113)$$

$$-\chi'' + \left[-\frac{1}{4r^2} + \frac{2\tau + \frac{1}{2} W'}{r} + \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} W'^2 \right] \chi = E\chi \quad (114)$$

$$\chi = u\sqrt{r}; \chi' = u'\sqrt{r} + \frac{1}{2\sqrt{r}}u; \chi'' = u''\sqrt{r} + \frac{u'}{\sqrt{r}} - \frac{u}{4\sqrt{r}^3} \quad (115)$$

Luego:

$$-u''\sqrt{r} - \frac{u'}{\sqrt{r}} + \frac{u}{4\sqrt{r}^3} + \left[\frac{2\tau + \frac{1}{2} W'}{r} + \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} W'^2 \right] u\sqrt{r} = Eu\sqrt{r} \quad (116)$$

Dividiendo por $\sqrt{r}$:

$$-u'' - \frac{u'}{r} + \left[\frac{2\tau + \frac{1}{2} W'}{r} + \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} W'^2 \right] u = Eu \quad (117)$$

La cual es la ecuación que se resolverá mediante el método de disparos.

$$V_0(r) = \frac{1}{2} W'' + \frac{1}{4} W'^2 \quad (118)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{2\tau + \frac{1}{2}W'}{r} + V_0(r) \quad (119)$$

Las condiciones de frontera para esta ecuación (118) son:

$$a. \quad r \rightarrow 0; \quad -\frac{1}{r}u' + \frac{2\tau + \frac{1}{2}W'}{r}u = 0 \quad (120)$$

$$u(0) = 1; \quad u'(0) = 2\tau + \frac{1}{2}W'(0) \quad (121)$$

$$b. \quad r \rightarrow \infty; \quad W(r_{\max}) = 0; \quad \chi(r) = u(r)\sqrt{r} \quad (122)$$

3. JACOBIANO PARA EL EXCITON EN UN PUNTO CUANTICO DE GaAs/(GA,Al)As EN D=2

Por simplicidad en el cálculo de la integral para el Jacobiano (65) en D=2, se tiene en cuenta que esta tiene dos singularidades en la vecindad de los límites inferior y superior de la integral y se eliminan estas singularidades usando alguna sustitución. Para analizar estas singularidades separadamente la integral interior (65) se representa como:

$$I = \int_{|r_e-r|}^{r_e+r} \frac{|f_{l'}^{(h)}(r_h)|^2}{\sqrt{(r_e+r+r_h)(r_e+r-r_h)(r_h+r_e-r)(r_h-r_e+r)}} r_h dr_h = I_1 + I_2; \quad (123)$$

$$I_1 = \int_{|r_e-r|}^{\sqrt{r_e^2+r^2}} \frac{|f_{l'}^{(h)}(r_h)|^2}{\sqrt{[4r_e^2r^2 - (r_e^2+r^2-r_h^2)^2]}} r_h dr_h; \quad I_2 = \int_{\sqrt{r_e^2+r^2}}^{r_e+r} \frac{|f_{l'}^{(h)}(r_h)|^2}{\sqrt{[4r_e^2r^2 - (r_e^2+r^2-r_h^2)^2]}} r_h dr_h \quad (124)$$

Usando en la primera integral la sustitución $r_h \rightarrow y$ y en la segunda $r_h \rightarrow z$ en concordancia con la siguiente fórmula:

$$r_h^2 = 2r_e r_h y^2 + (r_e - r)^2; \quad r_h^2 = (r_e + r)^2 - 2r_e r_h z^2 - \quad (125)$$

Por sustitución las integrales I_1 y I_2 se reducen a las siguientes formas:

$$I_1 = \int_0^{\sqrt{2r_e r}} \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{y^2 + (r_e - r)^2} \right) \right|^2}{\sqrt{[4r_e r - y^2]}} dy; \quad I_2 = \int_0^{\sqrt{2r_e r}} \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{(r_e + r)^2 - z^2} \right) \right|^2}{\sqrt{[4r_e r - z^2]}} dz \quad (126)$$

Sustituyendo en la primera integral $y \rightarrow x$ y en la segunda $z \rightarrow x$ de acuerdo con las siguientes fórmulas $y = x\sqrt{2r_e r_h}$; $z = x\sqrt{2r_e r_h}$, las integrales se reducen a:

$$I_1 = \int_0^1 \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{x^2 2r_e r + (r_e - r)^2} \right) \right|^2}{\sqrt{2 - x^2}} dx; \quad I_2 = \int_0^1 \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{(r_e + r)^2 - x^2 2r_e r} \right) \right|^2}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (127)$$

Finalmente la integral interior en (24) puede representarse como:

$$I = \int_0^1 \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{x^2 2r_e r + (r_e - r)^2} \right) \right|^2 + \left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{(r_e + r)^2 - x^2 2r_e r} \right) \right|^2}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (128)$$

y la expresión del Jacobiano (65) se simplifica como:

$$J_{ll'}(r) = 2\pi \int_0^\infty \left| f_{l'}^{(e)}(r_e) \right|^2 r_e dr_e \int_0^1 \frac{\left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{x^2 2r_e r + (r_e - r)^2} \right) \right|^2 + \left| f_{l'}^{(h)} \left(\sqrt{(r_e + r)^2 - x^2 2r_e r} \right) \right|^2}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (129)$$

Esta integral ahora no tiene singularidades.

4. JACOBIANO PARA UN EL EXCITON EN UN PUNTO CUANTICO DE GaAs/(GA,Al)As EN D=3

El jacobiano para un punto cuántico en tres dimensiones no presenta la misma dificultad que para D=2 ya que la integral no presenta singularidades. De la ecuación (65) y haciendo D=3 se tiene la expresión general para el jacobiano como sigue:

$$J_0(r) = r \int_0^\infty f_e^2(r_e) dr_e \int_{|r_e - r_h|}^{r_e + r_h} f_h^2(r_h) dr_h \quad (130)$$