

ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS
PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN
HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2008

ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS
PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN
HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID

Tesis de Grado presentada como requisito parcial para optar al título
de
Doctor en Ciencias Naturales (Física)

Director:
Dr. ILIA D. MIKHAILOV

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2008

Dedico el fruto de este esfuerzo
a toda mi familia, y en
particular a mis padres,
Manuel Antonio y Maria
Teresa.

A Chochis, mi gran amor,
alegría en mi tristeza,
apoyo en las dificultades
y amor a cada instante.

AGRADECIMIENTOS

Al hacedor de todas las cosas, a ti Dios que me has sostenido a cada instante.

A la Universidad Nacional de Colombia por haberme otorgado la comisión para realizar estudios de doctorado en la UIS

A la UIS por su apoyo para asistir a los diferentes eventos científicos en los cuales pude participar como expositor.

Al Doctor Ilia Mikhailov, por haber aceptado ser el director de esta tesis, pero muy especialmente por su permanente capacidad para enseñar y formar, no solo desde el punto de vista académico si no también a nivel personal. Por eso te recordaré siempre como lo que eres, un gran maestro!

Al profesor Javier Betancur, por sus consejos, colaboración, pero sobre todo por su amistad.

Al profesor Francisco García que con su incorregible manera de ser me hacia gozar con las cosas que decía y hacía, pero sobretodo con las que le pasaban. También quiero agradecerle su permanente deseo de ayudar sin esperar nada a cambio.

A mis colegas de la Escuela de Física de la Universidad Nacional, sede Medellín, quienes siempre me han alentado en esta etapa de mi vida.

A mis compañeros de posgrado: William, Juan Carlos, Carlos Arnulfo, Javier del Cristo, Janeth, Ligia y Rosita, mi gratitud eterna por aguantar mi mal genio y mi acelere. Esto no fue tarea fácil, son todos unos héroes.

CONTENIDO

	Página
INTRODUCCION.....	20
Sistemas de pocas partículas en bloquesemiconductores.....	20
Complejos móviles o exexcitónicos.....	21
Complejos inmóviles.....	22
Sistemas de pocas partículas en heterojunturas semiconductoras...	22
Puntos cuánticos autoensamblados.....	24
Lista de publicaciones y de eventos.....	32
 1. SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN EL LÍMITE ADIBÁTICO.....	 35
1.1 Dos electrones en anillos cuánticos acoplados verticalmente.....	39
1.2 Dos partículas en anillos cuánticos concéntricos.....	43
1.3 Triones X^- y X^+ en estructuras unidimensionales axialmente simétricas.....	46
1.4 Aproximación adiabática.....	50
1.5 Efecto del tamaño sobre el espectro energético de dos electrones en anillo cuántico.....	53
1.6 Efecto del tamaño sobre el espectro energético de un excitón en un punto cuántico.....	62
 2. EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DEL CAMPO MAGANÉTICO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA D^0 Y DE UN IÓN D^- CONFINADOS EN SAQDs.....	 73

2.1	Modelo.....	75
2.2	Energía del estado base para el electrón libre.....	78
2.3	Energía del estado base para una donadora neutra D^0 y donadora cargada negativamente D^-	82
2.4	Espectro de energía del estado base para una donadora neutra D^0 ..	82
2.5	Espectro de energía del estado base para una donadora cargada negativamente.....	91
3.	DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN PUNTO CUÁNTICO CON EXCITÓN ATRAPADO	101
3.1	Análisis comparativo de la distribución de carga en discos y anillos cuánticos.....	105
3.1.1	Modelo teórico.....	106
3.1.2	Energía de enlace del estado base de un excitón atrapado en discos y anillos.....	110
3.2	Efecto de la morfología sobre la distribución de carga de un excitón en SAQDs.....	121
3.3	Distribución de carga en puntos cuánticos acoplados verticalmente con excitón.....	132
	CONCLUSIONES	138
	REFERENCIAS	141

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1. Representación esquemática de algunos complejos excitónicos en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.....	21
Figura 2. Representación esquemática de algunos complejos inmóviles en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.....	22
Figura 3. Parámetros de red y brechas de energía para algunos materiales binarios.....	25
Figura 4. Representación esquemática del proceso de fabricación de SAQDs mediante la técnica de Stranski-Krastanov. En la figura se muestran las cuatro etapas principales: A) Elección de los materiales base con parámetros de red diferentes, B) deposición de un semiconductor sobre el otro hasta que se forme la capa húmeda, C) formación espontánea de los QDs a causa de los efectos de tensión-relajación y D) recubrimiento del QD con el semiconductor usado como sustrato.....	26
Figura 5. Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes morfologías con simetría axial a) anillo, b) disco, c) lente, d) pirámide cónica y e) pirámide truncada.....	22
Figura 6. Energías totales normalizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en función del radio R de los anillos cuánticos verticalmente acoplados para tres diferentes valores de la razón β entre la distancia y el radio de los anillos: 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete.....	41
Figura 7. Energías totales normalizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en función de la distancia d entre los anillos acoplados verticalmente con dos radios diferentes $R = 1a_0^*$ (curvas superiores) y $R = 5a_0^*$ (curvas inferiores).....	41

- Figura 8.** Energías normlizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del campo magnético γ para dos electrones verticalmente acoplados en anillos uni-dimensionales de radio $R = 1a_0^*$ y separación $d = 0.1a_0^*$42
- Figura 9.** Energías normalizadas $\tilde{E}(0, 0, +)$ y $\tilde{E}(0, 2, -)$ en función del radio, para dos electrones en dos anillos cuánticos coaxiales con diferentes razones β para los radios interior y exterior. Las líneas para $\beta = 1$ corresponden a la referencia [74] y las líneas para $\beta = 0.8$ y $\beta = 0.95$ son los resultados obtenidos en esta tesis.....45
- Figura 10.** Dependencia con el radio R de los estados pares de energía más bajos del par electrón-hueco (lado izquierdo) y del par electrón-electrón (lado derecho) en anillos cuánticos coaxiales con razón $\beta = 0.95$ 46
- Figura 11.** Representación esquemática de dos sistemas uni-dimensionales formados por dos electrones y un hueco (triión X^-) y dos huecos y un electrón (triión X^+).....47
- Figura 12.** Curvas de potencial $V_z(\tilde{z})$ para diferentes separaciones entre anillos.....48
- Figura 13.** Energía normalizada $\tilde{E}(M, m, s, n, p)$ en función del radio de los anillos.....49
- Figura 14.** Energía normalizada $\tilde{E}(M, m, s, n, p)$ en función de la separación entre anillos.....50
- Figura 15.** Geometría para dos electrones confinados en un QR donde el material A es $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ y el material B es $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$. En la parte inferior se puede observar el perfil de la BC de estos dos materiales.....53
- Figura 16.** Niveles de energía para un electrón con número radial $n = 1$ y diferentes valores del número cuántico orbital.....55
- Figura 17.** Funciones de onda para los estados con número radial $n = 1$ y número cuántico orbital entre 1 y 8.....56

- Figura 18.** Energías normalizadas para algunos estados singletes de dos electrones en un QR en función del radio interior R_i , construidas con dos valores diferentes del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d . La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $E(M,m)$60
- Figura 19.** Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función del espesor del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y de la altura. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$ 61
- Figura 20.** Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función de la altura del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y exterior. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$ 62
- Figura 21.** Tipos de puntos cuánticos axialmente simétricos que contienen un par electrón-hueco.....64
- Figura 22.** Formas del potencial de confinamiento y las correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral de un electrón en un QD de forma piramidal, pirámide truncada y disco.....69
- Figura 23.** Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QD para tres valores diferentes de la razón R_i/R_e 70
- Figura 24.** Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QP para tres valores diferentes de la altura: $d_0 = 2nm$, $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$ 71
- Figura 25.** Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el potencial de confinamiento V_0 76
- Figura 26.** Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el nivel de energía para el estado base de un electrón libre en un segundo pozo.....77

- Figura 27.** Curvas del potencial confinamiento normalizado del movimiento electrónico bidimensional en puntos cuánticos de diferente morfología y dos alturas diferentes.....79
- Figura 28.** Distribución de carga electrónica en el plano $\rho-z$ para diferentes QDs obtenidos mediante el uso de la función de onda 2.10.....81
- Figura 29.** Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y $8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....87
- Figura 30.** Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0, 1, 3, 6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....88
- Figura 31.** Energía de enlace para el estado base de una D^0 en función del radio R_c de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.....90
- Figura 32.** Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y $8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....91
- Figura 33.** Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0, 1, 3, 6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.....92
- Figura 34.** Energía de enlace para el estado base de una D^- en función del radio R_0 de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y

la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.....93

Figura 35. Razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ como función de la distancia de la donadora al eje para diferentes alturas del QD (a) y para diferentes intensidades del campo magnético.....94

Figura 36. Razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ como función del radio de la base de QDs en forma de disco, lente y pirámide cónica para dos alturas: $d_0 = 2nm$ (líneas continuas) y $d_0 = 4nm$ (líneas a trazos).....96

Figura 37. Curvas de nivel de la energía de correlación de una D^0 y un ión D^- en un plano a través de el eje de simetría de un QD en forma de lente con radio de la base 25 nm, altura de 4nm, y espesor de la capa húmeda de 2nm, para $\gamma = 0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma = 3$ (figura 2.13c y d).....97

Figura 38. Curvas de contorno de las energías ΔE requeridas para el intercambio de carga entre donadoras localizadas en un plano que pasa a través del eje de simetría, estando las donadoras sobre y fuera del eje del QD. Las curves se hacen sin (a) y con (b) campo magnético. Las partes sombreadas de las figuras indican las posiciones de las donadoras descentradas para las cuales el intercambio de carga con la donadora centrada es de carácter exotérmico.....99

Figura 39. Representación esquemática del estado base de energía, E_z , para una partícula confinada en un QD de altura d_0 . El punto se fabrica a partir de dos materiales $A=InAlAs$ y $B=AlGaAs$101

Figura 40. Representación esquemática en tres dimensiones para un anillo cuántico.....105

Figura 41. Comparación de los resultados de cálculo de la energía obtenidos en esta tesis para el estado base de un excitón en un disco de (a) $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ y (b, c) $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con los resultados teóricos obtenidos previamente (a, b) y experimentalmente (c). Los resultados de esta tesis (líneas sólidas) para la energía de enlace del estado base de un excitón como función del radio

del disco cuántico se compara con (a) los resultados variacionales (diferentes símbolos) y (b) tratamiento 3D (círculos abiertos). Los cálculos de esta tesis (líneas sólidas y a tramos) del desplazamiento diamagnético de la energía del excitón como función del campo magnético externo se compara con los resultados experimentales (cuadrados) en la figura (c).....111

Figura 42. Densidad de probabilidad de encontrar al electrón (línea continua) y al hueco (línea punteada) sobre el plano de simetría, en función de la distancia desde la posición de la partícula al eje del QR, para dos radios exteriores diferentes: $0.7 a_0^*$ (a) y $1.5 a_0^*$ (b). En ambos casos el espesor del QR es de $0.5 a_0^*$. Las líneas verticales representan las posiciones de las junturas del QR.....113

Figura 43. Curvas de nivel para la densidad radial de la distribución de carga en un plano que pasa a través del eje de simetría del disco cuántico (a, b) de radio 5nm y espesor de 5nm y también para un QR (c, d) con radio interior y exterior de 10 y 15nm, respectivamente y espesor de 5nm. Las diferentes nanoestructuras se toman sin WL (a y c) y con WL (b y d). Las líneas sólidas corresponden a la carga positiva y las líneas a tramos son los niveles con densidad de carga negativa.....115

Figura 44. Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en un disco de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ (línea a tramos) y en varios anillos de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con diferentes espesores de capa húmeda (líneas continuas).....117

Figura 45. Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en anillos de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con diferentes radios exteriores, 10, 15 y 25 nm. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del campo magnético. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en la figura principal.....119

Figura 46. Energía de enlace del excitón en un anillo de InAlAs-AlGaAs en función del radio exterior para un espesor fijo del anillo y para diferentes intensidades del campo magnético. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del radio exterior. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en la figura principal.....121

- Figura 47.** Curvas de potencial efectivo para el movimiento del electrón en el plano en puntos cuánticos en forma de disco, lente y pirámide cónica.....124
- Figura 48.** Curvas de contorno de la distribución de carga radial inducida por excitón en un plano que pasa a través del eje de simetría de un QD de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ cuyas formas corresponden a un disco, una lente y una pirámide cónica. Para las tres morfologías se toma un radio de la base igual a 20nm y la altura máxima para los QDs de la izquierda sin capa húmeda es de 3nm. Para los QDs de la derecha la máxima altura por encima de la con húmeda es de 3nm y el espesor de esta capa es de 2nm. Las partes sombreadas de estas figuras indican las regiones que se cargan positivamente dentro del $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$. Las líneas gruesas muestran los perfiles de los QDs.....127
- Figura 49.** Lo mismo que en la figura 3.10, sólo que aquí se tienen dos pirámides cónicas con alturas de 2nm y 5nm, respectivamente.....129
- Figura 50.** Energía de correlación del excitón como función del radio de la base para QDs con diferentes perfiles obtenidos con (3.14) (líneas continuas) y usando principio de incertidumbre (líneas a tramos).....130
- Figura 51.** Energía de correlación del excitón en función del radio del QD de forma piramidal para tres diferentes alturas.....131
- Figura 52.** Representación esquemática de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados verticalmente.....132
- Figura 53.** líneas de nivel para densidad de distribución de carga a lo largo de un plano (x-z) para un sistema formado por dos lentes acopladas verticalmente y dentro de las cuales se confina un excitón bajo la presencia de un campo magnético $\gamma=0$ (figuras de la izquierda a,c) y $\gamma=3$ (figuras de la derecha b,d).....133
- Figura 54.** Energía del estado base de un excitón en lentes cuánticas de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ acopladas verticalmente, como función del radio de la base.....136

Figura 55. Energía del estado base de un excitón en lentes cuánticas de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ acopladas verticalmente como función del campo magnético.....137

LISTA DE TABLAS

		Página
Tabla 1.	Funciones que definen los perfiles para cinco diferentes tipos de SAQDS.....	28
Tabla 2.	Comparación entre la energía exacta $\tilde{E}(M, m, s)$ dos electrones en anillos acoplados verticalmente tomando $\beta = 0.001$ con dos electrones en un sólo anillo según la Referencia [74].....	38
Tabla 3.	Notación usada para los diferentes niveles.....	48
Tabla 4.	Energías de enlace para impurezas D^0 y D^- y su razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ para sistemas en 3D, 2D y cuasi-unidimensionales (modeladas para donadoras en campos magnéticos muy intensos) en materiales en el bloque y los correspondientes valores máximos alcanzados por estas energías en pozos (QW), hilos (QWW) y puntos (SQD) cuánticos esféricos con barrera de potencial de $40 R_y^*$	95

ACRÓNIMOS Y SÍMBOLOS

Con el propósito de hacer más simple el proceso de escritura se han utilizado algunos acrónimos y símbolos los cuales se listan a continuación:

MBE	Técnica de haces moleculares
CVD	Deposición de vapor químico
QW	Pozo cuántico
QD	Punto cuántico
S-K	Stranski-Krastanov
WL	Capa húmeda
SAQD	Punto cuántico auto ensamblado
AA	Aproximación adiabática
SQD	Punto cuántico esférico
QP	Pirámide cuántica
QR	Anillo cuántico
QL	Lente cuántica
SPCF	Función de correlación espacial del par
K_B	Constante de Boltzman
K	Grado Kelvin
T	Temperatura
E_k	Energía cinética
U	Energía potencial
A	Potencial vectorial
B	Campo magnético
V_0	Potencial de confinamiento
V_ρ	Potencial de confinamiento radial
e	Electrón
h	Hueco
m_e^*	Masa efectiva del electrón
m_h^*	Masa efectiva del hueco
γ	Factor de Landau
ϵ	Constante dieléctrica
β	Razón entre dos longitudes
a_0^*	Radio de Bohr efectivo
R_y^*	Rydberg efectivo
D^0	Donadora neutra
D^-	Donadora cargada negativamente
X	Excitón
X^-	Trión negativo
X^+	Trión positivo
D	Dimensión

TÍTULO: ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS FUERTEMENTE CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS*.

AUTOR: JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID**.

PALABRAS CLAVES: Dos electrones, Excitón, Donadoras Neutras y Cargadas Negativamente, Puntos Cuánticos Autoensamblados, Espectro Energético, Aproximación Adiabática, Método de Dimensión Fractal.

RESÚMEN

Se estudia el espectro energético de los sistemas formados por electrones y huecos: par electrón-electrón, electrón-hueco, trión X^- y trión X^+ , así como donadoras neutras D^0 y cargadas negativamente D^- . El análisis se realiza asumiendo partículas fuertemente confinadas en puntos cuánticos autoensamblados de $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con simetría axial: anillos, discos, lentes, pirámides cónicas y truncadas.

Inicialmente se analizan modelos unidimensionales ideales para el electrón-electrón, excitón, triones X^- y X^+ , a fin de obtener características generales de sistemas de pocas partículas y valores límites a los cuales deben tender las energías de sistemas más reales. Los resultados demuestran la existencia de oscilaciones Aharonov-Bohm y de transiciones de Wigner.

Usando la aproximación adiabática y del método de dimensión fractal, se transforman los problemas multidimensionales en problemas de una y dos dimensiones. Estos métodos permiten analizar la incidencia que tienen sobre el espectro de energía factores tales como: la morfología y el tamaño de los puntos cuánticos, posición de las impurezas dentro de los puntos y efecto del campo magnético.

Los resultados demuestran que aun cuando la altura de los puntos sea significativamente menor que la dimensión lateral, no es posible considerar los puntos como películas bi-dimensionales, ya que el espectro de energía depende fuertemente de la altura y la morfología de los puntos, así como del espesor de la capa húmeda.

Con relación a la influencia del campo magnético, se demuestra que éste aumenta la probabilidad de formación de impurezas D^- , mediante la transferencia de un electrón desde una donadora neutra D^0 localizada en la región periférica hacia otra cercana al eje.

* Tesis de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Ilia D. Mikhailov (Director)

TITLE: ENERGY SPECTRUM OF FEW-PARTICLE SYSTEMS STRONGLY CONFINED IN SEMICONDUCTOR HETEJUNCTIONS^{*}.

AUTHOR: JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID^{**}.

KEY WORDS: Two-electrons, Exciton, Neutral, Negatively Charged Donors, Self-assembled Quantum Dots, Energy Spectrum, Adiabatic Aproximation, Fractal Dimension Method.

RESUMÉ

The energy spectrum of systems formed by electrons and holes: electron-electron, electron-hole, trion X^- and trion X^+ as well as neutral donor D^0 and negative charged donor D^- are studied. The analysis is realized by assuming that the particles are strongly confined inside the axially symmetric $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ self-assembled quantum dots with different morphologies: rings, disks, lenses, conical and truncated pyramids.

Initially, ideal exactly solvable models for multiple-particle systems such as: two-electron, exciton, trions X^- and X^+ in one-dimensional spaces are analyzed in order to obtain general features of few-particle systems and energy limit values at which have to tend the energy of most actual systems. The results show the existence of Aharonov-Bohm oscillations and Wigner type transitions.

The multiple dimensional problems are transformed in one-and-two dimensional problems by means of the adiabatic approximation and the fractal dimension method. These methods allow study of the influence on the energy spectrum of the morphology and size quantum dots, impurity position inside the dots, and magnetic field.

Despite of the quantum dot height is significantly less than the lateral dimension; it is not possible to consider the dots as two-dimensional films since the energy spectrum is strongly dependent on the height and morphology of the dots as well as the thickness of the wetting layer

D^- impurities formation are increased by means of the magnetic field as a consequence of electron transfer from the peripheral donor toward another D^0 closed to the axis.

Finally, it is show that the difference between the electron and hole effective masses is responsible of differential tunneling to the barrier region and the formation of the dipolar and cuadrupolar momenta.

* Thesis project

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Ilia D. Mikhailov (Director)

INTRODUCCIÓN

Los sistemas de pocas partículas conforman una parte fundamental del mundo de la física. Su estudio es de mucho interés en el área de semiconductores, ya que la presencia de estos sistemas permiten ejercer un control sobre las propiedades ópticas, tanto en el régimen lineal como no lineal, lo cual constituye la base para la fabricación de diferentes dispositivos opto electrónicos [1].

Una descripción exacta de estos sistemas, requiere incluir los potenciales de interacción entre partículas, haciendo prácticamente inviable una solución directa de la ecuación de Schrödinger. Por esta razón, es necesario acudir a métodos aproximados entre los que se incluyen, el variacional [2-7], diagonalización matricial [8-9], Hartree-Fock [10-12], teoría de funcionales de densidad [13-14], configuración de interacción [15-16] y Monte Carlo Cuántico [17-18].

El estudio teórico de los sistemas de pocas partículas permite clarificar de manera más sencilla el papel que juegan los efectos de correlación y su real incidencia en el espectro energético y en las propiedades de transporte eléctrico. Los métodos elaborados para el estudio de los sistemas de pocas partículas, son importantes debido a que ponen al descubierto ciertas propiedades generales que también son características de los sistemas de muchos cuerpos. Además, estos métodos se pueden utilizar para determinar la validez y el alcance de las técnicas de Funciones de Green [19-20] y Diagramas de Feynman [21-24], las cuales se usan para estudiar las propiedades de los sistemas de muchas partículas.

El interés por los problemas de pocas partículas, recientemente obtuvo un nuevo impulso con el advenimiento de las nanoestructuras semiconductoras, en las cuales los portadores de carga son confinados dentro una región de tamaño comparable con longitudes de ondas de De Broglie. En estas estructuras los sistemas de pocas partículas adquieren unas nuevas propiedades, las cuales pueden ser modificadas fácilmente al variar la geometría o la composición de los materiales. Por esta razón, los métodos teóricos que se utilizan para analizar propiedades de sistemas de pocas partículas en bloque y en nanoestructuras semiconductoras, en general, son diferentes.

SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN BLOQUE SEMICONDUCTORES

El estudio de los sistemas de pocas partículas en semiconductores en el bloque, por ejemplo Ge, GaAs, CdS, etc, se inicia a partir de 1958 cuando Murray A. Lampert [25] estableció las bases teóricas para que se formaran

complejos o agregados multi-particulares con diferentes tipos de portadores de carga. Los resultados mostraron que estos sistemas debían ser muy débilmente ligados e inestables y con tiempos de vida muy cortos ($\tau \approx 10^{-9} s$), lo que sólo permitiría su observación a temperaturas por debajo de los 5°K, pues a temperaturas mayores la energía térmica $K_B T$ supera la energía de ionización del sistema. Además se demostró que la estabilidad de los complejos depende de la razón entre las masas efectivas del electrón y del hueco (m_e^*/m_h^*), siendo más estable cuanto menor sea esta razón.

Según Lampert, los complejos multiparticulares se clasifican en dos grupos: móviles e inmóviles.

COMPLEJOS MÓVILES O EXCITÓNICOS. Estos sistemas están compuestos únicamente por electrones (e) de la banda de conducción y huecos (h) de la banda de valencia. La extrema pequeñez de las masas efectivas de estas partículas cuyos valores son como mínimo de un orden de magnitud menor que la masa del electrón libre, les garantiza una gran movilidad para desplazarse por todo el material.

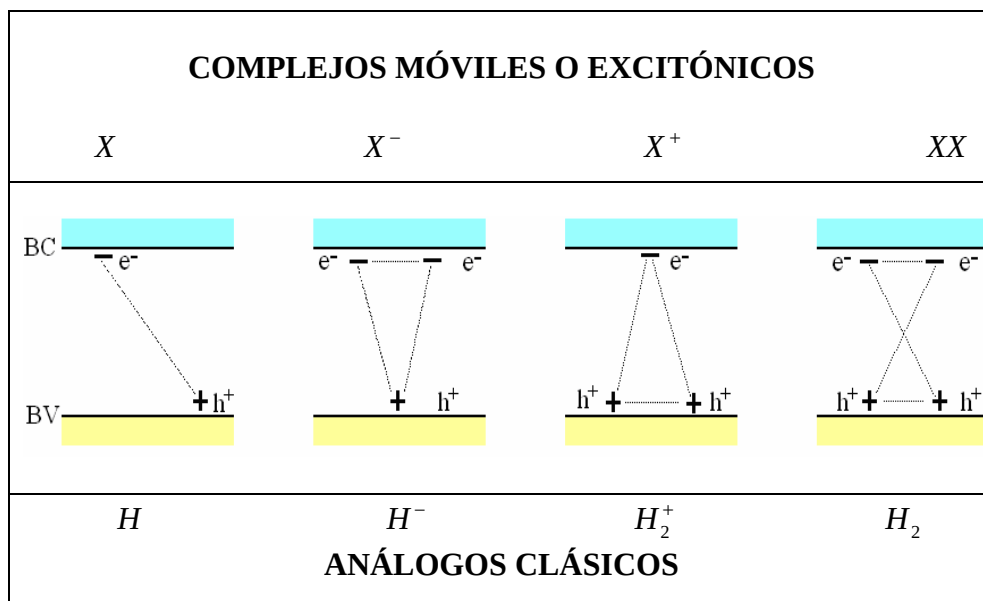


Figura I.1 Representación esquemática de algunos complejos excitónicos en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.

El complejo más simple de este tipo es el excitón (X) el cual está formado por un par e-h. Otros sistemas más complicados se forman cuando un excitón es capaz de ligar o enlazar un electrón o un hueco extra, formándose excitones cargados o ionizados que se conocen con el nombre de triones X^- (eeh) y X^+ (ehh), respectivamente. En caso de que la densidad de excitones sea muy grande se puede aumentar la interacción entre ellos y dar

lugar a la formación de sistemas más complicados como la molécula excitónica o bi- excitón (XX). En la figura I.1 se ha hecho un diagrama que muestra algunos de los complejos móviles que se acaban de describir.

COMPLEJOS INMÓVILES. Estos sistemas están formados por centros localizados en posiciones fijas de la red, los cuales surgen debido a impurezas, tanto donadoras (D) como aceptadoras (A). Como consecuencia de la interacción Coulombiana, estos centros localizados pueden llegar a atrapar electrones, huecos o excitones. Un ejemplo de este tipo de complejos es el ión D^- [26] que es análogo al ión de hidrógeno H^- y el cual se forma cuando una donadora neutra D^0 (ión positivo fijo en la red más un electrón) atrapa un segundo electrón. Otros sistemas se forman a partir de dos centros iónicos positivos que ligan uno o dos electrones formándose así los complejos moleculares conocidos como D_2^+ y D_2^0 [27], respectivamente, cuyos análogos clásicos son las moléculas de hidrógeno H_2^+ y H_2^0 . Finalmente, las donadoras o las aceptadoras podrían capturar un excitón y así formar complejos del tipo D^0X y A^0X , respectivamente. En la figura I.2 se ha hecho una representación esquemática de varios complejos inmóviles formados por donadoras y aceptadoras.

COMPLEJOS INMÓVILES			
D^-	D_2^0	A^-	D^0X
H^-	H_2	H^-	H_2
ANÁLOGOS CLÁSICOS			

Figura I.2 Representación esquemática de algunos complejos inmóviles en materiales semiconductores en el bloque y sus correspondientes análogos clásicos.

SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

En la década de los 60, Haynes [28] logró demostrar la existencia de algunos de éstos agregados multiparticulares en materiales de silicio dopado

con elementos del grupo III y V de la tabla periódica. A partir de estas investigaciones se pudo comprobar que la observación de estos complejos es una labor muy complicada debido a que ellos son meta estables a temperaturas por encima de los 5°K. Esta dificultad se pudo superar años más tarde, gracias a que las nuevas técnicas de crecimiento cristalino, tales como la de haces moleculares (MBE) [29-30] y deposición de vapor químico (CVD) [31], permitieron fabricar pozos cuánticos (QW) de GaAs-GaAlAs. Dentro de estas heteroestructuras se pueden confinar diferentes tipos de complejos, haciendo que su energía de enlace aumente significativamente [32] a consecuencia del incremento en la interacción Coulombiana por efecto del mayor acercamiento entre las partículas. Debido al confinamiento espacial en todas las direcciones en un QD, las partículas quedan más confinadas en estos sistemas que en otros tipos de heteroestructuras, lo que conlleva a tener complejos más estables permitiendo su observación a temperatura ambiente [33].

Los puntos cuánticos también denominados átomos artificiales, debido a que las partículas confinadas en ellos poseen un espectro de energía discreto, se han convertido en verdaderos mini-laboratorios, en los que gracias a la posibilidad de variar el confinamiento de las partículas, se puede esclarecer las características específicas de efectos de correlación e-e y e-h. Entre la gran variedad de temas interesantes que han surgido en el proceso de estudio de las propiedades de los QDs, uno de los que más ha cautivado la atención de la comunidad científica, está relacionado con el hecho de que al variar el tamaño de QD, se produzcan cambios abruptos en las características espectrales de los sistemas de pocas partículas, parecidos a los que se observan en las transiciones de fase en sistemas de muchos cuerpos. En el año de 1934, E. Wigner [34] mostró que en un sistema homogéneo de muchos electrones, al variar la concentración debe observarse una transición de fase debido a que la energía cinética promedio es inversamente proporcional al cuadrado de la longitud característica del sistema r_s ($\langle E_k \rangle \propto 1/r_s^2$, siendo r_s la celda de Wigner-Seitz), mientras la energía promedio de interacción Coulombiana entre partículas es inversamente proporcional a r_s ($\langle U \rangle \propto 1/r_s$). Esto resulta en que el estado base del sistema debe tener un carácter completamente diferente en los límites de densidades bajas (r_s grande) y altas (r_s pequeña) como consecuencia de la fuerte competencia entre los términos de energía cinética y potencial. En el límite de alta densidad electrónica, las partículas tienen gran libertad para moverse debido al predominio de la energía cinética sobre la potencial, de tal manera que al estar las partículas débilmente correlacionadas adquieren una configuración similar a la de un gas de electrones. De otro lado, cuando la densidad electrónica disminuye, ambas energías decrecen, pero la energía potencial se impone sobre la energía cinética, haciendo que los efectos de correlación comiencen a dominar fuertemente la estructura electrónica. Para densidades suficientemente

bajas, caracterizadas por un cierto valor crítico de r_s , la interacción Coulombiana hace que el estado base de los electrones se cambie bruscamente, transformándose de un estado gaseoso a una estructura regular conocida como cristal de Wigner [34].

El aspecto novedoso relacionado con los QDs consiste en la posibilidad de generar transiciones similares en sistemas de pocas partículas desde un estado con un movimiento caótico a otro congelado. Recientemente Bryant [35] demostró que los efectos de correlación entre partículas confinadas en QDs, se pueden modular a través del control del potencial de confinamiento, de tal manera que los aportes realizados por las energías cinética y potencial se pueden variar. Dependiendo de la interrelación entre los aportes de estas energías, las partículas en el estado base pueden formar estructuras moleculares ordenadas, similares a los cristales de Wigner con configuraciones poligonales regulares [36]. La aplicación de fuertes campos magnéticos, perpendiculares a la dirección de crecimiento de los QDs, puede favorecer notoriamente la formación de estados localizados, pues en este caso el campo empuja a los electrones hacia el centro del QD, aumentando aún más su confinamiento, y como consecuencia se incrementa el aporte de la energía potencial. Recientemente se demostró que los campos magnéticos externos posibilitan además la formación de estados de fase conocidas como estructura de vórtices magnéticos [37], los cuales son fases intermedias entre las configuraciones desordenadas de tipo gaseoso y las que se asemejan al cristal de Wigner.

Dado que el interés principal de esta tesis gira en torno del análisis de los sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en puntos cuánticos auto ensamblados (SAQDs) [38-39], consideramos conveniente hacer una descripción sucinta de las principales características de los SAQDs, con el propósito de garantizar un mejor entendimiento de los modelos propuestos y de los resultados obtenidos en esta tesis.

PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS

El progreso alcanzado durante los últimos años en las técnicas de crecimiento cristalino, ha permitido la fabricación de heteroestructuras semiconductoras de tamaño nanométrico conocidos como puntos cuánticos, los cuales se forman a partir de dos semiconductores base que pueden ser binarios o ternarios. Los materiales que se utilicen para este propósito deben satisfacer ciertas condiciones dependiendo del método que se utilice. Por ejemplo, la técnica de crecimiento MBE demanda que los semiconductores tengan parámetros de red muy similares y brechas de energía diferentes, mientras que la técnica de Stranski-Krastanov [38-39], usada para la fabricación de SAQDs, demanda que los semiconductores tengan brechas de energía y parámetros de red diferentes. Con la primera

condición se busca garantizar que el material resultante posea propiedades electrónicas novedosas, mientras que con la segunda se explotan las características naturales de los materiales para generar esfuerzos interfaciales, a fin de que se formen de manera espontánea una serie de islotes con diferentes morfologías y tamaños bien definidos. Para determinar que materiales satisfacen estas condiciones, en la figura I.3 se muestran los valores de los parámetros de red de algunos materiales binarios y sus respectivas brechas de energía.

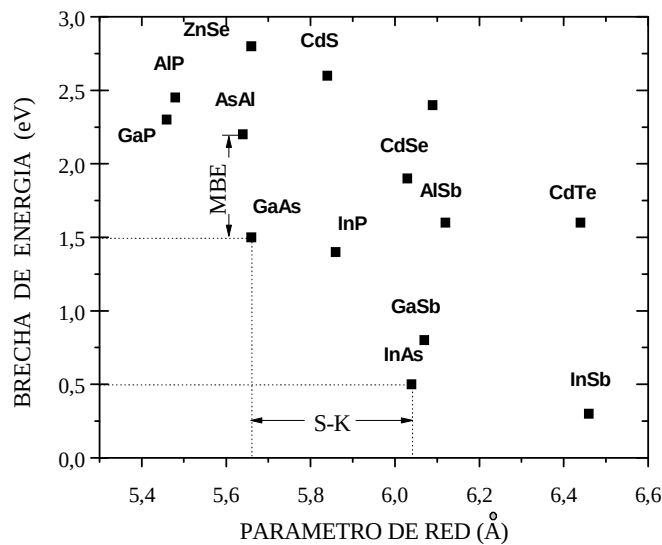


Figura I.3 Parámetros de red y brechas de energía para algunos materiales binarios.

Los materiales más comúnmente usados para fabricar QDs mediante MBE son el GaAs y AlAs por poseer parámetros de red muy similares, pero estos materiales no sirven para fabricar SAQDs mediante S-K. En este caso se utilizan principalmente semiconductores de InAs y GaAs, cuyos parámetros de red difieren en un 7.2%, mientras que las brechas de energía permiten tener potenciales de confinamiento para electrones y huecos del orden de 200 meV . En los QDs formados a partir de GaSb-GaAs [40] y CdSe-InP [41] los potenciales de confinamiento para estas partículas es significativamente menor. En general, estos potenciales son susceptibles de modelar o de definir con antelación y para ello basta con reemplazar un material por otro en proporciones estequiométricas adecuadas, pasando así de un semiconductor binario a otro ternario. El sistema formado por $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ [42] es el ejemplo más representativo y son justamente con estos materiales con que se fabrican los SAQDs que son materia de investigación en esta tesis.

El proceso para fabricar un SAQDs mediante la técnica de S-K, consiste en formar un sustrato con el semiconductor de parámetro de red menor y sobre

este material se hace una deposición epitaxial con átomos del segundo semiconductor. Este proceso se realiza hasta que se forme una franja, conocida como capa húmeda (WL), en la que prevalece un ordenamiento atómico de corto alcance. Una vez la WL alcanza un espesor crítico y dependiendo de la energía superficial del material depositado, las monocapas que se depositen a continuación estarán sometidas a un campo de esfuerzos que conllevan a la ruptura del ordenamiento atómico. Si se prosigue el proceso de deposición, los átomos que lleguen a continuación se organizarán de manera espontánea, formándose pequeños islotes que poseen formas regulares y tamaños bien definidos. El islote será catalogado como QD cuando sus dimensiones sean del orden de las longitudes de onda de las partículas que en ellos se confinen. Una vez se forme el QD se procede a recubrirlo con el mismo material semiconductor que se usó como sustrato. En la figura I.4 se ha hecho una representación esquemática del proceso para fabricar SAQDs usando el método de S-K.

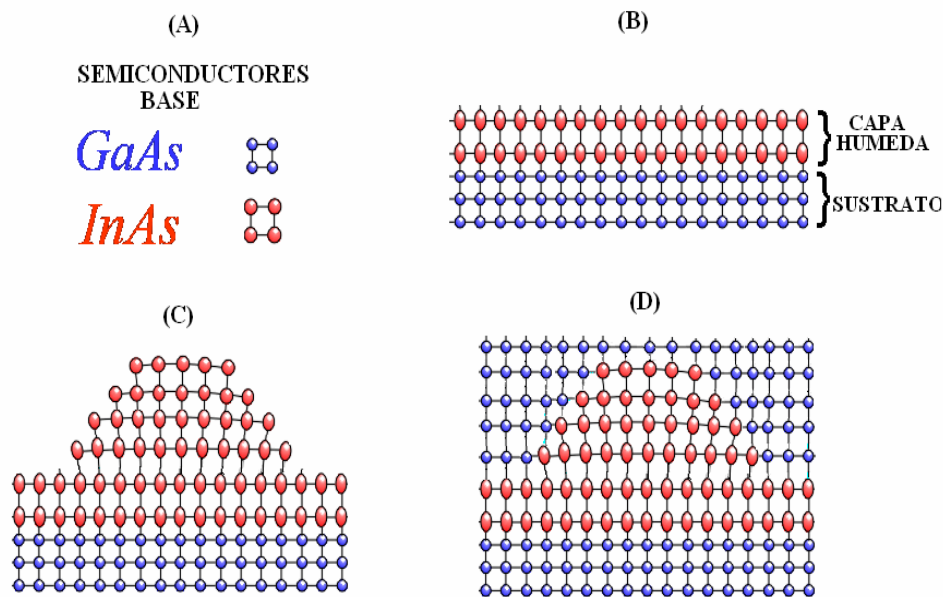


Figura I.4 Representación esquemática del proceso de fabricación de SAQDs mediante la técnica de Stranski-Krastanov. En la figura se muestran las cuatro etapas principales: A) Elección de los materiales base con parámetros de red diferentes, B) deposición de un semiconductor sobre el otro hasta que se forme la capa húmeda, C) formación espontánea de los QDs a causa de los efectos de tensión-relajación y D) recubrimiento del QD con el semiconductor usado como sustrato

El tamaño y forma de los QDs depende principalmente de factores tales como: intensidad de la tensión entre las capas, discontinuidad en las constantes de red, temperatura y velocidad de crecimiento. Bajo ciertas condiciones es posible lograr un control preciso de la geometría de los QDs

y de su posición, al punto tal que ahora se pueden fabricar redes periódicas con puntos cuánticos [43]. Usando técnicas estructurales como: Microscopia de fuerza atómica [44], barrido y tunelamiento [45], reflexión electrónica a altas energías [46] y microscopia electrónica de transmisión [47], se ha podido establecer que los SAQDs tienen diferentes morfologías [48-50], tales como: pirámide cónica, disco, lente, anillo y volcán. Mediante la técnica de S-K también se ha logrado fabricar sistemas formados por dos puntos casi idénticos. Las configuraciones más comunes corresponden al caso de puntos apilados uno encima del otro (acoplamiento vertical) [38] o uno frente al otro (acoplamiento horizontal o lateral) [38]. La importancia de estos sistemas radica en que con ellos se pueden simular moléculas artificiales, donde el complejo molecular más ampliamente estudiado ha sido la molécula de hidrógeno H_2 , la cual se obtiene confinando en cada punto acoplado verticalmente un único electrón [51].

Con el propósito de establecer el efecto de la morfología y del tamaño de los SAQDs sobre el espectro energético de los sistemas de pocas partículas, guiados por los resultados estructurales y por razones de simplicidad matemática, se va asumir que los SAQDs poseen simetría axial, cuyas representaciones esquemáticas se muestran en la figura I.5.

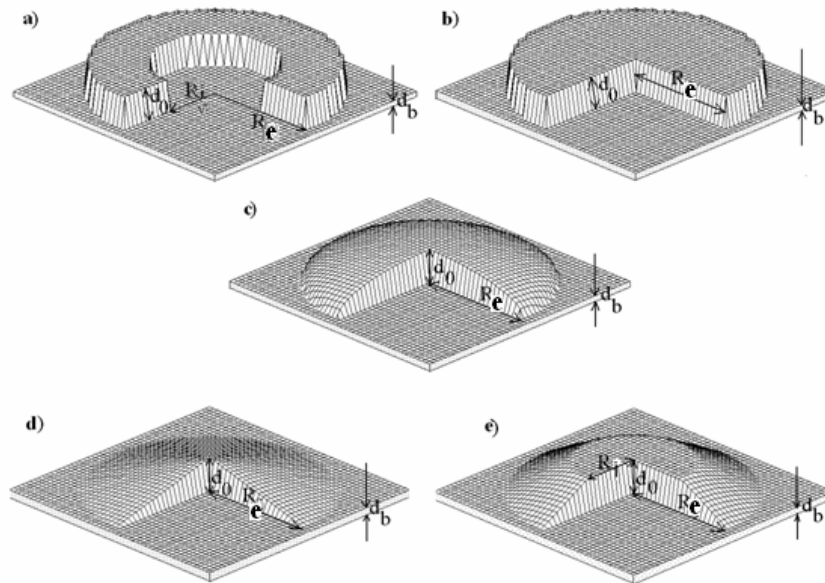


Figura I.5 Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-encontrados de diferentes morfologías con simetría axial a) anillo, b) disco, c) lente, d) pirámide cónica y e) pirámide truncada.

Los factores geométricos que caracterizan estos QD son: El radio de la base R_e , el espesor de la WL d_b y la máxima altura del QD por encima de la WL

d_0 . Para definir el radio interior, en el caso del anillo o el radio de la base superior, en el caso de la pirámide truncada, se usa el radio R_i .

Como el espesor de los puntos es variable, el perfil de las diferentes morfologías que poseen los SAQDs (incluyendo WL) se debe describir mediante una función $d(\rho)$, la cual toma en cuenta la variación de la altura del punto cuántico con la distancia radial ρ al eje de simetría z . Estas funciones son seccionalmente continuas y en esta tesis se toman lineales para todas las estructuras, excepto en el caso de la lente que se toma de forma elíptica. Las expresiones matemáticas para estas funciones se presentan en la tabla I.1

MODELO	FUNCIÓN ESPESOR $d(\rho)$
ANILLO	$d(\rho) = \begin{cases} d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho < R_i \cup \rho > R_e \end{cases}$
DISCO	$d(\rho) = \begin{cases} d_0 + d_b, & \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases}$
LENTE	$d(\rho) = \begin{cases} d_b + d_0 \sqrt{1 - (\rho/R_e)^2}, & \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases}$
PIRÁMIDE CÓNICA	$d(\rho) = \begin{cases} (1 - \rho/R_e)d_0 + d_b, & \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases}$
PIRÁMIDE TRUNCADA	$\begin{cases} d_0 + d_b, & \rho < R_i \\ [(R_e - \rho)/(R_e - R_i)]d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases}$

Tabla I.1 Funciones que definen los perfiles para cinco diferentes tipos de SAQDS

El potencial de confinamiento, debido a la discontinuidad en el perfil de la banda de conducción de los materiales que conforman el QD, está dado por la siguiente función continua a tramos:

$$V_i(\rho, z) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < z < d(\rho) \\ V_{0i}, & \text{si } z < 0 \cup z > d(\rho) \end{cases}, i = e, h \quad (I.1)$$

Aquí y en adelante el índice e corresponde al electrón y el índice h al hueco. Para los SAQDs fabricados a partir de los semiconductores ternarios de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ y $\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$, el valor de V_{0e} es de aproximadamente $40R_y^*$ y $V_{0h} \approx 27R_y^*$.

Mediante las técnicas estructurales mencionadas anteriormente, también se ha logrado determinar que los SAQDs, debido a su crecimiento epitaxial, se caracterizan por tener una geometría casi plana. Esta afirmación está respaldada por las dimensiones que se han encontrado experimentalmente para estos QDs [50], donde el espesor de la WL es alrededor de 2nm, las alturas máximas del punto por encima de la WL oscilan entre 2 y 4nm, mientras que los tamaños laterales son mucho más grandes y alcanzan los 70nm. Esto significa que la partícula se mueve más rápido en la dirección perpendicular a la base, ya que la función de onda de la partícula dentro del QD en esta dirección llega a ser menos extendida. Debido a esta fuerte restricción en el movimiento de las partículas en dirección vertical, varios autores [52-55] han considerado natural modelar los SAQDs como si fueran películas bidimensionales, cuyo potencial de confinamiento en dirección radial varía en forma parabólica [56-62]. La ventaja de usar el potencial armónico consiste en la simplicidad matemática que ofrece este modelo para analizar sistemas de dos partículas [6-7, 62], ya que en este caso se pueden desacoplar las coordenadas de centro de masa y relativas. Sin embargo, la aplicabilidad de este modelo sólo está garantizado cuando el espaciamiento entre los niveles electrónicos sea mucho menor que la discontinuidad de la banda de conducción en las juntas. A juicio de varios autores, los potenciales rectangular [5,63] y de carga imagen [64-65] son mucho más realistas que el potencial armónico. Además, existen potenciales todavía mucho más versátiles que asumen una forma suave en las juntas. Ejemplos de este tipo de potenciales son el de Wood-Saxon [66] y exponentes de potencias [67], los cuales se usaron para tener en cuenta el desplazamiento de la banda de conducción en una determinada dirección o el carácter no tan abrupto de las interfaces debido a la posible difusión de materiales entre ellas [66].

Las condiciones impuestas por el potencial de confinamiento real, hacen que la descripción teórica de los sistemas de pocas partículas confinadas en QDs resulte ser una tarea realmente difícil, debido a que la ecuación de autovalores debe resolverse en un espacio no homogéneo y anisotrópico. Para resolver este problema se han utilizado diferentes métodos aproximados, siendo los más ampliamente usados el variacional [5-7], el de diagonalización matricial [8,9], expansión por series [68-69], teoría de perturbaciones [70], elementos y diferencias finitas [57,71], soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales [66]. Todas estas técnicas resultan ser bastante complicadas a la hora de analizar el espectro de energía de los

diferentes sistemas, debido a que el esfuerzo computacional crece exponencialmente con el número de partículas.

Adicionalmente existe otra complicación asociada con la suposición de que los SAQDs se pueden modelar como sistemas bidimensionales. En nuestro concepto, esta suposición entraña una contradicción interna, ya que un espesor muy pequeño está asociado con un pozo de potencial muy angosto, lo que obligatoriamente dará lugar a un fuerte desbordamiento de la función de onda de los portadores de carga en dirección transversal. De esta manera, si el espesor es demasiado pequeño las partículas se desbordan fuera del espesor y por lo tanto, no pueden considerarse como bidimensionales, y si el espesor no es muy pequeño, el movimiento de las partículas tampoco puede considerarse como bidimensional. Además, precisamente la variación de la magnitud del espesor, a lo largo de la base, define la distribución de las probabilidades de localización de portadores de carga en SAQDs y los perfiles de potenciales de confinamiento lateral. Por esta razón los modelos bidimensionales desprecian una información muy importante relacionada con los efectos de morfología de SAQDs.

En esta tesis se mostrará que una de las maneras de superar estas dificultades es sacando provecho de las características experimentales de los SAQDs que garantizan espesores mucho menores que sus tamaños laterales. Esta condición permite utilizar la aproximación adiabática (AA) [58,62-63,72-77], lo que tendrá un doble beneficio. Por un lado, la AA permite separar los problemas tridimensionales en otros similares en espacios de una y dos dimensiones con Hamiltonianos renormalizados, los cuales se pueden resolver usando las técnicas de dimensión fractal [78-79] y de barrido trigonométrico [80]. Estas técnicas han sido desarrolladas anteriormente por el grupo de física teórica en materia condensada de la Universidad Industrial de Santander (UIS). Por el otro lado, AA permite tener en cuenta la manera como influyen el tamaño y la morfología de los SAQDs sobre el espectro de energía de los sistema de pocas partículas, los cuales han sido ignorados en muchas investigaciones [51-55].

Un ejemplo ilustrativo de la aplicación exitosa de la AA se presenta en el trabajo de Korkusinski y Hawrylak [81]. Ellos consideraron un problema uniparticular en puntos cuánticos acoplados verticalmente, con el propósito de estudiar la influencia sobre el espectro energético de los factores geométricos de la estructura, de los esfuerzos que se generan entre las capas y del campo magnético. Los resultados conseguidos mediante la AA, están en muy buen acuerdo con los obtenidos por el método de diagonalización exacta [82]. Partoens [76] y Peeters [62] también usaron la AA para estudiar el caso de dos electrones en un solo disco y en dos discos acoplados verticalmente con barrera infinita de potencial entre las capas. Los resultados obtenidos permiten establecer propiedades muy interesantes, tales como la existencia de oscilaciones entre estados con espín singlete y

triplete, la inversión en el ordenamiento de los niveles de energía bajo acción del campo magnético, y la existencia de transiciones de fase de segundo orden.

En general, la AA puede utilizarse como técnica principal para analizar las propiedades de átomos y moléculas artificiales fabricados a partir de SAQDs. Cabe señalar que si bien es posible obtener átomos y moléculas artificiales mediante SAQDs, estos tienen características diferentes de sus análogos de la física atómica y nuclear. En el caso de SAQDs, los electrones están confinados en un volumen mucho mayor que el ocupado por los electrones en un átomo real, lo que conlleva a tener distancias entre partículas muy grandes, haciendo que los efectos de correlación sean predominantes. Otra diferencia entre átomos reales y SAQDs está en la forma de potencial. En los átomos reales la fuerte interacción de Coulomb limita el movimiento electrónico a un pequeño volumen en la vecindad del núcleo, mientras que en los SAQDs el potencial no es central si no que corresponde a una trampa definida por las dimensiones físicas de los semiconductores base y por la discontinuidad de los perfiles de las bandas de conducción y de valencia. La existencia de estos semiconductores base es responsable de la aparición de nuevos efectos relacionados con la anisotropía del medio. Estas diferencias entre átomos naturales y artificiales hacen que los modelos desarrollados en la física atómica y molecular para estudiar el espectro energético de los sistemas de pocas partículas, no sean siempre aplicables al estudio de los SAQDs. Si a lo anterior se le suma el hecho de que el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en QDs, es muy sensible a la variación de la morfología y el tamaño del QD, así como a la presencia de campos externos, entonces se hace absolutamente indispensable desarrollar nuevos métodos teóricos que sean confiables y versátiles, a fin de tener en cuenta los rasgos específicos que caracterizan los SAQDs. Esta es justamente una de las razones que motivaron la realización de esta tesis, pues si bien existe un gran volumen de trabajos teóricos y experimentales sobre SAQDs, son realmente muy pocos los que analizan la manera como influyen el tamaño del espesor y la morfología sobre el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en QDs.

En esta tesis se analiza el espectro de energía de los sistemas de pocas partículas formados por: dos electrones, un excitón, triones del tipo X^+ y X^- , donadoras neutras D^0 y cargadas negativamente D^- . El estudio se llevará a cabo usando la aproximación adiabática en el marco del método de dimensión fractal y las ecuaciones fundamentales se resuelven usando la técnica de barrido trigonométrico. Todos los programas computacionales requeridos para analizar el espectro energético y las distribuciones de carga de los diferentes sistemas de pocas partículas, se han realizado en lenguaje Fortran.

Este trabajo de tesis está formado por tres capítulos cuyos contenidos se describen a continuación. El primero consta de dos partes fundamentales. En la primera mitad se estudian modelos de pocas partículas exactamente solubles en espacios unidimensionales. En la segunda mitad se hace una descripción de la forma como se ha implementado el modelo de aproximación adiabática, de tal manera que permita separar los movimientos rápido y lento de las partículas dentro de los SAQDs. También se hace una descripción del modelo de dimensión fractal y se calcula el espectro de energía de dos electrones y un excitón en el límite adiabático ($m_e^*/m_h^* \rightarrow 0$). Los resultados se obtienen considerando la influencia del tamaño y la morfología de los SAQDs.

En el segundo capítulo se calcula la energía de enlace para las impurezas neutras D^0 y cargadas negativamente D^- confinadas en SAQDs. El estudio se efectúa tomando funciones de prueba tripamétrica del tipo de Hylleras [83]. Los resultados permiten determinar el papel que juega el campo magnético en la formación del ión D^- y la incidencia que tienen la posición de la impureza, el tamaño y la forma del QD sobre el espectro de energía.

En el último capítulo se calcula la distribución de carga para un excitón confinado tanto en sólo QD como en dos QDs acoplados verticalmente. Se demuestra que la diferencia de masas efectivas de electrones y huecos dan lugar a la formación de momentos cuadrupolares, cuyos valores son mayores en QDs con geometrías más puntiagudas. Adicionalmente, se demuestra que la capa húmeda tiene una gran incidencia tanto en el espectro de energía del excitón como en la distribución de carga y la magnitud del momento cuadrupolar.

LISTA DE PUBLICACIONES Y DE EVENTOS

Esta tesis es el producto del esfuerzo de un trabajo investigativo de más de casi cuatro años y cuyos principales resultados han sido presentados en varias revistas y congresos de carácter nacional e internacional. La lista de los trabajos publicados que a continuación se describen, está hecha en orden cronológico, pero este orden no es el mismo en que se han expuesto los temas desarrollados en cada uno de los capítulos.

1. F. García, F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, W. Gutiérrez, R. Robayo, and **J. H. Marín**, *Negatively Charged Donor and Trion in Quantum Disks*, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3626(2005) [84]
2. F. García, **J. H. Marín**, H. Paredes-Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, *Low-Lying States of Two-Electron Quasi-One-Dimensional Ring*, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3630(2005)[85]

3. I. D. Mikhailov, **J. H. Marín**, and F. García, *Off-Axis Donors in Quasi-Two-Dimensional Quantum Dots with Cylindrical Symmetry*, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 1636(2005) [86]
4. **J. H. Marín**, F. J. Betancur, and I. D. Mikhailov, *Effect of Magnetic Field on the Formation of D^- ions in Lens-Shape Quantum Dots*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 1005(2005)[87]
5. **J. H. Marín**, F. García, and F. J. Betancur, *Electron-Hole Pair in Quantum Pyramid*, Rev. Col. de Fís. **37**, 94 (2005)[88]
6. W. Gutiérrez, **J. H. Marín**, F. García, and I. D. Mikhailov, *Negatively Charged Donor and Trion in Quantum Ring*, Rev. Col. de Fís. **37**, 150 (2005)[89]
7. L. F. García, **J. H. Marín**, and I. D. Mikhailov, *Negatively Charged Donor in Flat Quantum Dot*, Braz. Jour. of Phys. **36**, 878(2006)[90]
8. **J. H. Marín**, L. F. García,, and I. D. Mikhailov, *Two Electrons in Vertically Coupled One-Dimensional Rings*, Braz. Jour. of Phys. **36**, 940 (2006)[91]
9. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Effect of the Wetting Layer on Electron-Hole Correlation in Quantum Discs and Rings*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 9493 (2006)[92]
10. L. F. García, I. D. Mikhailov, and **J. H. Marín**, *Spectrum of two Spatially Separated Particles in Coaxial Nanoring*, Rev. Col. de Fís. **38**, 1078 (2006)[93]
11. **J. H. Marín**, I. D. Mikhailov, and L. F. García, *Charge Distribution in Quantum Dot with Trapped Exciton*, Physica B Condensed Matter, **398**, 135(2007)[94]
12. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, **J. H. Marín**, and Y. Orlik, *Charging Quantum Dots by Captured Exciton*, Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures, Proceedings of the International Conference Nano-Meeting 2007, pág. 125 (2007)[95]
13. C. A. Gómez, L. F. García, W. Gutiérrez and J. H. Marín, *D-Energy Spectrum in Toroidal Quantum Ring*, accepted to published in Microelectronics Journal [96]
14. **J. H. Marín**, L. F. García, and J. C. Piña, *Wigner Crystallization of Negatively Charged Exciton in Disconnected One-Dimensional Structure*, Rev. Col. de Fís. **39**, 339 (2007)[97]
14. L. F. García, **J. H. Marín**, and, I. D. Mikhailov, *Exactly Solvable Model for Positively Charged Exciton in an Axially Symmetrical One-Dimensional Structure*, Rev. Col. de Fís. **39**, 535 (2007)[98]
15. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Effect of the Wetting Layer on Electron-Hole Correlation in Quantum Discs and Rings*, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 9493 (2006)[99]
16. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Two-Electron Quantum Dot With Soft-Edge Barrier*, Physica E **40**, 805(2008)[100]
17. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, *Vertically Coupled Quantum Dots Charged by Exciton*, Microelectronics Journal **39**, 378(2008) [101]

Los eventos en los cuales se han presentado trabajos es la siguiente:

1. VI Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada (VI ENFMC), Universidad de Antioquia, Medellín-Colombia, octubre 27-29 de 2004.
2. XVII Latin American Symposium on Solid State Physics (XVII SLAFES), La Habana-Cuba, diciembre 6-9 de 2004
3. XXI Congreso Nacional de Física, Universidad del Atlántico, Barranquilla-Colombia, octubre 24-28 de 2005
4. XII Latin American Congress of Surface Science and Its Applications (XII CLACSA), Rio de Janeiro-Brazil, diciembre 5-9 de 2005
5. VII Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada (VII ENFMC), Universidad de Pedagógica y Tecnológica, Tunja-Colombia, octubre 23-27 de 2006
6. International Conference Nano-Meeting 2007, Minsk-Belaurus, mayo 22-25 de 2007
7. VI International Conference on Low Dimensional Structures and Its Applications (VI LDSD), San Andrés Colombia, abril 15-20 de 2007
8. XIII Latin American Congress of Surface Science and Its Applications (XII CLACSA), Santa Marta-Colombia, diciembre 3-7 (2007)

1. SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN EL LÍMITE ADIBÁTICO

Los sistemas de pocas partículas más simples que se pueden obtener en nanoestructuras semiconductoras están compuesto por dos electrones, un par electrón-hueco (excitón X^-), un electrón y un par de huecos (triión X^{2+}) o un hueco con un par de electrones (triión X^+). El conocimiento del espectro energético de estos sistemas confinados en un QD, determinada por la interrelación entre el confinamiento estructural y la interacción Coulombiana, permite clarificar características esenciales relacionadas con los efectos de correlación de los sistemas de pocos cuerpos [102-103] y a la vez profundizar en el entendimiento de los efectos de confinamiento relacionados con el tamaño y geometría de las nanoestructuras. Este conocimiento también constituye un paso clave hacia el control de los dispositivos de pocas partículas [104-105]. Por estas razones, en las últimas dos décadas se han realizado muchas investigaciones sobre dos y tres partículas en QDs [8,62,71,73,100,106], las cuales buscan desarrollar métodos confiables para calcular su estructura electrónica, ya que ésta define las propiedades físicas de los QDs y sus potenciales aplicaciones.

Una de las técnicas que se ha usado para analizar el espectro de un conjunto de pocas partículas en las heterojunturas de baja dimensionalidad es la AA. Para explicar la idea principal de este método consideremos el Hamiltoniano de dos partículas con cargas $\tau_1 e$ y $\tau_2 e$ en presencia de un campo magnético uniforme y paralelo a la dirección de crecimiento del QD:

$$\begin{aligned}
 H &= H_1(\mathbf{r}_1) + H_2(\mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2); \\
 H_j(\mathbf{r}_j) &= \frac{1}{2m_j^*} \left(\mathbf{p}_j - \frac{\tau_j e \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)}{c} \right)^2 + V_j(\mathbf{r}_j); \quad j=1,2 \\
 U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \frac{\tau_1 \tau_2 e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde m_j^* y ϵ son la masa efectiva de la j -partícula y la constante dieléctrica del medio respectivamente. Con el propósito de tener en cuenta dos tipos diferentes de partículas, se ha introducido un parámetro artificial τ_j , el cual es igual a +1 para un hueco y -1 para un electrón. $V_j(\mathbf{r}_j)$ es el potencial de confinamiento y $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)$ es el potencial vectorial de la j -ésima partícula cuya posición está definida por el vector $\mathbf{r}_j$. En el desarrollo de esta tesis, se considerará el caso cuando el campo magnético es homogéneo y

está aplicado a lo largo de eje z , lo que permite escoger $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_j$ y escribir el Hamiltoniano (1.1) en coordenadas cilíndricas como:

$$H = \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \nabla_j^2 + \frac{e^2 B^2 \rho_j^2}{8m_j^* c^2} + \frac{\tau_j i \hbar e B}{2m_j^* c} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + V_j(\mathbf{r}_j) \right) + \frac{\tau_1 \tau_2 e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (1.2)$$

Para simplificar los cálculos y análisis futuros, se usa el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \varepsilon \hbar^2 / \tilde{m} e^2$, el Rydberg efectivo $R_y^* = \hbar^2 / 2 \tilde{m} a_0^{*2}$ y el primer nivel de Landau expresado en R_y^* , $\gamma = e \hbar B / 2 \tilde{m} c R_y^*$ como unidades de longitud, energía e intensidad del campo magnético adimensionales. El valor que tome la masa $\tilde{m}$ depende del sistema que se analice. Por ejemplo, si se tienen dos partículas idénticas, $\tilde{m} = m_1^* = m_2^*$, pero si las partículas tienen masas diferentes, $\tilde{m} = \mu = m_1^* m_2^* / (m_1^* + m_2^*)$. En estas unidades el Hamiltoniano (1.2) es:

$$H = \sum_{j=1}^2 \eta_j \left(-\nabla_j^2 + i \tau_j \gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{\gamma^2}{4} \rho_j^2 + V_j(\mathbf{r}_j) \right) + \frac{2 \tau_1 \tau_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}; \quad \eta_j = \tilde{m} / m_j^* \quad (1.3)$$

La presencia simultánea de los términos de interacción Coulombiana y del potencial de confinamiento en (1.3), no permiten separar las variables en la ecuación de onda correspondiente. No obstante, existen al menos dos modelos para los cuales el Hamiltoniano (1.3) se hace separable. Estos corresponden a los casos de dos partículas con las masas iguales confinadas dentro un disco con potencial parabólico [7,62,68-71,107] o en un anillo unidimensional [74]. En ambos casos la posibilidad de encontrar las soluciones exactas de la ecuación de onda está relacionada con el uso de las coordenadas relativas y de centro de masa. En el primer caso, se utiliza la posibilidad de transformar una suma de dos potenciales parabólicos $V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2)$ en otra suma de dos potenciales, uno para el movimiento de centro de masa y otro para el movimiento relativo $\tilde{V}_1(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \tilde{V}_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. El caso más simple corresponde al movimiento de dos partículas a lo largo de un anillo homogéneo y unidimensional, donde el potencial de confinamiento se considera como una constante ($V_1(\mathbf{r}_1) = V_2(\mathbf{r}_2) = 0$). Recientemente Zhu, Dai, y Hu [74] demostraron que el problema de dos electrones en un QR unidimensional (1D) de radio R e inmerso en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B \mathbf{z}$ perpendicular plano del anillo, resulta ser exactamente soluble.

Para evitar singularidades, debido a que la energía cinética del sistema en límite $R \rightarrow 0$ es proporcional a $1/R^2$, es conveniente usar un Hamiltoniano renormalizado $\tilde{H} = R^2 H$, que de acuerdo con (1.3) puede escribirse como:

$$\tilde{H} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} - i\gamma R^2 \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \right] + \frac{\gamma^2 R^4}{2} + U\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) \quad (1.4)$$

con

$$U(\varphi_1 - \varphi_2) = 2R \left/ \left| \sin\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) \right| \right. \quad (1.5)$$

Los autovalores del Hamiltoniano (1.4) correspondientes a la energía bi-electrónica normalizada, $\tilde{E} = ER^2$ se pueden encontrar exactamente usando coordenadas relativas $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ y de centro de masa $\theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$. En estas coordenadas el Hamiltoniano (1.4) se hace separable:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_c + \tilde{H}_r + \gamma^2 R^4 / 2; \quad \tilde{H}_c = -0.5 \frac{d^2}{d\theta^2} - i\gamma R^2 \frac{d}{d\theta}; \quad \tilde{H}_r = -2 \frac{d^2}{d\varphi^2} + U(\varphi) \quad (1.6)$$

y la energía normalizada se hace igual a $\tilde{E} = \tilde{E}_c + \tilde{E}_r$, siendo $\tilde{E}_c$ y $\tilde{E}_r$ los autovalores $\tilde{H}_c$ y $\tilde{H}_r$, respectivamente. Mediante el uso de una función de onda de la forma: $\Psi = e^{iM\theta} f(\varphi)$, se puede determinar los autovalores de $\tilde{H}_c$, los cuales están dados por:

$\tilde{E}_c(M) = 0.5M^2 + \gamma MR^2$ donde $M = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ es el momentum angular del centro de masa, en tanto que los autovalores del operador $\tilde{H}_r$ se obtienen solucionando la ecuación

$$-2 \frac{d^2 f_{ms}(\varphi)}{d\varphi^2} + U(\varphi) f_{ms}(\varphi) = \tilde{E}_r(m, s) f_{ms}(\varphi) \quad (1.7)$$

en la región $[-2\pi, 2\pi]$, con condiciones de frontera periódicas $f_{ms}(0) = (-1)^m f_{ms}(2\pi)$ y mediante la expansión en series de potencias del potencial $U(\varphi)$. Los números cuánticos $m = 0, \pm 1, \pm 2$ y $s = (\pm)$ definen el movimiento angular relativo del par e-e y la paridad s de la correspondiente autofunción, donde las soluciones pares ($s = +$) corresponden a los estados singlete y las soluciones impares ($s = -$) corresponden a los estados triplete. El espectro electrónico del sistema estará dado por las energías $\tilde{E}(M, m, s)$ siendo M, m, s los tres números cuánticos con que se etiqueta esta energía

Los resultados obtenidos a partir de este modelo simplificado demuestran la existencia del efecto Aharanov-Bohm [108], el cual está asociado con la oscilación de la energía del estado base del sistema conforme la intensidad del campo magnético aumenta. Adicionalmente se puede establecer la existencia de una fuerte competencia entre la energía cinética y la potencial en dependencia del tamaño del QR. Por ejemplo, si el radio es pequeño prima la energía cinética sobre la potencial y el sistema tiene un comportamiento semejante al de un gas. Pero al aumentar el radio, la energía potencial se impone sobre la cinética, obligando lentamente a los electrones localizarse con mayor probabilidad en lados opuestos del anillo. En el caso límite de fuerte correlación, los electrones adquieren una configuración muy similar a un rotor rígido conocida como cristalización de Wigner [34].

Ambos modelos, tanto el del disco con potencial parabólico, como el del anillo 1D, sirven como punto de partida en el análisis de propiedades fundamentales de los QDs, en relación con el efecto que tienen su tamaño y la interacción Coulombiana sobre el espectro energético. Sin embargo, cada uno de estos modelos tiene sus propias limitaciones. Por ejemplo, el modelo de anillo 1D no es lo suficientemente flexible como para permitir un gran acercamiento entre los electrones ni para permitir el análisis de partículas con diferente tipo de carga, pues esto haría que el sistema colapse. En ambos modelos se supone que el potencial de confinamiento tiene una barrera infinita que no permite el desbordamiento de las partículas fuera del pozo, lo que impide el estudio de los fenómenos de tunelamiento. Por otro lado, es evidente que en el límite cuando el grosor del disco o del anillo tiende a cero, la separación entre los niveles energéticos se incrementa y puede llegar a tener valores comparables con la brecha de energía entre las bandas de conducción de los materiales que conforman la heteroestructura. Esto implicaría que el modelo de barrera infinita resulta ser inapropiado y en su lugar se debería usar un modelo con barrera finita [9] u otro con barrera suave [100,109-110]. Por esta razón, nosotros consideramos importante desarrollar una técnica que permita encontrar la solución correspondiente para los modelos con grosores angostos pero finitos a partir de los modelos exactamente solubles, considerándolos como un límite adiabático. Además, nosotros observamos que este modelo se puede ampliar, de tal manera que permita analizar diversos sistemas compuestos por dos anillos de tamaño diferente, tanto concéntricos como acoplados verticalmente, los cuales albergan cargas de igual o de diferente signo. La ventaja fundamental de esta generalización es que se preserva el carácter de modelo exactamente soluble. La extensión de los modelos exactos y la utilización de ellos como punto de partida para la aproximación adiabática, constituye el contenido del presente capítulo.

1.1 DOS ELECTRONES EN ANILLOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE

Los puntos cuánticos de InAs apilados verticalmente y fabricados recientemente [111-112], ofrecen mayores oportunidades para mejorar el rendimiento de los dispositivos ópticos en comparación con un punto cuántico solitario, debido al acoplamiento entre QDs. En este contexto, nosotros consideramos relevante buscar modelos exactamente solubles para explorar la nueva física relacionada con los QDs acoplados, de tal manera que nos permitan comprender los efectos que tienen el acoplamiento sobre el espectro energético de dos partículas.

En esta sección, se considerará un modelo simple formado por dos anillos 1D idénticos de radio R , verticalmente acoplados y coaxiales, los cuales contienen cada uno un único electrón y se hallan inmersos en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$. Si el cociente entre la separación entre anillos d y el radio R tiende a cero ($\beta = d/R \rightarrow 0$), es decir, cuando los anillos se fusionen en un uno solo, los resultados de cálculos para este modelo se pueden comparar con los de la Referencia [74] que han sido obtenidos anteriormente para un sólo anillo. Nótese que los Hamiltonianos correspondientes a estos dos problemas, sólo se diferencian en el término que describe la interacción Coulombiana, que en nuestro caso toma la siguiente forma:

$$U(\varphi_1 - \varphi_2) = 2R \sqrt{4\sin^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) + \beta^2} \quad (1.8)$$

Para obtener los autovalores del problema (1.7) con potencial (1.8) y con las condiciones de fronteras establecidas anteriormente, nosotros hemos utilizado el método de barrido trigonométrico [80]. Cálculos numéricos de la energía bi-electrónica $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del radio R fueron realizados para diferentes valores de β .

En la Tabla 1.1 se comparan nuestros resultados para el caso en que la separación entre anillos es muy pequeña ($\beta = 0.001$) con la energía exacta $\tilde{E}(M, m, s)$ obtenida en la Referencia [74] para dos electrones en un solo anillo. En el análisis de las energías del conjunto de niveles más bajos, se ha usado una notación corta para los diferentes números cuánticos y de espín en un orden creciente: a, b, c, etc. La comparación permite concluir que existe una excelente concordancia entre ambos grupos de resultados, lo que pone de manifiesto la eficacia de método de barrido trigonométrico que se ha implementado.

		$R = 1a_0^*$		$R = 4a_0^*$	
		Resultados Tesis	Referencia [74]	Resultados Tesis	Referencia [74]
a	$\tilde{E}(0,0,0)$	1.72	1.73	5.18	5.18
b	$\tilde{E}(1,1,1)$	2.23	2.23	5.68	5.68
c	$\tilde{E}(0,2,1)$	3.61	3.62	7.92	7.92
d	$\tilde{E}(2,0,0)$	3.72	3.73	7.18	7.18
e	$\tilde{E}(1,1,0)$	4.06	4.12	8.41	8.42
f	$\tilde{E}(2,2,1)$	5.62	5.62	9.92	9.92
g	$\tilde{E}(0,2,0)$	6.22	6.23	11.40	11.40
h	$\tilde{E}(3,1,1)$	6.33	6.38	9.68	9.68
i	$\tilde{E}(1,3,1)$	6.88	6.88	11.90	11.90
j	$\tilde{E}(3,1,0)$	8.06	8.11	12.41	12.41
k	$\tilde{E}(2,2,0)$	8.22	8.38	13.40	13.40
l	$\tilde{E}(0,4,1)$	10.08	10.08	15.71	15.71
m	$\tilde{E}(4,0,0)$	9.72	9.73	13.18	13.18
n	$\tilde{E}(1,3,0)$	10.24	10.57	16.19	16.21
o	$\tilde{E}(3,3,1)$	10.88	10.88	15.90	15.90
p	$\tilde{E}(4,2,1)$	11.62	11.62	15.92	15.92

Tabla 1.1. Comparación entre la energía exacta $\tilde{E}(M, m, s)$ dos electrones en anillos acoplados verticalmente tomando $\beta = 0.001$ con dos electrones en un sólo anillo según la Referencia [74]

En la figura 1.1 se muestra la forma como el conjunto de niveles más bajos de energía cambia con el radio del anillo, a medida que la separación entre éstos crece desde 0.01 hasta 10.

Para entender esta evolución se deben comparar los aportes realizados por las energías cinética y potencial al Hamiltoniano (1.4) y analizar quien gana en la competencia entre ellos. Cuando el radio de los anillos es muy pequeño o la distancia entre ellos es muy grande, la contribución de la energía Coulombiana (la cual es proporcional al radio R e inverso proporcional a la separación β), se hace despreciable y los valores propios del Hamiltoniano (1.4), corresponden a las energías normalizadas de dos rotores rígidos desacoplados con valores dados por la siguiente expresión:

$$\tilde{E}(M, m, s) = 0.5(M^2 + m^2) \quad (1.9)$$

En la Figura 1.1 se puede notar como las energías satisfacen esta expresión cuando $R \rightarrow 0$, independiente del valor de β y para ambos estados singlete y triplete.

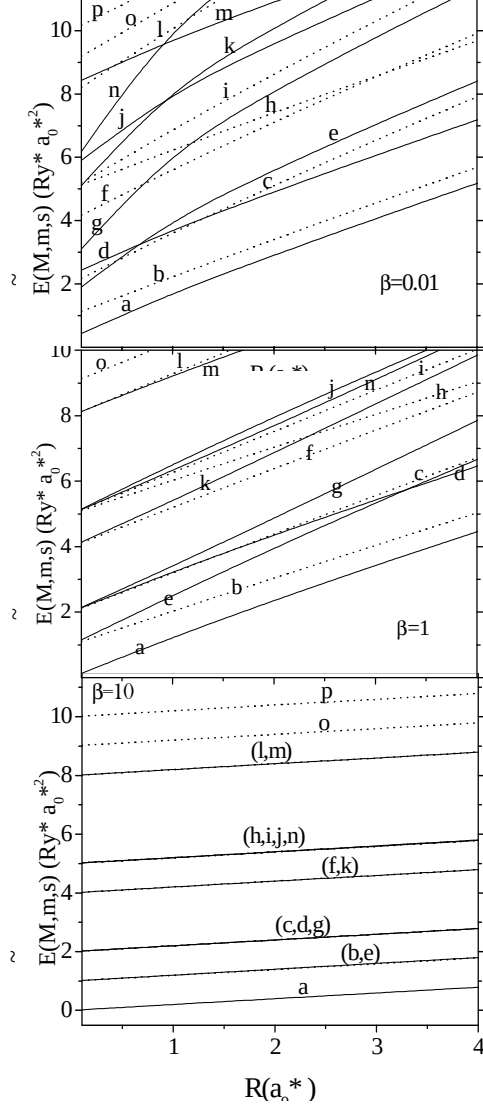


Figura 1.1. Energías totales normalizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en función del radio R de los anillos cuánticos verticalmente acoplados. Las curvas se hacen para tres diferentes valores de la razón β entre la distancia y el radio de los anillos: 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete.

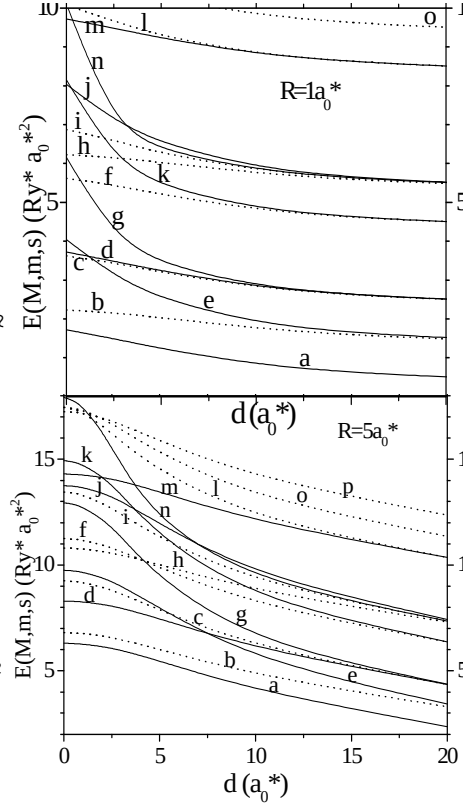


Figura 1.2. Energías totales normalizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en función de la distancia d entre los anillos acoplados verticalmente. Las curvas se hacen para dos radios diferentes $R = 1a_0^*$ (curvas superiores) y $R = 5a_0^*$ (curvas inferiores)

Cuando el radio del anillo se aumenta, la energía Coulombiana crece, y como consecuencia de este aumento de la energía potencial se producen intersecciones entre los niveles más altos. Estas intersecciones decrecen notablemente a medida que razón β aumenta, de tal manera cuando β es muy grande, todas las curvas de energía se vuelven casi horizontales, haciendo que todos los niveles se vuelvan degenerados con respecto a la orientación de los espines.

Dependencias similares para la energía bi-electrónica en función de la separación entre anillos se presenta en la figura 1.2. Se puede observar como el espectro de energía se transforma desde un sistema caracterizado por una fuerte interacción Coulombiana (cuando la distancia entre anillos es pequeña) a otro sistema de rotores rígidos independientes (cuando la distancia entre anillos es grande) cuyas energías están dadas por (1.9). Esta evolución del espectro es responsable de las intersecciones entre las diferentes curvas observadas en la figura 1.2.

En la figura 1.3 se muestra la energía $\tilde{E}(M, m, s)$ con $|M| \leq 2$ en función del campo magnético para los radios $R = 1a_0^*$ y separación entre anillos $d = 0.1a_0^*$. Se puede ver que la existencia del campo magnético origina la división de los niveles de energía cuyo momentum angular M tiene signos diferentes, en un modo tal que cuanto más grande es la intensidad del campo, más significativa es la división inducida por el término paramagnético del Hamiltoniano (1.4).

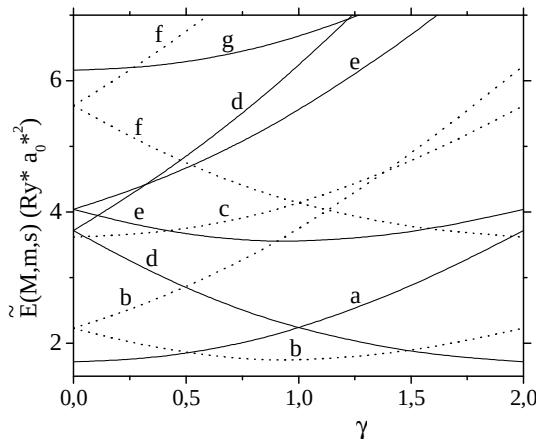


Figura 1.3. Energías normalizadas $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del campo magnético γ para dos electrones verticalmente acoplados en anillos uni-dimensionales de radio $R = 1a_0^*$ y separación $d = 0.1a_0^*$

El comportamiento de estas curvas está controlado por la fuerte competencia entre los términos paramagnético y diamagnético presentes en el Hamiltoniano (1.4). Mientras la dependencia del término paramagnético con el campo es lineal, la del diamagnético es cuadrática. Por lo tanto, cuando el campo magnético es pequeño el término paramagnético es predominante mientras que para grandes campos magnéticos el término diamagnético se hace más significativo. Por esta razón, al inicio todas las

curvas son cuasi-lineales con pendiente positiva para $M \geq 0$ o negativa para $M \leq 0$ y adoptan la forma parabólica para grandes campos magnéticos. Adicionalmente se puede observar que el nivel de energía más bajo exhibe un comportamiento oscilatorio con el campo magnético, cuyo periodo es $\gamma=1.0$. Para campos magnéticos menores que 0.5 el estado básico corresponde al estado singlete $\tilde{E}(0,0,0)$. Cuando la intensidad del campo es mayor que 0.5 el estado base se transforma en el estado triplete $\tilde{E}(-1,1,1)$ y este carácter de estado base lo conserva dentro del intervalo $1 < \gamma < 1.5$, pero a partir de 1.5 el estado base es asumido por el nivel $\tilde{E}(-2,0,0)$. Este comportamiento oscilatorio se mantiene para diferentes valores de los radios de los anillos y separación entre ellos. Es evidente que el número cuántico M del nivel del estado base, sube con el incremento de la intensidad del campo magnético, haciendo que las posiciones de los mínimos en las curvas correspondan a valores $\gamma = M/R^2$ con periodo de oscilación igual a $1/R^2$. Es necesario advertir que las oscilaciones no cambian al modificar el radio, debido a que la interacción Coulombiana entre el par e-e en un anillo 1-D es responsable de los efectos de tamaño cuántico.

1.2 DOS PARTÍCULAS EN ANILLOS CUÁNTICOS CONCÉNTRICOS

Uno estaría tentado a suponer que la solución exacta encontrada para dos electrones en la Referencia [74], también se podría extender al caso de dos partículas de carga diferente con sólo reemplazar la repulsión Coulombiana por la atracción. Pero es bien conocido que cualquier sistema biparticular 1D con atracción de Coulomb resulta ser inestable con respecto a la fusión. Por esta razón, nosotros consideramos un modelo en el cual dos partículas con cargas de signos iguales u opuestos, se localizan en dos anillos concéntricos 1D, de tal manera que siempre queden separados. Aunque la solución exacta se podría obtener para el caso de dos partículas con masas diferentes, acá solo consideramos un modelo simplificado para dos partículas con masas efectivas iguales $m_1^* = m_2^* = m^*$, lo cual a su vez facilitará la comparación de los resultados con los obtenidos en [74]. En este modelo la primera partícula esta localizada en el anillo interno de radio $R_1 = \beta R$ ($0 < \beta \leq 1$) y la otra está dentro del anillo exterior de radio R .

A partir de (1.3) y (1.4), el Hamiltoniano 1D renormalizado para las dos partículas en coordenadas polares, es:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} + 2\tau R / \sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta \sin^2 \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}} ; \tau = \pm 1 \quad (1.10)$$

Signo positivo del parámetro $\tau = \tau_1 \tau_2$ corresponde al caso de dos electrones y el menos al par electrón-hueco. Nótese que cuando en (1.10) la razón β es igual a 1, se obtiene el Hamiltoniano (1.4) para dos electrones en un anillo. Esto nos indica que para obtener los autovalores del operador $\tilde{H}$ se puede seguir el mismo procedimiento descrito en la sección anterior. En este nuevo caso, los términos $\tilde{H}_c$ y $\tilde{H}_r$, en los cuales se separa el operador $\tilde{H}$ están dados por:

$$\tilde{H}_c = -\frac{1}{1+\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}; \quad \tilde{H}_r = -\frac{1+\beta^2}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2\tau R}{\sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta \sin^2 \varphi/2}} \quad (1.11)$$

Los autovalores del operador $\tilde{H}_c$ son iguales a $\tilde{E}_c(M) = M^2 / (1+\beta^2)$, mientras los autovalores $\tilde{E}_r(m, s)$ $\tilde{H}_r$ se pueden encontrar numéricamente resolviendo la ecuación de onda 1D:

$$-\frac{1+\beta^2}{\beta^2} \frac{\partial^2 f_{ms}(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2\tau R}{\sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta \sin^2 \varphi/2}} f_{ms}(\varphi) = \tilde{E}_r(m, s) f_{ms}(\varphi) \quad (1.12)$$

en la región $[0, 2\pi]$ con condiciones de frontera periódicas $f_{ms}(0) = (-1)^m f_{ms}(2\pi)$. Los números cuánticos (M, m, s) tienen el mismo significado físico establecido anteriormente en el estudio del par e-e en un anillo.

Los resultados de nuestro cálculo numérico, obtenidos mediante la técnica de barrido trigonométrico [80] para el estado singlete $(0, 0, +)$ y el estado triplete $(0, 2, -)$ y para dos diferentes valores de β muy cercanos a la unidad: 0.8 y 0.95, se muestran en la figura 1.4. Se puede ver como nuestros resultados consistentemente se acercan al valor reportado en la referencia [74], a medida que el valor de β se tiende a uno.

También se puede ver que las energías de ambos niveles en anillos concéntricos, siempre está por encima de la energía obtenida para un sólo anillo. Esto se debe a que la mayor separación posible de dos electrones en anillos concéntricos, $(1+\beta)R$, siempre es menor que el valor de $2R$ correspondiente al caso de dos electrones en un sólo anillo.

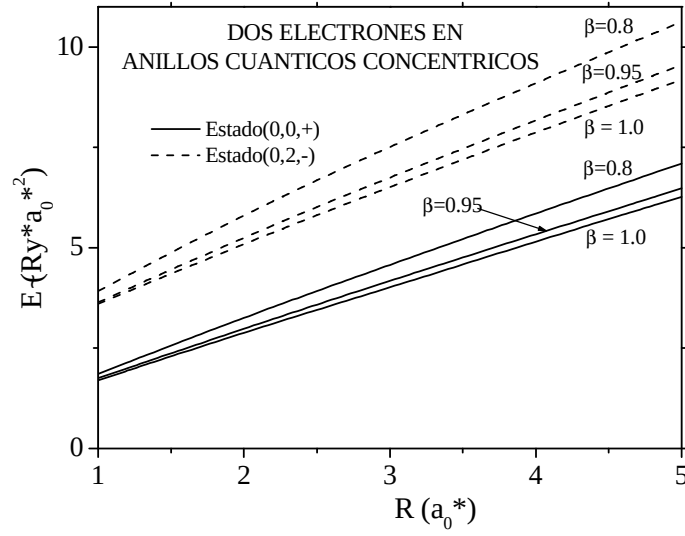


Figura 1. 4. Energías normalizadas $\tilde{E}(0,0,+)$ y $\tilde{E}(0,2,-)$ en función del radio, para dos electrones en dos anillos cuánticos coaxiales con diferentes razones β entre los radios interior y exterior. Las líneas para $\beta=1$ corresponden a la referencia [74] y las líneas para $\beta=0.8$ y $\beta=0.95$ son los resultados obtenidos en esta tesis.

En la figura 1.5 se muestra la variación con el radio R de los niveles de energía correspondientes a los estados singlete más bajos, tanto para el electrón-hueco (parte izquierda) como del para el electrón-electrón (parte derecha), calculados tomando un valor de $\beta=0.95$. Cuando el radio exterior se incrementa desde cero hasta $10 a_0^*$ los efectos de tamaño cuántico modifican el ordenamiento de los niveles produciendo cruces de algunos niveles. En la figura 1.5 se ve que la interacción Coulombiana es importante cuando el confinamiento es pequeño ($R \rightarrow \infty$) donde los niveles forman grupos que son muy diferentes a los grupos típicos para fuerte confinamiento ($R \rightarrow 0$). En el primer caso, el término dominante en el Hamiltoniano (1.10) es el Coulombiano y por lo tanto, los grupos están formados por los niveles con los mismos valores del momentum angular relativo m , mientras en el segundo caso, el término de interacción Coulombiana se hace despreciable y los estados de energía normalizados tienden al valor $M^2/(1+\beta^2) + (1+\beta^2)m^2/\beta^2$.

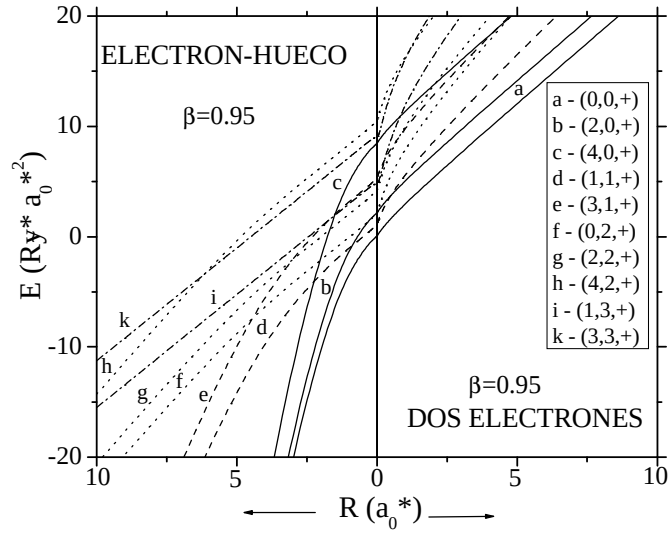


Figura 1.5. Dependencia con el radio R de los estados pares de energía más bajos del par electrón-hueco (lado izquierdo) y del par electrón-electrón (lado derecho) en anillos cuánticos coaxiales con razón $\beta = 0.95$

1.3 TRIONES X^- Y X^+ EN ESTRUCTURAS UNIDIMENSIONALES AXIALMENTE SIMÉTRICAS

Los modelos bi-particulares en anillos cuánticos concéntricos y acoplados verticalmente que hemos estudiado en las últimas dos secciones, se pueden ampliar para incluir una tercera partícula sin que se pierda el carácter de separabilidad del nuevo Hamiltoniano tri-particular. Estos nuevos modelos consisten de dos electrones (o dos huecos) que están rotando dentro de dos anillos coaxiales idénticos y verticalmente acoplados. La tercera partícula es un hueco (o electrón) que se mueve dentro de un hilo muy estrecho dirigido a lo largo del eje común, tal como se muestra esquemáticamente en la figura 1.6.

Dado que desde el punto de vista matemático y computacional el análisis es el mismo para ambos sistemas, nosotros sólo describiremos el caso del trión X^- , sistema compuesto por dos electrones de masas m_e^* y un hueco de masa m_h^* . El análisis del trión X^+ también se realizó y los resultados de este trabajo se encuentran publicados en la referencia [98].

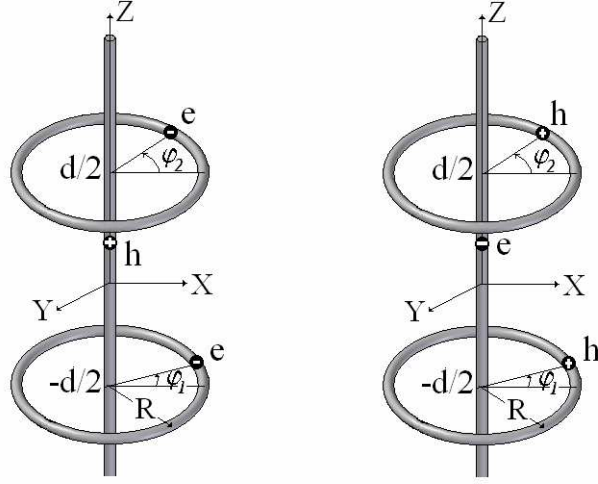


Figura 1.6 Representación esquemática de dos sistemas uni-dimensionales formados por dos electrones y un hueco (triión X^-) y dos huecos y un electrón (triión X^+)

El Hamiltoniano renormalizado para este sistema se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \tilde{H}_h(z) + \tilde{H}_{ee}(\varphi_1, \varphi_2); \quad \tilde{H}_h = -\eta \partial^2 / \partial \tilde{z}^2 - 2R/\tilde{r}_+ - 2R/\tilde{r}_-; \\ \tilde{r}_{\pm} &= \sqrt{1 + (\beta/2 \pm \tilde{z})^2}; \\ \tilde{H}_{ee} &= -\partial^2 / \partial \varphi_1^2 - \partial^2 / \partial \varphi_2^2 + 2R/\tilde{r}_{12}; \quad \tilde{r}_{12} = \sqrt{\beta^2 + 4\sin^2((\varphi_1 - \varphi_2)/2)}\end{aligned}\quad (1.13)$$

donde $\beta = d/R$, $\tilde{z} = z/R$ y $\eta = m_e^*/m_h^*$. Nótese que el Hamiltoniano (1.13) se separa en dos términos. El primero de ellos corresponde al Hamiltoniano del par e-e en anillos acoplados verticalmente y cuyos autovalores de energía, $\tilde{E}_c(M)$ y $\tilde{E}_r(m, s)$, ya se obtuvieron en la sección 1.1. El segundo término describe el movimiento del hueco a lo largo del hilo y sus autovalores deben obtenerse a partir de la solución de la ecuación de onda unidimensional

$$\begin{aligned}-\eta \frac{d^2 g_{n,p}(\tilde{z})}{d\tilde{z}^2} - V_z(\tilde{z}) g_{n,p}(\tilde{z}) &= \tilde{E}_z(n, p); \\ V_z(z) &= \frac{2R}{\sqrt{1 + (\beta/2 + \tilde{z})^2}} + \frac{2R}{\sqrt{1 + (\beta/2 - \tilde{z})^2}}\end{aligned}\quad (1.14)$$

Dado que tanto el potencial (1.8) como el potencial $V_z(z)$ presente en (1.14) son pares, entonces las autofunciones

$\psi_{M,m,s,n,p}(\varphi_1, \varphi_2, z) = \exp(iM\theta) f_{m,s}(\varphi) g_{n,p}(z)$ del Hamiltoniano (1.13) tienen una paridad definida. El conjunto de soluciones pares de $f_{m,s}(\varphi)$ corresponden al estado singlete ($s=0$) y el conjunto de soluciones impares $f_{m,s}(\varphi)$ corresponden al estado triplete ($s=1$). Las funciones de onda del electrón, $g_{n,p}(z)$ son pares si $p=+$ e impares si $p=-$. La ecuación (1.14) se solucionó numéricamente usando el método de barrido trigonométrico [80].

A fin de facilitar la interpretación de los resultados de cálculo, en la figura 1.7 se ha graficado el potencial $V_z(\tilde{z})$ para anillos de $R=4a_0^*$ y diferentes separaciones d . En esta figura se puede ver que para pequeñas separaciones, las curvas de potencial tienen un solo mínimo en el punto medio de separación entre los anillos, mientras para separaciones más grandes que $2R$ el potencial tiene dos mínimos, lo cuales se localizan en el plano de cada anillo. Por lo tanto, se podría esperar una transición del estado base con simetría ($p=+$), con hueco localizado alrededor de $z=0$ a otro estado antisimétrico ($p=-$), cuando el hueco se localiza cerca del plano de cada anillo. En la Tabla 1.2 se muestra el conjunto de números cuánticos (M, m, s, n, p) para los cuales se ha calculado la energía $\tilde{E}(M, m, s, n, p)$ del sistema tri-particular.

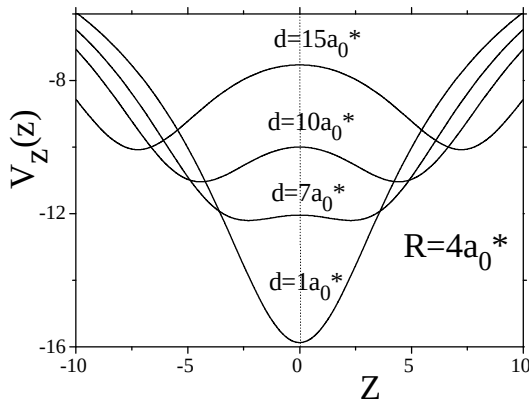


Figura 1. 7. Curvas de potencial $V_z(\tilde{z})$ para diferentes separaciones entre anillos

	(M, m, s, n, p)		(M, m, s, n, p)
a	$(0, 0, 0, 0, +)$	e	$(0, 0, 0, 0, -)$
b	$(1, 1, 1, 0, +)$	f	$(1, 1, 1, 1, -)$
c	$(0, 2, 1, 0, +)$	g	$(0, 2, 1, 1, -)$

Tabla 1.2 Notación usada para los diferentes niveles

En la figura 1.8 se muestran los resultados de cálculo de los 6 niveles de energía normalizados más bajos, en función del radio R para una distancia entre anillos de $d = 20a_0^*$.

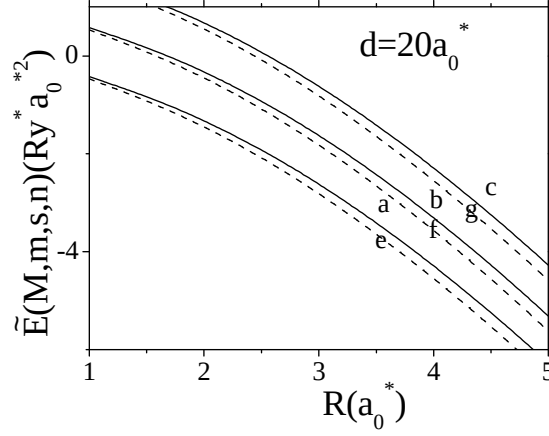


Figura 1.8. Energía normalizada $\tilde{E}(M, m, s, n, p)$ en función del radio de los anillos

Para esta gran separación, la curva $V_z(\tilde{z})$ tiene dos mínimos y por tanto, los niveles con $(p = -)$, correspondientes a estados antisimétricos no ligados (líneas punteadas) tienen niveles de energía más bajos que los correspondientes a estados simétricos ($p = +$, líneas continuas). Para explicar el comportamiento de estas curvas, se debe tener en cuenta que el término de energía cinética no incluye al radio como parámetro, mientras que la energía potencial es proporcional a R . Por lo tanto, cuando el radio es muy pequeño, el movimiento relativo está débilmente correlacionado y ellos se comportan de manera similar a un sistema de muchas partículas en fase gaseosa. Cuando el radio del anillo aumenta, la pendiente de la curva de energía crece lentamente hasta llegar a ser constante, haciendo que el movimiento de las partículas lleguen a estar fuertemente correlacionado. La última parte de la curva con pendiente constante, corresponde al caso del movimiento de partículas casi congeladas, las cuales adoptan una configuración similar a un cristal de Wigner [34].

En la figura 1.9 se presenta la energía normalizada en función de la separación d entre los anillos de radios $R = 4a_0^*$. Se ve que cuando la separación entre anillos es pequeña los estados simétricos ligados tienen energías más bajas que los correspondientes estados antisimétricos no ligados, pero este orden se invierte para $d > 10a_0^*$. En este punto de inflexión la pendiente de la curva se cambia, hecho que indica la existencia de una variación brusca en la simetría del cristal de Wigner.

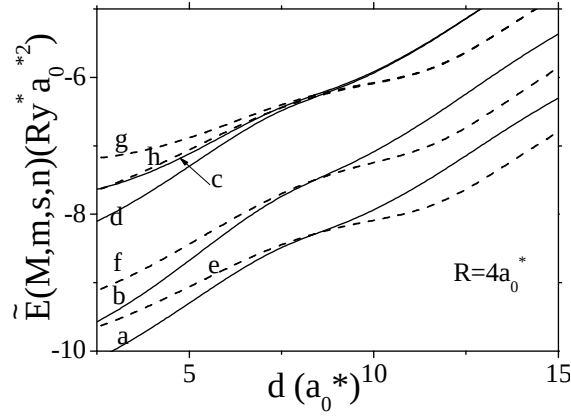


Figura 1.9. Energía normalizada $\tilde{E}(M, m, s, n, p)$ en función de la separación entre anillos

1.4 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

En las secciones anteriores se estudiaron modelos exactamente solubles sobre la base de una expansión en series y del barrido trigonométrico, los cuales permitieron analizar el espectro energético de dos electrones en un anillo [74], en anillos concéntricos [93] y verticalmente acoplados [91], y también se pudo extender estos modelos al caso de tres partículas [98].

Estudios estructurales sobre puntos cuánticos auto-ensamblados con topología de anillo, han demostrado que el radio exterior de estos QR oscila entre 30 y 70nm y el interior tiene un valor de 10nm mientras que su altura varía entre 2 y 4nm [50]. Esta evidencia experimental deja claro que los modelos de QR 1D con barrera de potencial infinita e infinita razón entre el radio y el ancho del QD, sólo sirven como punto de partida para analizar el espectro energético de sistemas de pocas partículas en QR más reales, que tengan en cuenta el tamaño de éste y el carácter finito del potencial de confinamiento, el cual está intrínsecamente determinado por las brechas de energía de los materiales que forman el QR.

Una manera adecuada de calcular el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en SAQDs, sin dejar de lado la incidencia de la morfología y el tamaño del QD, se basa en el uso de la Aproximación Adiabática, la cual ha sido amplia y exitosamente usada en el análisis de muchos problemas de mecánica cuántica [113]. Un análisis breve de la ecuación Schrödinger, nos ayudará a convencernos de la validez de esta aproximación en el análisis del espectro de pocas partículas en QDs con espesores muy pequeños. Sin pérdida de generalidad, consideremos el caso de una

donadora neutra D^0 confinada dentro de un QD con simetría axial, de altura máxima d_0 y radio de la base R_e , así como los mostrados en la figura I.5.

El Hamiltoniano adimensional uniparticular en la aproximación de masa efectiva para esta donadora neutra se puede escribir como:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = -\nabla^2 + V(\rho, z) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}|} \quad (1.15)$$

Los vectores $\boldsymbol{\xi} = (\xi_\rho, \xi_z)$ y $\mathbf{r} = (\rho, z)$ describen las posiciones del ion y del electrón. El potencial de confinamiento $V(\rho, z)$, que surge de la discontinuidad en la banda de conducción de los dos materiales que forman la heterojuntura del QD, es igual a:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < z < d(\rho) \text{ y } 0 < \rho < R_e \text{ (Dentro del QD)} \\ V_0, & \text{si } z < 0 \text{ y } z > d(\rho) \text{ y } \rho > R_e \text{ (Fuera del QD)} \end{cases} \quad (1.16)$$

La ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano (1.16) no es completamente separable, pues la presencia del potencial de confinamiento y del potencial Coulombiano no lo permiten. Por lo tanto, no se conoce una solución exacta, aun ni para la situación más simple, la cual corresponde al estado base de un electrón no sujeto a la interacción Coulombiana. No obstante, para encontrar los autovalores de la energía se puede sacar provecho de las características experimentales de los SAQDs que demuestran que el espesor es mayor que el radio ($d_0 \gg R_e$), pues bajo esta condición será posible hacer uso de la AA. Para iniciar se realizará un “rescalamiento” de las coordenadas que aparecen en la ecuación de onda con Hamiltoniano (1.15) de tal manera que los desplazamientos en dirección radial ρ y a lo largo del eje Z lleguen a ser del mismo orden, para ello se hará la siguiente sustitución:

$$z = d_0 \tilde{z} \text{ y } \rho = R_e \tilde{\rho} \quad (1.17)$$

Bajo esta transformación se puede ver que el movimiento electrónico se limita a la región $0 < \tilde{\rho}, \tilde{z} < 1$. En las nuevas coordenadas, la ecuación de Schrödinger para el D^0 con Hamiltonia (1.15) se puede escribir de la siguiente forma:

$$-\frac{1}{d_0^2} \frac{d^2 f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z})}{dz^2} - \frac{1}{R_e^2} \nabla_{\tilde{\rho}}^2 f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z}) + V_{eff}(\rho, z, \xi) f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = E_0 f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \quad (1.18)$$

$$V_{eff}(\rho, z, \xi) = \tilde{V}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \xi|}$$

La ecuación de Schrödinger (1.18) con función de onda monoelectrónica $f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ tiene un aspecto similar a la ecuación que describe un átomo hidrógeno libre [113]. En nuestro caso, la ecuación (1.18) se puede interpretar como si describiera dos partículas que interactúan a través del potencial $V_{eff}(\rho, z, \xi)$, donde una de ellas, la que fungiría como electrón en el caso de la comparación con el átomo de hidrógeno, tiene un movimiento unidimensional y se desplaza a lo largo del eje Z con una masa d_0^2 y su energía cinética está dada por el primer término de la ecuación (1.18), mientras la segunda de masa R_e^2 , la cual haría las veces del núcleo, está restringida a moverse en el plano X-Y y su energía cinética corresponde al segundo término de la ecuación (1.18). Al ser $R_e \gg d_0$, resulta obvio que estamos frente al caso de dos partículas, una ligera con energía cinética $\frac{1}{d_0^2} \frac{d^2 f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z})}{dz^2}$ mucho mayor que la energía cinética de la partícula pesada $\frac{1}{R_e^2} \nabla_{\tilde{\rho}}^2 f_0(\tilde{\rho}, \tilde{z})$. Para este tipo de situación, en la teoría de la mecánica cuántica se ha establecido un proceso de solución conocido como *aproximación adiabática* [113] cuyos resultados están acordes con la experimentación.

El proceso consiste en congelar momentáneamente el movimiento de la partícula masiva para analizar el movimiento de la partícula ligera a lo largo del eje Z, manteniendo a la variable ρ en el plano X-Y como un parámetro del cual dependerá la energía. La ecuación de Schrödinger para esta partícula ligera puede escribirse como:

$$-\frac{d^2 f_z(\rho, z)}{dz^2} + V(\rho, z) f_z(\rho, z) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \xi|} = E_z(\rho) f_z(\rho, z) \quad (1.19)$$

Una vez se obtenga el autovalor de la energía $E_z(\rho)$, bien sea de manera analítica, si fuera posible, o numéricamente, se reemplaza en la ecuación de Schrödinger que describe el movimiento de la partícula pesada, es decir, se descongela su movimiento para determinar cual es el aporte que hace a la energía total del sistema. La ecuación que se obtiene es:

$$-\nabla_{\rho}^2 f_{\rho}(\rho) + E_z(\rho) f_{\rho}(\rho) = E_0 f_{\rho}(\rho) \quad (1.20)$$

donde es claro que la función de onda completa es $f_0(\mathbf{r}) = f_{\rho}(\rho) f_z(\rho, z)$. Nótese que al escribir las ecuaciones (1.19) y (1.20) se regresó a las coordenadas originales, pues las coordenadas (1.17) sirvieron sólo temporalmente para hacer una interpretación y justificar la validez de la AA. Esta aproximación será usada a lo largo de la presente tesis en el análisis de diferentes tipos de sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en QDs, iniciando nuestro estudio con dos electrones en un QR, ya que las mediciones sobre estos sistemas garantizan que su radio exterior es mucho mayor que la altura.

1.5 EFECTO DEL TAMAÑO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS ELECTRONES EN ANILLO CUÁNTICO.

En el análisis del espectro energético de dos electrones en un QR de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}-\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, altura d_0 y radio interior y exterior, R_i y R_e respectivamente, se asume que estos parámetros geométricos satisfacen la condición experimental definida a través de la desigualdad $d_0/R_e \ll 1$. En la figura 1.10 se ha hecho una representación esquemática del anillo y del potencial de confinamiento al cual están sometidos los dos electrones. Las posiciones de los electrones $\mathbf{r}_1 = (\rho_1, z_1)$ y $\mathbf{r}_2 = (\rho_2, z_2)$ se miden respecto del centro del QR y los vectores ρ_1 y ρ_2 se localizan en el plano X-Y.

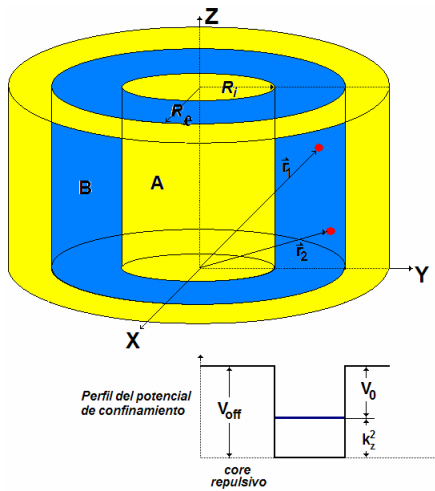


Figura 1.10. Geometría para dos electrones confinados en un QR donde el material A es $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ y el material B es $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$. En la parte inferior se puede observar el perfil de la BC de estos dos materiales.

La región central del anillo, conocida como núcleo o “core” repulsivo, es responsable de la existencia de modificaciones sustanciales del espectro energético en comparación con el disco cuántico. Para el sistema específico bajo estudio, la discontinuidad en el fondo de la BC de los dos materiales que constituyen el QR, da lugar a una diferencia de potencial de, V_{off} de 258 meV. Ya que las mediciones experimentales realizadas sobre QRs garantizan que se satisface la condición $d/R_e \ll 1$, entonces de acuerdo a lo estudiado en la sección 1.4 se puede usar la AA para desacoplar el movimiento transversal del paralelo a Z. Adicionalmente, Price, Zhu y Das Sarma [114], demostraron que el problema 3D para dos electrones confinados en un QD, se puede aproximar, con un alto grado de confiabilidad, a un problema 2D, en donde la energía potencial de interacción electrón-electrón adimensional se puede reemplazar por el término $2/\sqrt{0.04d^2 + \rho_{12}^2}$ de tal manera que el nuevo potencial V_0 se puede escribir como: $V_0 = V_{off} - k_z^2(d, V_{off})$, donde $k_z^2(d, V_{off})$ es el nivel energético más bajo que se puede formar en el pozo rectangular de altura d y barrera de potencial V_{off} .

El Hamiltoniano adimensional resultante en 2D, en la aproximación de masa efectiva y usando coordenadas polares, está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{p}_1) + \hat{H}_0(\mathbf{p}_2) + \frac{2}{\sqrt{0.04d^2 + |\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|^2}} \quad (1.21)$$

$$\hat{H}_0(\rho) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\rho)$$

El potencial de confinamiento renormalizado, $V(\rho)$ es una función seccionalmente constante definida como:

$$V(\rho) = \begin{cases} V_0, & \text{si } \rho < R_i \\ 0, & \text{si } R_i < \rho < R_e \\ V_0, & \text{si } \rho > R_e \end{cases} \quad (1.22)$$

Si bien existen efectos de anisotropía y de discontinuidad de la masa efectiva entre los dos materiales que se utilizan para fabricar el QD, éstos no serán tenidos en cuenta, pues su efecto sobre el espectro energético es relativamente bajo en comparación con el aporte generado por la interacción Coulombiana. Por lo dicho anteriormente y por simplicidad matemática, se asumirá que las masas efectivas del electrón, tanto en el pozo como en la barrera son iguales. El valor que se adopte en los cálculos será el que ellos

tomen en el sistema de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$, para el cual la masa efectiva es $0.076m_0$ y la permitividad de 12.71. Con estos valores el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo son 8.86 nm y 6.40 meV , respectivamente.

Antes de embarcarnos en la solución de la ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano (1.21), obtengamos la solución de esta ecuación para el caso de un electrón:

$$\hat{H}_0(\vec{\rho}) f_{n,m}(\vec{\rho}) = E_0(n, m) f_{n,m}(\vec{\rho}); \quad f_{n,m}(\vec{\rho}) = e^{im\varphi} R_{n,m}(\rho) \quad (1.23)$$

Donde n y m representan los números cuánticos radial y orbital. La función de prueba es el producto de dos funciones, una que contiene la parte angular y la otra que depende de la coordenada radial, lo cual puede obtenerse en forma analítica a partir de una combinación de diferentes funciones de Bessel. El espectro energético para el electrón se presenta en la figura 1.11.

Como puede observarse, los niveles correspondientes al mismo número cuántico radial ($n=1,2$) y diferente momentum angular, están agrupados en una serie de conjuntos de subniveles. Nótese como los subniveles pertenecientes al mismo conjunto ($n=1$ o $n=2$) están muy cerca y las diferencias energéticas entre ellos no son mayores de $0.03 R_y^*$, mientras que la diferencia entre los conjuntos $n=1$ y $n=2$ es realmente grande, pues la separación llega a alcanzar un valor del orden de $2.5 R_y^*$.

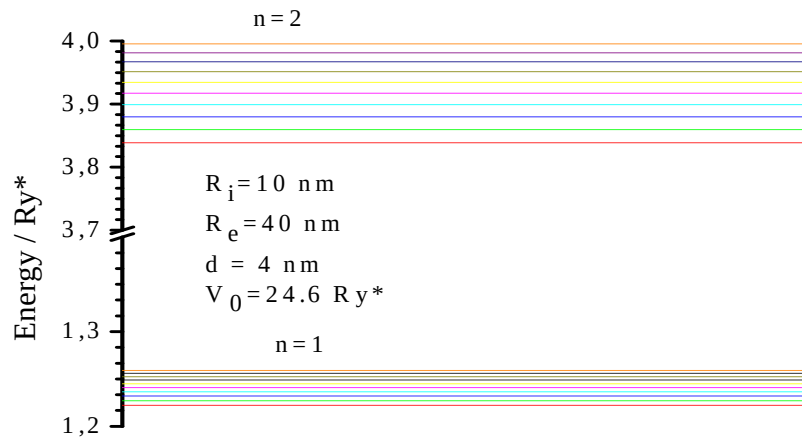


Figura 1.11 Niveles de energía para un electrón con número radial $n = 1$ y diferentes valores del número cuántico orbital.

En la figura 1.12 se han graficado algunas funciones de onda para $n = 1$ y 8 diferentes valores de m . Se puede observar como la función de onda tunela más la región $\rho > R_e$ que en la región asociada al núcleo repulsivo ($0 < \rho < R_i$).

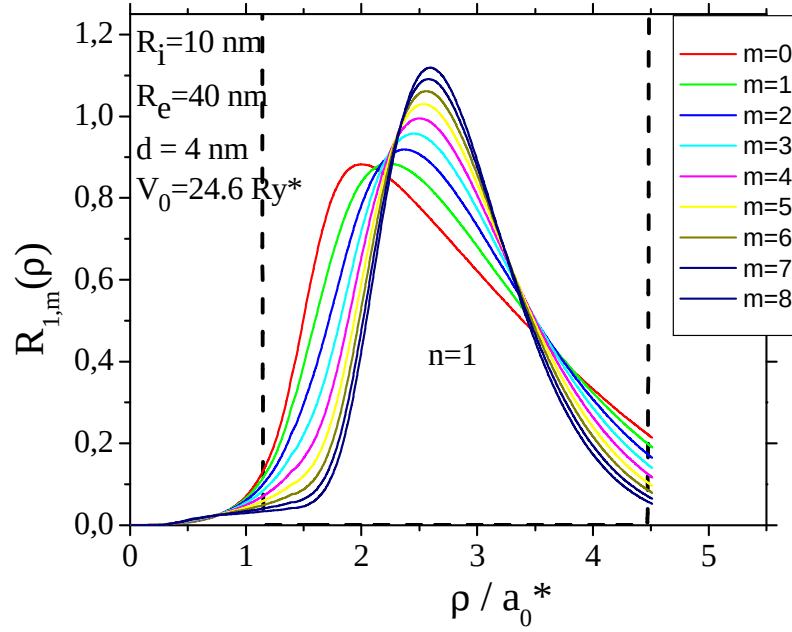


Figura 1.12 Funciones de onda para los estados con número radial $n = 1$ y número cuántico orbital entre 1 y 8.

Aun cuando no se muestra en la gráfica, es necesario manifestar que este efecto es fuertemente dependiente de la altura de disco, encontrándose que a menor d mayor es el confinamiento y mayor es la probabilidad de desbordamiento de la función de onda a través de la barrera de potencial.

Al introducir el segundo electrón en el QR, la interacción electrón-electrón hace que se produzca una mezcla de los estados uni-electrónicos del mismo conjunto, pero la mezcla entre subniveles de grupos diferentes es despreciable. Esto pone de manifiesto que los estados más bajos para el sistema de dos electrones se forma a partir de la mezcla entre los subniveles con el mismo número cuántico radial $n = 1$. Lo anterior se hace más evidente en la medida que el radio interior sea más grande y más pequeño llegue a ser el espesor del QR, pues la separación entre conjuntos de subniveles es más grande. A partir de la figura 1.12 también se puede ver que la parte radial de la función de onda uni-particular, $R_{1,m}(\rho)$ para los diferentes números cuánticos m , tienen una forma similar, de tal manera que al momento de realizar los cálculos variacionales para el sistema de dos electrones confinados en el QR, todas ellas se puedan aproximar a la misma

parte radial de la función de onda con $m = 0$ ($R_{1,0}(\rho)$). Por esta razón, para calcular los estados más bajos del sistema bi-electrónico se propone una función de prueba del tipo:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = R_{1,0}(\rho_1) R_{1,0}(\rho_2) \Phi(\varphi_1, \varphi_2) \quad (1.24)$$

La función variacional $\Phi(\varphi_1, \varphi_2)$ describe el movimiento angular del sistema bi-electrónico correspondiente a un momentum angular diferente. Esta función que se determinará numéricamente, satisface una ecuación diferencial de segundo orden que para ser establecida se utilizará el principio variacional de Schrödinger, el cual establece que la autofunción del Hamiltoniano debe minimizar la funcional siguiente:

$$F[\Phi] = \langle \psi | H - E | \psi \rangle \quad (1.25)$$

Teniendo presente que $H_0(\rho_i) R_{1,0}(\rho_i) = E_0(1,0) R_{1,0}(\rho_i)$, al sustituir (1.21) y (1.24) en (1.25) y después de integrar por partes se obtiene la siguiente expresión para la funcional:

$$\begin{aligned} F[\Phi] = & 2E_0(1,0) \langle R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2) \rangle + \\ & \langle R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) (\nabla_1 \Phi(\varphi_1, \varphi_2))^2 \rangle + \\ & \langle R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) (\nabla_2 \Phi(\varphi_1, \varphi_2))^2 \rangle + \left\langle \frac{2R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2)}{\sqrt{0.04d^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} \right\rangle - \\ & \langle R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2) \rangle E = I_1 + I_2 + I_3 \end{aligned} \quad (1.26)$$

donde

$$\begin{aligned} I_1 = & \langle (2E_0(1,0) - E) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2) \rangle \\ I_2 = & \left\langle \frac{2R_{1,0}^2(\rho_1) R_{1,0}^2(\rho_2) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2)}{\sqrt{0.04d^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} \right\rangle = \langle \tilde{V}(\varphi_1 - \varphi_2) \Phi^2(\varphi_1, \varphi_2) \rangle \\ \tilde{V}(\varphi_1 - \varphi_2) = & 8\pi^2 \int_0^\infty \rho_1 R_{1,0}^2(\rho_1) d\rho_1 \int_0^\infty \frac{\rho_2 R_{1,0}^2(\rho_2)}{\sqrt{0.04d^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} d\rho_2 \quad (1.27) \\ I_3 = & \frac{1}{I} \left\langle \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right)^2 \right\rangle; \quad \frac{1}{I} = 2\pi \int_0^\infty \rho R_{1,0}^2(\rho) d\rho \end{aligned}$$

Luego la funcional puede escribirse de manera compacta así:

$$F[\Phi] = \left\langle \left[\{2E_0(1,0) - E\} + \tilde{V}(\varphi_1 - \varphi_2) \right] \Phi^2(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{1}{I} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right)^2 \right] \right\rangle \quad (1.28)$$

La Lagrangiana para nuestro sistema es:

$$L = \left[\{2E_0(1,0) - E\} + \tilde{V}(\varphi_1 - \varphi_2) \right] \Phi^2(\varphi_1 - \varphi_2) + \frac{1}{I} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right)^2 \right] \quad (1.29)$$

A partir de la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi} - \sum_{i=1}^2 \frac{d}{d\varphi_i} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}_i} \right) = 0 \quad \text{con} \quad \dot{\Phi}_i = \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_i} \quad (1.30)$$

se obtiene la ecuación para $\Phi(\varphi_1 - \varphi_2)$:

$$-\frac{1}{I} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right)^2 \right] + \tilde{V}(\varphi_1 - \varphi_2) \Phi(\varphi_1 - \varphi_2) = \{E - 2E_0(1,0)\} \Phi(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (1.31)$$

Esta última ecuación se puede separar usando coordenadas de movimiento de centro de masa y relativas:

$$\vartheta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2 \quad \text{y} \quad \varphi = (\varphi_1 - \varphi_2) \quad (1.32)$$

de tal manera que la función de onda

$$\Phi(\vartheta, \varphi) = e^{jM\vartheta} u(\varphi); \quad (1.33)$$

nos permite re-escribir la ecuación (1.31) de la siguiente manera:

$$u''(\varphi) + \left\{ I \left[\frac{E}{2} - E_0(1,0) - \frac{\tilde{V}(\varphi)}{2} \right] - \frac{M^2}{4} \right\} u(\varphi) = 0 \quad (1.34)$$

con $-2\pi < \varphi < 2\pi$ y $0 < \vartheta < 2\pi$

Nótese que el potencial de la ecuación (1.31) es par, por lo tanto, existen dos grupos de soluciones, una par con $u(-\varphi) = u(\varphi)$, la cual corresponde a los estados singletes y otra impar con $u(-\varphi) = -u(\varphi)$ correspondiente a los estados tripletes. De acá en adelante sólo se considerarán los estados

singletes, para los cuales también podría agregarse la siguiente condición periódica [74] $u(\varphi \pm 2\pi) = (-1)^M u(\varphi)$ que permite considerar el problema de autovalores (1.13) únicamente dentro de la región $0 < \varphi < 2\pi$ con la condición de frontera $u'(0) = u'(2\pi) = 0$. Las soluciones de este problema, son las funciones de onda $u(\varphi) = u_{M,m}(\varphi)$ y las energías, $E = E(M, m)$ que dependen de dos números cuánticos, el momentum angular del centro de masa M y momentum angular relativo m . La solución de este problema se realizó mediante el método numérico de barrido trigonométrico [80].

Con el propósito de establecer la precisión del procedimiento numérico utilizado, lo primero que se hizo fue obtener las energías de los estados más bajos en el caso límite en que la altura del QR tiende a cero y la barrera de potencial se hace tender a infinito. En todos los casos se encontró una muy buena concordancia con los resultados presentados en la referencia [74].

Los resultados de cálculo para la energía se presentan en las figuras 1.13 y 1.14, las cuales han sido obtenidas para los niveles de energía correspondientes a los estados singletes $E(M, m)$ de los dos electrones en el QR de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}-\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con diferentes valores del radio interior, R_i , del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d . De la misma manera que se hizo en las secciones anteriores, se graficó una energía normalizada que se define como:

$$\tilde{E}(M, m) = [E(M, m) - 2E_0(1, 0)] R_0^2 \text{ con } R_0 = (R_i + R_e) / 2.$$

En la figura 1.13 se muestran las energías de algunos de los estados más bajos en función del radio interior, para valores fijos de la altura y del espesor. En el primer caso (Fig. 1.13a) estas dos cantidades se toman de valor 2nm y en el segundo caso (Fig. 1.13b) se hacen iguales a 4nm y 5 nm, respectivamente. Como se puede apreciar en ambas figuras, el nivel correspondiente al estado base $\tilde{E}(0, 0)$, siempre se encuentra separado de los otros niveles, independientemente del valor que tome el radio interior de QR. Para los otros niveles, a consecuencia de la fuerte interacción electrón-electrón, se pueden observar cruces entre las curvas, lo que da lugar a un cambio en el orden en que se distribuyen los niveles. Esta situación es más evidente cuando los electrones fuertemente confinados, como es el caso del QR con altura y espesor pequeño. Adicionalmente, a partir de la figura 1.13a se puede observar que para pequeños valores del radio interior, los estados correspondientes al mismo valor de M y diferente m son degenerados, debido a que en estos casos la rotación relativa no hace ninguna contribución a la energía total del sistema bi-electrónico.

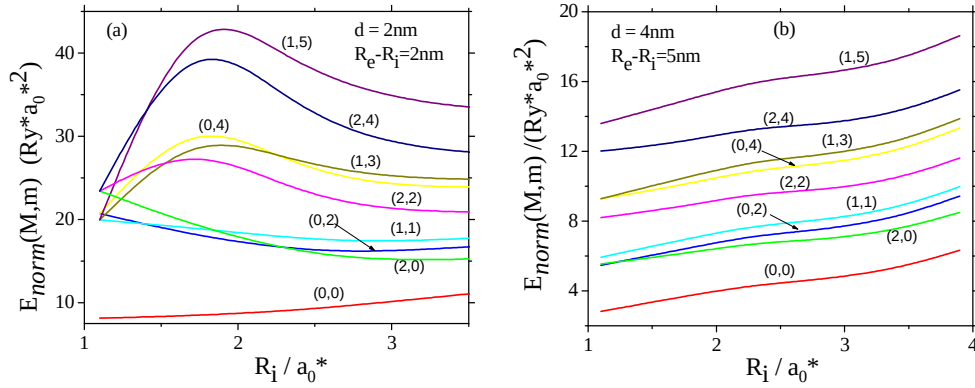


Figura 1.13 Energías normalizadas para algunos estados singletes de dos electrones en un QR en función del radio interior R_i . Las curvas se construyen para dos valores diferentes del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d . La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $E(M,m)$.

Una situación bien diferente ocurre para grandes valores del radio interior, donde la contribución debida a la rotación del centro de masa es insignificante y por lo tanto, los niveles con los diferentes valores de M e iguales valores de m tienden a los mismos valores de la energía total, así como lo muestran los cruces de las curvas en la figura 1.13a. Como se puede apreciar en la figura 1.13b, cuando el espesor y la altura del QR aumentan los cruces disminuyen y casi desaparecen por completo. La mayor diferencia entre estas dos curvas se debe a los valores que toman las alturas de las barreras de potencial renormalizadas, pues en el primer caso es $12.6 R_y^*$, mientras que para el segundo caso es casi del doble ($24.6 R_y^*$). Como consecuencia de este hecho, los efectos asociados al desbordamiento de la función de onda en las regiones de la barrera, es más grande en el primero de los casos ($d = 2nm$) debido al fuerte confinamiento, mientras que llega a ser insignificante para el QR con $d = 4nm$. Para este último caso las curvas se hacen muy similares a las obtenidas en el modelo 1D con barrera de potencial de altura infinita.

En general, las curvas de la figura 1.13a se pueden dividir en dos grupos, el primero corresponde a los niveles más bajos, los cuales se caracterizan por poseer un mínimo y el segundo grupo corresponde a los niveles más altos, los cuales tienen tanto un mínimo como un máximo. La posición mínima se debe al efecto de desbordamiento de la función de onda dentro de la región del núcleo repulsivo ($0 < \rho < R_i$), mientras que el máximo se debe al

desbordamiento de la función dentro de la región exterior de la barrera ($\rho > R_e$).

En la figura 1.14 se presentan las energías de los estados más bajos en función del espesor del QR, $R_e - R_i$, para dos grupos de valores del radio interior y del espesor: $R_i = 10\text{nm}$ y $d = 2\text{nm}$ (fig. 1.14a) y $R_i = 20\text{nm}$ y $d = 4\text{nm}$ (fig. 1.14b), respectivamente.

Se puede ver a partir de ambas figuras, que para valores del espesor mayores de 8nm todas las curvas tienen un comportamiento muy similar, pero éste sufre una modificación notoria para valores pequeños del espesor y prueba de ello son los múltiples cruces que se logran apreciar en la figura 1.14a, mientras que las curvas de la figura 1.14b son casi paralelas. Se puede observar que para espesores mayores de 8nm , las energías crecen monótonamente con el espesor, debido al crecimiento de la probabilidad de encontrar a los dos electrones al mismo lado del QR. Cuando el espesor del QR se hace menor que 8nm , el comportamiento de las curvas de energía cambia drásticamente debido al incremento de la probabilidad de tunelamiento de los electrones en la región del núcleo repulsivo.

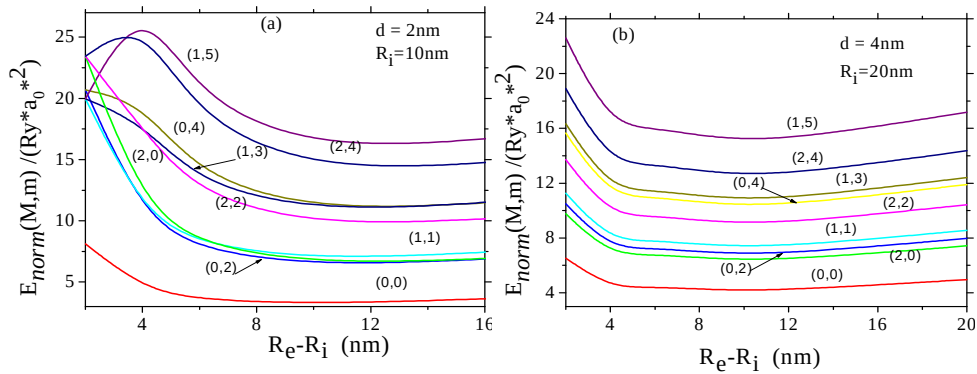


Figura 1.14 Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función del espesor del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y de la altura. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.

Cuanto más estrecho es el QR y más alto es el nivel energético de los electrones, mayor es la probabilidad de tunelamiento y más fuerte llega a ser la repulsión entre los electrones. Los picos asociados a las curvas $\tilde{E}(2,4)$ y $\tilde{E}(1,5)$ para un anillo de 4nm de espesor aproximadamente, deben estar asociados al desbordamiento de la función de onda hacia el exterior de la barrera.

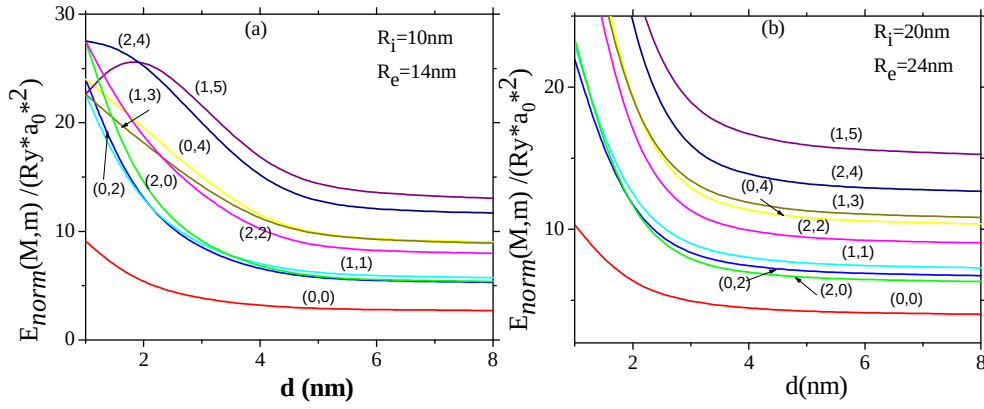


Figura 1.15 Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función de la altura del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y exterior. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.

Para finalizar esta sección, en la figura 1.15 se exhiben las curvas que describen el comportamiento de la energía del sistema bi-electrónico con la altura del QR para dos grupos de valores del radio interior y exterior: $R_i = 10nm$ y $R_e = 14nm$ (figura 1.15a) y $R_i = 20nm$ y $R_e = 24nm$ (figura 1.15b). Para la gran mayoría de las curvas se observa que la disminución de la altura produce un incremento de la energía del sistema bi-electrónico a consecuencia del fuerte confinamiento. Esto hace que aumente la probabilidad de tunelamiento de los electrones hacia la parte central del núcleo repulsivo, con lo cual se disminuiría la distancia promedio entre los electrones. En el caso particular de la energía $\tilde{E}(1,5)$ se presenta un pico de energía correspondiente a una altura aproximada del QR de $2nm$, lo cual viene a ser a una confirmación adicional del desbordamiento de la función de onda hacia el exterior.

1.6 EFECTO DEL TAMAÑO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN EXCITÓN EN UN PUNTO CUÁNTICO.

El estudio de las propiedades experimentales del par electrón-hueco en materiales semiconductores en el volumen, entraña una gran dificultad por que son muy inestables frente a la disociación, lo cual se debe a que tienen tiempos de vida muy cortos. No obstante, con el advenimiento de los sistemas de baja dimensionalidad esta dificultad se ha podido superar, gracias a que en condiciones de fuerte confinamiento, la energía de enlace se incrementa fuertemente a consecuencia de un mayor acercamiento entre el electrón y el hueco, lo cual conlleva a que el tiempo de vida de este sistema aumente bruscamente.

En el análisis del efecto de confinamiento sobre el espectro energético de los excitones confinados en QDs, se ha dedicado un gran esfuerzo e ingenio, en donde se han utilizado diferentes métodos, tales como variacional [5-115-116], diagonalización matricial [117-118], elementos finitos [119], dimensión fraccionaria [78] y otros métodos numéricos que se basan en la solución directa de las ecuaciones más relevantes [66]. Hasta ahora se han considerado entre otros modelos de confinamiento los de tipo: parabólico [118], Gaussiano [115], infinito [120], finito [5, 116]. La mayoría de estas técnicas se caracterizan porque es necesario realizar un gran esfuerzo computacional con el fin de obtener resultados que se ajusten a los datos experimentales, pero su precisión, como es el caso del método variacional, depende en gran medida de la correcta elección de la función de prueba. Adicionalmente, estos métodos parten del supuesto de que los QDs son de naturaleza bidimensional; es decir, dejan de lado los efectos relacionados con la altura del QD, lo cual no es cierto, ya que en la sección anterior se demostró que el tamaño influye notoriamente en el espectro energético del par e-e y es de esperarse que lo mismo suceda con el par e-h. El objetivo fundamental en esta sección, será demostrar mediante el método de dimensión fractal [79] y en el marco de la AA, que el potencial de confinamiento y el espectro energético del par e-h confinado en un QD con simetría axial, está fuertemente influenciado por el perfil y de la altura de éste. Por lo tanto, el QD que se adopte en el análisis debe ser muy flexible, de tal manera que al variar algunos parámetros geométricos se pueda obtener otros QDs que sean topológicamente equivalentes. Por esta razón, se utilizará un QD de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ - $\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ en forma de pirámide truncada, cuya forma se muestra en la figura 1.16. Los factores geométricos que describen este punto cuántico piramidal (QP) son el radio de la base, R_e , el radio de la parte superior, R_i , y la altura máxima d_o , donde la razón R_i/R_e es menor que la unidad. Esta razón puede tomar valores diferentes que nos sirven para describir otros tipos de puntos, por ejemplo, si $R_i/R_e = 1$ se tendrá un disco cuántico, mientras que si $R_i/R_e = 0$ se tiene un cono.

En los cálculos realizados se considera un modelo con discontinuidades en la BC de valor $V_e = 258\text{meV}$ y en BV de valor $V_h = 172\text{meV}$, pero con los mismos parámetros físicos en la barrera y en el pozo. En el sistema ternario de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ la constante dieléctrica es: $\epsilon = 12.71$ y masas efectivas $m_e^* = 0.076m_0$, y $m_h^* = 0.45m_0$. El radio de Bohr y el Rydberg efectivo son iguales a $a_0^* = \hbar^2\epsilon/\mu e^2 \approx 10.36\text{nm}$ y $R_y^* = e^2/2\epsilon a_0^* \approx 5.47\text{meV}$, donde $\mu = m_e^*m_h^*/(m_e^* + m_h^*) \approx 0.065m_0$ representa la masa efectiva.

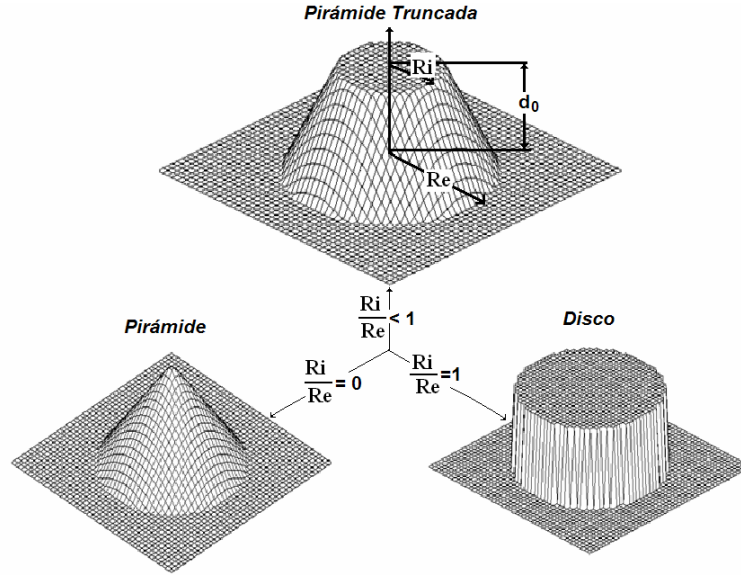


Figura 1.16. Tipos de puntos cuánticos axialmente simétricos que contienen un par electrón-hueco.

Una característica general de los QP de AlGaAs-InAlAs, es que la razón entre la altura máxima y el radio de la base es mucho menor que la unidad ($d_0/R_e \ll 1$). Esta condición permite aplicar la AA a fin de desacoplar el movimiento longitudinal y transverso. Adicionalmente, el problema 3D para las partículas interactuantes en el QP, en un alto grado de precisión se aproxima a un problema 2D [57], en donde el potencial de confinamiento lateral se renormaliza tomando la siguiente forma:

$$V_i(\rho) = \begin{cases} V_i, & \text{para } \rho > R_e \quad (i = e, h) \\ E_z(\rho), & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (1.35)$$

en donde $E_z(\rho)$ es la energía del nivel más bajo en el pozo cuántico con barrera de potencial V_i y altura $d(\rho)$ en el punto cuya distancia desde el eje de simetría es ρ .

El perfil que describe al QP es:

$$d(\rho) = \begin{cases} d_0, & \text{para } \rho < R_i \\ d_0 \left(1 - \frac{\rho - R_i}{R_e - R_i} \right), & \text{para } R_i < \rho < R_e \\ 0, & \text{para } \rho > R_e \end{cases} \quad (1.36)$$

Resulta evidente que cuánto más pequeña sea la altura de la pirámide, más baja se hace la altura de la barrera de potencial renormalizada, tanto para el electrón como para el hueco, lo cual pone de manifiesto que este modelo no es estrictamente bidimensional, pues en él se toma en cuenta el espesor transversal del punto.

Para calcular la energía del excitón, vamos a tener en cuenta el hecho bien conocido de que la masa efectiva del hueco en materiales de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ es mayor que la masa del electrón. Esta diferencia es significativamente importante en condiciones de fuerte confinamiento, ya que la mayor inercia del hueco lo torna más lento, mientras que el electrón por ser más liviano puede orbitar alrededor del hueco. Esta circunstancia, permite usar la AA como punto de partida en nuestro análisis del espectro energía del excitón. El uso de la AA se requiere hacerlo en dos pasos. El primero, consiste en congelar el movimiento del hueco en un punto cuya posición en el plano del QP está dado por $\mathbf{p}_h$ y dejar temporalmente de lado el aporte de su energía cinética a la energía total del sistema. Bajo esta consideración, el problema del excitón se reduce al caso de una impureza donadora D^0 descentrada en un QP cuya energía $E_{D^0}(\mathbf{p}_h)$ es función del parámetro $\mathbf{p}_h$. En el segundo paso, se calcula la energía del hueco, asumiendo que éste se encuentra confinado por un potencial de energía $E_{D^0}(\mathbf{p}_h)$. Para realizar este cálculo, se requiere conocer las funciones de onda uni-particulares del electrón y del hueco, así como sus respectivas energías. Las funciones de onda para este par de partículas satisfacen la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} H_{0i}(\rho_i)\varphi_i(\rho_i) &= E_i\varphi_i(\rho_i); i = e, h; \\ H_{0i}(\rho_i) &= -\frac{\eta_i}{\rho_i} \frac{d}{d\rho_i} \rho_i \frac{d}{d\rho_i} + V_i(\rho_i) = -\eta_i \nabla_i^2 + V_i(\rho_i) \end{aligned} \quad (1.37)$$

donde $\eta_i = \mu/m_i^*$. Como el potencial de estas ecuaciones de onda unidimensionales para el electrón y para el hueco son seccionalmente constantes, sus soluciones exactas, $\varphi_e(\mathbf{p}_e)$ y $\varphi_h(\mathbf{p}_h)$, se pueden encontrar de manera analítica, mientras que las energías del estado base, E_e y E_h , respectivamente, se pueden calcular resolviendo las correspondientes ecuaciones trascendentes.

El Hamiltoniano adimensional para el D^0 en un QP en la aproximación de masa efectiva es:

$$H_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = H_{0e}(\mathbf{p}_e) - \frac{2}{|\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h|} = -\eta_e \nabla_e^2 + V_e + U_{eh} \quad (1.38)$$

donde $U_{eh} = -2/|\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h|$, describe la interacción Coulombiana entre el electrón y el hueco. La ecuación de Schrödinger para el D^0 es:

$$H_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) \Psi_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = E_{D^0}(\mathbf{p}_h) \Psi_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) \quad (1.39)$$

donde la función de onda $\Psi_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h)$ se tomará de la siguiente manera:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = \varphi_e(\mathbf{p}_e) \Phi(|\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h|) \quad (1.40)$$

El primer término del lado derecho de esta ecuación es la función de onda para un electrón libre, mientras que la segunda es la función envolvente que sirve para describir la probabilidad de distribución electrónica producida por la atracción Coulombiana y sólo depende de la distancia electrón-ión. De acuerdo a lo estudiado en la sección anterior, la función variacional $\Phi(|\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h|)$ se puede obtener a partir del principio variacional de Schrödinger, el cual establece que la autofunción del Hamiltoniano (1.39) debe minimizar la funcional (1.25), de tal manera que ésta se puede escribir así:

$$F[\Phi] = \langle \varphi_e \Phi | H - E | \varphi_e \Phi \rangle = \langle \varphi_e \Phi | -\eta_e \nabla_e^2 + \tilde{V}_e + U_{eh} - E | \varphi_e \Phi \rangle = I_0 + I_1 \rightarrow \min \quad (1.41)$$

Donde por economía en la escritura se han dejado de lado los argumentos de las funciones, pero en el análisis que a continuación se describe siempre se tuvieron en cuenta. Las integrales I_0 e I_1 se definen de la siguiente manera:

$$I_0 = \langle (U_{eh} - E) \varphi_e^2 \Phi^2 \rangle \quad (1.42)$$

$$I_1 = \langle \varphi_e \Phi | -\eta_e \nabla_e^2 + V_e | \varphi_e \Phi \rangle \quad (1.43)$$

Esta última integral se puede transformar notoriamente. Para ello se va a tener en cuenta que:

$$-\eta_e \nabla_e^2 (\varphi_e \Phi) = -\eta_e \varphi_e \nabla_e^2 \Phi - \eta_e \Phi \nabla_e^2 \varphi_e - 2\eta_e \nabla \varphi_e \cdot \nabla \Phi \quad (1.44)$$

al reemplazar (1.37) y (1.44) en (1.43) se obtiene:

$$I_1 = \langle -\eta_e \varphi_e^2 \Phi \nabla_e^2 \Phi + E_e \varphi_e^2 \Phi^2 - 2\eta_e \varphi_e \Phi \nabla \varphi_e \cdot \nabla \Phi \rangle = E_e \langle \varphi_e^2 \Phi^2 \rangle - \eta_e \langle \varphi_e^2 \Phi \nabla_e \cdot \nabla_e \Phi \rangle - 2\eta_e \langle \varphi_e \Phi \nabla \varphi_e \cdot \nabla \Phi \rangle \quad (1.45)$$

El segundo término de esta ecuación se puede expresar como:

$$\langle \varphi_e^2 \Phi \nabla_e \cdot \nabla_e \Phi \rangle = - \langle \nabla_e \Phi \cdot \nabla_e (\varphi_e^2 \Phi) \rangle = - \langle \nabla_e \Phi \cdot (\varphi_e^2 \nabla_e \Phi + 2 \varphi_e \Phi \nabla_e \varphi_e) \rangle \quad (1.46)$$

lo que permite escribir la integral I_1 de una manera muy simple y compacta, así:

$$I_1 = E_e \langle \varphi_e^2 \Phi^2 \rangle + \eta_e \langle \varphi_e^2 (\nabla_e \Phi)^2 \rangle \quad (1.47)$$

Finalmente, a partir de (1.42) y (1.47) la funcional (1.41) será igual a:

$$F[\Phi] = \left\langle \varphi_e^2 \left\{ \Phi^2 \left(-\frac{2}{|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h|} - E + E_e \right) + \eta_e (\nabla_e \Phi)^2 \right\} \right\rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \left(\int_0^\infty \rho_e d\rho_e \varphi_e^2 \left\{ \eta_e \left(\frac{d\Phi}{d\rho_e} \right)^2 + \left(E_e - E - \frac{2}{\sqrt{\rho_h^2 + \rho_e^2 + 2\rho_e \rho_h \cos \phi}} \right) \Phi^2 \right\} \right) \quad (1.48)$$

Si hacemos $J_0(\rho, \rho_h) = \rho \int_0^{2\pi} \varphi_e^2 \left(\sqrt{\rho_h^2 + \rho^2 + 2\rho \rho_h \cos \phi} \right) d\phi$ el funcional (1.48) puede escribirse como:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty J_0(\rho, \rho_h) \left\{ \eta_e \left(\frac{d\Phi}{d\rho} \right)^2 + \left(E_e - E - \frac{2}{\rho} \right) \Phi^2 \right\} d\rho \quad (1.49)$$

Nótese que el integrando depende tanto de la función envolvente como de su derivada. De la ecuación de Euler-Lagrange se obtiene la ecuación para Φ :

$$-\frac{\eta_e}{J_0} \frac{d}{d\rho} \left(J_0 \frac{d\Phi}{d\rho} \right) - \frac{2}{\rho} \Phi = (E - E_e) \Phi \quad (1.50)$$

Esta ecuación es similar a la parte radial de un átomo hidrogenoide en un espacio isotrópico donde la parte radial del Jacobiano está descrito por $J_0(\rho, \rho_h)$. Las propiedades del espacio, en lo que se refiere a la geometría y dimensionalidad de la heteroestructura, generalmente estarán relacionados con $J_0(\rho, \rho_h)$; es decir, si se considera que $J_0(\rho, \rho_h)$ es proporcional a una potencia de ρ , ésta debe ser de acuerdo con la teoría de Dimensional Scaling [121] de la forma:

$$J_0(\rho, \rho_h) = c\rho^{D-1} \quad (1.51)$$

donde el parámetro D define la dimensión efectiva del espacio. Por lo tanto, la ecuación (1.50) tendría que coincidir con el problema de autovalores para un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo D -dimensional, donde D solo tomar valores enteros o fraccionarios. Por esta razón, a lo largo de esta tesis nos referimos a este método con el nombre de dimensión fractal, pero es de advertirse que la ecuación (1.51) sólo se verifica para un espacio homogéneo. Para el caso particular que se está tratando, se puede ver que $D = 2$ ya que $J_0(\rho, \rho_h)$ es proporcional a ρ . En el eventual caso en que la dependencia del Jacobiano con ρ no pudiese realizarse por medio de una ley de potencias como el descrito por la ecuación (1.51), entonces sería necesario definir una dimensión local en un espacio isotrópico efectivo usando el concepto de fractales de Mandenbrot [122].

Para calcular la energía del excitón y siguiendo el proceso estándar de la AA, ahora debemos descongelar el movimiento del hueco y para ello debemos regresar a la ecuación de onda del sistema, es decir:

$$\begin{aligned} H_X \Psi(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) &= \sum_{i=e,h} \left(-\frac{\eta_i}{\rho_i} \frac{d}{d\rho_i} \rho_i \frac{d}{d\rho_i} + \tilde{V}_i(\rho_i) \right) \Psi(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) - \\ &\frac{2}{|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h|} \Psi(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) \\ \Psi(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) &= \Psi_{D^0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) \Phi_X(\rho_h) \end{aligned} \quad (1.52)$$

Nótese que en este Hamiltoniano se ha incluido el término de energía cinética del hueco. Siguiendo los mismos pasos descritos en la sección anterior, es posible mostrar que la función envolvente $\Phi_X(\rho_h)$ satisface la siguiente ecuación:

$$-\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \left(\rho_h \frac{d\Phi_X(\rho_h)}{d\rho_h} \right) + [\tilde{V}_h + E_{D^0}(\rho_h)] \Phi_X(\rho_h) = E_X \Phi_X(\rho_h) \quad (1.53)$$

Para resolver el problema de autovalores (1.53) y encontrar la energía del excitón E_X se utiliza nuevamente el método de barrido trigonométrico [80].

Con el propósito de facilitar la interpretación de los resultados correspondientes a la energía del excitón, se presenta en la figura 1.17 las curvas que describen el confinamiento lateral y las respectivas funciones de

onda para un electrón no ligado en QDs con tres diferentes morfologías y cada uno de ellos con altura $d_0 = 4nm$.

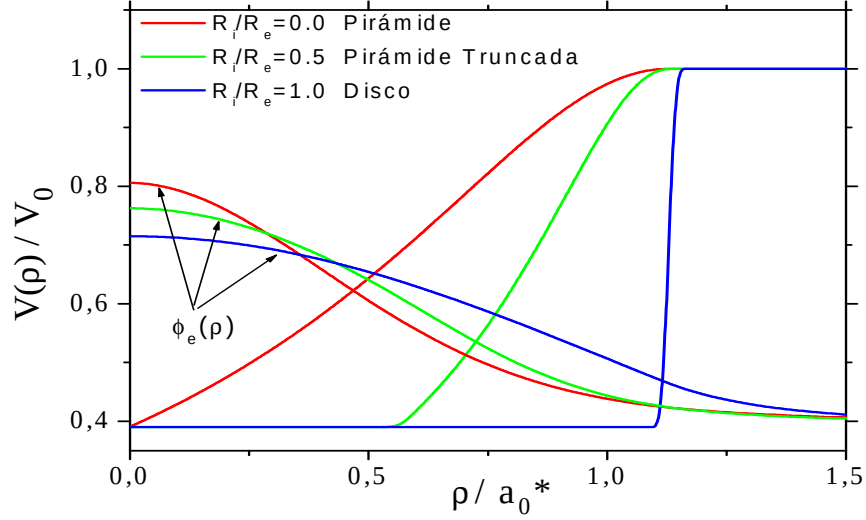


Figura 1.17. Formas del potencial de confinamiento y las correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral de un electrón en un QD de forma piramidal, pirámide truncada y disco.

En esta figura se puede apreciar como la altura de la barrera para un electrón confinado en un QD decrece hasta un 40% debido al confinamiento en dirección Z, siendo este comportamiento independiente de la morfología del QD. Adicionalmente se puede apreciar como la forma del potencial de confinamiento presenta una variación suave, desde casi triangular hasta casi rectangular a medida que la morfología del punto se modifica desde una pirámide hasta un disco, donde el caso de la pirámide truncada constituye un paso intermedio entre estos dos límites. En este proceso la función de onda para el electrón no ligado se va volviendo más y más extendido, indicando con esto que la nanoestructura en forma de pirámide produce el mayor confinamiento electrónico, lo que tendrá una gran implicación en los valores que alcance la energía del par e-h.

En las figuras 1.18 y 1.19 se exhiben los resultados de cálculo de las energías de correlación, $E_c(X)$, para el excitón en función del radio de la base del QD de $In_{0.55}Al_{0.45}As-Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ para cinco diferentes razones, R_i/R_e , comprendidas entre los valores límites 0 y 1 y para diferentes alturas d_0 . Este abanico de posibilidades y valores permiten tener un mayor control de cómo la morfología y los factores geométricos afectan el espectro energético del excitón. La energía $E_c(X)$ se define

como la diferencia de energías entre el par e-h libre y la de los estados acoplados, así:

$$E_c(X) = E_e + E_h - E(X) \quad (1.54)$$

A partir de la figura 1.18 se puede ver que las curvas presentan un comportamiento muy similar, ya que al disminuir el radio de la base, la energía de correlación excitónica crece a consecuencia del incremento del solapamiento espacial entre la función de onda del electrón y del hueco. Este hecho se traduce en un fuerte aumento de la energía atractiva de Coulomb, lo cual va a ser determinante en los valores que alcance la energía de correlación para valores pequeños de R_e . Ahora si el radio de la base incrementa, la energía de correlación comienza a disminuir y paulatinamente converge al valor asintótico propio de grandes radios igual a $4R_y^*$, el cual es característico para un excitón libre en un sistema 2D. A simple vista se observa que la convergencia resulta más rápida para aquellos QD con razones R_i/R_e mayores.

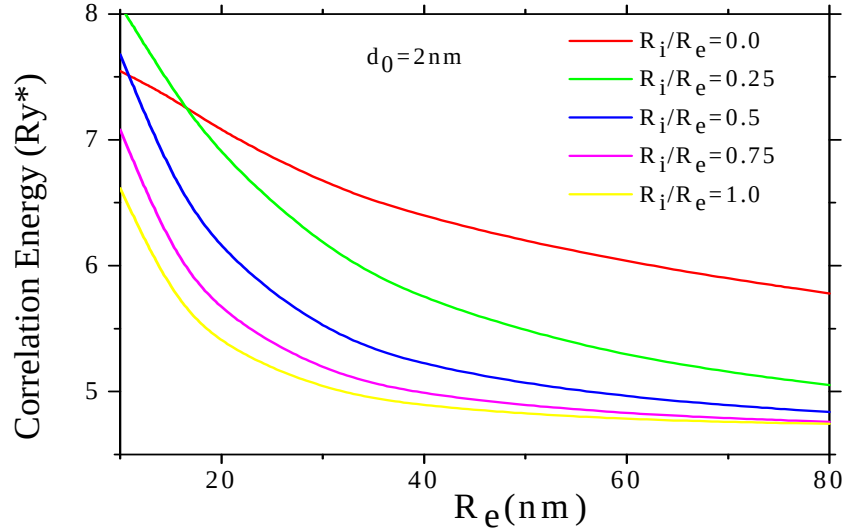


Figura 1.18 Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QD para tres valores diferentes de la razón R_i/R_e

Adicionalmente se puede ver como la morfología es un factor determinante en la energía de correlación del excitón, pues estas curvas toman diferentes valores dependiendo de la forma del QD que se analiza. Nótese también que cuanto más grande es la razón R_i/R_e más pequeño es el confinamiento en el QD y menor es la energía de correlación; por lo tanto, menor es la posibilidad de encontrar el par e-h en QD porque las funciones de onda llegan a ser más extendidas. Si el radio de la base se hace más grande que el

radio de Bohr efectivo, las diferencias más sensibles en las energías de correlación excitónicas aparecen entre los QDs en forma de disco y de pirámide, las cuales están asociadas con los confinamientos más pequeño y más grande, respectivamente.

Por último, se puede observar que al disminuir el radio de la base, aparece un cruce entre las curvas que describen la morfología piramidal y las truncadas de razón R_i/R_e igual a 0.25 y 0.5. Esto se debe a que el confinamiento produce un desbordamiento de la función de onda del electrón hacia la barrera del QD, lo que da lugar a un aumento de la separación entre el electrón y el hueco, y por consiguiente una disminución de la energía atractiva, lo que obligatoriamente producirá una disminución de la energía atractiva.

En la figura 1.19 se muestra la forma como evoluciona la energía de correlación del par e-h con el radio de la base de un QP ($R_i = 0$) para diferentes valores de la altura del QP. Esto permitirá observar diferencias notorias para la energía de correlación excitónica entre QDs de igual morfología pero diferente tamaño o volumen.

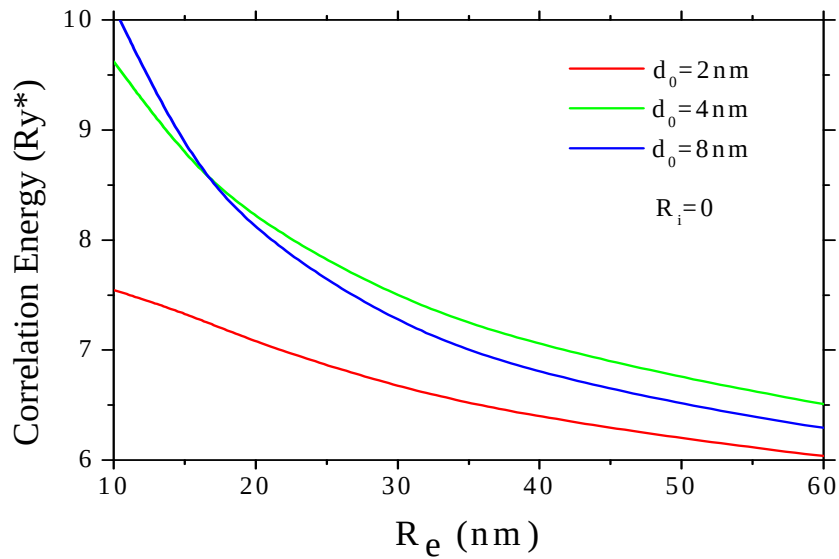


Figura 1. 19 Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QP para tres valores diferentes de la altura: $d_0 = 2nm$, $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$.

En esta figura se puede ver como una disminución en la altura del QP hace que el sistema esté más confinado produciendo un incremento en la energía de correlación. Es de advertir que para el caso $d_0 = 2nm$ y de acuerdo con

lo que se acaba de manifestar, la energía debería estar por encima de las diferentes curvas. Esto no ocurre de este modo debido a que se ha producido el desbordamiento de la función de onda, lo que genera una disminución de la energía con relación a las otras situaciones analizadas en la figura. Esta apreciación puede confirmarse al observar las dos curvas: $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$. Cuando se tienen condiciones de confinamiento moderado correspondientes a R_e mayores de $15nm$ y donde todavía no se presentan los efectos de desbordamiento de la función de onda electrónica, la curva con $d_0 = 8nm$ está por debajo de su análoga con $d_0 = 4nm$, pues esta última se encuentra más confinada y la función de onda no está muy extendida. Pero alrededor de $R_e = 15nm$ se presenta una coincidencia de valores de energía y para R_e por debajo de este valor, se presenta una inversión de las curvas, debido a que el confinamiento en el QP de altura $d_0 = 4nm$ es tan grande que se produce el desbordamiento de la función de onda hacia la barrera, haciendo que se produzca una disminución en la energía de correlación.

En conclusión, se podría decir que el espectro energético para un par e-h confinado en un QD es fuertemente dependiente de su morfología y del tamaño del mismo. Esta situación permite prever que el espectro energético del excitón puede modelarse y manipularse a voluntad del experimentador y dependiendo de la aplicación que se le quiera dar.

Para finalizar este primer capítulo, debo manifestar que el procedimiento implementado en estas dos últimas secciones, también se utilizó para analizar otros sistemas de pocas partículas, como es el caso de una donadora cargada negativamente, D^- y un trión X^- confinados en un disco cuántico. Los resultados de este trabajo se encuentran publicados en la referencia [84].

2. EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA D^0 Y DE UN IÓN D^- CONFINADOS EN SAQDs

Uno de los avances tecnológicos más importantes en el crecimiento de materiales semiconductores para la industria opto-electrónica, ha sido el de introducir impurezas dentro de la red cristalina. Esta posibilidad permite que el espectro de energía sea diseñado de acuerdo a las potenciales aplicaciones. Los átomos que se introducen en el cristal con un electrón extra a los requeridos para formar los enlaces químicos con los átomos vecinos, se denominan donadores (D^0) y tienen la característica fundamental que se ionizan fácilmente al donar su electrón al cristal. Cuando este donador se coloca dentro de una heteroestructura de baja dimensionalidad, el número de grados de libertad en el movimiento del electrón disminuye, haciendo que su situación sea más compleja que en el bloque, ya que la energía de enlace se vuelve fuertemente dependiente del potencial de confinamiento y de la posición de la donadora.

Al realizar un estudio de la energía de enlace de las donadoras neutras en el pozo $D^0(P)$ y en la barrera $D^0(B)$, se ha demostrado [123] que los electrones en el pozo están más fuertemente ligados que los electrones en la barrera. Esto significa que mediante un dopaje selectivo es posible transferir el electrón de la barrera al pozo y éste al ser atrapado por la $D^0(P)$ forma un ión D^- mucho más estable que en el volumen. Este proceso de ionización descrito por Larsen [124] se puede describir mediante la siguiente reacción: $D^0(P) + D^0(B) = D^-(P) + D^+(B)$.

La detección experimental del ión D^- es todo un reto debido a que sus estados son meta-estables y se pueden destruir térmicamente con gran facilidad, haciendo que su importancia práctica sea muy limitada. El descubrimiento del D^- en semiconductores de Si se debe a Dean, Haynes y Flood [125], mientras que la historia de los D^- en sistemas de 2D es más reciente y su hallazgo fue reportado por Huant, Najda y Etienne [26] usando experimentos magneto-ópticos.

Las energías del estado base para la D^0 y para el ión D^- confinados en un punto cuántico esférico (SQD), calculadas por métodos variacionales [126] y expansión por series [127], demuestran que la razón σ entre las energías de enlace del ión D^- y la donadora neutra, $\sigma = E_b(D^-)/E_b(D^0)$ es más grande que para otros tipos de estructuras, llegando a alcanzar la proporción

1:3. Mediante el uso del método de diagonalización [124] se ha podido calcular la energía de enlace para una D^0 descentrada dentro de un SQD y los resultados demuestran que el espectro es muy sensible a la posición de la donadora dentro del SQD. Estudios variacionales realizados sobre el ión D^- centrado en un SQD, demuestran que los niveles de energía para el estado base y para los estados excitados, tanto con espín singlete como con espín triplete, dependen de la profundidad del potencial y del radio del SQD[128].

Los efectos del tamaño del QD y de la altura del potencial sobre el espectro energético de una D^0 y de un ión D^- , confinados en un anillo toroidal muy estrecho, han sido reportados recientemente [129] usando el modelo de aproximación adiabática.

De otro lado, el método de dimensión fractal [79-130] ha demostrado ser muy efectivo a la hora de calcular el efecto de la posición de una D^0 y de un ión D^- sobre la energía del estado base, cuando ellas se encuentran confinadas dentro de diferentes tipos de heteroestructuras semiconductoras: pozos, hilos y puntos cuánticos esféricos. Los resultados alcanzados con este método, presentan una excelente concordancia con los obtenidos mediante Monte Carlo [18], diagonalización [131] y expansión por series [127,132].

A pesar de que los puntos cuánticos esféricos no se han fabricado experimentalmente usando el método de S-K, la mayoría de trabajos que estudian el espectro de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- , asumen que estos sistemas hidrogenoides se hallan confinados en este tipo de puntos cuánticos, debido a que su geometría permite simplificar los cálculos. Una de las razones por la cual son muy escasos los trabajos que analizan el espectro de una D^0 y de un D^- confinados en puntos cuánticos de forma de disco, pirámide truncada, lente, pirámide, etc, está relacionada con la dificultad que entrañan sus cálculos. Para que se tenga una idea, en el caso del espectro energético del D^- se presentan integrales multidimensionales de orden 6, las cuales requieren de un gran esfuerzo computacional para su evaluación a fin de garantizar la precisión requerida. No obstante esta dificultad y ante la escasez de trabajos que estudien el espectro energético de los sistemas D^0 y D^- en SAQDs, el presente capítulo tiene como objetivo fundamental analizar de manera exhaustiva, la influencia que tienen el tamaño, la forma y la posición de la impurezas, sobre la energía de enlace de una D^0 y de un ión D^- confinados en SAQDs. En el caso particular de la formación del ión D^- , a partir de la transferencia de un electrón desde de una donadora en la barrera a una donadora en el pozo, se analiza como se refuerza este proceso por la aplicación de un campo magnético. El estudio energético para una impureza neutra D^0 y un ión D^- descentrado en un SAQD con diferentes

morfologías y en presencia de campo magnético, se realizará usando el método de dimensión fractal y la aproximación adiabática.

2.1 MODELO

Para efectos de cálculo numérico se consideran cuatro diferentes tipos de QDs de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ con simetría cilíndrica cuyas imágenes 3D se presentan esquemáticamente en la figura I.5: b) disco, c) lente, d) pirámide cónica, y e) pirámide truncada. Las funciones que describen la variación del espesor del punto cuántico con la distancia radial al eje de simetría se presentan en la tabla I.1 y el potencial de confinamiento al que se encuentran sometidas las partículas está definido por la ecuación I.1.

Debido a que en el presente capítulo, el mayor esfuerzo está orientado a determinar el efecto que tienen la morfología, el tamaño del punto y la posición de la impureza sobre el espectro de energía de una D^0 y un D^- , en los cálculos que acá se realicen, no serán tenidos en cuenta los efectos asociados con las variaciones de los parámetros del material, es decir, diferencias relacionadas con las constantes dieléctricas y las masas efectivas de los electrones en la región del pozo y de la barrera.

El Hamiltoniano para el estado base de un ión D^- en SAQD y en presencia de un campo magnético uniforme orientado en la dirección de crecimiento z del QD, se puede escribir como:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1, \tau_2) = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1, \tau_1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2, \tau_2) + 2\tau_1\tau_2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \quad (2.1a)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_i, \tau) = -\nabla_i^2 + V(\rho_i, z_i) + \gamma^2 \rho_i^2 / 4 - 2\tau/|\mathbf{r}_i - \xi|; \quad i = 1, 2 \quad (2.1b)$$

donde $\xi = (\xi_\rho, \xi_z)$ y $\mathbf{r}_i = (\rho_i, z_i)$ definen los vectores de posición del ión y de los electrones 1 y 2, respectivamente.

En la escritura de los Hamiltonianos (2.1a) y (2.1b) se han introducido parámetros artificiales τ_1 , τ_2 y τ con el propósito de describir diferentes situaciones. Por ejemplo, si en el Hamiltoniano uniparticular (2.1b) se hace $\tau = 0$ o $\tau = 1$, entonces se tiene un electrón libre y una donadora neutra, respectivamente. Pero si simultáneamente se hacen $\tau_1 = \tau_2 = 1$, entonces se obtiene un ión D^- . Las funciones de onda para el electrón libre, $f_0(\mathbf{r})$ la donadora neutra, $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$ y la donadora cargada negativamente, $\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, así como sus correspondientes energías más bajas E_0 , $E(D^0)$ y $E(D^-)$ se pueden encontrar como soluciones de los respectivos problemas de autovalores:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau=0) f_0(\mathbf{r}) = E_0 f_0(\mathbf{r}) \quad (2.2a)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau=1) \Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E(D^0) \Psi_{D^0}(\mathbf{r}) \quad (2.2b)$$

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1=1, \tau_2=1) \Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(D^-) \Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.2c)$$

Para determinar la existencia de estados ligados para las donadoras neutras y cargadas negativamente en SAQDs, se ha definido en [128] las energías de enlace $E_b(D^0)$ y $E_b(D^-)$, respectivamente. Estas cantidades están asociadas a la mínima energía requerida para transferir un electrón desde el pozo a la barrera. Para ayudar a entender este concepto, en la figura 2.1 se ha hecho una representación esquemática de una donadora neutra D^0 ligada a su único electrón y de un ión D^- ligado a sus dos electrones, así como de sus respectivos estados base de energía $E(D^0)$ y $E(D^-)$.

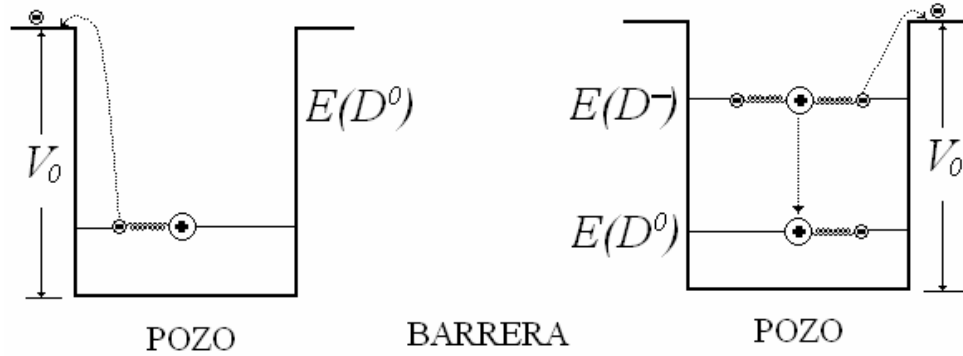


Figura 2.1 Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el potencial de confinamiento V_0

Las reacciones que tienen lugar durante la transferencia del electrón desde el pozo hacia la barrera se pueden describir así:



Un electrón ligado a la donadora en el pozo se transforma en una donadora ionizada positivamente fija en el pozo (P) y un electrón en la barrera (B)



Una donadora cargada negativamente confinada en el pozo (P) se transforma en una donadora neutra en el pozo (P) y un electrón en la barrera (B).

Una vez calculadas las energías del estado base, $E(D^0)$ y $E(D^-)$, las energías de enlace para una D^0 y un ión D^- se pueden expresar, respectivamente como:

$$E_b(D^0) = V_0 - E(D^0) \quad (2.3a)$$

$$E_b(D^-) = V_0 + E(D^0) - E(D^-) \quad (2.3b)$$

Nótese como la energía de enlace da información conjunta acerca de las propiedades, tanto del donador en el pozo como de la barrera, la cual se caracteriza a través del potencial de confinamiento V_0 .

Con relación a la definición exacta de la energía de enlace para una D^0 y un ión D^- , no hay un consenso unánime porque otros autores [126, 131] la definen para el caso del D^0 como la diferencia de los autovalores de los Hamiltonianos $\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau=0)$ y $\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau=1)$ para el caso del D^- la definen como $\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1=1, \tau_2=0)$ y $\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1=1, \tau_2=1)$.

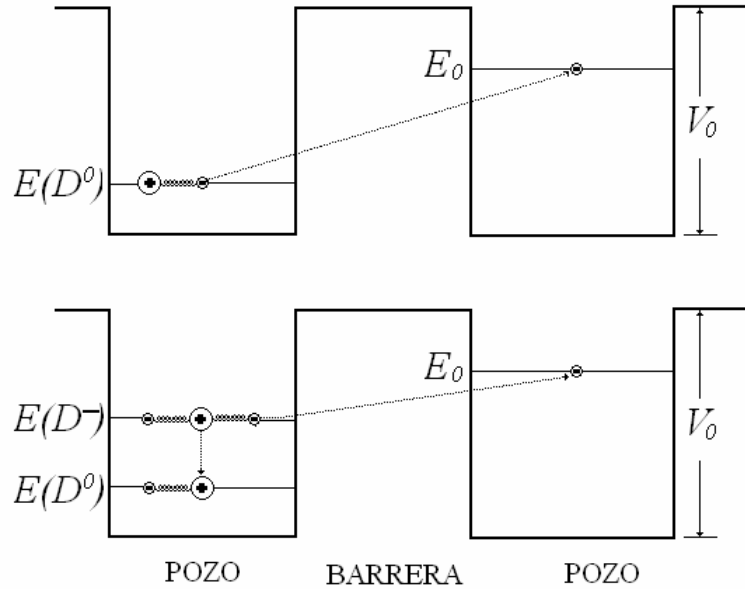


Figura 2.2 Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el nivel de energía para el estado base de un electrón libre en un segundo pozo.

Para ayudar a comprender el significado de esta definición de energía de enlace, vamos a basarnos en la figura 2.2

Esta energía así definida por los autores [126,131] se puede interpretar como la energía necesaria para liberar un electrón, bien sea desde la donadora o del ión D^- y moverlo al estado más bajo del electrón libre confinado en un segundo QD. Este proceso no se puede llevar a cabo en un QD aislado, porque si así ocurriera, entonces el potencial atractivo entre el electrón y el centro D^+ , en el caso descrito en la parte superior de la figura 2.2 o entre el electrón y la donadora neutra D^0 en el caso descrito en la parte inferior de la figura 2.2, inmediatamente podría ligar nuevamente al electrón y se reestablecería el sistema original D^0 y D^- , respectivamente. Una energía de enlace así definida involucra un proceso de tunelamiento del electrón liberado a un segundo QD. Debido a que entre las dos definiciones descritas para la energía de enlace, existen marcadas diferencias, en lo que respecta a esta tesis preferimos tomar esta segunda definición como la correspondiente a la energía de correlación, es decir:

$$E_c(D^0) = \hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau = 0) - \hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau = 1) = E_0 - E(D^0) \quad (2.4a)$$

$$E_c(D^-) = \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1 = 1, \tau_2 = 0) - \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1 = 1, \tau_2 = 1) = E_0 + E(D^0) - E(D^-) \quad (2.4b)$$

Nótese que la energía de correlación sólo contiene información acerca de las propiedades intrínsecas del donador confinado en el QD, pero no de su entorno.

En este capítulo se presentarán resultados de cálculo, tanto para la energía de enlace como para la energía de correlación.

2.2 ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA EL ELECTRÓN LIBRE

Soluciones exactas para el electrón libre en un QD no se han encontrado debido a que el Hamiltoniano (2.2a) no es separable a causa de la existencia del potencial $V(\rho, z)$. Por lo tanto, algún método aproximado se debe usar para encontrar las funciones de onda $f_0(\mathbf{r})$ del electrón libre y su correspondiente nivel de energía más bajo E_0 en un QD. De acuerdo con las mediciones estructurales realizadas sobre los SAQDs, una situación típica corresponde al caso en que el espesor del QD es mucho más pequeño que su dimensión lateral en el plano $((d_o + d_b) \ll 2R_0)$. Esta condición

experimental nos permite sacar provecho de la aproximación adiabática que ya habíamos usado exitosamente en el capítulo 1 para analizar el espectro de energía del par e-e en un QR [84] y del par e-h en una pirámide [88]. Siguiendo el procedimiento descrito en la sección 1.4, la función de onda $f_0(\mathbf{r})$ se puede expresar como el producto de dos funciones, $f_z(z, \rho)$ la cual describe el movimiento rápido en la dirección transversa, caracterizada por un fuerte confinamiento y la segunda función $f_\rho(\rho)$ la cual describe el movimiento lento en el plano. De acuerdo con el proceso estándar seguido en la aplicación de la AA que se ha descrito en la sección 1.4, lo primero que se debe hacer es resolver la ecuación de onda para el electrón en un pozo cuántico de ancho $d(\rho)$ y barrera de potencial de altura V_0 :

$$-\frac{d^2 f_z(z, \rho)}{dz^2} + V(\rho, z) f_z(z, \rho) = E_z(\rho) f_z(z, \rho) \quad (2.5)$$

donde ρ debe tratarse como un parámetro.

Los resultados para el potencial de confinamiento $E_z(\rho)$ que gobierna el movimiento electrónico bidimensional se muestran en la figura 2.3. Los cálculos se han realizado para diferentes perfiles sin tener en cuenta el efecto de la capa húmeda ($d_b = 0$).

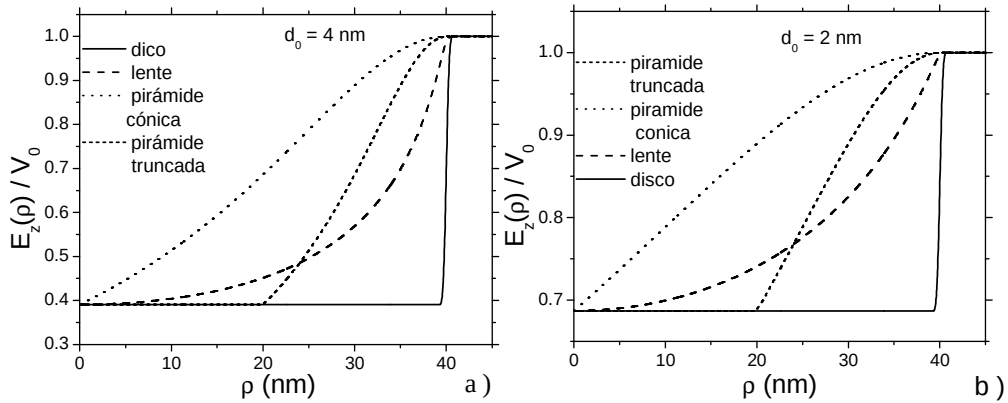


Figura 2.3 Curvas del potencial confinamiento normalizado del movimiento electrónico bidimensional en puntos cuánticos de diferente morfología y dos alturas diferentes

A partir de estas curvas se puede ver que la altura de la barrera, para el movimiento electrónico en el plano, experimenta un decrecimiento debido al fuerte confinamiento en la dirección z . Cuando se comparan las variaciones para las $d_0 = 4\text{nm}$ y $d_0 = 2\text{nm}$ se puede concluir que cuanto

más pequeña es la altura del QD, más grande es el decrecimiento de la altura de barrera. Por ejemplo, en la figura 2.3a se observa que cuando la altura de la barrera es de $4nm$ el potencial decrece en un 40% en comparación con el potencial original, mientras que en la figura 2.3b, para la altura del punto igual a $2nm$, la reducción del potencial alcanza a ser del 70%. Esto se debe a que el electrón se encuentra más confinado, lo cual aumenta la posibilidad de desbordamiento de la función de onda electrónica a la región de la barrera. También se puede notar que el perfil del QD determina la forma del potencial de confinamiento en el plano, poniendo de manifiesto que el espectro de energía uniparticular es fuertemente dependiente de la morfología y tamaño del QD.

Una vez calculado el autovalor $E_z(\rho)$ se reemplaza en la ecuación original (2.2a) y se procede a analizar el movimiento lento en el plano:

$$-\nabla_{\rho}^2 f_{\rho}(\rho) + \left[E_z(\rho) + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \right] f_{\rho}(\rho) = E_0 f_{\rho}(\rho) \quad (2.6)$$

Para obtener la energía del estado base a partir de esta ecuación, se debe tener en cuenta que el potencial $E_z(\rho)$ en la región $\rho \geq R_e$ permanece constante e igual a V_0 . Por lo tanto, la solución de la ecuación (2.6) fuera del QD se puede encontrar analíticamente:

$$f_0(\rho) = C \exp\left(-\frac{\gamma \rho^2}{4}\right) U\left(\frac{1}{2} + \frac{V_0 - E_0}{2\gamma}, 1, \frac{\gamma \rho^2}{2}\right); \quad R_e \leq \rho < \infty \quad (2.7)$$

donde $U(a, 1, x)$ es la forma general de la función hipergeométrica confluyente [83] la cual permanece finita cuando $x \rightarrow \infty$. Dentro del QD, el uso de la sustitución $g(\rho) = f_0'(\rho)/f_0(\rho)$, permite que la ecuación (2.6) se reduzca a un problema de Cauchy para la ecuación de Riccati:

$$g'(\rho) + g^2(\rho) + g(\rho)/\rho + [E_0 - E_z(\rho) - \gamma^2 \rho^2/4] = 0; \quad (2.8)$$

$$0 < \rho < R_0; \quad g(0) = 0$$

donde E_0 se considera como un parámetro fijo. Uno puede definir la función $g(R_e, E_0)$ como solución del problema (2.8) en el punto $\rho = R_e$, la cual se puede encontrar para cada valor de E_0 usando por ejemplo el método de Runge-Kutta. Luego se exige la continuidad de esta función con la solución de (2.8) en el punto $\rho = R_e$ y así se puede obtener la siguiente ecuación trascendente que permite obtener la energía del estado base E_0

$$g(R_0, E_0) = -\frac{\gamma R_0}{2} - \gamma R_0 \left(\frac{1}{2} + \frac{V_0 - E_0}{2\gamma} \right) U \left(\frac{3}{2} + \frac{V_0 - E_0}{2\gamma}, 2, \frac{\gamma R_0^2}{2} \right) / U \left(\frac{1}{2} + \frac{V_0 - E_0}{2\gamma}, 1, \frac{\gamma R_0^2}{2} \right) \quad (2.9)$$

en donde se ha utilizado la relación [19] $U'(a, c; x) = -aU(a+1, c+1; x)$

A partir de la solución de la ecuación (2.6) es posible determinar la función de onda $f_\rho(\rho)$ para el movimiento lento, la cual junto con la función de onda $f_z(z, \rho)$, permiten encontrar la función de onda $f_0(\mathbf{r})$ para el electrón en el QD como el producto de estas dos funciones:

$$f_0(\mathbf{r}) = f_z(z, \rho) f_\rho(\rho) \quad (2.10)$$

Una vez determinada $f_0(\mathbf{r})$ se puede calcular la distribución de la densidad de probabilidad electrónica dentro de los QDs con diferentes morfologías. Los resultados se muestran en la figura 2.4 para puntos en forma de disco, lente pirámide cónica.

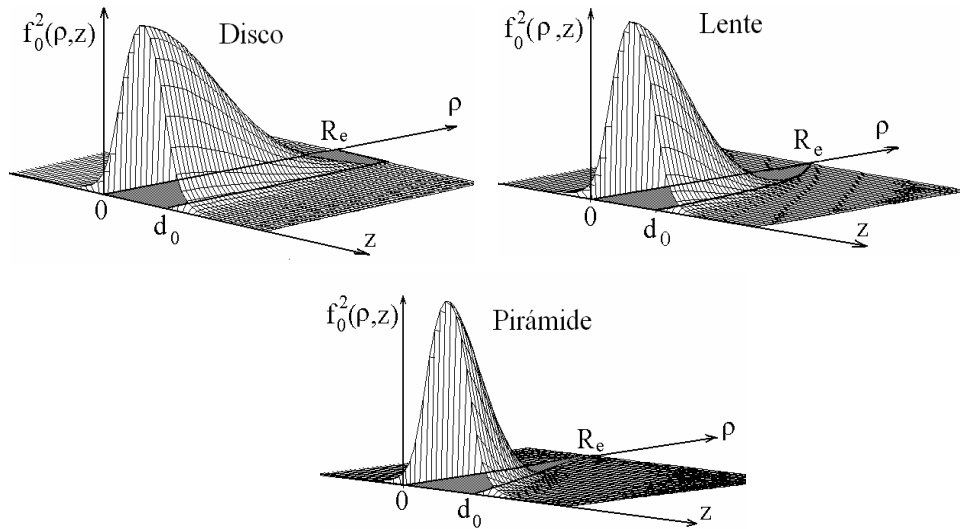


Figura 2.4 Distribución de carga electrónica en el plano $\rho-z$ para diferentes QDs obtenidos mediante el uso de la función de onda 2.10

De esta figura se puede observar que la densidad de distribución electrónica llega a ser más y más comprimida alrededor del eje, a medida que la morfología del QD varía su forma desde un disco a una lente y posteriormente a una pirámide cónica, donde el confinamiento electrónico es más fuerte. Este cambio en la distribución del electrón libre dentro del

QD, tendrá gran incidencia sobre la energía de enlace de las donadoras neutras y cargadas negativamente.

2.3 ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA NEUTRA D^0 Y DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE D^-

A fin de encontrar las funciones de onda para la donadora neutra, $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$ y para el ión D^- , $\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ correspondientes a los estados de energía más bajos, $E(D^0)$ y $E(D^-)$, respectivamente, se usarán funciones de prueba de la forma:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r}) \Phi_{D^0}(|\mathbf{r} - \xi|) \quad (2.11a)$$

$$\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_0(\mathbf{r}_1) f_0(\mathbf{r}_2) \Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \xi|, |\mathbf{r}_2 - \xi|, r_{12}) \quad (2.11b)$$

Estas funciones de onda dan excelentes resultados[79-130] cuando se comparan con los datos obtenidos mediante los métodos de Monte Carlo [18] y diagonalización exacta [131], tanto para donadoras centradas como descentradas en un punto cuántico esférico.

Las funciones envolventes $\Phi_{D^0}(|\mathbf{r} - \xi|)$ y $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \xi|, |\mathbf{r}_2 - \xi|, r_{12})$ que describen la modificación de la distribución de probabilidad producida por la interacción Coulombiana, satisfacen cada una su propia ecuación de onda y éstas pueden obtenerse a partir del método de dimensión fractal [79,130].

A. ECUACIÓN DE ONDA PARA $\Phi_{D^0}(|\mathbf{r} - \xi|)$

Esta función envolvente tiene simetría esférica y solamente depende de la distancia relativa entre el ión fijo y el electrón, $|\mathbf{r} - \xi|$. La ecuación que ella satisface se puede obtener partiendo del principio variacional de Schrodinger:

$$F[\Phi_{D^0}] = \langle f_0 \Phi_{D^0} | \hat{H}_0 - E | f_0 \Phi_{D^0} \rangle \rightarrow \min \quad (2.12)$$

Trasladando el origen de coordenadas a la posición del ión impureza y siguiendo el procedimiento descrito en la sección 1.6, pero teniendo en cuenta que $\eta_e = 1$ y $J_0(\rho, \rho_h) = J(r)$, la ecuación (1.49) puede escribirse como:

$$F[\Phi_{D^0}] = \int_0^\infty J(r) \left\{ \left[\frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right]^2 - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}^2(r) + (E_0 - E) \Phi_{D^0}^2(r) \right\} dr \rightarrow \min \quad (2.13)$$

donde

$$J(r) = 4\pi r^2 P(r); \quad P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \int f_0^2(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}) \delta(|\mathbf{r}| - r) d\mathbf{r} \quad (2.14)$$

De esta ecuación se puede ver que el factor $J(r)$ está relacionado con la densidad de carga $P(r)$ para el estado base del electrón libre, promediada sobre una esfera de radio r centrada en el ión impureza.

Una vez calculada la función de onda del electrón libre (2.10), se puede determinar la dependencia del Jacobiano con r mediante una estimación numérica de la integral (2.14), la cual en coordenadas cilíndricas se puede escribir como:

$$J(r) = r \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-r}^r dz f_z^2(z + \xi_z, |\boldsymbol{\rho} + \boldsymbol{\xi}_\rho|) f_\rho^2(|\boldsymbol{\rho} + \boldsymbol{\xi}_\rho|); \quad (2.15)$$

$$|\boldsymbol{\rho} + \boldsymbol{\xi}_\rho| = \sqrt{r^2 - z^2 + \xi_z^2 + 2\xi_z \sqrt{r^2 - z^2} \cos \varphi}$$

A partir del cálculo de la derivada funcional $\delta F[\Phi_{D^0}]/\delta \Phi_{D^0} = 0$ se obtiene una ecuación de Euler-Lagrange unidimensional para $\Phi_{D^0}(r)$

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad (2.16)$$

La forma tridimensional de esta ecuación es la siguiente:

$$-\frac{1}{P(r)} \nabla [P(r) \nabla \Phi_{D^0}(r)] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad (2.17)$$

La ecuación de onda renormalizada (2.16) que satisface $\Phi_{D^0}(r)$ describe un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo, donde el Jacobiano $J(r)$ es la parte radial del elemento de volumen. Esta interpretación surge de la condición de ortogonalidad $\langle \Phi_{D^0}^n(r) | \Phi_{D^0}^m \rangle = \delta_{nm}$ con elemento de volumen infinitesimal $dV = J(r) dr$, donde $J(r)$ se puede considerar como el área

de un cascarón esférico de espesor dr . En un espacio homogéneo de una, dos y tres dimensiones, $J(r)$ es igual a 1, $2\pi r$ y $4\pi r^2$, respectivamente. Si la dependencia de $J(r)$ sobre r fuera una ley de potencia, por ejemplo $J(r) = cr^{D-1}$, entonces la ecuación (2.16) coincidiría con la ecuación de Schrödinger para el estado más bajo del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo D -dimensional, donde D puede ser un número entero o fraccionario. En los puntos cuánticos $J(r)$ no obedece a una ley de potencia en la separación electrón-donador, r , debido a la existencia de la densidad de carga. Por esta razón, (2.16) se puede considerar como la ecuación de onda para un átomo de hidrógeno en un espacio de dimensión fraccionaria variable que depende de la distancia electrón-donador. A causa de esta interpretación, el modelo que se ha implementado en el análisis de la donadora neutra y cargada negativamente se le denomina método de dimensión fractal [79,130].

Para resolver la ecuación (2.16) se reescribirá en la siguiente forma:

$$-\Phi_{D^0}''(r) - w(r)\Phi_{D^0}'(r) - \frac{2}{r}\Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0]\Phi_{D^0}(r); \quad (2.18)$$

$$w(r) = \left[\frac{2}{r} + (\ln P(r))' \right]$$

donde se usa la notación $J(r) = r^2 P(r)$ teniendo en cuenta que el comportamiento del Jacobiano (2.15) para pequeños valores de r es casi parabólico. Como la solución de la ecuación (2.18) en el punto $r = 0$ debe ser una función analítica, entonces se puede derivar la siguiente condición inicial: $\Phi_{D^0}'(0)/\Phi_{D^0}(0) = -1$. Usando la sustitución $\tan \vartheta(r) = \Phi_{D^0}'(r)/\Phi_{D^0}(r)$, se puede reducir el problema (2.18) a un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden:

$$\vartheta(r) + \sin^2 \vartheta(r) + w(r) \sin \vartheta(r) \cos \vartheta(r) + \left[E(D^0) - E_0 + \frac{2}{r} \right] \cos^2 \vartheta(r) = 0; \quad (2.19)$$

$$\vartheta(0) = -\pi/4$$

Aquí la función $w(r)$ y el valor E_0 se conocen previamente de la solución del problema del electrón libre en el QD y el valor de la energía del donador $E(D^0)$ se puede considerar como un parámetro fijo. Para cada valor de este parámetro, el problema de Cauchy se puede resolver numéricamente usando el método de Runge-Kutta y la solución $\vartheta(r, E(D^0))$ se puede encontrar en cualquier punto r . A partir del significado físico de la función envolvente

$\Phi_{D^0}(r)$, ésta debería tender a cero para grandes separaciones r entre el electrón y el ión impureza. También se puede ver a partir de la definición (2.11a), que el comportamiento de la función envolvente para grandes separaciones no afecta esencialmente la función de onda del estado base de la donadora debido a la presencia del factor predominante $f_0(\mathbf{r})$, el cual decrece exponencialmente para grandes separaciones r . Por esta razón, uno puede escoger un valor límite suficientemente grande para las separaciones electrón-ión, $R_{\max}$ de tal manera que $\Phi_{D^0}(R_{\max})=0$. Esta condición permite obtener la siguiente ecuación trascendente con respecto a la energía desconocida del donador $E(D^0)$:

$$\vartheta(R_{\max}, E(D^0)) = -\pi/2 \quad (2.20)$$

donde $\vartheta(R_{\max}, E(D^0))$ es solución del problema de Cauchy (2.19) en el punto $r = R_{\max}$.

B. ECUACIÓN DE ONDA PARA $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \xi|, |\mathbf{r}_2 - \xi|, r_{12})$

El método descrito anteriormente, también se puede usar para calcular el estado base del ión D^- con función de prueba (2.11b), en donde la función envolvente $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \xi|, |\mathbf{r}_2 - \xi|, r_{12})$ tiene en cuenta los efectos de correlación entre los electrones debido a la interacción Coulombiana. En esta función r_1 y r_2 representan las distancias entre los electrones 1 y 2 al ión impureza, mientras r_{12} representa la distancia entre los electrones. Usando el principio variacional de Schrödinger con Hamiltoniano (2.1a), se tiene que la funcional para la envolvente Φ_{D^-} se puede escribir como:

$$F[\Phi_{D^-}] = \langle f_0(1) f_0(2) \Phi_{D^-} | \hat{H} - E | f_0(1) f_0(2) \Phi_{D^-} \rangle \rightarrow \min \quad (2.21)$$

Para obtener la ecuación diferencial que satisface $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \xi|, |\mathbf{r}_2 - \xi|, r_{12})$, se debe seguir el mismo procedimiento descrito en la sección (1.6) y en el apartado anterior para la D^0 . La ecuación Euler-Lagrange que se obtiene para la función envolvente del ión D^- , con origen situado en la posición del ión impureza, es la siguiente:

$$\sum_{i=1}^2 -\frac{1}{J(r_i)} \frac{d}{dr_i} \left[J(r_i) \frac{d\Phi_{D^-}}{dr_i} \right] + \left(\frac{2}{r_{12}} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + 2E_0 - E(D^-) \right) \Phi_{D^-}(r) = 0 \quad (2.22)$$

y en términos de la densidad de probabilidad $P(r)$ se puede expresar como:

$$\sum_{i=1}^2 -\frac{1}{P(r_i)} \nabla_i [P(r_i) \nabla_i \Phi_{D^-}] + \left(\frac{2}{r_{12}} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + 2E_0 - E(D^-) \right) \Phi_{D^-}(r) = 0 \quad (2.23)$$

Se puede ver claramente que la ecuación (2.22) describe un ión de hidrógeno H^- en un espacio isotrópico con dimensión fractal

Con el propósito de encontrar la energía $E(D^-)$ se usará para la función envolvente Φ_{D^-} una función triparamétrica del tipo de Hylleras[83]:

$$\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12}) = [1 + \beta(r_1 - r_2)^2 + \eta r_{12}] \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \quad (2.24)$$

La cual permitirá encontrar la energía variacional $E(D^-, \alpha, \beta, \eta)$ como una función de los tres parámetros α, β y η . El límite superior estimado para la energía del donador cargado negativamente se puede encontrar como:

$$E(D^-) = \min_{\alpha, \beta, \eta \in (0,1)} E(D^-, \alpha, \beta, \eta) \quad (2.25)$$

En la determinación de $E(D^-, \alpha, \beta, \eta)$ se usarán coordenadas de Hylleras[83] en un espacio tridimensional isotrópico para cálculo de las integrales múltiple, donde la parte radial del Jacobiano r^2 se sustituye por $r^2 P(r)$. Luego puede obtenerse la siguiente expresión explícita para la energía variacional como una función de los parámetros α, β y η :

$$E(D^-, \alpha, \beta, \eta) = 2E_0 + 2\alpha^2 + \frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \zeta\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \zeta\right) R_1(s, t) dt}{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \zeta\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \zeta\right) R_0(s, t) dt}, \quad (2.26)$$

donde

$$\begin{aligned}
R_1(s,t) = & 2(s-t) \left[(s^2-t^2)(1+\beta t^2)^2 + 4\beta\eta s^2 t^2 + 2\alpha\eta s t^2 (1+\beta t^2) \right] + \\
& (s^2-t^2) \left\{ 2s\alpha\eta^2 t^2 - 4s(1+\beta t^2)^2 + (s^2-t^2) \left[4\beta^2 t^2 + 2\eta(1+\beta t^2) + \eta^2 \right] \right\} - \\
& \frac{2\eta}{3} (s^3-t^3) \left[4\beta t^2 + 2s(4+\alpha)(1+\beta t^2) - \eta(s^2-t^2) \right] - \eta^2 s (s^4-t^4) (\alpha+2) \\
R_0(s,t) = & (s^2-t^2) \left[\frac{1}{2} (s^2-t^2)(1+\beta t^2)^2 + \frac{2\eta}{3} (s^3-t^3)(1+\beta t^2) + \frac{\eta^2}{4} (s^4-t^4) \right]
\end{aligned} \tag{2.27}$$

2.4 ESPECTRO DE ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA NEUTRA D^0

Para describir los efectos de tamaño del QD y de la posición de la donadora sobre la energía del estado base, se han calculado las energías de correlación y de enlace de una D^0 confinada dentro de un QD en forma de lente, con radio de la base $R_e = 25\text{nm}$, espesor de capa húmeda $d_b = 2\text{nm}$ y cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y 8nm . Los resultados de cálculo para las energías $E_b(D^0)$ y $E_c(D^0)$ en función de la distancia al eje ξ_p , para una donadora localizada en la base de la capa húmeda ($\xi_z = d_b = 2\text{nm}$) se muestran en la figura 2.5

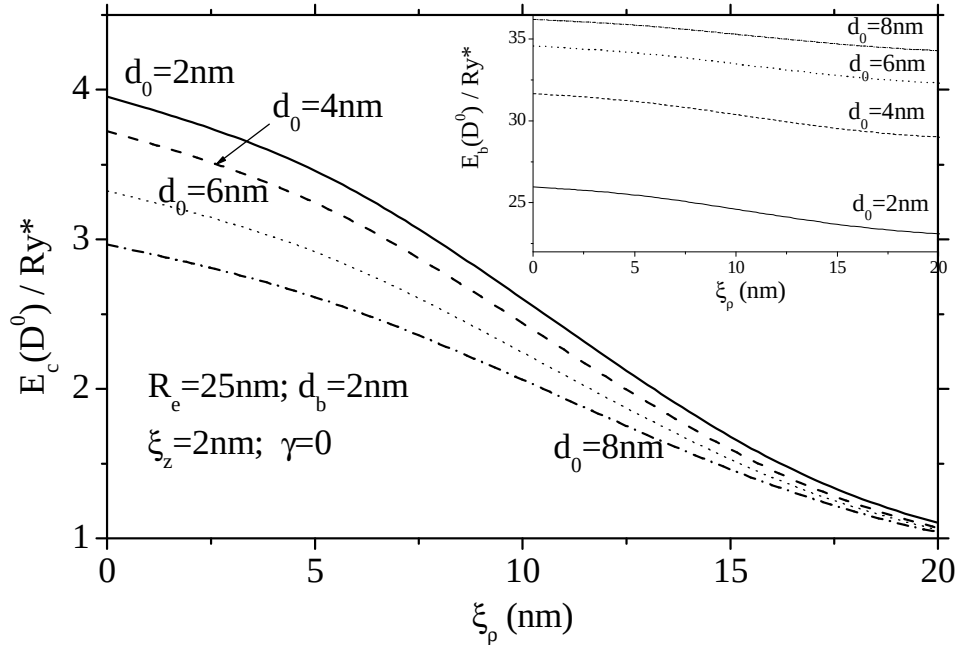


Figura 2.5 Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y 8nm . En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

En esta figura se puede observar como las energías $E_b(D^0)$ y $E_c(D^0)$ disminuyen cuando el donador se aleja del eje del QD. Esto se debe a que el movimiento del electrón está restringido principalmente a la región cercana al eje, independientemente de la posición de la donadora. Por lo tanto, cuando la donadora se mueve desde el eje, la distancia promedio entre el electrón y el ión se incrementa, lo cual conduce a una disminución de las energías de correlación y de enlace, debido al decrecimiento en la interacción Coulombiana. También se puede ver a partir de esta figura que los ordenes de las curvas para diferentes alturas del QD en la figura principal y en el recuadro se invierten. La energía de correlación en la figura principal decrece con el incremento de la altura del QD, mientras los valores más grandes de energía de enlace, en la figura del recuadro, corresponden a donadores localizados en QDs con alturas más grandes. Esto se debe a que una reducción en la altura del QD, produce una subida de los niveles de energía del electrón y del donador hacia la banda de conducción.

En la figura 2.6 se presenta el efecto del campo magnético sobre las energías de correlación del donador en una lente de altura $d_0 = 4 \text{ nm}$, radio de la base $R_0 = 25 \text{ nm}$ y espesor de la capa húmeda $d_b = 2 \text{ nm}$.

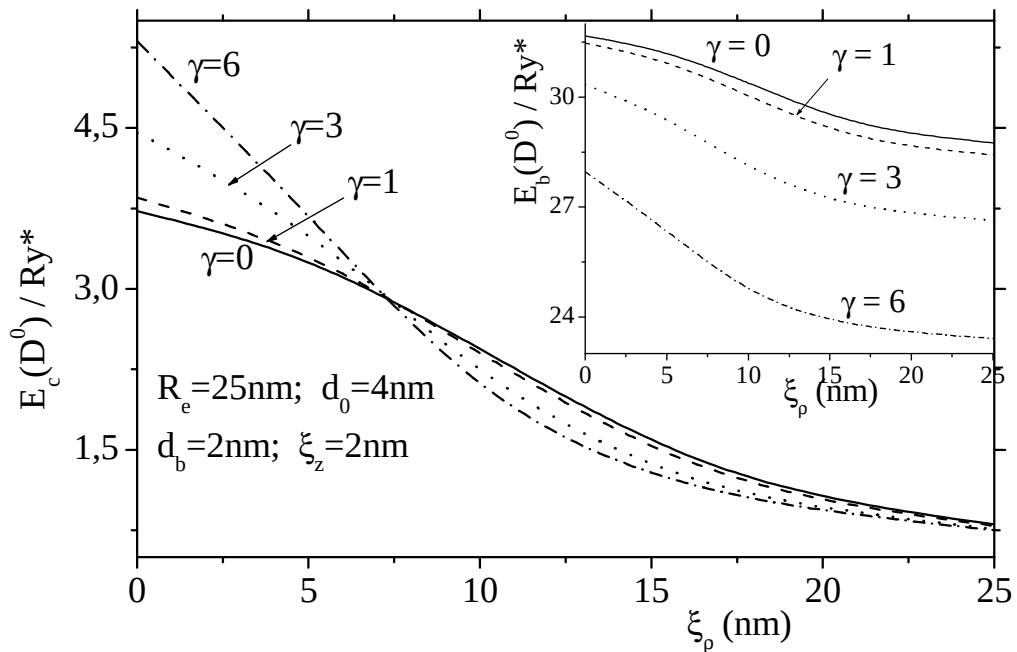


Figura 2.6 Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0, 1, 3, 6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

Se puede ver a partir de la figura principal como las energías de correlación de los donadores localizados en la vecindad del eje es mayor cuanto más grande es la intensidad del campo magnético, pero este comportamiento se invierte al alejar la donadora del eje del QD. En consecuencia, todas las curvas se cruzan y ésto tiene lugar en un mismo punto ($\xi_\rho \approx 7.5nm$) donde la energía de correlación permanece inalterada por la acción del campo magnético. En general, el efecto del campo magnético es el de producir un confinamiento adicional, el cual restringe el movimiento del electrón en dirección radial, haciendo más probable su localización en la vecindad del eje. Debido a esta variación en la distribución de carga por efecto del campo magnético, se produce una disminución en la separación electrón-ión para donadores localizados cerca del eje. Esta situación conlleva a un incremento de la energía de correlación Coulombiana, pero este comportamiento se invierte cuando los donadores se sitúan lejos del eje, lo cual explica la inversión de las curvas de la figura 2.6.

Muchos autores en sus estudios sobre SAQDs, debido a que la altura del punto cuántico es mucho menor que el tamaño lateral, han ignorado los efectos que tienen la altura y la forma SAQD sobre el espectro de energía de impurezas confinadas en estos sistemas. Con el propósito de describir el efecto de la morfología del QD y la posición del donador sobre la energía del estado base de una D^0 , se ha calculado su energía de enlace en función del radio R_c de la base. Los puntos se toman en forma de disco, lente y pirámide truncada, para dos alturas diferentes $d_0 = 2nm$ y $4nm$ e impureza localizada a la mitad del eje ($\xi_\rho = 0$, $\xi_z = 0.5d_0$). Como el objetivo puntual ahora es de analizar los efectos de tamaño y forma de los SAQDs sobre la energía de correlación, de manera intencional se ha dejado de lado el efecto del espesor de la capa húmeda.

A fin de facilitar el análisis, resulta conveniente comparar los resultados obtenidos con las energías de enlace para una donadora neutra en el bloque [133-134], tanto en el caso 3D ($E_c = 1Ry^*$) como en el 2D ($E_c = 4Ry^*$).

Los resultados de cálculo de la energía de correlación para la impureza D^0 se muestran en la figura 2.7. Comparando las curvas para los QDs con diferentes morfologías, se puede observar que en la región correspondiente a grandes radios de la base ($R_c > 20nm$), la mayor energía de correlación le pertenece al QD en forma de pirámide cónica y el menor valor de energía de correlación es para el disco. Esto se debe a que en la pirámide cónica se da el mayor confinamiento en la dirección radial, seguida por la lente, mientras que en el disco se da el menor confinamiento. Estos resultados están en absoluta correspondencia con los mostrados en la figura 2.4 para el electrón libre. Cuando el radio disminuye la energía de correlación del donador

neutro inicialmente crece, pero existe un momento en que la función de onda del electrón comienza a desbordar hacia la región de la barrera produciéndose un incremento de la separación entre el electrón y la impureza, lo cual se traduce en una disminución de la energía de enlace a causa del debilitamiento en la interacción Coulombiana.

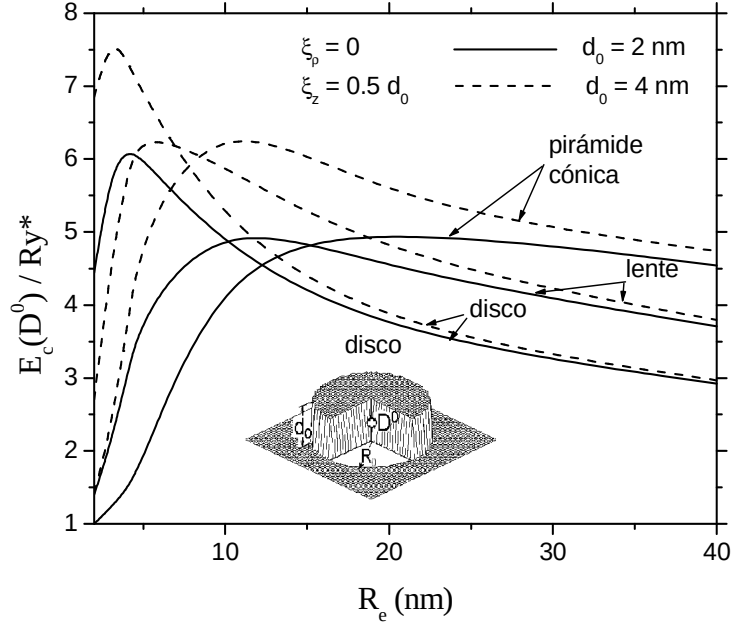


Figura 2.7 Energía de enlace para el estado base de una D^0 en función del radio R_e de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2$ nm y la punteada a una altura $d_0 = 4$ nm. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.

Comparando las curvas para las diferentes estructuras, se puede ver que el efecto de desbordamiento ocurre primero en la pirámide cónica seguido por la lente y finalmente por el disco. Como resultado de este efecto, se presenta un cruzamiento y una inversión del orden de las energías de correlación cuando el radio de la base es menor de 15 nm y en el límite cuando este radio tiende a cero, se observa que D^0 recupera completamente su carácter 3D, ya que la energía de enlace se aproxima paulatinamente al valor de $1Ry^*$, el cual es característico de un D^0 en sistemas 3D en el bloque. Este valor de la energía de enlace contrasta con el valor promedio de $4Ry^*$ que se obtiene para estructuras con radio muy grande. En este caso las estructuras se pueden considerar como sistemas cuasi-bidimensionales con un fuerte pero incompleto confinamiento en la dirección z , debido a los valores finitos del potencial de confinamiento y de la altura del QD. Por lo tanto, es de esperarse que cuando el valor del radio se incremente lo

suficiente, la energía de enlace del D^0 tenderá a valores ligeramente más bajos que los obtenidos para sistemas 2D en le bloque.

2.5 ESPECTRO DE ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE D^-

Para describir los efectos asociados con la posición de la impureza, la morfología y el tamaño del SAQD sobre la energía del estado base de una impureza cargada negativamente, se calculan la energía de enlace y de correlación mediante las definiciones (2.3b y 2.4b). Los resultados de cálculo de $E_c(D^-)$ para impurezas localizadas en diferentes partes de una lente de radio de la base $25nm$, espesor de la capa húmeda $2nm$ y diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y $8nm$, con y sin campo magnético se muestran la figuras 2.8 y 2.9. En el recuadro de cada una de estas figuras se muestra la evolución de la energía de enlace, $E_b(D^-)$ con la distancia ξ_ρ al eje del QD.

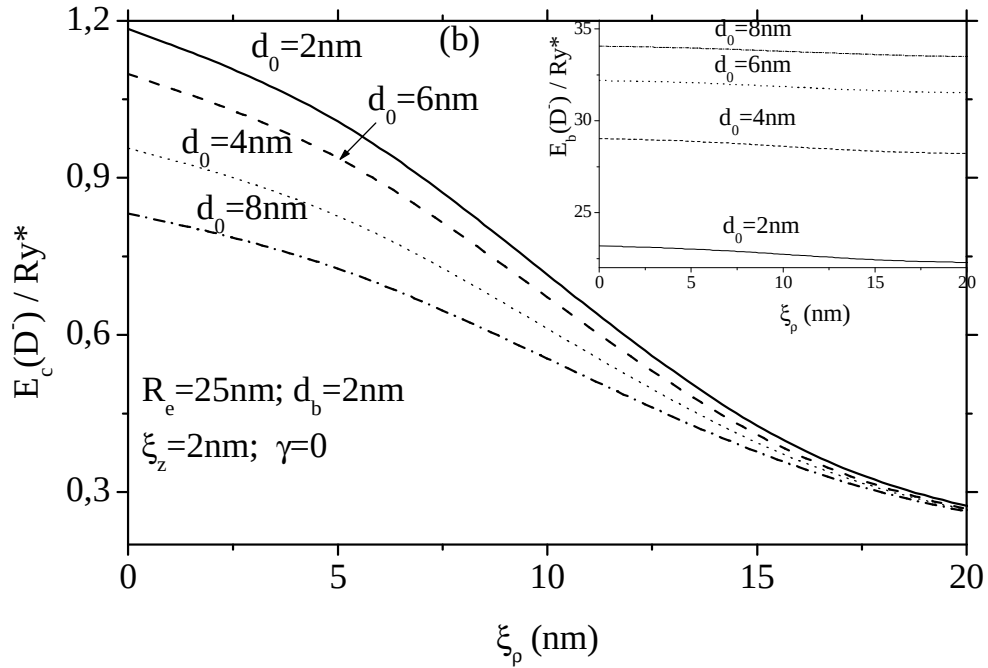


Figura 2.8 Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6$ y $8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

El comportamiento de estas curvas es similar al descrito en la sección anterior para el D^0 ; es decir, tanto $E_b(D^-)$ como $E_c(D^-)$ decrecen cuando la impureza se aleja del eje de simetría del QD. Esto se debe a que el movimiento electrónico queda restringido principalmente a la región vecina al eje, lo cual conlleva a un aumento de la separación entre impureza y electrones, haciendo que las energías de enlace y de correlación decrezcan a causa de la disminución en la interacción Coulombiana. Se debe notar que la disminución monótona de $E_b(D^-)$ y $E_c(D^-)$ al aumentar la separación ξ_ρ , es independiente de la altura del QD y de la intensidad del campo magnético.

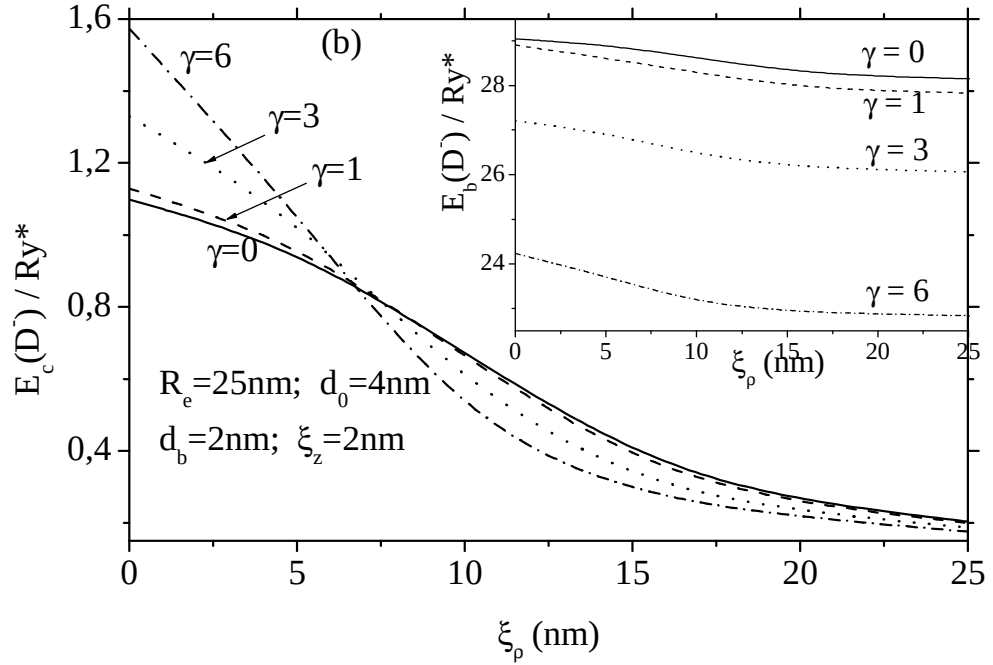


Figura 2.9 Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0, 1, 3, 6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

También se puede observar como la energía de correlación para impurezas localizadas cerca del eje, es mayor cuánto más grande es la intensidad del campo magnético, pero este comportamiento se invierte para impurezas localizadas lejos del eje. Esta inversión produce un cruce de las curvas de energía de correlación en un mismo punto, el cual se caracteriza porque para esa separación la energía $E_c(D^-)$ se hace independiente de la intensidad del campo magnético. Este comportamiento de $E_c(D^-)$ con el campo magnético se debe a que los electrones son empujados por el campo hacia el eje de simetría del QD, produciéndose un confinamiento adicional al ya

generado por la discontinuidad en la banda de conducción de los materiales que constituyen el SAQD.

Para determinar el efecto de la morfología sobre la energía del estado base del ión D^- , se ha calculado la energía de correlación en función del radio del QD. Los puntos se toman en forma de disco, lente y pirámide cónica, para dos alturas diferentes $d_0 = 2\text{nm}$ y 4nm , espesor nulo de la capa húmeda e impureza localizada en el punto ($\xi_z = 0.5d_0$ y $\xi_p = 0$). Los resultados de cálculos se muestran en la figura 2.10, pero para ayudar a comprender el comportamiento de estas curvas se deben tener presente los valores de $0.055R_y^*$ y $0.511R_y^*$ correspondientes a las energías de correlación del D^- para sistemas 3D y 2D en el bloque, respectivamente.

Cuando el radio del QD aumenta, la energía de correlación decrece monótonamente de tal manera que para valores de los radios suficientemente grande, la energía paulatinamente se aproxima al valor de $0.511R_y^*$ característico de los sistemas 2D. Este valor no lo alcanza porque el espesor del QD es pequeño pero no nulo, lo cual hace que el confinamiento sea muy fuerte pero incompleto debido a que la barrera de potencial es finita.

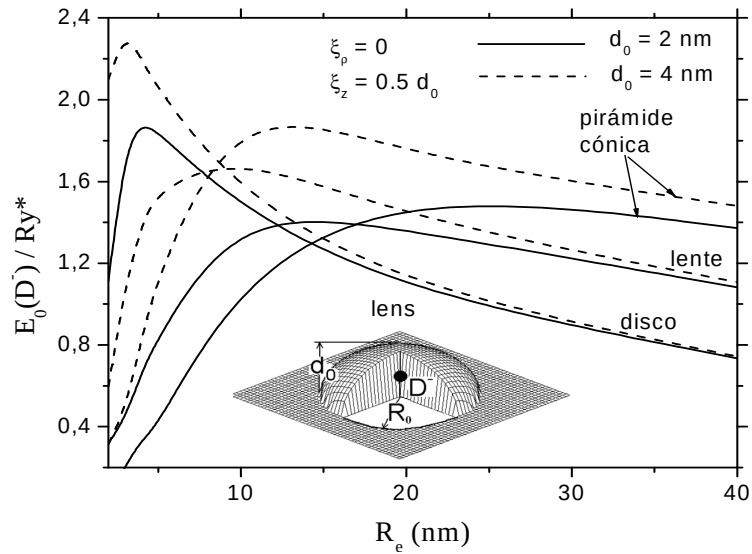


Figura 2.10 Energía de enlace para el estado base de una D^- en función del radio R_0 de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2\text{nm}$ y la punteada a una altura $d_0 = 4\text{nm}$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.

Para radios de los puntos menores que 20nm , las energías de enlace de las donadoras inicialmente crecen hasta alcanzar un valor máximo, pero a partir

de ese punto comienza a disminuir debido a que los electrones desbordan hacia la región de la barrera, lo que produce un aumento en la separación del electrón y la donadora y una disminución de las energías de enlace. En el límite en que el radio del QD tiende a cero, las donadoras recuperan su carácter tridimensional y la energía cae bruscamente a un valor muy pequeño cercano a $0.055R_y^*$, haciendo que la configuración del D^- se vuelve similar a la de un ión de hidrógeno H^- tridimensional.

Comparando las curvas para diferentes morfologías, se puede ver que el efecto de desbordamiento de las funciones de onda en la región de la barrera debido al decrecimiento del radio del punto cuántico, ocurre primero en la pirámide cónica, seguido de la lente y después del disco. Este desbordamiento produce un cruce de las curvas y la inversión en el orden de la energía de enlace para valores del radio del orden de un radio de Bohr efectivo.

Para llevar a cabo un mejor entendimiento de las características dimensionales de la donadora neutra, D^0 y cargada negativamente D^- , en la figura 2.11 se muestra la razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ como función de la distancia de la donadora al eje del QD para diferentes alturas (Figura 2.11a) y para diferentes intensidades del campo magnético (Figura 2.11b).

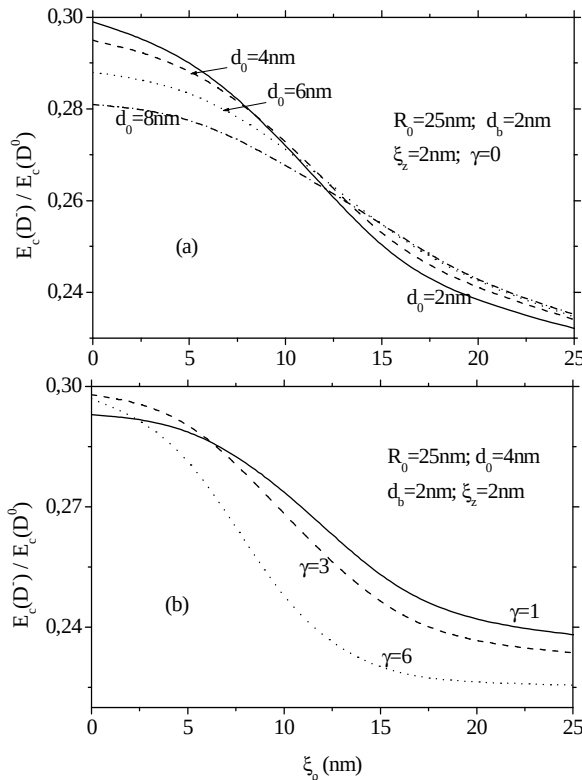


Figura 2.11 Razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ como función de la distancia de la donadora al eje para diferentes alturas del QD (a) y para diferentes intensidades del campo magnético

Los resultados obtenidos en estas curvas se pueden comparar con los valores de la razón σ que se muestran en la tabla 2.1, los cuales se han obtenido previamente por medio de métodos variacionales [79,127] y de difusión de Monte Carlo[18].

Para los casos no confinados 3D y 2D, la razón σ , de acuerdo a los trabajos de Louie y Pang [18], son iguales 0.055 y 0.128, respectivamente. Usando función de prueba de Hylleras con 3 parámetros variacionales con nuestro modelo se obtienen los valores de 0.0506 y 0.086, respectivamente.

En la tabla 2.1 se presentan los valores de las energías de correlación $E_c(D^-)$, $E_c(D^0)$, y la razón σ , que se han obtenido previamente para donadoras centradas en puntos cuánticos esféricos (SQD) [6,9], hilos cuánticos cilíndricos(QWW) y pozos cuánticos (QW) con altura de la barrera de potencial igual a $40 R_y^*$.

ENER. DONA DORA	BLOQUE			HETEROESTRUTURAS CON BARRERA DE ALTURA $40 R_y^*$		
	3D	2D	Q1D	QW	QWW	SQD
$E_b(D^0)$	1 Ry*	4 Ry*	7.5 Ry*	2.5 Ry*	5.8 Ry*	8.1 Ry*
$E_b(D^-)$	0.055 Ry*	0.51 Ry*	1.5 Ry*	0.32 Ry*	1.2 Ry*	2.4 Ry*
σ	0.055	0.128	0.2	0.13	0.2	0.3

Tabla 2.1. Energías de enlace para impurezas D^0 y D^- y su razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ para sistemas en 3D, 2D y cuasi-unidimensionales (modeladas para donadoras en campos magnéticos muy intensos) en materiales en el bloque y los correspondientes valores máximos alcanzados por estas energías en pozos (QW), hilos(QWW) y puntos (SQD) cuánticos esféricos con barrera de potencial de $40 R_y^$*

Como en el artículo [127] se demostró que la razón σ depende muy débilmente de la forma del potencial, lo cual se puede ver también a partir de la tabla 2.1, entonces los valores límites de σ iguales a 0.3, 0.2, 0.128 y 0.05 se pueden considerar como los valores típicos para heteroestructuras de dimensión 0D, 1D, 2D y 3D, respectivamente.

Se puede ver a partir de la figura 2.11 como el valor límite de $\sigma \cong 0.3$ correspondiente a SQD, también es valido para donadoras localizadas cerca del eje del QD en forma de lente y este resultado es independiente de la presencia del campo magnético. Cuando la donadora se remueve lejos del eje, la razón σ se reduce y monótonamente tiende al valor límite de 0.2 correspondiente a sistemas 1D, demostrándose así que tanto la donadora neutra D^0 como la cargada negativamente D^- adoptan

configuraciones geométricas casi lineales, donde los electrones tienden a localizarse principalmente cerca del eje, mientras el ión se desplaza a la región periférica. En la figura 2.11b se puede apreciar que en presencia de campos magnéticos muy intensos, el valor límite de la razón σ correspondiente a sistemas 1D, se alcanza más rápidamente cuando la posición de la donadora es removida a la región periférica del QD. Esto se debe al hecho de que bajo la acción un campo magnético el movimiento de los electrones llega a ser más restringido a la vecindad del eje y con la donadora desplazada lejos del eje, la órbita electrónica se hace más alargada.

Se podría pensar que estos valores límites que alcanza σ solamente son válidos para QDs en forma de lente, pero a partir de la figura 2.12, en donde se muestra la evolución de σ con el radio de la base del QD para tres diferentes morfologías, disco, lente y pirámide cónica, se puede ver que el valor 0.3, correspondiente al valor de límite de σ para estructuras 0D, también es válido para todos los puntos cuánticos autoensamblados independientemente de su morfología.

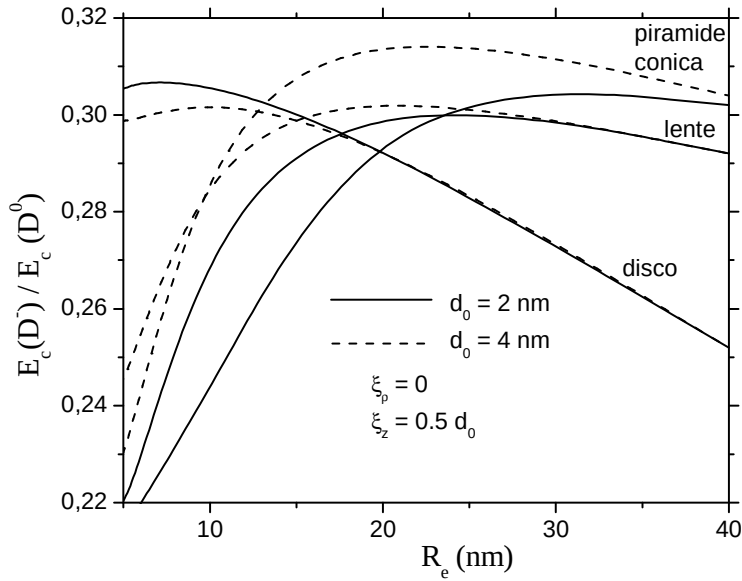


Figura 2.12. Razón $\sigma = E_c(D^-)/E_c(D^0)$ como función del radio de la base de QDs en forma de disco, lente y pirámide cónica para dos alturas: $d_0 = 2$ nm (líneas continuas) y $d_0 = 4$ nm (líneas a trazos)

En esta figura se puede ver como la razón σ cae abruptamente para todas las heteroestructuras, desde su valor máximo al valor aproximado de 0.05 correspondiente a sistemas 3D no confinados y obtenido cuando el radio de la base tiende a cero. En el otro límite, cuando el radio de la base se hace

muy grande, σ decrece monótonamente y tiende al valor límite correspondiente a sistemas 2D en el bloque.

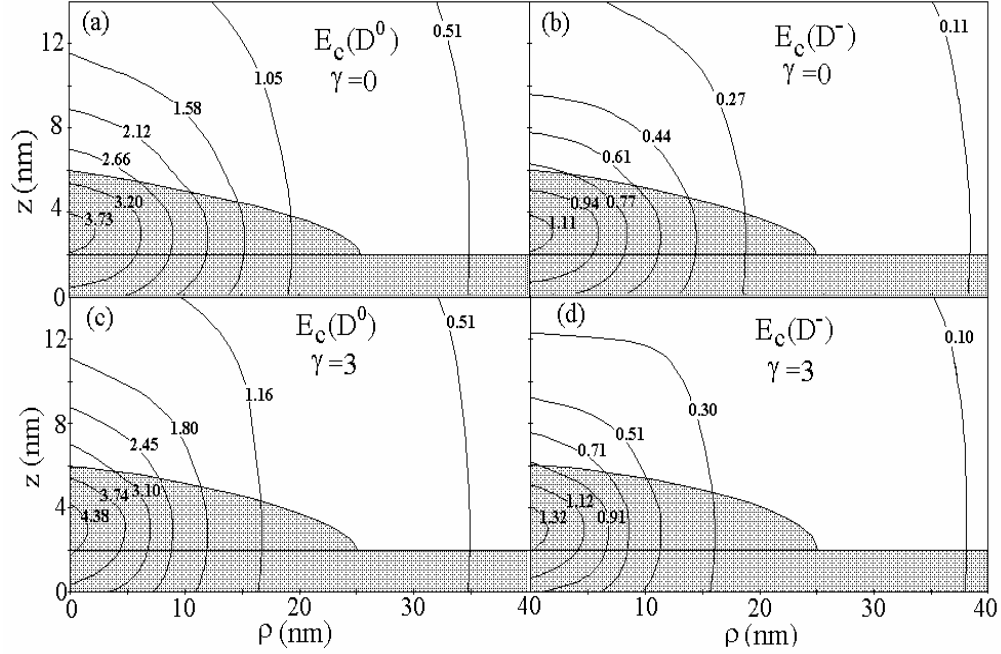


Figura 2.13 Curvas de nivel de la energía de correlación de una D^0 y un ión D^- en un plano a través de el eje de simetría de un QD en forma de lente con radio de la base 25 nm, altura de 4nm, y espesor de la capa húmeda de 2nm, para $\gamma = 0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma = 3$ (figura 2.13c y d).

Los números sobre las líneas de contorno indican el valor de la energía de correlación en Ry^* . Debido al apretujamiento que sufre la función de onda del electrón por la acción del campo magnético, el electrón tiende a estar más localizado en el centro del QD. Es por esta razón que las líneas de nivel de la figura inferior (figura 2.13c y d) con $\gamma = 3$ llegan a estar más comprimidas a lo largo de la dirección ρ que las líneas de la figura superior (figura 2.13a y b) calculadas en ausencia de campo magnético. También se puede ver que el comportamiento de las curvas de nivel para la donadora D^0 y para el ión D^- es similar y en ambos casos las energías de correlación bajo la influencia del campo magnético se incrementan cuando la donadora se localiza cerca del eje, mientras para donadoras alejadas del eje se observa un decrecimiento de la energía de correlación.

Para facilitar la interpretación de los resultados de cálculo de las energías de correlación para donadoras neutras y cargadas negativamente que se localizan por fuera del eje de simetría y en presencia de campo magnético, nosotros hemos realizado las curvas de contorno que se muestran en la figura 2.13. Estas curvas corresponden a las líneas de nivel de las energías

de correlación, $E_c(D^0)$ y $E_c(D^-)$, para donadoras localizadas en diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal a través del eje de simetría de la lente, tomando $\gamma=0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma=3$ (figura 2.13c y d). Las partes sombreadas indican la sección transversal del QD con radio $25nm$, altura $4nm$ y espesor de la capa húmeda $2nm$.

Comparando las curvas de contorno mostradas en la figura (2.13a) y (2.13b) para la donadora D^0 y para el ión D^- , se puede ver que las energías de correlación del D^- localizado cerca del eje son más grandes que las energías de correlación para la D^0 localizada en la periferia del QD, esto significa que la D^0 en la periferia está más débilmente ligada que el ión D^- localizado cerca del eje. Por ejemplo, la energía de correlación mostrada en la figura 2.13b para el ión D^- centrado es de alrededor de 1.11 Ry^* mientras que la energías de correlación mostrada en la figura 2.13a para la D^0 a una distancia de 20 nm sobre la periferia del QD es menor que 1.05 Ry^* . Esto significa que la transferencia del electrón desde una D^0 en la periferia a una D^0 cercana al eje del QD, es energéticamente más favorable y en consecuencia, una significativa población de iones D^- pueden aparecer en equilibrio en la vecindad del eje. Adicionalmente se puede observar en las figuras 2.13c y 2.13d, que en presencia de un campo magnético las diferencias entre las energías de correlación para el ión D^- localizado cerca del eje y para una donadora D^0 en la periferia se hacen más grandes. Por lo tanto, en la presencia de campos magnéticos intensos, el proceso de formación de iones D^- se refuerza de manera significativa.

La probabilidad de que una donadora sobre el eje, D_{on}^0 se convierta en una donadora ionizada sobre el eje, D_{on}^- , después de atrapar un electrón liberado por una donadora de la periferia, D_{off}^0 , de acuerdo a la reacción de intercambio de carga $D_{on}^0 + D_{off}^0 \rightarrow D_{on}^- + D_{off}^+$, es significativamente importante sólo si la energía ΔE requerida para remover el electrón desde la donadora en la periferia y colocarlo en la donadora sobre el eje es negativa, es decir, si la reacción se hace exotérmica. El valor de ΔE se puede estimar como la diferencia entre la energía requerida para separar al electrón desde la donadora de la periferia, $E_c(D_{off}^0)$ y la energía ganada por la donadora sobre el eje, $E_c(D_{on}^-)$ más la energía electrostática atractiva, U_a , entre los dos iones que se forman a causa de la reacción:

$$\Delta E = E_c(D_{off}^0) - E_c(D_{on}^-) - U_a \quad (2.28)$$

Las energías $E_c(D_{off}^0)$ y ΔE dependen fuertemente de la posición de la donadora descentrada. A fin de establecer las posiciones de las donadoras para las cuales el intercambio de carga con donadoras centradas en el eje

produce una reacción de tipo exotérmico, se han realizado las curvas de contorno que se muestran en la figura 2.14.

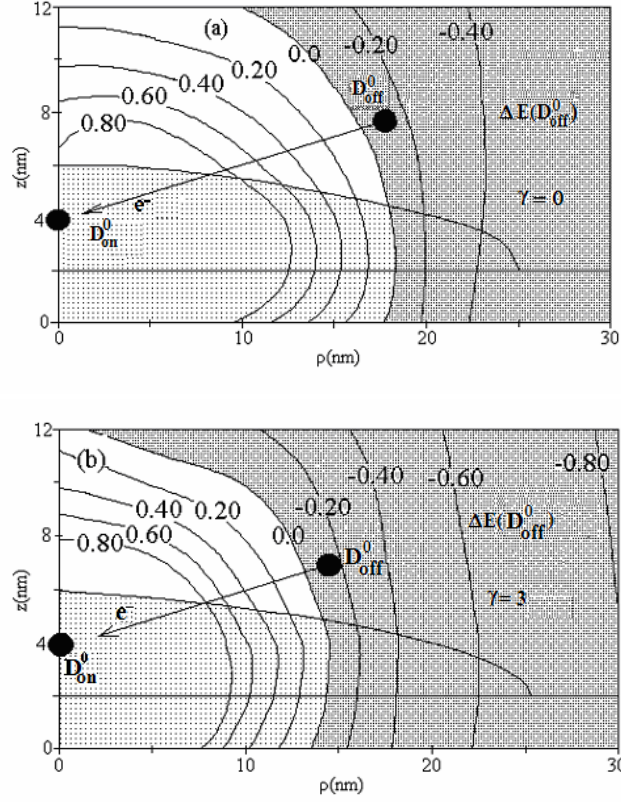


Figura 2.14 Curvas de contorno de las energías ΔE requeridas para el intercambio de carga entre donadoras localizadas en un plano que pasa a través del eje de simetría, estando las donadoras sobre y fuera del eje del QD. Las curvas se hacen sin (a) y con (b) campo magnético. Las partes sombreadas de las figuras indican las posiciones de las donadoras descentradas para las cuales el intercambio de carga con la donadora centrada es de carácter exotérmico.

Estas curvas corresponden a las energías ΔE requeridas para remover un electrón desde una donadora D_{off}^0 , con diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal en el plano del eje de simetría de la lente, hasta una donadora localizada a la mitad de la altura total de la lente y sobre el eje de simetría ($\xi_z = 0$, $\xi_\rho = d_b + d_0/2$). El estudio se hace tanto en ausencia ($\gamma = 0$, figura 2.14(a)) como en presencia de campo magnético ($\gamma = 3$, figura 2.14(b)).

Las partes sombreadas de la figura sirven para indicar las posiciones de la donadora neutra descentrada, para las cuales las energías se hacen negativas

y cuando la reacción que tiene lugar en la formación del ión D^- sobre el eje del QD es de carácter exotérmico.

Se ha hecho un estimativo de U_a definida como la energía de interacción entre una carga puntual $+e$ localizada en la posición de la donadora descentrada y una carga $-e$ distribuida homogéneamente dentro de una esfera de radio $1/\alpha$ (siendo α el parámetro variacional de la función de prueba de Hylleraas dada por la ecuación 2.24), cuyo radio se localiza en el punto correspondiente a la ubicación de la donadora que está sobre el eje ($\xi_\rho = 0$, $\xi_z = d_b + d_0/2$).

Se puede ver a partir de las curvas de contorno mostradas en la figura 2.14, como la energía requerida para la formación de un D_{on}^- cae rápidamente cuando la donadora D_{off}^0 se remueve desde el eje, volviéndose negativa (partes oscuras de la zona sombreada) cuando la donadora D_{off}^0 , en ausencia de campo magnético, está a una distancia del eje mayor que 18 nm y de 13 nm cuando $\gamma = 3$. Comparando las curvas de contorno en las figuras 2.14a y 2.14 b, es fácil de observar que el incremento del campo magnético da lugar a una expansión de la región con donadoras en la periferia y valores de ΔE es negativos, lo que indica que el proceso de formación del ión D^- sobre el eje del punto cuántico se ve favorecido por la existencia del campo magnético externo.

3. DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN PUNTO CUÁNTICO CON EXCITÓN ATRAPADO

Cuando un cristal semiconductor es excitado, térmica o lumínicamente, se pueden formar cuasi-partículas compuestas por un par electrón-hueco, los cuales están ligados entre si por una interacción Coulombiana de tipo atractiva, de forma similar a lo que sucede con el átomo de hidrógeno o con las donadoras neutras que se estudiaron en el capítulo anterior. Este estado ligado formado por el par electrón-hueco se denomina excitón.

Los excitones poseen características que los diferencian de los otros estados ligados que se acaban de mencionar. Por ejemplo, en el caso de las donadoras neutras, los electrones se localizan alrededor de la posición fija, mientras que en el caso del excitón, éste puede trasladarse por todo el cristal sin que ello implique la generación de fotoconductividad, debido a que el par electrón-hueco se mueve conjuntamente con una carga neta igual a cero. No obstante, debe tenerse en cuenta que el electrón al ser menos inercial se encuentra orbitando alrededor del hueco, tal como si fuera un átomo hidrogenoide. Esto significa que la interacción Coulombiana sólo es capaz de afectar el movimiento relativo del par electrón-hueco, pero no el movimiento de su centro de masa, el cual debe ser descrito mediante funciones de onda completamente deslocalizadas. De acuerdo con lo que se acaba de mencionar y en analogía con el átomo de hidrógeno, la energía de ionización del par electrón-hueco se puede expresar como:

$$E_X = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2 \pi^2 \epsilon^2 n^2} \quad (3.1)$$

El entero $n(n \geq 1)$ sirve para describir los diferentes niveles energéticos del excitón, $\mu^* = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$ representa la masa reducida efectiva del sistema y ϵ la permitividad del material semiconductor.

No sobra recordar que la masa efectiva del núcleo del átomo impureza, es muchas veces más grande que la del electrón, razón por la cual la masa reducida efectiva es prácticamente igual a la del electrón. En el caso del excitón, la situación es bien diferente porque las masas efectivas del electrón y del hueco son comparables, haciendo que la masa reducida del sistema también sea del mismo orden de magnitud. Para sustentar lo que se acaba de mencionar, analicemos el caso del semiconductor ternario de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ con el cual se fabrican los SAQDs que van a ser objeto de estudio del presente capítulo. En este caso los valores de las masas efectivas son $m_e^* = 0.076 m_0$ y $m_h^* = 0.45 m_0$, respectivamente, $\mu^* = 0.065 m_0$ y $\epsilon = 12.71$. Al reemplazar estos valores en la ecuación (3.1) se obtiene que

la energía de ionización del excitón es mucho menor que la que la energía de enlace del átomo de hidrógeno ($E_x \cong E_H/2000$). La debilidad de dicho enlace hace que las órbitas excitónicas abarquen varias celdillas del cristal. Para el caso particular del semiconductor ternario que se acaba de mencionar, el radio de Bohr efectivo es de $103.6\text{\AA}$. Este valor es casi 20 veces más grande que el parámetro de red del material y 200 veces más grande que el radio de Bohr para el átomo de hidrógeno, el cual es de tan solo de $0.5\text{\AA}$.

La pequeñez de la energía del enlace excitónico, hace que el tiempo de vida de estos sistemas sea muy corto, lo cual conlleva a que su observación experimental en semiconductores en el bloque sólo sea posible a temperaturas extremadamente bajas. Debido a estas dificultades, los excitones en semiconductores en el bloque no revisten ningún interés tecnológico ni experimental. No obstante, cuando el par e-h es confinado en un punto cuántico, las dos partículas están obligadas a estar más cerca la una de la otra. Esto conlleva a que su energía de enlace se incremente notoriamente con relación al mismo sistema en semiconductores en el bloque, haciendo posible su observación a temperatura ambiente [135]. Este resultado ha generado grandes expectativas debido a que estos sistemas poseen propiedades imposibles de obtenerse en semiconductores en el bloque, lo que permite pensar en nuevas posibilidades de generar dispositivos de alto rendimiento a partir de la modificación del espectro energético y de la distribución espacial de carga, tanto del electrón(e) como del hueco(h).

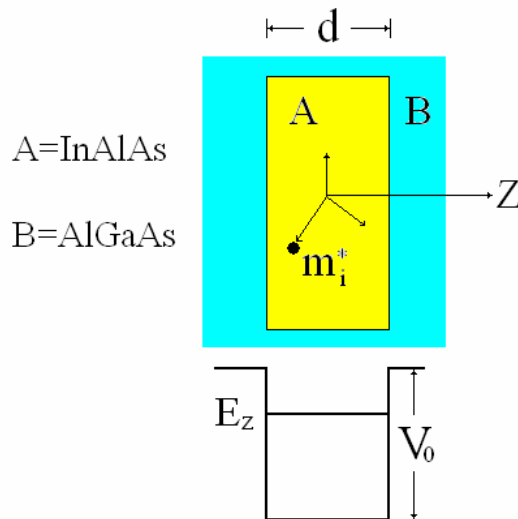


Figura 3.1 Representación esquemática del estado base de energía, E_z , para una partícula confinada en un QD de altura d . El punto se fabrica a partir de dos materiales A=InAlAs y B=AlGaAs.

Una de estas posibilidades está relacionada con la diferencia entre las masas efectivas del electrón y del hueco, que al estar confinadas en un QD, tienen diferente capacidad para tunelar hacia la región de la barrera. Para hacer más evidente este hecho, consideremos una partícula de masa efectiva

m_i^* ($i = e, h$) dentro de un QD de altura d , así como se muestra esquemáticamente en la figura 3.1.

El QD se fabrica a partir de un material A (InAlAs) y se rodea de otro B (AlGaAs).

Con el propósito de hacer un estimativo simple de la energía del estado base para la partícula confinada en el QD, usaremos el principio de incertidumbre de Heisenberg. En la dirección de crecimiento Z del QD se tiene $\Delta p_z \approx \hbar/d$ y por lo tanto la energía de la partícula es aproximadamente igual a:

$$E_z = \left((\Delta p_z)^2 / 2m_i^* \right) = \hbar^2 / (2m_i^* d^2) \quad (3.2)$$

De este resultado se puede observar que la energía de la partícula depende tanto de su masa efectiva como del ancho del QD. En consecuencia, si la altura d se disminuye la función de onda de la partícula en el pozo se comprime, lo que genera un aumento de la energía y una disminución en el confinamiento experimentado por la partícula. Por lo tanto, se puede pensar que debe existir un valor $d = L$ para el cual el tunelamiento de la función de onda en la región de la barrera comienza a ser notable. Esto ocurre cuando la energía (3.2) se hace aproximadamente igual a la altura de la barrera V_0 , lo cual nos permite encontrar una expresión para la longitud L , lo que en adelante denominaremos longitud de tunelamiento, así:

$$L = \sqrt{\hbar^2 / (2m_i^* V_0)} \quad (3.3)$$

Nótese que L es un parámetro de suma importancia, ya que si la altura del QD se hace menor que la longitud de tunelamiento, entonces se pierden las propiedades adquiridas por efecto del confinamiento cuántico, debido a que la partícula recuperaría las propiedades correspondientes al semiconductor en el bloque. Al depender L de la masa efectiva de la partícula y del potencial de confinamiento, se pone de manifiesto que electrones y huecos tienen diferentes longitudes de tunelamiento. Para calcular los valores de L correspondientes al par e-h en QDs de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}-\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ debe tenerse en cuenta que los potenciales de confinamiento para el electrón (V_{0e}) y para el hueco (V_{0h}) son diferentes, siendo iguales a 258meV y 172meV , respectivamente. Usando estos valores del potencial junto a los valores de las masas efectivas definidas anteriormente, se puede demostrar que $L_e/L_h = \sqrt{\hbar^2 / (2m_e^* V_{0e})} / \sqrt{\hbar^2 / (2m_h^* V_{0h})} \cong 2$. Este resultado indica que el electrón tiene más capacidad que el hueco para tunelar hacia la región de la barrera de potencial, a pesar de que el potencial de confinamiento para el electrón es mayor que para el hueco. Recientemente se ha demostrado [57]

que para discos cuánticos de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}-\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ con altura 3.22nm, la probabilidad de encontrar al hueco dentro del QD es de 90%, mientras que la del electrón es de 70%, haciendo que la razón L_e/L_h sea de 3. Este resultado es mayor que el estimativo realizado a partir del principio de incertidumbre, pues en este último caso se ha subestimado el efecto de desbordamiento en la región del plano.

En lo que atañe a los puntos cuánticos auto-ensamblados con excitón atrapado, la existencia de la capa húmeda (WL) es un factor adicional que ayuda a reforzar la redistribución espacial de carga del par e-h, sólo que en este caso el proceso de tunelamiento ocurre en dos etapas. En la primera de ellas, una disminución de la altura del punto hace que el electrón de manera preferente penetre en la región de la WL, ya que no le toca saltar ninguna barrera de potencial. En la segunda etapa, debido a que la altura de la WL es muy pequeña ($\approx 2\text{nm}$), de acuerdo con la ecuación (3.3), se produce un aumento significativo de la probabilidad de tunelamiento del electrón hacia la región de la barrera debido a la disminución en el confinamiento cuántico. Por lo tanto, la existencia de un QD con WL puede dar lugar a una distribución espacial de carga excitónica muy diferente a la que se tendría en el mismo QD sin WL.

El hecho de que el electrón y el hueco tengan diferentes capacidades de tunelamiento, hace pensar que las regiones correspondientes a las partes de encima y de abajo del QD se carguen negativamente, debido a la mayor capacidad de tunelamiento del electrón hacia la región de la barrera, mientras que la parte central se deberá cargar positivamente a consecuencia de la mayor inercia del hueco. Esta separación espacial de la carga del electrón y del hueco, deberá dar lugar a la formación de momentos dipolares y cuadrupolares en QDs, siendo este efecto más pronunciado en QDs con geometrías más agudas ya que las partículas están más confinadas. Dado que los fenómenos asociados con la distribución espacial de carga y el efecto de la capa húmeda sobre el espectro energético del excitón atrapado en un SAQD, hasta donde se conoce no han sido reportados en la literatura y esto es justamente una de los elementos que han motivado la realización del estudio que se describe en el presente capítulo, el cual básicamente consiste en la determinación de la energía y la distribución espacial de carga inducida por excitón atrapado dentro un QD, teniendo en cuenta el tunelamiento de las partículas hacia la capa húmeda. Para realizar este estudio se utiliza un método variacional [92,130] en asocio con la dimensión fractal [122]. Este método es significativamente más simple que otros métodos basados en diagonalización matricial [56,110], Monte Carlo [78,139-141], elementos finitos [57], porque además de producir excelentes resultados requiere de menor esfuerzo computacional y de cálculo, como ya se ha demostrado en las secciones anteriores.

3.1 ANÁLISIS COMPARATIVO DE LA DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN DISCOS Y ANILLOS CUÁNTICOS

Del conjunto de SAQDs con diferente morfología que se pueden fabricar, los que tienen forma de anillo poseen una gran riqueza física, debido a la variedad de nuevos fenómenos que en ellos se pueden estudiar y además porque desde el punto de vista teórico permiten analizar ciertas variaciones topológicas que incluyen un sistema 2D, como es el caso de un disco cuántico plano y un anillo 1D, como los estudiados en el capítulo 1.. Debido a estas características singulares de los anillos cuánticos (QRs), se ha decidido comenzar este capítulo analizando el espectro energético y la distribución de carga de un excitón atrapado en un QR con potencial rectangular. En la figura 3.2 se ha hecho una representación esquemática del QR, y en él se muestran los factores geométricos que lo caracterizan; es decir, los radios exterior e interior, R_e y R_i , respectivamente, el espesor de la WL, d_b , y la altura del punto por encima de esta capa, d_0 .

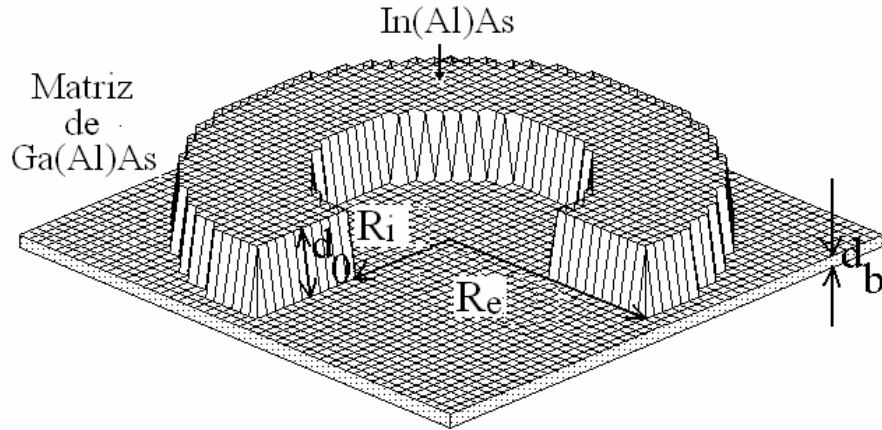


Figura 3.2 Representación esquemática en tres dimensiones para un anillo cuántico.

La forma geométrica del QR se puede describir mediante una función seccionalmente continua $d(\rho)$ dada por la siguiente expresión:

$$d(\rho) = \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{\rho - R_i}{R_e - R_i} \right)^2} d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho < R_i \cup \rho > R_e \end{cases} \quad (3.4)$$

y el potencial de confinamiento rectangular al que se encuentra sometido cada partícula, se puede expresar en términos de $d(\rho)$ y de la función de Heaviside, así:

$$V_i(\rho, z) = V_i \cdot [\theta(z - d(\rho)) + \theta(-z)], \quad i = e, h \quad (3.5)$$

Con el propósito de comparar nuestros resultados con los obtenidos para un par e-h en un disco cuántico 3D [57] fabricado a partir de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, se asumirá que las masas efectivas del electrón en las regiones dentro y fuera del QD son $m_{ew} = 0.076 m_0$ y $m_{eb} = 0.097 m_0$, respectivamente, mientras que las del hueco son $m_{hw} = m_{hb} = 0.45 m_0$.

3.1.1 MODELO TEÓRICO

Tomando $\mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_h$ como los vectores de posición del electrón y del hueco, respectivamente, la ecuación de Schrödinger para el par e-h en un QD axialmente simétrico, en presencia de un campo magnético uniforme orientado a lo largo del eje z, se puede escribir en coordenadas cilíndricas ($\mathbf{r}_p = \{\rho_p, \vartheta_p, z_p\}$; $p = e, h$) como:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) &= E(\tau) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau); \\ H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) &= H_e(\mathbf{r}_e) + H_h(\mathbf{r}_h) - 2\tau / r_{eh}; \tau = \tau_1 \tau_2 = 0, 1 \\ H_p(\mathbf{r}_p) &= -\nabla_p \eta_p \nabla_p + \gamma^2 \rho^2 / 4 + V_p(\rho_p, z_p); \\ \eta_p &= \mu / m_p; \quad p = e, h, \quad \mu = m_{ew} m_{hw} / (m_{ew} + m_{hw}) \approx 0.065 m_0 \end{aligned} \quad (3.6)$$

El parámetro η_p para el electrón en el pozo es igual $\eta_{ew} = 0.86$ y en la barrera es de $\eta_{eb} \approx 0.67$, mientras que para el hueco su valor es $\eta_{hw} = \eta_{hb} \approx 0.14$.

Para partículas neutras ($\tau = 0$), el Hamiltoniano (3.6) es separable y las energías $E = E_{m,m'}$, así como las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) = \Psi_{m,m'}^{(0)} = \Psi_{m,m'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0)$ para las dos partículas con momento angular $m, m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ se pueden obtener solucionando los siguientes dos problemas uni-particulares independientes:

$$H_p f_p^{(m)}(\mathbf{r}_p) = E_p^{(m)} f_p^{(m)}(\mathbf{r}_p); \quad p = e, h \quad (3.7a)$$

$$\Psi_{m,m'}^{(0)} = \Psi_{m,m'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) = f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h); \quad E_{m,m'}^{(0)} = E_e^{(m)} + E_h^{(m')} \quad (3.7b)$$

Para obtener las soluciones de este par de ecuaciones de onda uni-particulares, se va a proceder como en el capítulo anterior; es decir, se va a asumir que la altura total del QR es mucho más pequeña que las dimensiones laterales, lo cual permitirá hacer uso de la aproximación adiabática [76,81,86-87,142] a fin de desacoplar el movimiento rápido a lo largo de la dirección z del movimiento lento en dirección radial. Por lo tanto, la función de onda uni-particular puede escribirse como:

$$f_p^{(m)}(\mathbf{r}_p) = e^{im\vartheta} f_{zp}(z_p, \rho_p) f_{\rho p}^{(m)}(\rho_p); \quad p = e, h \quad (3.7c)$$

Acá la función $f_{zp}(z_p, \rho_p)$ describe la solución exacta para el estado base del movimiento una sola partícula en dirección z , cuando ésta se encuentra confinada en un pozo cuántico de altura V_{0p} y ancho igual al espesor $d(\rho_p)$ de la capa de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$.

La correspondiente energía del estado base, $E_{zp}(\rho_p)$, para el movimiento a lo largo de la dirección z , depende de la distancia al eje de simetría y toma el valor $E_{zp}^{(w)}$ dentro del QR ($R_{\text{int}} < \rho_p < R_{\text{ext}}$) y el valor $E_{zp}^{(b)}$ fuera del QR ($\rho_p < R_{\text{int}}$ o $\rho_p > R_{\text{ext}}$). Los valores $E_{zp}^{(w)}$ y $E_{zp}^{(b)}$ corresponden a los niveles de energía más bajos en pozos cuánticos con barrera de potencial V_{0p} y anchos d_0 y d_b , respectivamente. La parte radial de la función de onda uni-particular se obtiene solucionando el siguiente problema de campo central bi-dimensional:

$$-\frac{1}{\rho_p} \frac{\partial}{\partial \rho_p} \left[\eta_p \rho_p \frac{\partial f_{\rho p}^{(m)}(\rho_p)}{\partial \rho_p} \right] + \tilde{V}_p^{(m)}(\rho_p) f_{\rho p}^{(m)}(\rho_p) = E_p^{(m)} f_{\rho p}^{(m)}(\rho_p); \quad (3.8)$$

$$\tilde{V}_p^{(m)}(\rho) = E_{zp}(\rho) + \eta_p \left(\frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \gamma m \right)$$

Las autofunciones y los respectivos autovalores de la parte radial de la función de onda uni-particular (3.8), no se pueden obtener de forma exacta, razón por la cual se usará el método numérico de barrido trigonométrico [80].

El problema bi-particular (3.6) para $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1)$ correspondiente al par $e-h$, no se puede resolver exactamente, por lo tanto se debe emplear un método aproximado para determinar su solución. En nuestro caso se usará el principio variacional, donde la función de prueba del tipo de Bastard se

tomará como el producto de funciones de partículas neutras, $\Psi_{m,m'}^{(0)}$ con una función envolvente desconocida $\Phi(r_{eh})$, así:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1) = \Psi_{m,m'}^{(0)} \Phi(r_{eh}) = f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \quad (3.9)$$

Esta función de onda no tiene en cuenta los efectos relacionados con la mezcla de estados uni-particulares debidos a la atracción e-h. Esta deficiencia se podría solucionar reemplazando en (3.9) las funciones de onda uni-particulares por una combinación de funciones correspondientes a los estados de energía más bajos. Por razones de conveniencia matemática, en la función de onda (3.9) sólo se tomarán en cuenta los estados de energía más bajos. En cualquier disco estos niveles estarían dados por los números $m, m' = 0$, pero en un QR debido al efecto Aharanov-Bohm [108] los números cuánticos m y m' incrementan cuando la intensidad del campo crece.

La energía del estado base para del excitón en un QD se encuentra minimizando el valor esperado de la energía respecto de la función envolvente:

$$E[\Phi] = \frac{\left\langle f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \left| H(r_e, r_h, \tau=1) \right| f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \right\rangle}{\left\langle f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \left| f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \right\rangle} \quad (3.10)$$

Siguiendo el mismo procedimiento descrito en la sección (2.2), lo cual requiere de calcular la derivada funcional $(\delta E[\Phi]/\delta \Phi = 0)$ para determinar la ecuación de onda que satisface $\Phi(r_{eh})$ se obtiene:

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_1(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r); \quad (3.11)$$

$$E_b = E_e^{(m)} + E_h^{(m')} - E$$

Donde las funciones $P_0(r)$ y $P_1(r)$ están dadas por

$$P_0(r) = \int d\mathbf{r}_e \int \left| f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) \right|^2 \left| f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \right|^2 \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \quad (3.12)$$

$$P_1(r) = \int d\mathbf{r}_e \int (\eta_e(\mathbf{r}_e) + \eta_h(\mathbf{r}_h)) \left| f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) \right| \left| f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h) \right| \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \quad (3.13)$$

Cuando el tunelamiento de las partículas en región de la matriz que rodea al punto llega a ser muy pequeña, la diferencia entre las funciones $P_0(r)$ y $P_1(r)$ se pueden despreciar debido a que la condición $\eta_e(\mathbf{r}_e) + \eta_h(\mathbf{r}_h) = 1$ se satisface al interior del QR y dentro de la WL. Bajo la condición, $P_1(r) \approx P_0(r)$, la ecuación de onda (3.11) toma la forma de un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo con parte radial del Jacobiano igual a $P_0(r)$, es decir:

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_0(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r) \quad (3.14)$$

El Jacobiano $P_0(r)$ y la función envolvente $\Phi(r)$ están emparentadas con la función de correlación espacial del par e-h (SPCF) $P(r, \tau)$ cuya importancia física radica en el hecho de que esta función permite determinar la densidad de probabilidad de encontrar al electrón y al hueco, separados entre si por una distancia r . Su forma analítica se define como:

$$P(r, \tau) = \langle \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) \rangle = \int d\mathbf{r}_e \int d\mathbf{r}_h \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) |\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau)|^2 \quad (3.15)$$

Como resultado de comparar las ecuaciones (3.12) y (3.15), se puede ver que el Jacobiano es igual a la SPCF para dos partículas no interactuantes eléctricamente ($\tau = 0$) confinadas en nanoestructuras, así que $P_0(r) = P(r, \tau = 0)$. Para el caso del excitón ($\tau = 1$) la SPCF, $P(r) = P(r, \tau = 1)$ se puede expresar como:

$$P(r) = \int f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int f_h^2(\mathbf{r}_h) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) \Phi^2(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) d\mathbf{r}_h = P_0(r) \Phi^2(r) = \chi^2(r) \quad (3.16)$$

La función $\chi(r) = \sqrt{P(r)} = \Phi(r) \sqrt{P_0(r)}$ cuyo cuadrado coincide exactamente con la SPCF, se puede interpretar como una función de onda uniparticular que sólo depende de la coordenada generalizada que se usa para determinar la separación entre partículas. Por lo tanto, a partir de esta interpretación se puede pensar que $P_0(r)$ corresponde a una mediada de la probabilidad de encontrar al electrón y al hueco dentro del QD y separados entre si por una distancia r , cuando la interacción coulombiana se ignora. Nótese que el cuadrado de la función de correlación $\Phi(r)$ es exactamente igual a la razón entre la SPCF para estados acoplados (con interacción eléctrica) y la SPCF para los estados libres (sin interacción eléctrica), así:

$\Phi^2(r) = P(r, \tau=1) / P(r, \tau=0)$. Sustituyendo el valor de $\Phi(r) = \chi(r) / \sqrt{P_0(r)}$ en la ecuación (3.14) se obtiene la siguiente ecuación de onda para $\chi(r)$:

$$-\chi''(r, \tau) + V_{eff}(r, \tau) \chi(r, \tau) = (E - E_e - E_h) \chi(r, \tau); \quad (3.17a)$$

$$P(r) = \chi^2(r, \tau=1)$$

$$V_{eff}(r, \tau) = -\frac{2\tau}{r} + \frac{\left(\sqrt{P_0(r)}\right)''}{\sqrt{P_0(r)}} \quad (3.17b)$$

Una vez las funciones de onda para el electrón, $f_e(\mathbf{r}_e)$ y para el hueco, $f_h(\mathbf{r}_h)$ se hayan encontrado, el potencial efectivo $V_{eff}(r, \tau)$ presente en la ecuación (3.17) se puede calcular usando las relaciones dadas en la ecuación (3.12). La solución de la ecuación de onda uni-dimensional (3.17a) permitirá calcular la energía del excitón E y la SPCF, $P(r)$. La existencia del potencial efectivo no permite encontrar soluciones exactas de (3.17a) y por esta razón se debe implementar un método numérico, que en nuestro caso se usara el método de barrido trigonométrico [80].

3.1.2 ENERGÍA DE ENLACE DEL ESTADO BASE DE UN EXCITÓN ATRAPADO EN DISCOS Y ANILLOS

Con el propósito de determinar la precisión del método utilizado, lo primero que se hace es comparar los resultados de cálculo de la energía del estado base de un excitón en discos cuánticos de GaAs /Al_{0.3}Ga_{0.7}As y In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As ($R_{int} = 0$, $d_b = 0$) con los resultados teóricos obtenidos previamente mediante un método variacional [21,116,143] (figura 3.3a), así como los obtenidos mediante un tratamiento completo para un sistema 3D [57] (figura 3.3b). Adicionalmente en la figura (3.3c) se hace una comparación entre nuestros resultados y algunos datos experimentales [144]. Para que la comparación sea válida, se tomaó la misma definición de energía de enlace presentada en estas referencias y la cual corresponde a la diferencia entre las energías del par e-h no ligado y ligado, así: $E_b = E(\tau=0) - E(\tau=1) = E_e + E_h - E$. En la figura 3.3a se muestra la energía de enlace del excitón confinado en un disco GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As como función del radio. La altura del QD es $d_0 = 7nm$ y el efecto del espesor de la WL se ignora a fin de comparar los resultados obtenidos en esta tesis (líneas sólidas) con los obtenidos previamente mediante el uso funciones de tipo hidrogenoide (triángulos sin rellenar [21]), funciones con

dos parámetros variacionales (círculos sin rellenar [116]) y método con separación de variables (rectángulos sin rellenar [143]).

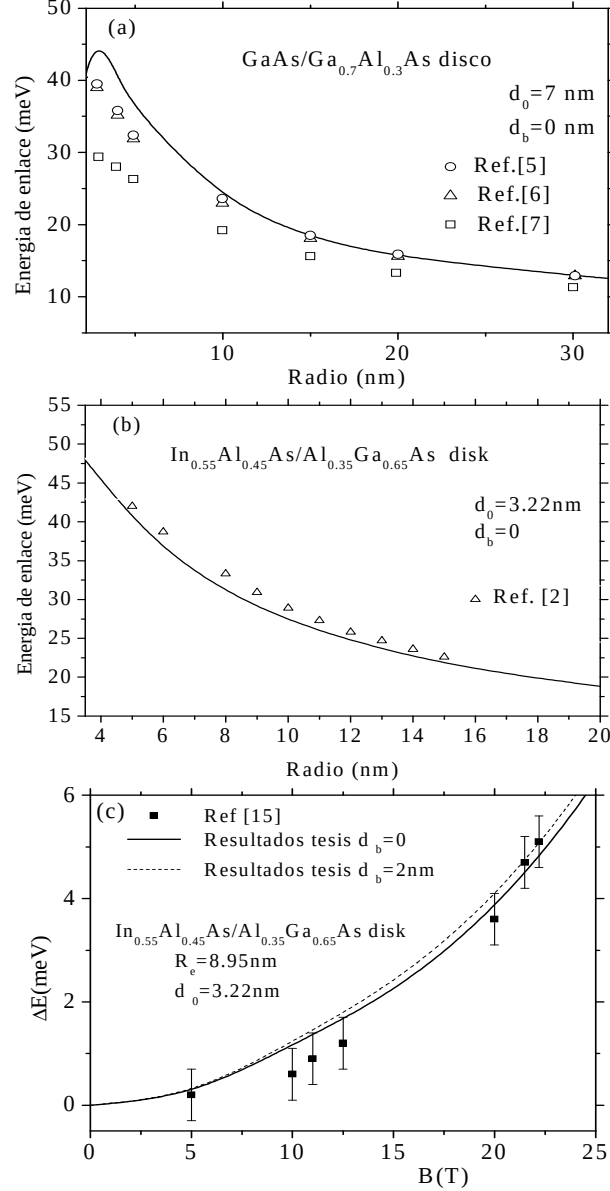


Figura 3.3 Comparación de los resultados de cálculo de la energía obtenidos en esta tesis para el estado base de un excitón en un disco de (a) GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As y (b, c) In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As con los resultados teóricos obtenidos previamente (a, b) y experimentalmente (c). Los resultados de esta tesis (líneas sólidas) para la energía de enlace del estado base de un excitón como función del radio del disco cuántico se compara con (a) los resultados variacionales (diferentes símbolos) y (b) tratamiento 3D(círculos abiertos). Los cálculos de esta tesis (líneas sólidas y a tramos) del desplazamiento diamagnético de la energía del excitón como función del campo magnético externo se compara con los resultados experimentales (cuadrados) en la figura (c).

Debido a que los cálculos variacionales siempre dan la estimación más baja de la energía de enlace, la comparación de los resultados de la figura 3.3a, demuestran que para discos de radios muy pequeños ($R \leq 1a_0^* = 10.4nm$) los resultados obtenidos en esta investigación superan a los obtenidos por otros métodos variacionales. Pero para el caso de radios grandes, nuestros resultados son similares a los obtenidos con funciones de tipo hidrogenoide y a los que usan dos parámetros variacionales. Esto se debe a que la función de prueba que se propone en esta tesis, al no usar parámetros variacionales, resulta ser más flexible a la hora de tener en cuenta los cambios de simetría del sistema cuando el radio se hace menor que un radio de Bohr efectivo.

De otro lado, la comparación con los resultados para un tratamiento completo en sistemas 3D presentado en la figura 4.3b, demuestra que la energías de enlace obtenidas mediante el procedimiento propuesto en esta tesis, son ligeramente más pequeñas que las de la referencia [57]. No obstante, se puede afirmar que en general existe una gran coincidencia entre los dos conjuntos de resultados, pero vale pena destacar un punto a favor del método implementado en este trabajo, y este tiene que ver con la simplicidad de los cálculos matemáticos y de los programas de computación. Adicionalmente, este método también permite comparar los resultados de cálculo con los datos experimentales [144] obtenido para el desplazamiento diamagnético del excitón ΔE , el cual se define como $\Delta E = E(B) - E(B=0)$. En la figura 3.3c se ha graficado ΔE para discos cuánticos de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ en función del campo magnético, donde las líneas continuas corresponden a los resultados de esta tesis y los cuadrados representan los escasos datos experimentales que se reportan en [144]. Se puede ver que existe una muy buena coincidencia entre nuestros resultados y los datos experimentales, especialmente para campos mayores de 20T. Si se tiene en cuenta la simplicidad de nuestro modelo teórico, se podría decir que en general existe un muy buen acuerdo entre los resultados de esta tesis y los resultados experimentales.

Ya que se ha garantizado la efectividad de nuestro método, de acá en adelante se presentarán resultados asociados con las propiedades del excitón confinado en nanoestructuras de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. Las Características más relevantes del excitón en QR son la separación entre electrón y el hueco y los momentos multipolares debido al mayor confinamiento del hueco dentro del QD. Estas características se pueden expresar en términos de las densidades de probabilidad bi-dimensional de encontrar al electrón $\Pi_e(\rho, z)$ y al hueco, $\Pi_h(\rho, z)$ en el punto de coordenadas (ρ, z) , lo cual de acuerdo con las ecuaciones (3.7c) y (3.8) se pueden calcular a partir de las siguientes expresiones

$$\Pi_e(\rho, z) = \rho f_{\rho e}^2(\rho) f_{ze}^2(z, \rho) C_h(z, \rho); \quad (3.18a)$$

$$\Pi_h(\rho, z) = \rho f_{\rho h}^2(\rho) f_{zh}^2(z, \rho) C_e(z, \rho);$$

$$C_p(z, \rho) = \int_0^\infty f_{\rho p}^2(\rho_p) d\rho_p \int_{-\infty}^{+\infty} f_{zp}^2(z_p, \rho_p) dz_p \int_0^{2\pi} \Phi^2 \left(\sqrt{\rho^2 + \rho_p^2 - 2\rho\rho_p \cos\vartheta} + (z - z_p)^2 \right) d\vartheta \quad (3.18b)$$

En la figura 3.4 se presentan las curvas para las densidades de probabilidad de encontrar al electrón (líneas sólidas) y al hueco (líneas punteadas)) en puntos localizados sobre el plano de simetría ($z = d_0/2$) en función de la distancia ρ , el cual se mide desde las posiciones de las partículas al eje del anillo. En el análisis se toman dos anillos con diferentes radios exteriores: $0.65a_0^*$ y $1.5a_0^*$. En ambos casos se puede observar que la carga positiva tiene mayor predominio en la parte interna del QR, mientras que la carga negativa predomina fuera del QR y en las regiones periféricas cercanas a las juntas. Esto es una consecuencia de un hecho anunciado al inicio de este capítulo y que tiene que ver con la menor inercia del electrón en comparación con el hueco, lo cual se traduce en una mayor capacidad del electrón para tunelar hacia las regiones de las barreras interna y exterior. Este resultado constituye una confirmación del estimativo simple realizado al inicio del capítulo sobre las diferencias en las longitudes de tunelamiento de este par de partículas. También se puede observar que al incrementar el radio interior, el tunelamiento del electrón hacia la región de la barrera más interna, se vuelve más significativo que el tunelamiento en la región exterior de la barrera.

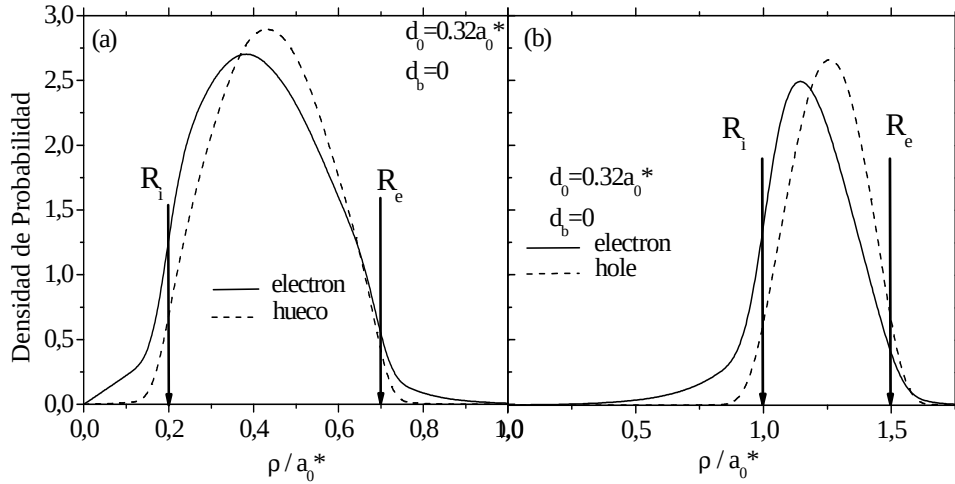


Figura 3.4. Densidad de probabilidad de encontrar al electrón (línea continua) y al hueco (línea punteada) sobre el plano de simetría, en función de la distancia desde la posición de la particular al eje del QR, para dos casos radios exteriores diferentes: $0.7a_0^*$ (a) y $1.5a_0^*$ (b). En ambos casos el espesor del QR es de $0.5a_0^*$. Las líneas verticales representan las posiciones de las juntas del QR.

La diferencia entre las distribuciones de carga para el electrón y el hueco, dentro y fuera del QR, hacen presumir el predominio de la carga positiva dentro del QR y de la carga negativa en las regiones cercanas a las junturas. La correspondiente densidad de distribución de carga $Q(\rho, z)$ para el excitón se pueden calcular como:

$$Q(\rho, z) = \Pi_h(\rho, z) - \Pi_e(\rho, z) \quad (3.18c)$$

En la figura 3.5 se muestran las curvas de nivel para la densidad de carga del excitón asociada a la distribución radial a lo largo de sección transversal en el centro de dos discos (a,b) y de dos anillos(c,d), las cuales se han calculado usando las relaciones (3.18) para nanoestructuras sin WL (a,c) y con WL(b,d).

Las zonas sombreadas de las figuras, indican las partes de la sección transversal de las estructuras que se hallan cargadas positivamente debido a la presencia del excitón. Se ve de las figuras 3.5(a,c) que la densidad de la distribución radial de carga dentro del disco y del anillo es positiva y se vuelve negativa en las partes de encima, abajo y en los bordes del disco y del anillo. Distribuciones similares de carga han sido encontradas previamente para excitones en QDs de tipo II [145-146].

Al comparar las figuras 3.5a y 3.5c, también se puede ver que en el disco la mayor parte de la carga negativa se localiza abajo y arriba de la estructura, mientras que en el anillo esta carga se desplazada hacia la región central, es decir hacia el hueco del anillo. Debido a la simetría axial de la de la estructura, el momento dipolar para las dos distribuciones mostradas en las figuras 3.5(a, c) es igual a cero y la distribución de carga se caracteriza por el momento cuadrupolar, el cual es positivo para el caso del disco figura 3.5 (a) y negativo para el QR mostrado en la figura 3.5 (c). Cuando el espesor del QD disminuye y se hace comparable con el espesor de la WL, el tunelamiento del electrón se favorece y el valor absoluto del momento cuadrupolar se incrementa. Debido a que en los dos tipos de QD que se están analizando, no posibilitan el tunelamiento del electrón en la misma forma, resulta interesante analizar la relación entre el momento cuadrupolar y con la transformación morfológica del QD inicialmente tienen la forma de una lente (aproximadamente 20 nm de diámetro y 7 nm de altura) y posteriormente adquieren la forma de un volcán con un tamaño lateral aumentado (entre 60nm y 140 nm en el diámetro exterior) y una altura reducida (alrededor de 2nm), mientras que el cráter central tiene un diámetro muy bien definido de aproximadamente 20 nm.

Como se ha establecido experimentalmente [50], la morfología del SAQD de InAs sufren un cambio notorio durante su proceso de crecimiento, ya que De acuerdo con los resultados mostrados en la figura 3.5, el momento cuadrupolar tiene que invertir su dirección a medida que la lente se transforma en un volcán y su valor absoluto debería incrementar significativamente debido a la drástica reducción en la altura del QD y al aumento del radio exterior.

En las figuras 3.5 (b, d) se muestra una distribución de carga similar en un disco y en QR, los cuales tienen un espesor de capa húmeda igual a $2nm$, mientras que la altura del QD por encima de esta capa es $5nm$. La existencia de la WL permite una reducción significativa de la altura de la barrera en la junta lateral, lo que incrementa la probabilidad de tunelamiento desde el QD hacia la WL.

Nótese que existe una diferencia bien marcada entre las distribuciones de carga correspondientes a los QDs con y sin capa húmeda. Por ejemplo, en los QDs sin WL (figuras 3.5 a,c) el tunelamiento del electrón se produce sólo hacia las regiones de la barrera, mientras que en los QDs con WL, este comportamiento se transforma parcialmente en un desbordamiento hacia la parte externa de la WL, como es el caso del disco (figura 3.5 b) y hacia la parte interna de la WL en el caso del QR (figura 3.5d). Por lo tanto, la existencia de la WL hace que se produzca una fuerte separación entre el electrón y el hueco, no sólo en dirección en dirección radial sino también en dirección z , lo que conlleva a que adicional al momento cuadrupolar en dirección ρ , ahora también aparezca un momento bipolar orientado a lo largo del eje z .

Se debe anotar que los resultados anteriores se basan sobre la suposición de que el potencial de confinamiento en las juntas esté dado por una función de paso. Como se ha demostrado previamente para el caso de SAQDs de tipo II, los esfuerzos a los que de manera inherente se encuentran sometidos los SAQDs durante su fase de crecimiento, pueden cambiar significativamente la forma del potencial de confinamiento [86]. No obstante, se asume que nuestros resultados para la distribución de carga en discos y anillos con excitón atrapado son cualitativamente aceptables, a pesar de que nuestro modelo simple desprecia el campo de esfuerzos al está sometido la heteroestructura.

La separación entre las partículas debido al mayor tunelamiento del electrón en el interior de la WL del QR se puede reforzar o debilitar mediante la aplicación de un campo magnético en la dirección de crecimiento. De un lado, el campo magnético posibilita un confinamiento adicional al desplazar ambas partículas hacia el eje de simetría, lo cual conlleva a un mayor acercamiento de las partículas al interior del anillo. De otro lado, los niveles de energía suben, lo cual incrementa la posibilidad de tunelamiento hacia el

interior de la WL, aun para campos muy pequeños. Este efecto se produce primero en el electrón que es más liviano y luego, para un campo más intenso, se produce el desbordamiento del hueco.. Cuando el electrón desborda se produce un aumento en la separación entre las partículas, pero esta separación posteriormente disminuye cuando ocurre el desbordamiento del hueco.

En la figura 3.6 se muestra la energía de enlace del excitón en función del campo magnético cuando el par e-h está confinado en QDs de dos diferentes morfologías, como discos de espesor 5nm y radio 30nm (línea a tramos) y para QRs con diferentes espesores de la WL (línea continua). En todos los casos el espesor de los QDs son iguales a 5nm, mientras que los radios interior y exterior, son iguales 20nm y 30nm, respectivamente.

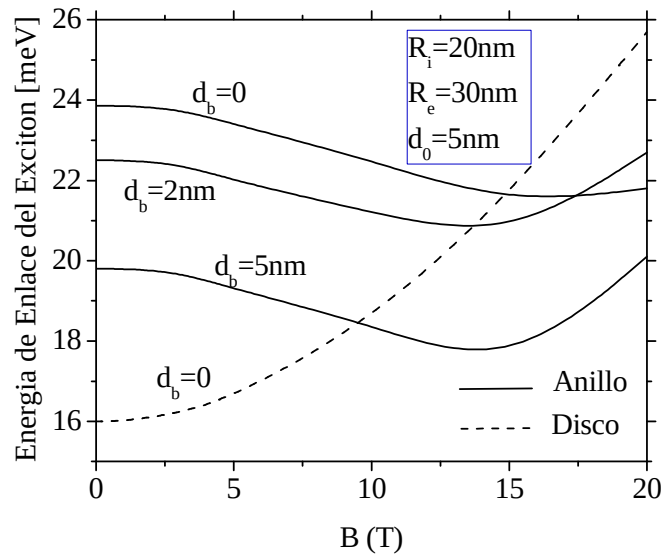


Figura 3.6 Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en un disco de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ (línea a tramos) y en varios anillos de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con diferentes espesores de capa húmeda (líneas continuas)

A partir de la figura 3.6 resulta evidente la existencia de una fuerte correlación entre la morfología y la dependencia de la energía del excitón con el campo magnético. Por ejemplo, en el caso del disco la energía de enlace del excitón crece monótonamente al incrementar el campo magnético. Esto se debe a que las partículas son haladas hacia el eje del disco, produciéndose un mayor acercamiento entre ellas. La morfología del anillo se caracteriza por la presencia de un orificio central en la estructura y por la existencia de dos junturas laterales, una exterior y otra interior. Esta es la razón por la cual las curvas en la figura 3.6 para QRs son absolutamente diferentes en comparación con el disco. En el anillo, cuando el campo magnético crece, la energía de enlace primero comienza a caer

hasta que alcanza un mínimo. Esto se debe a que bajo un campo relativamente débil, la partícula más masiva permanece dentro del anillo mientras la más liviana comienza a penetrar la región del orificio central, lo que conlleva a un incremento en la separación promedio del par e-h. Cuando la intensidad del campo magnético tiene un incremento adicional, el hueco comienza a penetrar en la región central, haciendo que la separación electrón-hueco vuelva a decrecer. Este hecho conlleva a que la energía de enlace comience a crecer. En la figura 3.6 se puede ver que la posición de los mínimos en las curvas para el QR son dependientes del espesor de la WL, de tal manera que cuanto más grande sea el espesor de la WL, más pequeña será la intensidad del campo magnético correspondiente a la posición del mínimo. Esta dependencia de la posición del mínimo está relacionada con la disminución en la altura de la barrera en las juntas laterales cuando el espesor de la WL crece.

Un aspecto que se debe resaltar en relación a la dependencia de la energía con el campo magnético, es que ésta cambia esencialmente cuando los espesores del QR crecen y las alturas de la WL disminuyen. Esto se debe a la significativa diferencia entre las probabilidades de tunelamiento del electrón y del hueco en la región central del anillo y a la elevación en la altura de la barrera lateral.

En la figura 3.7 se muestran los resultados de la energía de enlace, como función del campo magnético, para QRs con altura de 7nm, espesor de la WL, 1nm, espesor del anillo de 5nm y tres valores diferentes del radio exterior, 10, 15 y 25 nm. Las alturas laterales de la barrera en estas estructuras son significativamente más elevadas que en el caso que se consideró anteriormente, ya que la penetración de la partículas en la región central llega a ser posible únicamente bajo campos magnéticos muy fuertes.

A partir de esta figura se puede ver que la dependencia de la energía de enlace del excitón en los anillos con radio exterior de 10 y 15 nm es más bien similar, pero esta dependencia es absolutamente diferente en el anillo con radio exterior de 25 nm. En el primero de los casos mencionados, la energía de enlace crece monótonamente a medida que el campo magnético aumenta hasta alcanzar el valor de 25 T, en tanto que para el caso del QR con radio exterior de 25nm, la energía primero crece lentamente hasta alcanzar un valor máximo para $B=10T$ y a partir de este punto un incremento adicional del campo magnético hace que la energía comience a caer. Para facilitar la interpretación de este resultado, se presenta en el recuadro de la figura 3.7 la dependencia de la separación promedio entre el electrón y el hueco con el campo magnético, el cual se calcula mediante la SPCF dada por la ecuación (3.16). Comparando las curvas de la figura principal y las del recuadro, se puede observar una simetría de tipo especular en estas curvas, ya que cuanto más pequeña es la energía de enlace más grande es la separación electrón-hueco. Es preciso anotar que las

separaciones promedio correspondiente a los estados ligados del excitón en materiales de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ en el bloque, tanto en sistemas 2D como 3D, son iguales a medio ($\approx 5.2\text{nm}$) y a un ($\approx 10.4\text{nm}$) radio de Bohr efectivo, respectivamente. Por lo tanto, dadas las separaciones promedio para el par e-h en QDs, se podría pensar como si estos sistemas estuvieran inmersos un espacio isotrópico cuya dimensión es fraccionaria y la cual varía entre 2 y 3. Esto se debe a que el confinamiento en la dirección de crecimiento de cualquier QD de altura finita resulta ser muy fuerte pero incompleto. También es claro que el incremento del radio del anillo hace que la estructura del excitón sea más lineal, produciendo una disminución adicional en la dimensión efectiva del espacio. Esta es la razón por la cual la separación e-h en anillos de radio exterior de 15 y 25nm es apreciablemente más pequeña que en anillo con radio de 10nm. La curvatura de la estructura en el último caso es más grande, haciendo que la configuración para el excitón tenga un carácter más 2D que 1D y de manera contraria ocurre en el primer caso. La reducción de la altura de la barrera lateral efectiva más interna, en la presencia del campo magnético, es proporcional al valor $\gamma^2 R_{\text{int}}^2$.

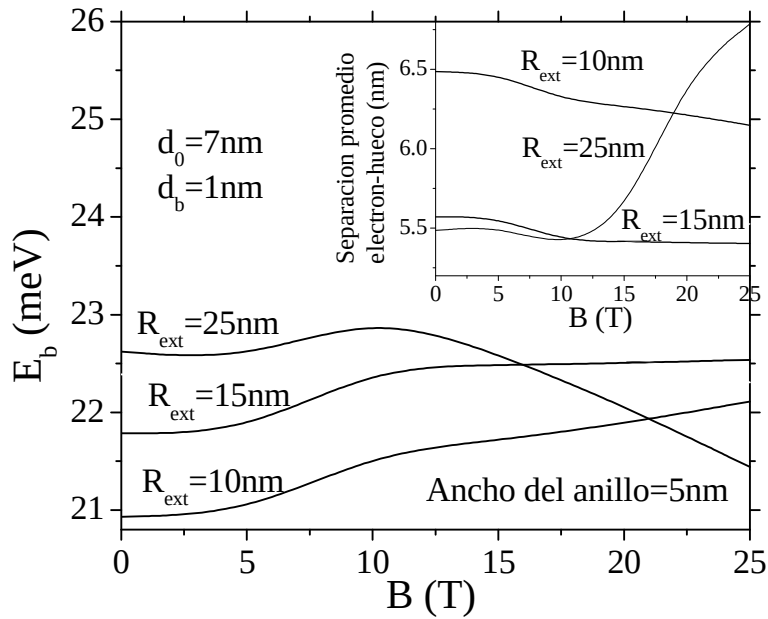


Figura 3.7 Energía de enlace del excitón en función del campo magnético en anillos de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con diferentes radios exteriores, 10, 15 y 25 nm. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del campo magnético. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en el la figura principal.

Para las estructuras consideradas, esta disminución es insuficiente para producir un incremento significativo de la probabilidad de tunelamiento del hueco en la región central, pero si es suficiente para hacer significativa la

probabilidad de tunelamiento de los electrones en QR con $R_i = 20nm$ y campos magnéticos de intensidades mayores de 10T. En consecuencia, se puede observar en el recuadro de la figura 3.7, que en estas condiciones la separación promedio del par e-h se incrementa abruptamente, mientras la energía de enlace en la figura principal decrece. Este efecto de un incremento drástico de la separación e-h y el correspondiente decrecimiento de la energía de enlace del excitón, se puede llevar a cabo mediante la aplicación de un campo magnético significativamente más débil en un QR con radio interior más grande, lo cual abre alguna posibilidad adicional para el manejo del espectro del excitón. Como la disminución de la altura de la barrera más interna en presencia del campo magnético externo depende también del radio del QR, entonces se podría esperar que la separación e-h y la energía de enlace del excitón deberían ser muy sensibles a la variación del tamaño lateral del QR. De tal manera que cuanto más grande es el radio interior del QR y más ligera es la partícula, más alta es la probabilidad de tunelamiento de la partícula en la región central de la barrera. Por lo tanto, la variación del radio del anillo define otra posibilidad para incrementar abruptamente la separación e-h.

En la figura 3.8 se muestran los resultados de cálculo de la energía de enlace del excitón en función del radio exterior del QR de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, para el cual se ha dado un valor fijo del espesor igual a 5nm y se toman valores diferentes de las intensidades del campo magnético, 0, 10 y 20T. En el recuadro de esta figura se exhibe la correspondiente variación de la separación promedio para el e-h.

A partir del recuadro se puede ver que cuando el radio exterior, R_{ext} incrementa desde 7.5nm (bajo la condición de que el espesor del anillo permanezca fijo), las funciones de onda del electrón y del hueco inicialmente se comprimen en los lados opuestos del anillo, haciendo que la separación e-h suba hasta alcanzar un valor máximo cuando R_{ext} llega a ser aproximadamente igual a un radio de Bohr efectivo (alrededor de 10nm). Para un incremento adicional de R_e , el electrón y el hueco saltan sobre el mismo lado del anillo, haciendo que la separación promedio se reduzca de manera rápida. En presencia de campos magnéticos intermedios o débiles, la altura de la barrera interior decrece lentamente cuando el radio interior crece, haciendo posible el tunelamiento del electrón en la región de la barrera central. En consecuencia, la separación e-h una vez más se incrementa. Se puede observar a partir del recuadro que este incremento se presenta a partir de $R_e \approx 17nm$ cuando el campo magnético se hace igual a 20T y para $R_e \approx 22nm$ cuando $B=10T$. También se puede observar que existe una total concordancia entre las curvas del recuadro y las que se muestran en la figura principal, ya que cuanto más grande es la separación e-h, más pequeña es la energía de enlace del excitón y viceversa.

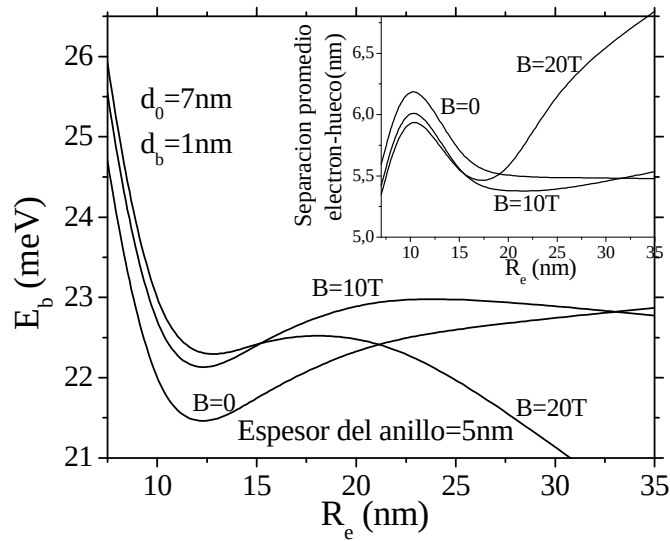


Figura 3.8 Energía de enlace del excitón en un anillo de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ en función del radio exterior para un espesor fijo del anillo y para diferentes intensidades del campo magnético. En el recuadro se presenta la variación de la distancia promedio entre el electrón y el hueco en función del radio exterior. Se utilizan las mismas convenciones empleadas en el la figura principal.

3.2 EFECTO DE LA MORFOLOGÍA SOBRE LA DISTRIBUCIÓN DE CARGA DE UN EXCITÓN EN SAQDs

En la sección anterior se estudió la forma como se distribuía la carga de un excitón confinado en un QD en forma de anillo y de disco. Los resultados demuestran que el campo magnético y el tamaño del QD tienen gran incidencia sobre la manera heterogénea como se distribuye la carga eléctrica. Como es bien conocido, no sólo el tamaño del QD afecta el espectro energético de las diferentes partículas confinadas dentro de él sino también su morfología. Por lo tanto, resulta lícito pensar en la forma como se distribuye la carga del par e-h en SAQDs de formas diferentes y en particular en QDs que posean morfologías más puntiagudas que los anillos, tal como la pirámide cónica y la lente. En estos dos casos se espera que al estar las partículas más confinadas, se presente una distribución de carga diferente a la observada en anillos y discos. Estas razones han motivado un estudio que permita determinar como la morfología del QD afecta la energía de enlace y la distribución de carga del excitón confinado en pirámides cónicas, lentes y discos (ver figura I.5). La altura variable del QD, d , la cual depende de la distancia ρ al eje de simetría, se define a través de una sencilla y versátil expresión unificada para los tres sistemas:

$$d(\rho) = d_b + d_0 \left[1 - (\rho/R_e)^n \right]^{1/n} \vartheta(R_0 - \rho) \quad (3.19)$$

Acá R_e representa el radio de la base, d_b es el espesor de la WL, d_0 es la máxima altura del QD por encima de la WL y $\vartheta(x)$ es la función escalón de Heaviside. La morfología del QD se controla por medio del parámetro generatriz de forma n , el cual corresponde a un entero que toma los valores 1 y 2 para QDs en forma de pirámides cónicas y lentes, respectivamente, mientras que el disco se genera cuando $n \rightarrow \infty$.

En el análisis que se va a realizar a continuación para la energía de enlace y la distribución de carga del par e-h confinado en QDs de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, se hacen dos suposiciones. Lo primero, es que por razones de conveniencia matemática y en correspondencia con los datos experimentales, se asumirá que el cociente entre la altura máxima del SAQD y del radio de la base es muy pequeña $[(d_0 + d_b)/R_e \ll 1]$. Esta condición permitirá desacoplar el movimiento rápido en dirección z del movimiento lento en el plano. La segunda condición tiene que ver con la omisión intencional de los efectos asociados con los campos de deformación que inherentemente se crean en el QD durante su fase de crecimiento y los cuales pueden llegar a tener un impacto significativo [147] en la estructura electrónica de los sistemas de pocas partículas confinadas en QDs.

Para solucionar la ecuación adimensional de Schrödinger (3.6), correspondiente a un excitón en un QD con simetría axial, se usará el mismo método de dimensión fractal con el que se hizo el análisis en la sección anterior para el excitón en discos y anillos. Grosso modo, en este método se requiere realizar dos pasos fundamentales. Lo primero es determinar las autofunciones y los respectivos autovalores de la ecuación de Schrödinger uni-particular y lo segundo es determinar y solucionar la ecuación que satisface la función de correlación $\Phi(r_{eh})$.

En la solución la ecuación uni-particular de schrödinger (3.7a) para el estado base ($m=0$), se utiliza la aproximación adiabática que se describió en la sección 1.4, con fin de desacoplar el movimiento rápido del lento. La ecuación de onda para el movimiento rápido a lo largo del eje z esta dado por:

$$-\frac{\partial}{\partial z_p} \eta_p \frac{\partial f_p(\rho_p, z_p)}{\partial z_p} - V_p(\rho_p, z_p) f_{zp}(\rho_p, z_p) = E_{zp}(\rho_p) f_{zp}(\rho_p, z_p); \quad p=e, h \quad (3.20a)$$

donde ρ_p se debe tratar como un parámetro. El potencial de confinamiento $V_p(\rho_p, z_p)$ se define a través de la ecuación (3.5), donde el espesor $d(\rho)$ del QD está definido por la ecuación (3.19). Los autovalores $E_{zp}(\rho_p)$ que se encuentran al resolver la ecuación de onda (3.20), representan los potenciales de confinamiento para el movimiento lento del electrón o del hueco en el plano perpendicular a z. La ecuación de onda uni-particular en el plano se puede escribir como:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[\eta_p \rho \frac{d f_{\rho p}(\rho)}{d\rho} \right] + E_{zp}(\rho) f_{\rho p}(\rho) = E_p f_{\rho p}(\rho); \quad p = e, h \quad (3.20b)$$

Claramente se puede ver que la función de onda uni-particular completa se puede escribir como:

$$f_p(\mathbf{r}_p) = f_{zp}(z_p, \rho_p) f_{\rho p}(\rho_p); \quad p = e, h \quad (3.21)$$

Una vez se obtienen las curvas de potencial $E_{zp}(\rho_p)$, las funciones de onda para el estado base $f_{\rho p}(\rho_p)$, correspondientes al movimiento plano de la partícula y las energías uni-particulares para el estado base del electrón E_e y del hueco E_h , se pueden encontrar resolviendo numéricamente la ecuación (3.20b) con condiciones de frontera $f'_{\rho p}(0) = 0$ y $f_{\rho p}(\infty) = 0$. En nuestro caso se usa nuevamente el método de barrido trigonométrico [87-80].

En la figura 3.9 se puede ver que la forma del potencial de confinamiento en el plano $E_{ze}(\rho_e)$, es fuertemente dependiente de la morfología del QD siendo casi una imagen especular de los perfiles de los QD. En nuestro modelo con altura del QD dado por la ecuación (3.19), las curvas de potencial para el movimiento de las partículas en el plano tienen la forma casi triangular para el caso de la pirámide cónica ($n=1$), forma casi parabólica para la lente ($n=2$) y rectangular para el disco ($n \rightarrow \infty$). Las expresiones analíticas aproximadas para la dependencia del potencial con la distancia, se pueden escribir como:

$$V_p(\rho_p) \approx \begin{cases} E_{layer}^{(p)} + 0.4 \cdot V_{0p}(\rho_p/R_e)^n; & 0 < \rho_p < R_e; \\ E_{layer}^{(p)} + 0.4 \cdot V_{0p}; & \rho_p > R_e; \end{cases} \quad p = e, h \quad (3.22)$$

En esta ecuación $E_{layer}^{(p)}$ y $E_{layer}^{(p)} + 0.4 \cdot V_{0p}$ representan las energías del estado base de las partículas en la capa de InAs con espesores de 5 y 2 nm, respectivamente.

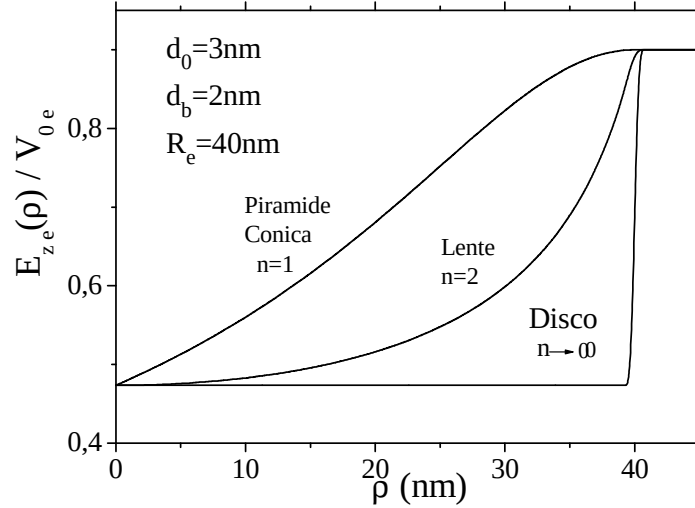


Figura 3.9. Curvas de potencial efectivo para el movimiento del electrón en el plano en puntos cuánticos en forma de disco, lente y pirámide cónica.

La ecuación de Schrödinger (3.6) para el excitón, no es posible resolverla exactamente y por lo tanto se debe emplear un método aproximado a fin de encontrar la función de onda, $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1)$ y la energía, $E(\tau=1)$ para el estado base. En nuestro caso se usará el principio variacional y para ello se propone una función de prueba de la forma:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1) = \Psi^{(0)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=0) \Phi(r_{eh}) = f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \quad (3.23)$$

donde $\Phi(r_{eh})$ es una función que tiene en cuenta los efectos de correlación del par e-h.

Mediante el principio variacional de Schrödinger se puede encontrar la mejor aproximación de $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1)$ a través de la minimización de la funcional $F[\Phi] = \langle f_e f_h \Phi | H - E | f_e f_h \Phi \rangle$. Tomando la derivada funcional con respecto a $\Phi(r)$ y después de algunas manipulaciones matemáticas se obtiene la ecuación de onda (3.14)

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_0(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r); \quad (3.24)$$

$$E_b = E(\tau=0) - E(\tau=1) = E_e + E_h - E$$

donde E_b es la energía de enlace del excitón y $P_0(r)$ es una función dada por:

$$P_0(r) = \int d\mathbf{r}_e \int \left| f_e(\mathbf{r}_e) \right|^2 \left| f_h(\mathbf{r}_h) \right|^2 \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \quad (3.25)$$

La ecuación de onda (3.24) que satisface $\Phi(r)$ es similar a un átomo de hidrógeno en un espacio isotrópico efectivo donde la parte radial del Jacobiano está dada por $P_0(r)$. Las propiedades del espacio, generalmente asociadas con la dependencia del Jacobiano sobre r , que de acuerdo con (3.25), estas propiedades deben definirse por la geometría de la heteroestructura. Si para cualquier heteroestructura esta dependencia fuera una ley de potencias, $P_0(r) = Cr^{D-1}$, entonces el parámetro de escalamiento D en esta dependencia se podría considerar como la dimensión del espacio efectivo y la ecuación (3.14) tendría que coincidir con el problema de autovalores para un átomo de tipo hidrogenoide en un espacio D -dimensional, donde D puede ser un parámetro entero o fraccionario [87].

Para pequeñas distancias de r y partiendo de la ecuación (3.25), se puede obtener una expresión aproximada de la dependencia del Jacobiano sobre r , solo basta tener en cuenta que en este caso los vectores $\mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_h$ son casi coincidentes, haciendo que

$$P_0(r) = 4\pi Cr^2; C = \int f_e^2(\mathbf{r}) f_h^2(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

Estas relaciones evidencian el carácter tri-dimensional del excitón para separaciones muy pequeñas del electrón-hueco independientemente de la geometría de confinamiento.

La ecuación de onda (3.24) se debe complementar por dos condiciones de frontera, una en el punto $r=0$ y la otra para r tendiendo a infinito. La primera de ellas surge de la condición de “cusp” [148] y de la relación (3.25):

$$\Phi'(0)/\Phi(0) = \lim_{r \rightarrow 0} \left[-2P_0(r)/rP_0'(r) \right] = -1 \quad (3.27)$$

La segunda condición de frontera se puede obtener tomando en cuenta que para grandes separaciones del par e-h, las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=1)$ y $\Psi^{(0)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=0)$ son similares y por lo tanto, la función $\Phi(r)$, de acuerdo a la expresión (3.23) debería ser casi constante. En consecuencia se tiene:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Phi'(r) = 0 \quad (3.28)$$

Los cálculos numéricos que se deben realizar a fin determinar la energía de enlace del excitón y la función de onda, con la cual se determine posteriormente la distribución de carga del par e-h en el QD, consiste fundamentalmente de tres pasos. Lo primero que se debe hacer es determinar las funciones de onda uni-dimensionales, $f_e(\mathbf{r}_e)$ y $f_h(\mathbf{r}_h)$ por medio de la aproximación adiabática, luego el cálculo numérico de la integral (3.26) y por último se debe encontrar la función de onda y la correspondiente energía más baja del problema de autovalores (3.24). Nosotros hemos calculado la integral (3.25) en 100 puntos sobre una malla uniforme y su resultado se usa después para determinar el Jacobiano $P_0(r)$ para una separación arbitraria del electrón-hueco mediante la técnica de Spline cúbico. Las ecuaciones de onda (3.24) con condiciones de frontera (3.27) y (3.28) se resuelven usando el método de barrido trigonométrico.

Una de las características más relevantes del par electrón-hueco en SAQDs, tiene que ver con la distribución heterogénea de carga, dentro y alrededor del QD, debido a las capacidades tan diferentes que tienen el electrón y el hueco para tutelar tanto hacia la región de la barrera como hacia la WL. Este hecho, tal como se demostró en la sección anterior, puede generar momentos multipolares de diferente orden, los cuales se pueden expresar en términos de las densidades de probabilidad de encontrar al electrón, $\Pi_e(\rho, z)$ y al hueco $\Pi_h(\rho, z)$ en el punto en el cual las coordenadas cilíndricas son (ρ, z) . La diferencia entre estas densidades de probabilidad del electrón y del hueco, permite determinar la densidad de distribución de carga $Q(\rho, z)$ en SAQDs con excitón atrapado, es decir:

$$Q(\rho, z) = \Pi_e(\rho, z) - \Pi_h(\rho, z)$$

En la figura 3.10 se muestran las curvas de contorno, las cuales corresponden a las líneas de nivel de las distribuciones de la densidad de carga a lo largo de sección transversal de un QD de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ en forma de disco, lente y pirámide cónica con excitón atrapado.

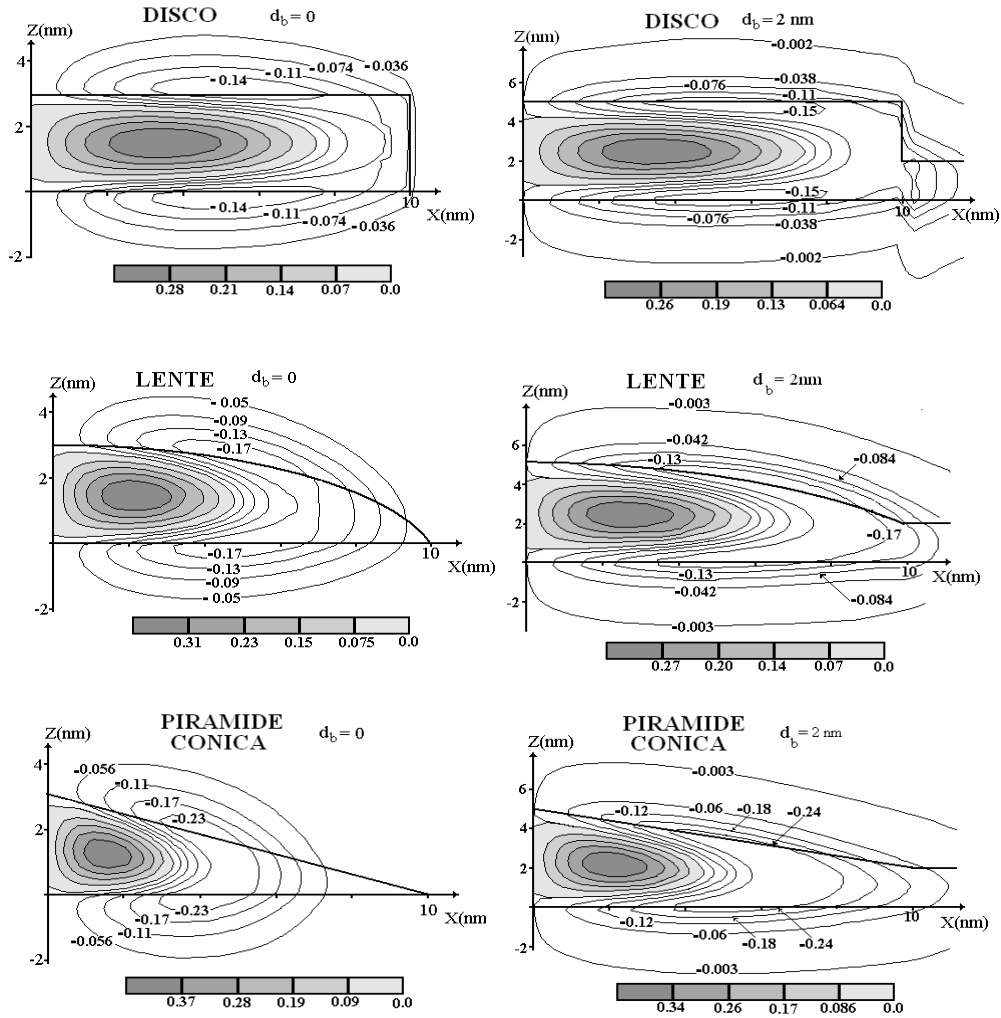


Figura 3.10. Curvas de contorno de la distribución de carga radial inducida por excitón en un plano que pasa a través del eje de simetría de un QD de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ cuyas formas corresponden a un disco, una lente y una pirámide cónica. Para las tres morfologías se toma un radio de la base igual a 20nm y la altura máxima para los QDs de la izquierda sin capa húmeda es de 3nm y para los de la derecha la máxima altura por encima de la con húmeda es de 3nm y el espesor de esta capa es de 2nm. Las partes sombreadas de estas figuras indican las regiones que se cargan positivamente dentro del $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$. Las líneas gruesas muestran los perfiles de los QDs

En la figura se ha hecho una comparación entre puntos sin capa húmeda (lado izquierdo) y puntos con capa húmeda (lado derecho), lo cual permitirá observar el efecto de la WL en la distribución de carga del par e-h. Las partes sombreadas de la figura indican las regiones dentro del material $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ que están cargadas positivamente. Se puede ver que la

densidad de distribución de carga radial dentro de los QDs y cerca al eje es positiva, mientras que en las partes superior e inferior, vecinas a las juntas del QD, la carga es negativa. También se puede ver que el tunelamiento del electrón en el plano de la capa, en las curvas del lado izquierdo para QDs sin WL, es despreciable. En este caso ambas partículas permanecen principalmente dentro del QD, pero el hueco por ser más masivo se sitúa más cerca del eje. Para el movimiento de las partículas en el plano, la existencia de la WL conduce a una disminución de la altura de la barrera, lo cual refuerza significativamente su tunelamiento en la dirección lateral. Este hecho conlleva a que las zonas periféricas cercanas a las juntas del QD estén mucho más cargadas que en los QDs sin WL.

Comparando en esta figura 3.10 las curvas de nivel para el disco, la lente, y la pirámide cónica, se puede observar también la variación de la distribución de carga, dentro y alrededor de las capas de InAs, la cual es similar a una distribución de carga de una superficie metálica, cuando las geometrías del QD varían desde un punto cuántico plano, como el disco, a otro más puntiagudo como la pirámide cónica. Esta variación en la distribución de carga, es una consecuencia del mayor confinamiento que se produce en las geometrías puntiagudas, lo cual se manifiesta en la figura 3.10 a través de un desplazamiento, tanto del centro de la carga positiva dentro del QD como de la nube de carga negativa, hacia el eje de simetría, conservando casi invariable la distribución de carga en la dirección vertical a medida que la geometría del QD se hace más puntiaguda.

Debido a la simetría axial e independientemente de morfología, la componente del momento dipolar en el es igual a cero y la distribución de carga en estos QDs, inducida por la captura del excitón, se caracteriza por tener un momento dipolar diferente de cero en la dirección de crecimiento del cristal y un momento cuadrupolar en el plano perpendicular al eje de simetría. Para aclarar la naturaleza de la componente vertical del momento dipolar inducido por el confinamiento del excitón en el QD y para explicar el porque este momento dipolar es más grande en estructuras con geometrías puntiagudas, se muestra en la figura 3.11 la distribuciones de carga en dos pirámides cónicas de alturas diferentes.

Las flechas en estas figuras muestran la dirección del momento dipolar a lo largo de las secciones transversales correspondientes. Se puede ver que cuanto más alta es la estructura más grande es la componente del momento dipolar en la dirección de crecimiento cristalino. Esto se debe al hecho de que el electrón se sitúa con mayor probabilidad en la región periférica del QD que está más cerca de la base, gracias a que el menor espesor le ofrece al electrón condiciones de mayor confinamiento. Contrariamente, el hueco se sitúa en la vecindad del eje de simetría y sobre el plano intermedio que está entre la base y la parte más alta del QD. Por lo tanto, la existencia de un momento dipolar diferente de cero en la dirección de crecimiento del

crystal, se puede atribuir al confinamiento no homogéneo en la dirección vertical de los QDs con morfología en forma de cuña.

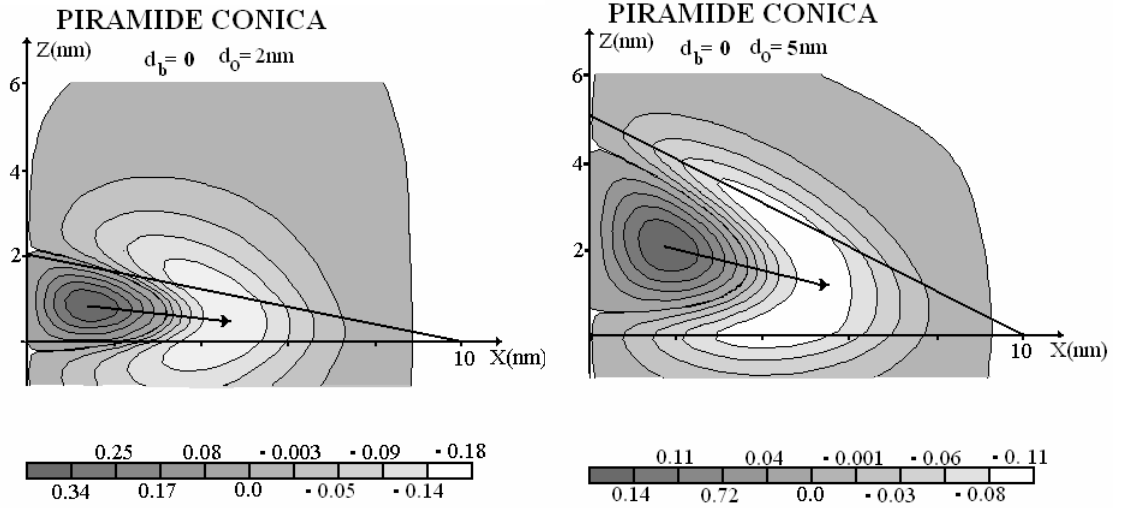


Figura 3.11. Lo mismo que en la figura 3.10, solo que aquí se tienen dos pirámides cónicas con alturas de 2nm y 5nm, respectivamente.

En contraste al momento dipolar paralelo al eje de simetría, el momento cuadrupolar en el plano se puede atribuir a la diferencia entre el tunelamiento promedio de las partículas hacia la WL y el cual, como se ve a partir de la figura 3.10, aumenta significativamente cuando el espesor de la WL crece y se hace comparable con el valor de la altura del punto que está por encima de la WL.. El valor del momento cuadrupolar también es sensible a la alteración en la morfología del QD. Se puede ver de la figura 3.10 que la separación e-h en la dirección lateral es más fuerte en QDs con forma puntiaguda y esta separación se incrementa cuando la morfología de los QDs cambia su forma desde un disco a una lente y después a una pirámide cónica. Así, los momentos, dipolar y cuadrupolar de los QDs con excitón atrapado, constituyen características importantes relacionadas con su morfología y donde los valores de estos momentos sufren un cambio considerable cuando la forma del QD se modifica.

Otra característica importante, la cual junto a la separación e-h puede llegar a sufrir una variación considerable debido a los cambios en la morfología del QD, es la energía de correlación del excitón: $E_b = E(\tau=0) - E(\tau=1) = E_e + E_h - E$. En la figura 3.12 se muestra la dependencia de la energía de correlación del excitón con el radio de la base del SAQD, el cual tiene una altura de 3nm sobre la WL y ésta a su vez tiene un espesor de 2nm. La gráfica se realiza para SAQDs con tres morfologías diferentes: disco, lente y pirámide cónica.

A partir de esta figura se puede ver que la dependencia de la energía de correlación con el radio de la base del QD es similar para las tres morfologías que se analizan, obteniéndose los valores más altos en la pirámide cónica ($n=1$), seguido por la lente ($n=2$) y el disco ($n \rightarrow \infty$). En otras palabras, cuanto más pequeño es el parámetro generatriz de forma n en la ecuación (3.19), más grande es la energía de correlación del excitón. En todos los casos, al incrementar el radio de la base se hace más débil el confinamiento y las energías de correlación caen y se aproximándose lentamente al valor límite de $4Ry^*$, el cual corresponde a la energía de correlación de un excitón en 2D. Para explicar esta tendencia vamos a establecer la dependencia de la energía de enlace del excitón con el parámetro generatriz de forma y para ello se hará uso de la relación de incertidumbre.

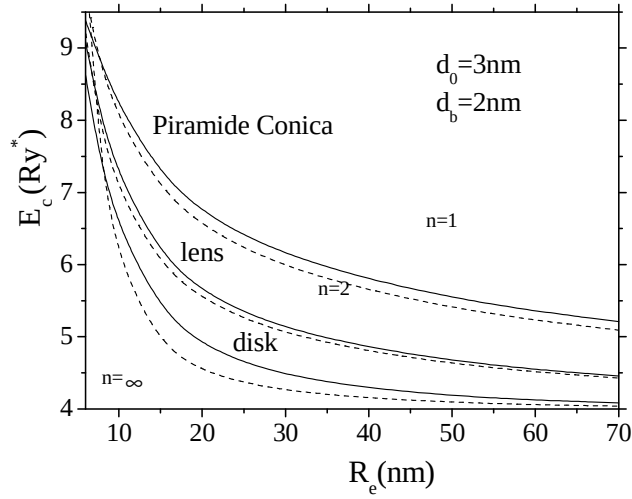


Figura 3.12. Energía de correlación del excitón como función del radio de la base para QDs con diferentes perfiles obtenidos con (3.14) (líneas continuas) y usando principio de incertidumbre (líneas a tramos).

Las energías uni-particulares para el estado base en un campo central de 2D con potencial dado por (3.23), se pueden obtener a partir de la relación de incertidumbre como:

$$E_p \approx E_{capa}^{(p)} + Ry^* (0.4 \cdot V_{0p} / Ry^*)^{2/(n+2)} (\mu / 4m_{pw})^{n/(n+2)} (a_0^* / R_e)^{2n/(n+2)}; \quad p=e,h \quad (3.29)$$

El primer término de esta ecuación da la energía potencial de la partícula localizada cerca del eje y el segundo término corresponde a la energía cinética para el movimiento en el plano. Cuando la base del radio crece, la energía cinética cae y tiende a cero, pero la rapidez de la convergencia a cero, depende del parámetro generatriz de forma n . Por ejemplo, en la pirámide cónica este término en la ecuación (3.29) decrece como $\approx 1/\sqrt[3]{R_e^2}$, en lentes como $\approx 1/R_e$ y en discos como $\approx 1/R_e^2$. Para estimar la energía

del par e-h, se debería tener en cuenta que la energía cinética de este sistema es aproximadamente igual a la energía del solo hueco más el término generado por la atracción entre partículas. La energía de interacción del par e-h en QDs con radio más grande que 10nm es de alrededor de $-4R_y^*$, igual al valor de la energía de correlación del excitón bi-dimensional no confinado (la separación promedio entre el electrón y el hueco en dos dimensiones es de alrededor de 5nm). Por lo tanto, la energía estimada para el excitón es: $E_p \approx E_{capa}^{(p)} + E_h - 4R_y^*$. Finalmente, de acuerdo a la definición dada para la energía de correlación, se puede obtener la siguiente expresión semi-empírica para la energía de correlación del excitón como función del radio de la base R_e del QD con diferente parámetro generatriz de forma n :

$$E_b \approx \left[4 + (2 + 2/n) (a_0^*/R_e)^{2n/(n+2)} \right] \cdot R_y^*; \quad n = 1, 2, \infty \quad (3.30)$$

Los resultados correspondientes a las energías de correlación del excitón estimadas usando esta relación, se muestran en la figura 3.12 con líneas a tramos. El buen acuerdo con el método variacional es muy gratificante si se considera la simplicidad de la estimación.

Para analizar el efecto de la variación de la altura del QD sobre las propiedades del excitón, se ha calculado la dependencia de la energía de correlación con el radio de la base de una pirámide cónica para tres valores diferentes de la altura d_0 sobre la WL, la cual tiene un espesor de 2nm. Los resultados se muestran en la figura 3.13.

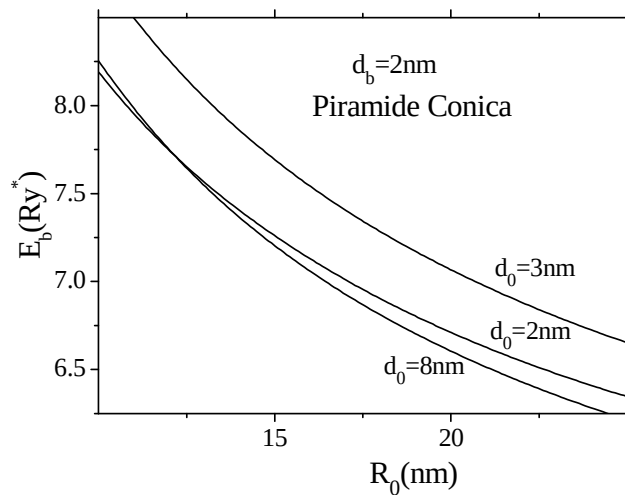


Figura 3.13 Energía de correlación del excitón en función del radio del QD de forma piramidal para tres diferentes alturas

En primera instancia uno estaría tentado a pensar que una disminución de la altura d_0 del QD debería siempre producir una reducción de la separación entre el electrón y el hueco y en consecuencia, la energía de correlación del excitón debería subir. No obstante, se puede observar en la figura 3.13 que las energías de correlación del excitón en QDs con alturas de 2nm, son más bajas que las energías de enlace en QDs con altura de 3nm independientemente del valor del radio del QD. La razón de este comportamiento inusual de la energía correlación del excitón, se debe a que cuando la altura del QD se reduce desde 3nm a 2nm, la energía cinética del electrón se incrementa y se hace comparable con la altura de la barrera del potencial de confinamiento. Bajo estas circunstancias se produce un desbordamiento de la función de onda del electrón hacia la región de la barrera, principalmente a lo largo de la dirección z . Esto hace que la separación entre el electrón y el hueco se incremente, llegando a ser tan grande como la separación entre partículas débilmente confinadas en QDs de 8nm de altura. Como ha sido estimado anteriormente, usando la relación de incertidumbre, el valor umbral para el ancho del pozo correspondiente al desbordamiento de la función de onda del electrón en la región de la barrera es de alrededor de 1nm. Esta es la razón del inusual comportamiento de la energía de enlace del excitón en QDs cuyas alturas son más bajas de 3nm.

Otra característica interesante de las dependencias presentadas en la figura 3.13 está relacionada con la intersección de las curvas correspondientes a QDs con alturas de 2 y 8nm cuando sus radios son de alrededor de 12nm. Este comportamiento solamente puede explicarse por un menor confinamiento del electrón en QDs con altura de 2nm que en QDs con altura de 8nm. En consecuencia, podemos concluir que una disminución de la altura del QD por debajo de un cierto valor crítico, siempre estará acompañado del desbordamiento de la función de onada del electrón, no solo en dirección z sino también en dirección lateral.

3.3 DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE CON EXCITÓN

En las secciones anteriores se demostró que los electrones y los huecos confinados en SAQD tienen probabilidades diferentes para tunelar hacia la región de la matriz que rodea al QD. Este hecho hace que al confinar un excitón en un QD, se formen densidades de carga opuestas entre la parte central del QD, la cual se carga positivamente, y la periferia del QD que se carga negativamente.

Recientemente se ha establecido la existencia de sistemas compuestos por dos SAQDs que se pueden disponerse vertical o lateralmente. Estos sistemas acoplados han generado grandes expectativas debido a sus

potenciales aplicaciones en opto electrónica y computación cuántica [112, 149].

En esta sección vamos a extender el método de dimensión fractal usado en el estudio de los excitones en un solo QD, al caso de excitones confinados en dos puntos cuánticos acoplados verticalmente. Para lograr este propósito, se consideran dos QDs de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ en forma de lente (parámetro generatriz de forma $n = 2$), altura máxima sobre la WL d_0 , espesor de la WL, d_b y separación entre puntos h . La representación esquemática en 3D para este sistema de dos puntos apilados verticalmente se muestra en la figura 3.14.

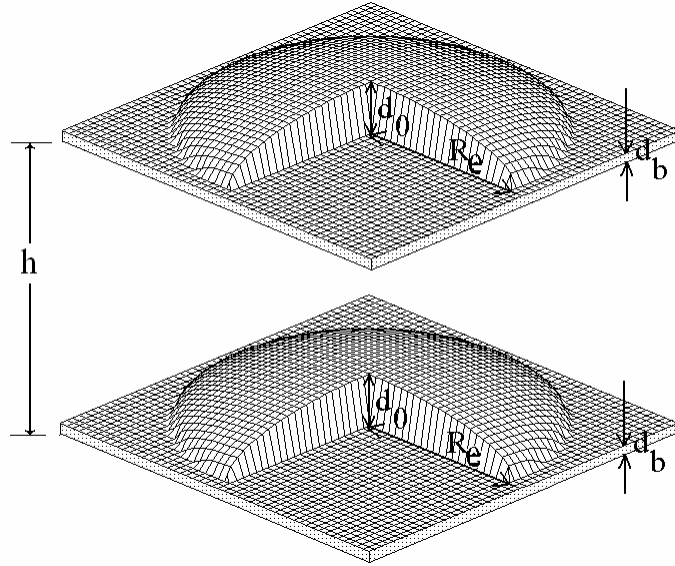


Figura 3.14. Representación esquemática de un sistema de dos punto cuánticos acoplados verticalmente

La ecuación adimensional de Schrödinger en la aproximación de masa efectiva para el excitón en presencia de campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ puede escribirse en coordenadas cilíndricas como:

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) = E(\tau) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau); \quad (3.31a)$$

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

$$H_p(\mathbf{r}_p) = -\nabla_p \eta_p \nabla + V_p(\rho_p, z_p) + \eta_p \gamma^2 \rho_p^2 / 4 + i\eta_p \gamma \partial / \partial \phi_p; \quad (3.31b)$$

$$\eta_p = \mu / m_p; \quad p = e, h$$

$$V_p(\rho, z) = V_p - V_p \vartheta(z) \vartheta[d(\rho) - z] - V_p \vartheta(z - h) \vartheta[h + d(\rho) - z] \quad (3.31c)$$

donde $\mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_h$ son los vectores de posición del electrón y el hueco, ($\mathbf{r}_p = \{\rho_p, \varphi_p, z_p\}$ $p = e, h$) y $r_{eh} = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ es la separación entre partículas. El parámetro τ en el Hamiltoniano (3.31) es igual a cero para el caso uni-particular y uno para el problema real con interacción Coulombiana entre el electrón y el hueco.

Para resolver el problema de autovalores 3.31a mediante el método de dimensión fractal, se deben realizar varios pasos. Lo primero que se debe hacer es resolver el problema uni-particular con Hamiltoniano (3.31b), tanto para el electrón (e) como para el hueco (h). Esto permitira determinar autofunciones $f_e(\mathbf{r}_e)$ y $f_h(\mathbf{r}_h)$, así como sus respectivos autovalores E_e y E_h . Este objetivo se puede lograr mediante la aproximación adiabática, la cual se puede implementar garantizando que $(d_0 + d_b) \gg R_e$. Una vez conocidas estas autofunciones se propone una función de prueba $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1)$ como el producto de las funciones de onda uni-particulares y una función de correlación, esto es: $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1) = f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh})$. Mediante el método variacional de Schrödinger se puede obtener la ecuación de onda que satisface la función de correlación $\Phi(r_{eh})$ y las respectivas condiciones de frontera que se deben cumplir. La solución de esta ecuación de onda (3.24) se debe hacer por métodos numéricos, que en el caso presente se usa una vez más el método de barrido trigonométrico.

Los resultados de cálculo para las distribuciones de carga y para la energía del excitón en puntos acoplados verticalmente, se muestran en tres diferentes figuras. Las distribuciones de carga para el excitón, calculadas sobre un plano que contiene al eje de simetría, se presentan a manera de curvas de nivel en las figuras 3.15(a-d). La densidad de carga se calcula como la diferencia entre las distribuciones de densidad de probabilidad entre el electrón y el hueco, lo cual se hace usando las funciones bi-particulares dadas por la ecuación (3.23). Los parámetros geométricos de las estructuras y la intensidad del campo magnético γ se dan en las figuras.

El perfil de la sección transversal del QD se describe a través de las líneas sólidas más gruesas. Las partes oscuras de las figuras indican las zonas dentro del material de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ que se hallan cargadas positivamente, mientras las partes más claras corresponden a las regiones periféricas que se encuentran cargadas negativamente. Debido a la diferencia de masas entre el electrón y el hueco, se puede ver como el tunelamiento del electrón se hace significativo cuando la máxima altura de la lente esta entre 3-5nm, mientras que el hueco permanece mas fuertemente restringido a la parte central del QD. Esta es la razón por la cual el interior de cada punto, con excitón confinado, se carga positivamente, mientras que las regiones periféricas alrededor de las junturas de cada punto se cargan negativamente.

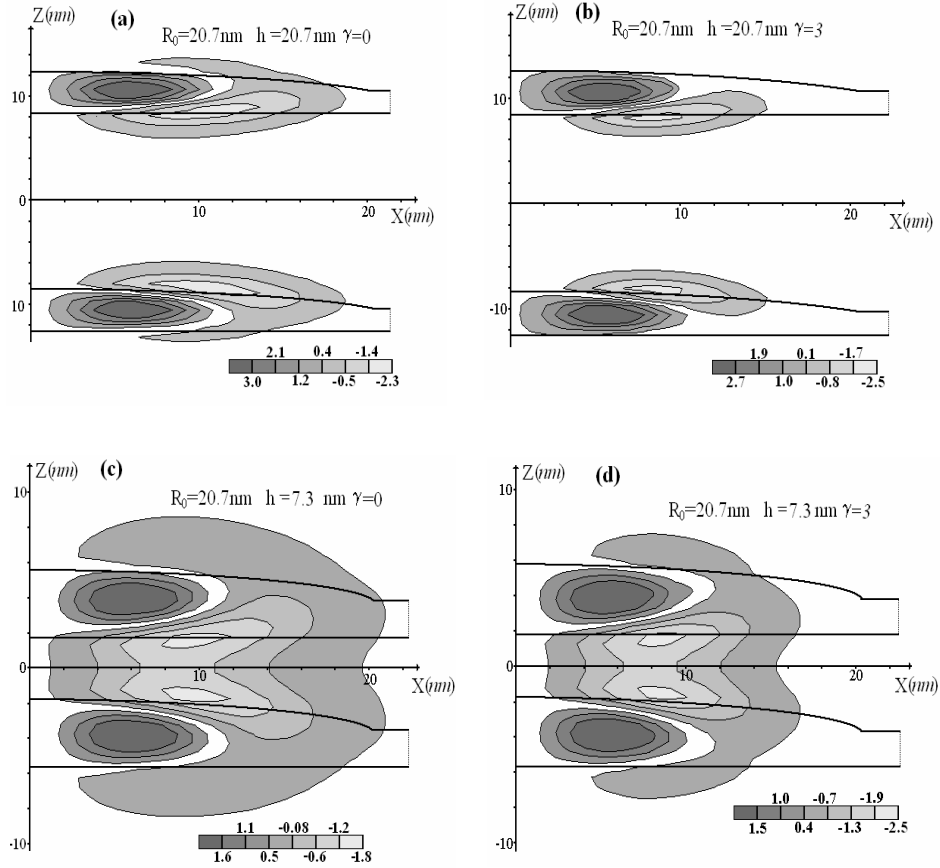


Fig. 3.15 líneas de nivel para densidad de distribución de carga a lo largo de una plano (x - z) para un sistema formado por dos lentes acopladas verticalmente y dentro de las cuales se confina un excitón bajo la presencia de un campo magnético $\gamma=0$ (figurs de la izquierda a,c) y $\gamma=3$ (figures de la derecha b,d)

La parte izquierda de la figura corresponde al caso de cero campo magnético para grandes (a) y pequeñas (c) separaciones entre QDs. Se puede ver un cambio significativo en las distribuciones de carga cuando los puntos se aproximan uno al otro. Cuando la separación entre puntos es grande, la carga negativa de manera preferencial escapa en dirección lateral, mientras que para el caso de pequeñas separaciones, la carga negativa escapa en todas las direcciones alrededor de las junturas. También de puede ver que bajo la influencia del campo magnético externo, figuras 3.15 (b,d) se produce una disminución significativa del tunelamiento del electrón en dirección lateral, lo cual se debe al fuerte confinamiento de la distribución electrónica en dirección radial por acción del campo magnético. Comparando las

distribuciones de carga del lado izquierdo y derecho de la figura 3.15, se puede ver un considerable confinamiento de la distribución electrónica en dirección radial por la acción del campo magnético. Debido a la simetría de la geometría que se analiza, el momento dipolar para todas las distribuciones es casi cero, pero la distribución de carga se caracteriza por un momento cuadrupolar, el cual incrementa a medida que la separación entre puntos disminuye y la intensidad del campo crece.

En la figura 3.16 se muestra la dependencia de la energía de enlace para el estado base de un excitón en dos QDs en forma de lente que se hallan acoplados verticalmente. El estudio se hace para tres diferentes alturas, pero en cada caso separación entre puntos es la misma e igual a 20nm.

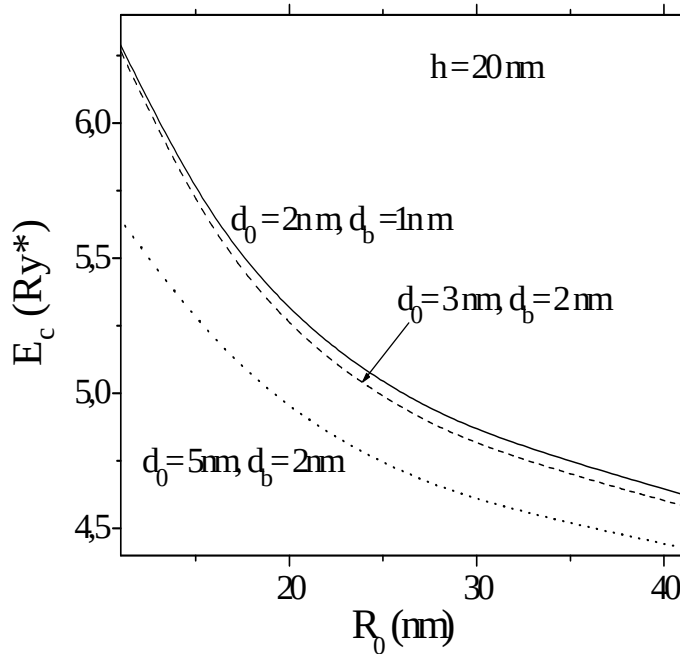


Fig. 3.16 Energía del estado base de un excitón, en lentes cuánticas de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ acopladas verticalmente, como función del radio de la base

Se puede ver que la que las energías de correlación disminuye monótonamente a medida que el radio de la base crece, y paulatinamente, en todos los casos, la energía se acerca al valor asintótico de $4Ry^*$, el cual corresponde a la energía correlación del excitón en sistemas bi-dimensionales, es decir en puntos para los cuales se cumple que la razón $d_0/R_e \rightarrow 0$. La dependencia de las energías de correlación con el radio de la base para los diferentes espesores de la WL y de la lente, en general tienen un comportamiento similar, donde los valores más altos de energía se

obtienen para las lentes de menor altura, debido al incremento adicional del confinamiento en la dirección de crecimiento.

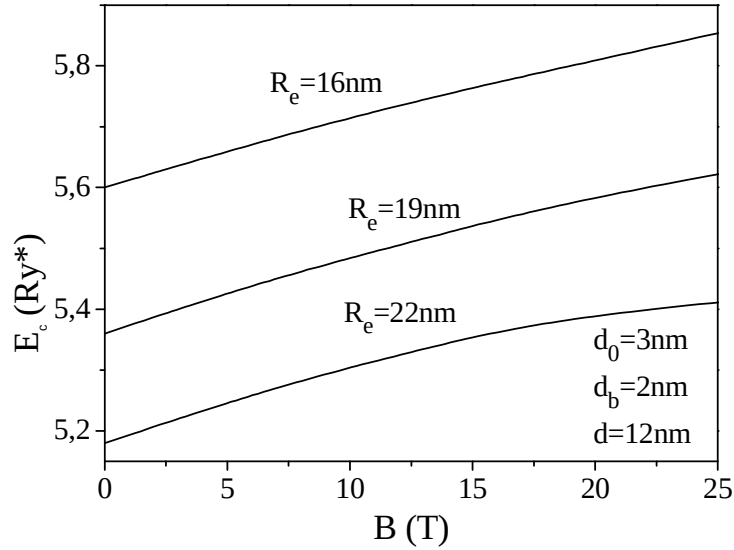


Fig. 3.17 Energía del estado base de un excitón, en lentes cuánticas de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ acopladas verticalmente, como función del campo magnético.

Finalmente, en la figura 3.17 se muestra a dependencia de la energía de correlación del excitón con el campo en heteroestructuras con diferente radio de la base. Se puede observar como la energía de correlación crece monótonamente al aumentar la intensidad del campo magnético, lo cual se debe a que el campo empuja a las partículas hacia el centro del anillo, produciéndose así un mayor acercamiento entre el electrón y el hueco, lo que finalmente se traduce en aumento de la interacción Coulombiana y por consiguiente de la energía.

CONCLUSIONES

- Se ha estudiado el espectro energético de los sistemas de pocas partículas, tanto del tipo móviles, formadas sólo por los portadores de carga como un par electrón-electrón (e-e), excitón (X), triones (X^+ y X^-), como del tipo inmóviles, correspondientes a los estados ligados de uno o dos electrones a un centro de carga positiva fija (D^0 y D^-). Se han considerado varios modelos de sistemas de pocas partículas exactamente solubles con el fin de establecer características generales de los puntos cuánticos auto ensamblados en los límites uní- y bidimensionales.
- El análisis de las soluciones exactas permitió establecer la existencia de una transformación del estado base, similar a la que se observa en una transición de fase de un sistema de muchas partículas desde un estado gaseoso hacia una fase ordenada del tipo cristal de Wigner cuando se disminuye la concentración de las partículas. Una transformación de este tipo se observa en un anillo con pocos electrones a medida que el radio se incrementa desde valor muy pequeño, cuando el movimiento de los electrones está débilmente correlacionado, hasta un valor muy grande cuando los electrones se encuentran fuertemente correlacionados.
- Se estudió el efecto del campo magnético sobre sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos acoplados verticalmente y se pudo establecer la existencia del efecto Aharonov-Bohm, similar al que tiene lugar para un solo anillo. Además se estableció que el período de oscilación del estado base en el efecto Aharonov-Bohm depende del radio del anillo, pero no de la distancia de separación entre ellos.
- Para extender los resultados anteriores a modelos con las secciones transversales y barreras de potencial finitas se aplicó la aproximación adiabática (AA). Se encontró que la disminución de la altura de los anillos hasta 2nm conlleva a un aumento de la probabilidad de tunelamiento electrónico fuera de los anillos y con mayor probabilidad hacia la región central. El tunelamiento se hace insignificante cuando la altura del anillo se duplica y los resultados se hacen similares a los obtenidos para anillos 1D con barrera infinita.
- La AA se utilizó también para analizar la influencia de la morfología y el tamaño de los SAQDs, ya que esta técnica permite separar el movimiento rápido de las partículas, en la dirección perpendicular a la base, del movimiento lento en la dirección lateral. Se demostró que el potencial efectivo que gobierna el movimiento lento de las partículas,

experimenta un descenso con relación al potencial original producido por la discontinuidad en las bandas de conducción de los materiales que constituyen la heteroestructura. Este descenso oscila entre el 40% y el 70% cuando la altura del QD disminuye desde 4nm a 2nm. Se encontró además que este potencial depende fuertemente de la morfología del SAQD, siendo su forma similar a una reflexión especular del perfil del punto en la sección axial respecto de la base.

- El estudio de los sistemas de pocas partículas en SAQDs realizado en el marco del método de dimensión fractal muestra que la energía del estado base es muy sensible también a los cambios del radio de la base, espesor de la capa húmeda, altura por encima de la capa húmeda y posición de las impurezas donadoras en el interior del QD.
- Se analizó el efecto de campo magnético sobre formación de donadores cargadas negativamente, D^- en SAQD. Se estableció que bajo influencia de campo magnético aplicado a lo largo de eje axial se aumenta esencialmente la probabilidad de formación de D^- cerca de eje de simetría a través de transferencia de un electrón desde una donadora neutra D^0 localizada en la región periférica hacia otra cercana al eje. De esta manera, la aplicación de campo magnético aumenta la población de las donadoras ionizadas lejos de eje de simetría y aumenta la población de D^- cerca de eje. El efecto se debe al confinamiento fuerte de los electrones y al aumento de probabilidad de encontrarlos cerca de eje bajo de influencia de campo magnético. Como lo mostraron los resultados de cálculo esto resulta en un aumento significativo de la energía de enlace de las impurezas centradas y en una disminución notable de esta energía para donadoras periféricas.
- Se estudió el efecto de morfología sobre las energías de enlace de las impurezas D^0 y D^- , así como del excitón en SAQDs. Se demostró que en condiciones de confinamiento moderado ($R_e \geq 20nm$ y $d_0 \approx 4nm$), la mayor energía de enlace se obtiene en QDs en forma de pirámide cónica, seguida por la pirámide truncada y la lente, mientras que el valor más pequeño siempre corresponde al QD en forma de disco. Esto se debe a que la distancia entre donador y electrón o entre electrón y hueco en los QDs con morfologías puntiagudas es menor que en los puntos con morfologías aplanadas u oblatas a consecuencia del mayor confinamiento que se logra en los QDs de tipo piramidal. El efecto contrario se presenta bajo condiciones de fuerte confinamiento ($R_e \leq 10nm$ y $d_0 \approx 4nm$), ya que el desbordamiento de la función de onda hacia la región de la barrera conlleva a que la distancia electrón-donador aumente, haciendo que el orden en las energías de correlación para las diferentes morfologías descrito anteriormente se

invierta totalmente y en este caso la máxima energía de correlación se presenta en discos mientras que la mínima se da en la pirámide cónica.

- Mediante el cálculo de la razón σ entre las energías de correlación de las impurezas D^- y D^0 respectivamente, se ha podido comprobar que en general los SAQDs no pueden considerarse como sistemas estrictamente bidimensionales, ya que al variar el radio de la base de los SAQDs, se puede evidenciar una evolución en la dimensionalidad de estas heteroestructuras. Cuando el radio de la base oscila entre 40 y 60 nm, el valor de σ se aproxima a 0.2 el cual es característico de sistemas 1D, pero para radios entre 10 y 30 nm, σ toma un valor cercano a 0.3 que es propio de los sistemas 0D, mientras que el valor de 0.13 característico de los sistemas 2D, sólo se logra para radios de la base mayores de 60 nm.
- Se comprobó que para los excitones atrapados en SAQDs la diferencia entre las masas efectivas del electrón y del hueco, tiene una gran incidencia sobre el espectro de energía del par electrón-hueco y la forma como se distribuye la carga en heteroestructura. La mayor longitud de tunelamiento del electrón, cuya masa efectiva es esencialmente menor de la del hueco, hace que exista un predominio de carga negativa en la región periférica cercana a las junturas, mientras que el interior del punto se carga positivamente a consecuencia de la mayor inercia del hueco. La separación espacial de cargas del electrón y del hueco da lugar a la formación de momentos cuadrupolares en las diferentes heteroestructuras. En anillos cuánticos este momento tiene una orientación contraria a la de los otros tipos de QDs que se analizaron debido a que el electrón tiene mayor probabilidad de tunelar hacia la zona central del anillo, mientras que en los otros casos tunela hacia el exterior de los QDs.
- Se demostró que la presencia de capa húmeda (“wetting layer”) en los SAQDs conduce a formación de un momento dipolar a lo largo del eje z el cual es mayor cuanto más grande sea el espesor del QD y más puntiagudo sea su perfil

REFERENCIAS

-
-
- [1]. M. L. Sadowski, M. Potenski, and M. Grynberg, Optical Properties of Semiconductor Nanostructures, Kluwer Academic Publishers, USA (1990)
 - [2]. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, London, 1958
 - [3]. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437(1982)
 - [4]. E. Gerjouy, A. R. P. Rau, and L. Spruch, Rev. Mod. Phys. **55**, 725(1983)
 - [5]. S. L. Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B **47**, 1383 (1993)
 - [6]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, and L. F. Garcia, Phys. Stat. Sol. (b) **224**, 757(2001)
 - [7]. I. D. Mikhailov and F. J. Betancur, Phys. Stat. Sol. (b) **213**, 325(1999)
 - [8]. P. A. Maksym and T. Chacrabarty, Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990)
 - [9]. J. J. S. De Groote, J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **46**, 12773 (1992)
 - [10]. G. W. Pratt, Phys. Rev. **102**, 1303(1956)
 - [11]. D. Pfannkuche, V. Gudmundsson, and P. A. Maksym, Phys. Rev. B **47**, 2244 (1993)
 - [12]. B. Szafran, S. Bednareck, J. Adamowski, M. B. Tavernier, E. Anisimovas and F. M. Peeters, The European Physical Journal D **373**(2001)
 - [13]. R. O. Jones, and O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689(1989)
 - [14]. W. Kohn, Rev. Mod. Phys. **71**, 1253(1999)
 - [15]. A. Wensaver, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, Solid State Commun. **130**, 115 (2004)
 - [16]. M. A. Troparevsky and Franceschetti, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 055211 (2008)
 - [17]. F. Bolton, Solid State Electron **37**, 1159 (1994)
 - [18]. T. Pang and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **65**, 1635(1990)
 - [19]. G. Onido, L. Reining, and A. Rubin, Rev. Mod. Phys. **74**, 601(2002)
 - [20]. S. Doniach, and E. H. Sondheimer, Green's Functions for Solid State Physics, Academic Press, New York (2004)
 - [21]. R. Mattuck, Guide to Feynman Diagrams in Many-Body Problem, Dover Publication, New York (1974)
 - [22]. T. Kawazu, T. Kousuke, and H. Sasaki, Physica E **32**, 226 (2006)
 - [23]. A. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Dover Publications, New York (2003)
 - [24]. Y-L Liu, Phys. Rev. B **71**, 014404 (2005)
 - [25]. M. A. Lampert, Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1958)
 - [26]. S. Huant, S. P. Najda, and Etienne, Phys. Rev. Lett. **65**, 1486 (1990)

- [27]. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marin, and L. E. Oliveira, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 7283 (1998)
- [28]. J. R. Haynes, Phys. Rev. Lett. **17**, 866 (1966)
- [29]. P.S. Kopev and N. N. Ledentsov, Sov. Phys. Semicond. **22**, 1093(1988)
- [30]. S. Gonda and Y. Matsushima, Jap. Appl. Phys. **15**, 2093(1976)
- [31]. F. J. Manjon, A. R. Goñi, K. Syassen, F. Heinrichsdorff, and C. Thomsen, Phys. Stat. Solidi (b) **235**, 497 (2003).
- [32]. B. Stébé and Ainame, Superlattices Microstructures **5**, 545 (1989)
- [33]. R. J. Warburton, C. S. Durr, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Madeiros-Ribero, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **79**, 5282(1997)
- [34]. E. Wigner, Phys.Rev. **46**, 1002 (1934)
- [35]. G. W. Bryant, Phys. Rev. Lett. **59**, 1140(1987)
- [36]. E. Rasanen, H. Saarikoski, M. J. Puska, and R. N. Neiminen, Phys. Rev. B **67**, 035326 (2003)
- [37]. E. Anisimovas, M. B. Tavernier, and F. M. Peeters, Physica E **40**, 1621(2008)
- [38]. L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wójs, Quantum Dots, Berlin (1998)
- [39]. T. Chakraborty, Quantum Dots, Elsevier, Amsterdam (1999)
- [40]. M. Geller, C. Kapteyn, L. Muller-Kirsch, R. Heitz, and D. Bimberg, Phys. Stat. Sol. (b), **238**, 258 (2003)
- [41]. A. Franceschetti, L. Wong, and A. Zunger, Phys. Rev. B **60**, 963 (2001)
- [42]. J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer, Rev. Mod. Phys. **76**, 725 (2004)
- [43]. Y. Nakamura, N. Ikeda, Y. Sugimoto, H. Nakamura, S. Ohkouchi, and K. Asakawa, Phys. Stat. Sol. (b) **238**, 237 (2003)
- [44]. J. H. Zhu, K. Brunner, and G. Abstreiter, Appl. Phys. Lett. **72**, 424 (1998)
- [45]. W. Wu, J. R. Tucker, G. S. Solomon, and J. S. Harris, Appl. Phys. Lett. **68**, 523 (1996)
- [46]. Y. Nabetani, T. Ishikawa, S. Noda, and A. Sasaki, J. Appl. Phys. **76**, 347(1994)
- [47]. J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne, and R. Leon, Phys. Rev. B. **59**, 12279(1990)
- [48]. M. Grundman, O. stier, and D. Bimberg, Phys. Rev. B. **52**, 11969(1995)
- [49]. K. Gergsson, N. Carlsson, L. Samuelson, W. Seifert, and L. R. Wallenberg, Appl. Phys. Lett. **67**, 2981(1995)
- [50]. A. Lorke, R. Luyken, A. Govorov, J. Kotthaus, J. M. García, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223(2000)
- [51]. E. Anisimovas and F. M. Peeters, Phys.Rev. B **68**, 115310(2003)
- [52]. G. M. Huang, Y. M. Liu, and C. G. Bao, Few-Body Systems **37**, 121(2005)
- [53]. M. Helle, A. Harju, and R. M. Nieminen, Phys.Rev. B **72**, 205329(2005)
- [54]. F. M. Peeters, Phys. Rev. B **42**, 1486 (1990)

- [55]. B. Szafran, F. M. Peeters, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **75**, 115303 (2007)
- [56]. T. Garm, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5725(1996)
- [57]. K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **63**, 205311(2000)
- [58]. D. Xu, and J-L Zhu, Phys. Rev. B **72**, 075326(2005)
- [59]. J-L Zhu, S. Hu, and Z. Dai, Phys. Rev. B **72**, 075411(2005)
- [60]. A. Wójs and P. Hawrylak, Phys. Rev. B **51**, 10880(1995)
- [61]. S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej, and Adamowski, Phys. Rev. B **68**, 045328(2003)
- [62]. F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468(1996)
- [63]. L. Wendler and V. M. Fomin, Phys. Rev. B **51**, 17814 (1994)
- [64]. J. M. Ferreyra and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **57**, 9061 (1998)
- [65]. P. G. Bolcatto and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **57**, 9061 (1998)
- [66]. R. Escorcía, R. Robayo, and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 431(2002)
- [67]. M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, S. Bednarek, Physica E **15**, 261 (2002)
- [68]. J-L Zhu, J. Z. Yu, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 7857 (1990)
- [69]. M. El Said, J. Phys. I, France **5**, 1027 (1995)
- [70]. A. Matulis and F. M. Peeters, J. Phys.: Condens. Matter **6** 7751 (1994)
- [71]. B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Physica E **5**, 185 (2000)
- [72]. A. Puente and Ll. Serra, Phys. Rev. B **63**, 125334 (2001)
- [73]. J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **62**, 4234(2000)
- [74]. J-L Zhu, X. Yu, Z. Dai, and X. Hu, Phys. Rev. B **68**, 045324(2003)
- [75]. B. Partoens and F. Peeters, Phys. Rev. Lett. **84**, 4433(2000)
- [76]. B. Partoens, A. Matulis, F. Peeters, Phys. Rev. B **59**, 1617(1999)
- [77]. S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski, and B. Szafran, Phys. Rev. B **67**, 205316(2003)
- [78]. X-F He, Phys. Rev. B **42**, 11751(1990)
- [79]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 590 (2002)
- [80]. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. D **31**, 3391(1998)
- [81]. M. Korkusinski and P. Hawrylak, Phys. Rev. B **63**, 195311(2001)
- [82]. G. Pryer, Phys. Rev. Lett. **80**, 3579 (1998)
- [83]. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one- and two-Electron Atoms* (Berlin: Springer-Verlag) 1957
- [84]. F. García, F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, W. Gutiérrez, R. Robayo, and **J. H. Marín**, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3626(2005)
- [85]. F. García, **J. H. Marín**, H. Paredes-Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol.(c) **2**, 3630(2005)

- [86]. I. D. Mikhailov, **J. H. Marín**, and F. García, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 1636(2005)
- [87]. **J. H. Marín**, F. J. Betancur, and I. D. Mikhailov, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 1005(2005)
- [88]. **J. H. Marín**, F. García, and F. J. Betancur, Rev. Col. de Fís. **37**, 94 (2005)
- [89]. W. Gutiérrez, **J. H. Marín**, F. García, and I. D. Mikhailov, Rev. Col. de Fís. **37**, 150 (2005)
- [90]. L. F. García, **J. H. Marín**, and I. D. Mikhailov, Braz. Jour. of Phys. **36**, 878(2006)
- [91]. **J. H. Marín**, L. F. García,, and I. D. Mikhailov, Braz. Jour. of Phys. **36**, 940 (2006)
- [92]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 9493 (2006)
- [93]. L. F. García, I. D. Mikhailov, and **J. H. Marín**, Rev. Col. de Fís. **38**, 1078 (2006)
- [94]. **J. H. Marín**, I. D. Mikhailov, and L. F. García, Physica B Condensed Matter, **398**, 135(2007)
- [95]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, **J. H. Marín**, and Y. Orlik, Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures, Proceedings of the International Conference Nano-Meeting 2007, pág. 125 (2007)
- [96]. C. A. Gómez, vGarcía W. Gutiérrez and **J. H. Marín**, accepted to published in Microelectronics Journal
- [97]. L. F. García, **J. H. Marín**, and, I. D. Mikhailov, Rev. Col. de Fís. **39**, 535 (2007)
- [98]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 9493 (2006)
- [99]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, Physica E **40**, 805(2008)
- [100]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and **J. H. Marín**, Microelectronics Journal **39**, 378(2008)
- [101]. P. A. Maksym, H. Imamura, G. P. Mallon, and H. Aoki, J. Phys.: Condens. Matter **12** R299 (2000)
- [102]. L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. **64**, 701(2001)
- [103]. Y. Arakawa y Y. Yariv, IEEE J. Quantum Electrón. **22**, 1887(1986)
- [104]. K. Imamura, Y. Sugiyama, Y. Nakata, S. Muto, and N. Yokohama, Japan. J. Appl. Phys. **34** L 1445 (1995)
- [105]. X. Wen-Fang, Chinese Phys. Lett. **23**, 193 (2006).
- [106]. M. El-Said, Phys. Rev. B **61**, 13026 (2000).
- [107]. Y. Aharanov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959)
- [108]. S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Phys. Rev. B **64**, 195303(2001)
- [109]. S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, J. Phys. Condens. Matter **14**, 73 (2002)

- [110]. R. H. Blick, D. Pfannkuche, R. J. Haug, K. v Klitzing, and K. Eberl, Phys. Rev. Lett. **80**,4032 (1998)
- [111]. T. Lundstrom, W. Schoenfeld, H. Lee, P. M. Petroff, Science **286**, 2312(1999)
- [112]. C. Cohen-Tannodji, B. Diu, F. Laloë: Quantum Mechanics, John Wiley and Sons, Paris, France (1977).
- [113]. R. Price, X. Zhu, S. Das Sarma, and P. M. Platzman, Phys. Rev. B **51**, 2017 (1995)
- [114]. B. Szafran, B. Stébé, J. Adamowski, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **66**, 165331 (2002)
- [115]. T. S. Koh, Y. P. Feng, X. Xu, and H. N. Spector, J. Phys. Condens. Matter **13**, 1485 (2001)
- [116]. J. Song and S. Ulloa, Phys. Rev. B **52**, 9015 (1995)
- [117]. P. Pereyra and S. Ulloa, Phys. Rev. B **61**, 2128 (2000); Phys. Rev. B **63**, 1125302 (2001)
- [118]. S. Glutsch, F. Bechstedt, W. Wegscheider, and F. Scheldelbeck, Phys. Rev. B **56**, 4108 (1997)
- [119]. T. Uozumi and Y. Kayanuma, Phys. Rev. B **65**, 165318 (2002)
- [120]. Dimensional Scaling, D. Herschbach, J. Avery, and O. Goscinski, Kluwer Academic Publishers, pág 14, Dordrecht, The Netherlands (1993).
- [121]. B. B. Mandelbrot, The fractal Geometry of the Nature, W. H. Freeman & Co., San Francisco (1988).
- [122]. D. M. Larsen and S. Y. McCann, Phys. Rev. B **45**, 3485(1992)
- [123]. D. M. Larsen, Phys. Rev. B **47**, 16333(1992)
- [124]. P. J. Dean, J. R. Hyanes, and W. F. Flood, Phys. Rev. B **161**, 711(1967)
- [125]. J-L Zhu, Phys. Rev. B **39**, 8780(1989)
- [126]. J-L Zhu, J-H Zhao, W. H. Duan, and G. L. Gu, Phys. Rev. B **39**, 8780(1989)
- [127]. B. Szafran, J. Adamowski, and J. Stébé, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 7575(1998)
- [128]. F. J. Betancur, W. Gutiérrez, and J. C. Piña, Physica B **396**, 12 (2007)
- [129]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. Escorcía, J. Sierra-Ortega, Phys. Rev. B **67**, 156317(2003)
- [130]. J-L. Zhu, Xi Chen, Phys. Rev. B **50** 4497 (1994)
- [131]. J-L. Zhu, J-J. Xiong, and B-L. Gu, Phys. Rev. B **41** 6001(1990)
- [132]. D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Phys. Rev., B **27**, 4883 (1983)
- [133]. D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Phys. Rev., B **26**, 912 (1982).
- [134]. S. Schmitt-Rink, D. S. Chemla, and D. A. B. Miller, Adv. Phys. **38**, 89 (1989)
- [135]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Physica B **355**, 255 (2005)
- [136]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. (b) **230** (2002) 469

- [137]. J. Song and S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 125302 (2001)
- [138]. X-F He, Phys. Rev. B **43**, 2063 (1991)
- [139]. H. Mathieu, P. Lefebvre, and P. Christol, Phys. Rev. B **46**, 4092 (1992)
- [140]. E. Reyes-Gómez, A. Matos-Abiague, C. A. Perdomo-Leiva, M. de Dios Leyva, and L. E. Oliveira, Phys. Rev. B **61** (2000) 13104
- [141]. J. Palacios and P. Hawrylak, Phys. Rev. B **51** 1769(1995)
- [142]. N. Susa , IEEE J. Quantum Electron. **32**, 1760(1996)
- [143]. P. G. Wang, J. L. Merz, S. Favard, R. Leon, D. Leonard, G. Medeiros-Ribeiro, M. Oestreich, P. M. Petroff, K. Uchida, N. Miura, H. Akiyama, and H. Sasaki, Phys. Rev. B **53**, 16458(1996).
- [144]. K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **64** 155324 (2001)
- [145]. K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev.B **66** 075314(2002)
- [146]. K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev.B **69** 235320(2004)
- [147]. Computational Physics, Steven E. Koonin, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., California, USA (1985)
- [148]. G. Burkard, G. Seeling, and D. Loss, Phys. Rev. B **62** (2000) 2581