

DETERMINACIÓN DE LA ABSORCIÓN ÓPTICA Y EL CAMBIO EN EL ÍNDICE DE
REFRACCIÓN DE UNA NANOESTRUCTURA DE CdSe POR EL MÉTODO DE
ELEMENTOS FINITOS BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y
MAGNÉTICOS UNIFORMES

ANA MILENA FORERO PINTO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
MAESTRÍA EN FÍSICA
BUCARAMANGA
2020

DETERMINACIÓN DE LA ABSORCIÓN ÓPTICA Y EL CAMBIO EN EL ÍNDICE DE
REFRACCIÓN DE UNA NANOESTRUCTURA DE CdSe POR EL MÉTODO DE
ELEMENTOS FINITOS BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y
MAGNÉTICOS UNIFORMES

ANA MILENA FORERO PINTO

Trabajo de grado para optar al título de
Magíster en Física

Directores

DAVID ALEJANDRO MIRANDA MERCADO

Doctor en Química Aplicada

WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO

Doctor en Ciencias Naturales- Física

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

MAESTRÍA EN FÍSICA

BUCARAMANGA

2020

En memoria de mi Madre

AGRADECIMIENTOS

Para quien merece todo agradecimiento, la gloria y alabanza de todos aquellos que hemos recibido su bondad y misericordia. A ti Padre, hijo y Espíritu Santo.

A la santísima virgen María, gracias por cuidarme y dejarme gozar de tu amado hijo Jesús. Enséñame a mirarlo a Él, con tus ojos y corazón.

Especial agradecimiento a mis padres a quienes les debo su sacrificio, amor y crianza. A ti papá por tu apoyo y a ti mami, por tus enseñanzas y valores inculcados; nunca te olvidaré, espero que podamos volver a encontrarnos en la eternidad, gozando de la visión beatífica de nuestro amor más grande, Dios. A mi hermano, por su invaluable compañía y humor. A mis tías, por su maternal amor, tiempo y consejo. A todos mis familiares que han estado en esos momentos difíciles, acompañándome y apoyándome.

Un especial agradecimiento a mis directores académicos, los doctores David Miranda y Willian Gutiérrez, que no sólo me han aportado magníficas ideas, sino que también han ayudado a mi formación integral con sus consejos a nivel espiritual. A mi mejor amiga Karen y a todos mis amigos, por su soporte y escucha paciente.

A la UIS por proveerme el conocimiento científico y abrir puertas a mis sueños.

Mil gracias a todos y cada uno de ustedes.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	15
1 MODELO TEÓRICO	19
2 SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER POR FEM	22
2.1 MÉTODOS Y MATERIALES	22
2.2 IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL	24
2.3 SELECCIÓN DE LIBRERÍAS	25
2.3.1 Geometría (herramienta CAD)	28
2.3.2 Mallado	29
2.3.3 Solver	30
2.3.4 Visualización	31
2.3.5 Resultado general de la evaluación	31
2.4 IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS	32
2.4.1 Instalación	32
2.4.2 Script de Python	33
3 COEFICIENTE DE ABSORCIÓN ÓPTICA	44
3.1 MODELO	49
3.2 MÉTODO	50
3.3 IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL	50
3.3.1 Validación	50
3.3.2 Resultados y análisis	53
3.4 IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS	63

3.5	ABSORCIÓN EN TÉRMINOS DEL OPERADOR POSICIÓN	66
4	CAMBIO EN EL ÍNDICE DE REFRACCIÓN	69
4.1	IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL	72
4.2	IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS	74
5	CONCLUSIONES	75
	BIBLIOGRAFÍA	79
	ANEXOS	83

LISTA DE FIGURAS

	pág.	
Figura 1	Parámetros geométricos del nanocono truncado	19
Figura 2	Proceso de filtros para la selección de Software FEM	26
Figura 3	Representación vectorial de puntos sobre la línea generatriz del NTC	39
Figura 4	Densidad de probabilidad realizadas por COMSOL y FEniCS para el quinto autovalor	41
Figura 5	Densidad de probabilidad realizadas por COMSOL y FEniCS para el tercer autovalor	42
Figura 6	Densidad de probabilidad realizadas por COMSOL y FEniCS para el primer autovalor	43
Figura 7	Espectro de absorción de un semiconductor	45
Figura 8	Espectro de absorción de un nanoestructuras	48
Figura 9	Espectro de absorción de un electrón en una caja 2D	53
Figura 10	Gráfica de burbujas para los elementos matriciales	55
Figura 11	Gráfica de burbujas de los elementos matriciales para diferentes conicidades y valores de campos	57
Figura 12	Efecto de los campos externos sobre los espectros de absorción de un NTC	60
Figura 13	Efecto de la geometría del NTC sobre los espectros de absorción	62
Figura 14	Comparación del espectro de absorción obtenido por COMSOL y FEniCS	65

Figura 15	Comparación de funciones para la definición del cambio en el índice de refracción	70
Figura 16	Efecto de los campos externos y geometría del NTC sobre el cambio en el índice de refracción	73
Figura 17	Comparación del cambio en el índice de refracción obtenido por COMSOL y FEniCS	74
Figura 18	Esquema de la Ley de Lambert-Beer	99

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1 Restricciones para la evaluación de software	27
Tabla 2 Especificaciones para la evaluación de software	28
Tabla 3 Evaluación para software CAD	28
Tabla 4 Evaluación para software de generación de malla	29
Tabla 5 Evaluación para software de Solución PDE	30
Tabla 6 Evaluación para software de Visualización	31
Tabla 7 Comparación entre los diez primeros autovalores de energía calculados con COMSOL y FEniCS	39
Tabla 8 Validación de autovalores de energía para un electrón en una caja bidimensional	51
Tabla 9 Validación para los elementos matriciales $(P_{if} = P_{n_x n'_x})$ para un electrón en una caja bidimensional	52
Tabla 10 Validación para los elementos matriciales $ M_{if} $ del NTC	65
Tabla 11 Valores calculados por FEM en COMSOL de los elementos de la MTD en función de los operadores momentum y posición	67

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A	Absorción de la luz y cambio en el índice de refracción de un medio 83
Anexo B	Teoría semiclásica de la función dieléctrica 94
Anexo C	Electrón en una caja de potencial bidimensional 101
Anexo D	Adimensionalización de la ecuación diferencial 105
Anexo E	Programa FEM en FEniCS 107
Anexo F	Permisos concedidos para el uso de figuras citadas en el trabajo 119

ACRÓNIMOS

FEM Método de Elementos Finitos

PDE Ecuación Diferencial Parcial

NTC Nanotubo cónico

QDs Puntos cuánticos

RFMS Radio Frequency Magnetron sputtering

MTD Matriz de Transición Dipolar

RESUMEN

TÍTULO: DETERMINACIÓN DE LA ABSORCIÓN ÓPTICA Y EL CAMBIO EN EL ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE UNA NANOESTRUCTURA DE CdSe POR EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y MAGNÉTICOS UNIFORMES *

AUTOR: ANA MILENA FORERO PINTO **

PALABRAS CLAVE: NANOTUBO CÓNICO, ABSORCIÓN, ÍNDICE DE REFRACCIÓN, ELEMENTOS FINITOS.

DESCRIPCIÓN:

En este trabajo de investigación se presentan los cálculos de las funciones de respuesta: absorción óptica $\alpha(\omega)$ y cambio en el índice de refracción $\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}$, de un electrón confinado en un nanotubo de CdSe en forma de cono truncado, sometido a campos magnéticos y eléctricos uniformes en dirección del eje de simetría. Estas funciones fueron obtenidas a través del modelo semiclásico y la aproximación de masa efectiva, y sus cálculos se realizaron mediante el uso de COMSOL Multiphysics, un software comercial de FEM. Adicional a esto, se realizó una evaluación de múltiples librerías o programas de código abierto, que constituyen parte de un software FEM; se tomaron algunos de los software escogidos y se escribió un Python Script, con el cual se realizaron de nuevo los cálculos de dichas funciones; para con ello, comparar y hacer la transición del software comercial al libre, como potencial opción para una futura creación de un programa de modelado inverso, enfocado hacia el diseño de nuevos materiales para la industria optoelectrónica. Ahora, respecto a los resultados en la implementación de los cálculos de las funciones de respuesta, se propuso un método que permite visualizar cómo es la contribución de cada elemento de la MTD en los espectros de $\alpha(\omega)$ y $\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}$; y se observaron que los efectos más predominantes del campo magnético y el campo eléctrico sobre los espectros, son la generación de un corrimiento de las resonancias y el aumento de la intensidad de estas, respectivamente; mientras que en general, al aumentar la magnitud de los campos, comienzan a tomar relevancia transiciones de mayor energía.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Directores: David A. Miranda Mercado, Doctor en Química Aplicada y Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales - Física.

ABSTRACT

TITLE: NUMERICAL DETERMINATION OF OPTICAL ABSORPTION AND REFRACTIVE INDEX CHANGES OF A CdSe NANOSTRUCTURE UNDER UNIFORM ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS BY THE FINITE ELEMENT METHOD *

AUTHOR: ANA MILENA FORERO PINTO **

KEYWORDS: CONICAL NANOTUBE, ABSORPTION, REFRACTIVE INDEX, FINITE ELEMENT METHOD.

DESCRIPTION:

In this research work the calculations of the response functions: optical absorption $\alpha(\omega)$ and refractive index changes $\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}$ of an electron confined in a truncated cone-shaped CdSe nanotube, under uniform magnetic and electric fields is presented. These functions were calculated using the semi-classical model and the effective-mass approximation, by using a commercial FEM software called COMSOL Multiphysics. In addition, an evaluation of multiple open source programs, which are part of a FEM software, were performed; a Python Script was written taking into account some of the chosen software, with which the calculations of these response functions were performed again; the intention for doing this was looking forward to a transition from commercial to free software, as a potential option for future creation of an inverse modeling program, which will be focused on the design of new materials for the optoelectronic industry. On the other hand, regarding the results in the implementation of calculations of the response functions, a method was proposed that allows visualize the contribution of each dipole transition matrix element in $\alpha(\omega)$ and $\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}$; moreover, it was observed that the most predominant effects of the magnetic field and the electric field on the spectra are the generation of a shifting of the resonances and the increase of their intensity, respectively; while in general, as the magnitude of the fields increases, higher energy transitions begin to take on relevance.

* Degree project

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Directors: David A. Miranda Mercado, Doctor en Química Aplicada y Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales - Física.

INTRODUCCIÓN

La industria optoelectrónica ha estado contribuyendo al crecimiento de la economía de muchos países, entre los cuales destacan por su rápido crecimiento, los de la región APAC (Asia Pacífico)¹. Según el reporte anual del 2017 ², realizado por la Asociación de Desarrollo de Industria y Tecnología Optoelectrónica (OITDA), entre otras empresas de investigación de mercado, como IndustryARC™ y Trends Market Research; es de esperarse que esta industria a nivel global, siga desarrollándose en los próximos cinco años, con una tasa de crecimiento anual compuesto (CAGR) entre el 10 % al 20 %.

En efecto, debido a que los dispositivos optoelectrónicos al ser sistemas que originan, detectan y/o controlan radiación electromagnética, integran muchas de las tecnologías utilizadas actualmente, y constituyen no solo una alternativa competitiva para los productos existentes, como en las comunicaciones, el entretenimiento, la salud, la educación, el transporte y aplicaciones militares que incluyen el tratamiento de imágenes de infrarrojos, radares, sensores de aviación y armas guiadas ópticamente;³ sino también, hacen parte de las nuevas tecnologías que revolucionarán la sociedad actual, y que ayudarían a crear sistemas inteligentes, de las cuales ya se está haciendo uso; como por ejemplo lo son, la inteligencia artificial (AI), la conduc-

¹ LIU TING-KUN. "R&D Expenditure, Spillovers and Productivity-Empirical Study of Taiwanese Optoelectronic Industry". En: *Asian Economic and Financial Review* 9.8 (2019), págs. 888-900.

² OITDA. *Annual Technical Report 2017*. Optoelectronics Industry y Technology Development Association. Mar. de 2018. URL: <http://www.oitda.or.jp/main/ar/atr2017.pdf>.

³ SANTIAGO SILVESTRE. *Optoelectrónica, fotónica y sensores*. En línea. URL: https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/103770/LM14_R_ES.pdf?sequence=1. Tech-Pedia. European Virtual Learning Platform for Electrical and Information Engineering.

ción automatizada y el internet de las cosas (IoT).

Como consecuencia, las nuevas tecnologías requieren de dispositivos que permitan la recopilación, transmisión y procesamiento de grandes cantidades de datos; donde las tecnologías optoelectrónicas incluyen muchos de estos dispositivos clave, como varios sensores, incluidos sensores de imagen y cámaras de alta velocidad para la recopilación de datos; sistemas de redes ópticas, de gran capacidad y alta velocidad, para la transmisión de estos; y circuitos integrados optoelectrónicos, de alta velocidad y baja potencia para su procesamiento.²

En ese sentido, se tiene que los mecanismos físicos involucrados en estas tecnologías son aquellos concernientes a la interacción luz-materia y entre los cuales se tienen: la absorción óptica, fotoconductividad, fotoluminiscencia, entre otros. Siendo así que, a modo de ejemplo, dentro de los dispositivos encargados de la generación de luz se encuentran: los LEDs y los LASERs; y entre aquellos que utilizan la luz para generar corrientes eléctricas están: los fotodiodos, fototransistores y celdas solares. Por su parte, aunque existen dispositivos optoelectrónicos no semiconductores como los fotomultiplicadores; en general, los materiales semiconductores constituyen la base de esta tecnología, pues al estar en un punto intermedio entre los conductores y los aislantes, su conductividad puede ser cambiada fácilmente dependiendo bajo qué condiciones se encuentren, ya sea temperatura, presión, radiación o campos externos; además sus propiedades pueden ser mejoradas si se les añade un cierto tipo de impureza, a lo cual se le denomina dopaje.⁴

Así mismo, desde el apogeo de la mecánica cuántica y su posterior aplicación en la

⁴ A. M. FORERO y col. *Oscilaciones cuánticas en las propiedades electrónicas de un nanotubo cónico*. Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander. 2017.

síntesis y estudio de sistemas mesoscópicos, se observó que además de la importancia de los semiconductores para la obtención de nuevas propiedades útiles en la industria; la disminución del tamaño de los materiales hasta el nivel nanométrico proporcionaba un cambio significativo en las diferentes propiedades del material, justificados en la aparición de una discretización de los niveles de energía de los portadores de carga del material, como resultado de restringir el movimiento de estos, en alguna de las direcciones de la región del espacio, donde se encuentran confinados; que generalmente es comparable con la longitud de onda de De Broglie de dichos portadores (confinamiento cuántico)⁵⁶. Algunos de los efectos de la nanoestructuración se observan en fenómenos como la cuantización de la conductancia, el efecto hall cuántico, el efecto Aharonov-Bohm y el efecto de bloqueo de Coulomb(QB).⁷⁸.

Considerando que la optoelectrónica incluye muchas tecnologías, que servirán de base para nuevas industrias; el grupo de investigación CIMBIOS ha venido trabajando en una línea dirigida hacia el cálculo de propiedades electrónicas y ópticas de nanoestructuras semiconductoras, con miras hacia la construcción de aplicaciones que incluyan el modelado inverso de dichas propiedades, para el posterior diseño de nuevos dispositivos; en donde hasta el momento se han realizado trabajos haciendo uso de la plataforma comercial, COMSOL Multiphysics. De allí que, la presente

⁵ VLADIMIR V. MITIN, DMITRY I. SEMENTSOV y NIZAMI Z. VAGIDOV. *Quantum Mechanics for Nanostructures*. Cambridge University Press, 2010. 448 págs.

⁶ ALEXANDER SHIK. *Quantum Wells: Physics and Electronics of Two-Dimensional Systems*. WORLD SCIENTIFIC PUB CO INC, 11 de ene. de 1998. 104 págs.

⁷ THOMAS IHN. *Semiconductor Nanostructures*. Oxford University Press, 2009. 580 págs.

⁸ MICHAEL R. GELLER. "Quantum Phenomena in Low-Dimensional Systems". En: *arXiv* (2001). eprint: [cond-mat/0106256v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0106256v1) (cond-mat.mes-hall).

investigación constituye la continuación del trabajo de grado “Oscilaciones cuánticas en las propiedades electrónicas de un nanotubo cónico”⁴, esta vez, mediante la implementación del método de elementos finitos (FEM) en un software libre, para el estudio de las propiedades ópticas de nanoestructuras axialmente simétricas, en particular para la absorción óptica y el cambio en el índice de refracción de un nanotubo cónico. Cabe destacar que, a pesar de que la descripción de la interacción luz-materia sea más rigurosamente explicada por la teoría cuántica de campos; en este trabajo serán utilizados los modelos semiclásicos, bajo la justificación de que los resultados obtenidos con éstos concuerdan con resultados experimentales, y además poseen la característica de ser de fácil aplicación.⁹

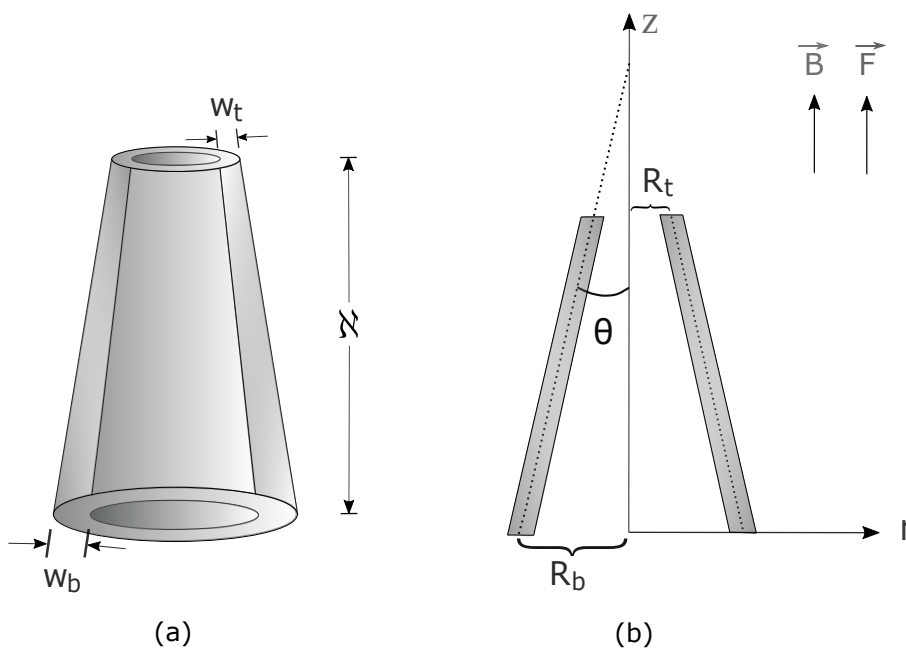
Así, este trabajo se organiza de la siguiente forma: Primero se presenta la descripción del sistema cuántico y el problema a resolver; luego, se realiza una revisión de los componentes que conforman un software FEM, para la resolución de PDEs, en particular para un problema de autovalores y autovectores, además se expone el proceso de elección de los programas a integrar el software libre; más adelante se muestran los resultados para los cálculos de los espectros de absorción y cambio en el índice de refracción, para transiciones intrabanda (región del infrarrojo), y su análisis. Y finalmente, se presentan las conclusiones y recomendaciones para futuros trabajos.

⁹ PETER YU y MANUEL CARDONA. “Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (Graduate Texts in Physics)”. En: Springer, 2010. Cap. 6, págs. 253-276.

1. MODELO TEÓRICO

Debido a la necesidad de poder predecir propiedades optoelectrónicas de materiales, para la obtención experimental de nuevos sistemas mesoscópicos, y su posterior aplicación en diferentes campos de la ciencia y la tecnología; en este trabajo, se propone estudiar dos propiedades ópticas (absorción y cambio en el índice de refracción) de una nanoestructura de CdSe axialmente simétrica, como la de la figura 1, mediante el uso del FEM implementado en un software libre.

Figura 1. Parámetros geométricos del cono truncado. Representación tridimensional (Izquierda); sección transversal (Derecha)



Fuente: A. M. FORERO y col. Oscilaciones cuánticas en las propiedades electrónicas de un nanotubo cónico. Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander. 2017.

Sea un electrón confinado en un nanotubo de $CdSe$ en forma de cono truncado con parámetros estructurales: Altura \aleph , radio medio superior R_t , radio medio de la base R_b , ancho superior w_t , ancho de la base w_b , y ángulo de apertura θ , el cual da cuenta del grado de conicidad de la estructura así: $\tan \theta = \frac{R_t - R_b}{\aleph}$; como se puede ver en la figura 1. Dado que en el modelo considerado, el nanotubo no está inmerso dentro de una matriz semiconductor, sino que se encuentra rodeado de aire, se ha considerado el potencial de confinamiento estructural de la siguiente forma:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & R_1(z) < r < R_2(z) \text{ y } 0 < z < \aleph \\ \infty, & \text{En caso contrario} \end{cases} \quad (1)$$

Donde $R_1(z) = \frac{(R_t - R_b) + (w_b - w_t)/2}{\aleph} z + R_b - \frac{w_b}{2}$ y $R_2(z) = \frac{(R_t - R_b) + (w_t - w_b)/2}{\aleph} z + R_b + \frac{w_b}{2}$ son los valores del radio interno y externo, respectivamente, para cualquier valor de la coordenada z . Así mismo, el $CdSe$ es uno de los semiconductores II-VI tipo n de banda prohibida directa cuya masa efectiva del electrón a bajas temperaturas ($T \approx 0[K]$) es de $m^* = 0,13m_e$.⁴

Para describir el comportamiento del electrón dentro del NTC bajo campos eléctricos y magnéticos uniformes, en la dirección del eje de simetría (\hat{z}) (ver figura 1), se hizo uso de la ecuación de Schrödinger estacionaria bajo la aproximación de masa efectiva (ver Anexo A) con la introducción de los potenciales eléctrico $\Phi(\vec{r})$ y vectorial magnético $\vec{A}(\vec{r})$.

$$\left[\frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla + e\vec{A}(\vec{r}))^2 - e\Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2)$$

Aprovechando la simetría axial de la estructura, se escribe el hamiltoniano en coordenadas cilíndricas (r, φ, z) , y se obtiene la separación de la variable acimutal $\psi(r, \varphi, z) = \chi(r, z)e^{im_l\varphi}$ con $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; además, teniendo en cuenta que $\Phi = -\vec{F} \cdot \vec{r}$, se

llega a la ecuación (3) en la cual se ha considerado la expresión del campo magnético y el eléctrico como: $\vec{B} = B\hat{z}$ y $\vec{E} = F\hat{z}$ respectivamente; además de la elección de \vec{A} como el gauge de Coulomb: $\vec{A} = \frac{\vec{B} \times \vec{r}}{2}$, $\nabla \cdot \vec{A} = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \chi(r, z) + \left[\frac{\hbar^2}{2m^* r^2} m_l^2 + \frac{e\hbar B}{2m^*} m_l + \frac{e^2 B^2}{8m^*} r^2 \right] \chi(r, z) + \\ + [eFz + V(r, z)] \chi(r, z) = E\chi(r, z) \end{aligned} \quad (3)$$

Donde el potencial $V(r, z)$ corresponde al de la ecuación (1) y por ende la condición de frontera que sigue la función de onda para la parte radial y axial, es la de Dirichlet: $\chi(r, z)|_{\partial\Omega} = 0$. Siendo $\partial\Omega$, la frontera del NTC.

Ahora, considérese una OEM monocromática de frecuencia ω , con polarización lineal en z , dado por el vector $\vec{u}_p = \hat{z}$ y que se propaga en el plano XY; esta OEM es atenuada al interactuar con el NTC, que además se encuentra bajo campos externos, dado que parte de la onda es absorbida por la estructura. Entonces, para calcular las propiedades ópticas de la nanoestructura, que se derivan de este suceso, se hace uso de las ecuaciones que se presentan en el capítulo 3; donde se tiene en cuenta que las funciones de estado que intervienen en éstas, corresponden a la solución de la ecuación (3).

2. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER POR FEM

Durante los últimos años, el grupo de investigación CIMBIOS ha venido trabajando en la línea teórica con el modelamiento de las propiedades electrónicas de nanoestructuras semiconductoras; en particular, las de la aleación $Hg_{(1-x)}Cd_xSe$, con miras hacia el cálculo de funciones de respuesta para la predicción de fenómenos que puedan ser aprovechados en la industria optoelectrónica.

Así, con el fin de avanzar en la creación de un software para el diseño de materiales nanoestructurados, y continuando la investigación iniciada en el trabajo de pregrado ⁴, en el cual se realizó el modelado directo de propiedades electrónicas de un NTC de $CdSe$ usando FEM. Se pretende hacer la migración desde el software COMSOL Multiphysics, utilizado anteriormente para la resolución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, a una plataforma libre, y de la misma forma obtener las propiedades ópticas: absorción y cambio en el índice de refracción, mediante ambos software.

A continuación, se realiza una breve descripción de las partes que constituyen un software de elementos finitos, la metodología de evaluación aplicada a los programas (o librerías) candidatos a formar parte del software libre, y los procedimientos llevados a cabo para la resolución de la ecuación diferencial parcial asociada al problema, en la plataforma COMSOL y FEniCS.

2.1. MÉTODOS Y MATERIALES

Las ecuaciones diferenciales parciales (PDEs) son una representación usual del comportamiento de propiedades de sistemas físicos; sin embargo, estas PDEs no

siempre pueden ser resueltas por métodos analíticos; en lugar, se suele buscar una aproximación a ellas mediante diferentes métodos numéricos de discretización, entre los cuales se encuentra el método de elementos finitos (FEM).

Las diferentes etapas ¹⁰ del proceso para resolver un problema por FEM son las siguientes:

1. **Pre-proceso:** en esta primera parte se realiza lo siguiente:
 - a) Se definen el dominio, mediante la creación de la geometría en donde actúa la PDE, y los parámetros del problema como constantes, variables y funciones que se encuentran en la PDE.
 - b) Se discretiza el dominio, mediante la división en subdominios llamados elementos; donde la forma del elemento está dada por la geometría de la celda de una malla; y el orden del elemento, por la función de interpolación (también llamada función de expansión, función base o función de forma). Por ejemplo, para este trabajo se utilizaron los elementos cúbicos triangulares, donde la función de forma corresponde a los polinomios de Lagrange de tercer orden.
 - c) Se definen las condiciones de frontera.
 - d) Se realiza la formulación del problema variacional o formulación débil. Además, junto a la discretización del dominio se construye un espacio vectorial de dimensión finita (espacio de elementos finitos) y se realiza una proyección del problema variacional sobre dicho espacio. Así, la solución numérica es una combinación lineal en este espacio vectorial.

¹⁰ JIANMING JIN. *The Finite Element Method in Electromagnetics*. Second, ed. Wiley-IEEE Press, 2002.

2. **Solucionador:** en esta etapa, la formulación variacional habrá convertido la PDE en un conjunto de N ecuaciones y N incógnitas, que puede ser resuelto mediante álgebra lineal; se solucionan las ecuaciones para cada nodo, donde el solver o solucionador dependerá del tipo de problema a trabajar, e.g. autovalores y autovectores; además, este paso involucra aplicar las condiciones de frontera y/o valores iniciales, anteriormente definidos.
3. **Post-proceso:** los resultados obtenidos son simples datos numéricos correspondientes a la solución en cada uno de los nodos; por lo tanto, en este paso se realiza un tratamiento de estos datos, donde se utilizan herramientas de visualización para realizar gráficos y/o se calculan magnitudes derivadas que se requieran estudiar para extraer conclusiones del problema.

En este trabajo, se reporta únicamente la realización del post-procesamiento, para el cálculo de las funciones de respuesta, a partir los resultados arrojados por COMSOL, ya estudiados en un trabajo anterior ⁴; además de todas las etapas del proceso anteriormente mencionado (solver, pre y post - procesamiento), para la reproducción de los cálculos realizados en COMSOL, ahora en un software libre; lo cual se llevó a cabo en un computador iMac con procesador Intel i5, 4GB RAM, 1TB de disco duro.

2.2. IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL

El post-procesamiento que se llevó a cabo en COMSOL, de las propiedades ópticas para el NTC, se realizó de la siguiente manera:

1. Se realizó un barrido paramétrico para obtener las soluciones a diferentes valores de campos eléctrico y magnético, además de diferentes valores para el número cuántico m_l .

2. Se encontraron las constantes de normalización para cada autovector (función de onda), añadiendo las expresiones para las constantes en “variables” bajo la rama de “Definitions”; donde se tuvo en cuenta el operador *intop1* asociado a la operación de integración, el cual también debe ser definido dentro de la misma rama “Definitions” pero esta vez en “component couplings” seleccionando *Integration*.
3. Después de haber encontrado las soluciones para los autovalores y autofunciones, se procedió a realizar el cálculo de los elementos matriciales en “Derived values” bajo “Results”, donde para realizar la integración correspondiente a los elementos de la matriz de transición dipolar (MTD, mencionada más adelante), se ingresó en “Surface Integration” la expresión a integrar en el dominio; aunque también puede realizarse bajo “Global Evaluation” pero haciendo uso del operador *intop1*. De la misma forma, también es posible calcular expresiones que involucran diferentes soluciones o “Data sets”, uniendo los resultados con la operación “join” que se encuentra en la misma rama de “Data Sets” ¹¹.

2.3. SELECCIÓN DE LIBRERÍAS

“Implementar, con software libre, un Python Script que permita paralelizar los procesos de generación de malla y “*solver*” de un cálculo por el método de elementos finitos” es uno de los objetivos que se trazaron para este trabajo, bajo la motivación de hacer la transición de un software comercial como COMSOL Multiphysics a un software libre, pues además de la ventaja económica, generalmente en estos últimos se tiene mayor libertad para acceder, estudiar y modificar el código fuente; por lo que, al contrario de un software comercial, la implementación de nuevas funciones y corrección de errores no depende de los desarrolladores del software sino de

¹¹ Más información en [BLOG COMSOL](#)

la comunidad en general. Por otra parte, se hace énfasis en paralelizar los cálculos del modelado directo, con el fin de reducir el tiempo de cómputo de este y poder implementar el modelado inverso; de esta forma, si bien es posible paralelizar los cálculos en COMSOL, se requiere un software que posea ventajas en la generación e implementación por código de las condiciones de ligadura o “bounding” para la realización del modelado inverso.

Siguiendo este orden de ideas, en esta sección se mostrará el proceso de evaluación y selección de librerías o aplicaciones, que se consideren como alternativas para reemplazar las características de COMSOL. Para ello, se sigue el proceso de filtros mostrado en la figura 2.

Figura 2. Proceso de filtros para la selección de programas de FEM



La evaluación está basada en características de los programas consultadas en las páginas web de cada uno, comentarios en foros y en parte, probadas por nosotros. A continuación, se muestran los software escogidos para la evaluación, clasificados de acuerdo a la especialidad de éstos; las cuales están relacionada con las diferentes etapas o estadios del proceso para resolver una PDE por medio de FEM (ver sección 2.1).

El primer filtro es llamado “Restricciones”, ya que son características que de una u otra forma limitan la incorporación de la librería al programa general de FEM. En la siguiente tabla se encuentran los criterios generales, enumerados del 1 al 6, que

todo programa debe tener para ser incluido dentro del software FEM y que facilitan su exploración y aplicación en la construcción de este.

Tabla 1. Descripción de cada una de las restricciones que constituyen el primer filtro para la evaluación de cada programa o librería.

Restricciones	
<i>Item</i>	<i>Descripción</i>
1	Posee documentación en inglés o español.
2	Se puede instalar.
3	Es de fácil instalación.
4	Contiene ejemplos.
5	Los ejemplos son ejecutables.
6	Puede ser controlado desde Python.

Al aplicar este filtro a cada programa, se realiza una evaluación binaria por cada criterio o item, donde se marca con una x en la casilla correspondiente al número del item si el programa cumple con este; de lo contrario, la casilla se marca con * y a partir de allí se deja de calificar los siguientes requisitos, quedando así descalificado.

Así mismo, el segundo filtro llamado “Especificaciones”, ya que se refiere a las características propias o detalles que cada programa debe tener dentro de la etapa FEM, consta de uno, dos o tres criterios (dependiendo de cada etapa) etiquetados por las letras *A*, *B* y *C*; los cuales se evalúan del 0 al 4, donde 0 significa que no cumple, 1 cumple en bajo grado, 2 cumple en mediano grado, 3 cumple en alto grado y 4 cumple completamente.

Tabla 2. Descripción de cada una de las especificaciones por etapa FEM, que constituyen el segundo filtro para la evaluación de cada programa o librería.

Especificaciones		
<i>Etapa FEM</i>	<i>Item</i>	<i>Descripción</i>
CAD	A	Modela geometrías primitivas en 1, 2 y 3 dimensiones.
	B	Permite la parametrización de la geometría.
Mallado	A	Posee diferentes tipos de elementos.
	B	Se puede paralelizar.
Solver	A	Resuelve problemas de autovalores.
	B	Posee diferentes tipos de polinomios de interpolación.
	C	Se puede paralelizar.
Visualización	A	Permite abrir formatos generados por el solver

2.3.1. Geometría (herramienta CAD) Para la construcción de la geometría del dominio, en donde se aplica la PDE, se eligieron las siguientes herramientas CAD a evaluar: FreeCAD, Salome, OpenSCAD y GMSH. A estos programas, se les aplicaron los filtros mostrados en las tablas 1 y 2, para los cuales se obtuvo:

Tabla 3. Primer y segundo filtro de evaluación para software de construcción de geometría

<i>Programas</i>	<i>Restricciones</i>						<i>Especificaciones</i>	
	1	2	3	4	5	6	A	B
FreeCAD	x	x	x	x	x	x	4	4
Salome	x	x	x	x	x	x	4	4
OpenSCAD	x	x	x	x	x	x	3	4
GMSH	x	x	x	x	x	x	4	4

De la tabla anterior, los resultados muestran que sólo un software (OpenSCAD) no pasó los dos primeros filtros; ya que aquel está más enfocado en el modelado de geometrías 3D y 2D. Aquellos que sí pasaron los filtros poseen suficientes geometrías primitivas y operaciones booleanas que permiten un buen diseño de geome-

trías complejas. Por otra parte, después del estudio mostrado en la tabla; desde la perspectiva de experiencia de usuario, se observó que entre los tres software, aquellos con una GUI más intuitiva de manejar son Salome y FreeCAD, con preferencia sobre Salome; ya que por ejemplo, en GMSH si se tienen dos geometrías concéntricas, es un poco engorroso para seleccionar alguna de ellas y realizar una operación booleana; sin embargo, siempre se puede abrir el script desde la GUI y modificarlo. Esta última característica estudiada es a lo que se le llamó filtro de ventajas, el cual es un filtro cualitativo y es opcional. Es así, que se recomienda como herramienta de CAD para la creación de la geometría, alguno de estos dos software: Salome o FreeCAD.

2.3.2. Mallado Para la construcción de la malla, se eligieron los siguientes programas a evaluar: Salome, GMSH y FEniCS. A continuación se muestran los resultados de la evaluación:

Tabla 4. Primer y segundo filtro de evaluación para software de construcción de malla

<i>Programas</i>	<i>Restricciones</i>						<i>Especificaciones</i>	
	1	2	3	4	5	6	<i>A</i>	<i>B</i>
Salome	x	x	x	x	x	x	4	2
GMSH	x	x	x	x	x	x	4	4
FEniCS/mshr	x	x	x	x	x	x	3*	4

* Aspectos relacionados con los diferentes tipos de elementos están siendo mejorados por FEniCS ([FEniCS Roadmap 2019-2020](#)).

En la tabla 4, se puede observar que Salome aunque posee diferentes tipos de elementos (con mayores opciones de elección que los otros programas) y también, se pueden nombrar fronteras configurando el grupo en la malla antes de exportar, falla en la calificación de la paralelización; esto se debe a que Salome necesita de una licencia comercial (e.g. **DISTENE**) para paralelizar el mallado. Por otro lado, se co-

menta que FEniCS en los años venideros, implementará más características en lo referente a las diferentes geometrías de los elementos del mallado. Ahora, si bien GMSH cumple con los requisitos y es el software recomendado para la realización de la malla; en el presente trabajo se utilizó mshr, ya que el problema en particular sólo se requería una malla triangular y esto está dentro de las capacidades de FEniCS.

2.3.3. Solver Para la solución de la ecuación diferencial parcial del problema de autovalores y autofunciones, se eligieron los siguientes programas a evaluar: Sfepy, PySOFE y FEniCS. Tal que, los resultados de aplicar los dos primeros filtros, se resumen en la tabla 5.

Tabla 5. Primer y segundo filtro de evaluación para PDE solvers

<i>Programas</i>	<i>Restricciones</i>						<i>Especificaciones</i>		
	1	2	3	4	5	6	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
Sfepy	x	x	*						
PySOFE	x	x	x	*					
FEniCS	x	x	x	x	x	x	4	4	4

De los resultados de la evaluación se tiene que, en el caso de la librería de Python, Sfepy, se calificó que no cumple el requisito de ser de fácil instalación, debido a que necesita de muchas dependencias que deben ser instaladas por separado para poder funcionar; cosa que no sucede con FEniCS, cuya instalación por defecto realiza esto. Así mismo, para esta etapa no existe el último filtro, pues es de notar en la tabla 5 la elección de FEniCS como la plataforma para resolver el problema planteado en este trabajo; sin embargo, hay que resaltar que este software tiene como desventajas que varias partes de su documentación están un poco desactualizadas, y algunos de los ejemplos o demo poseen secciones de código obsoletas; pero en general, el uso de ella es aceptable.

2.3.4. Visualización Para la evaluación de los programas relacionados con la visualización o post- procesamiento, se consideraron los siguientes candidatos: **Mayavi**, **Matplotlib**, **ParaView** y **Salome/Paravis**. Para los cuales se muestra en la tabla 6 los resultados de cada filtro.

Tabla 6. Primer y segundo filtro de evaluación para software de Visualización (post-procesamiento)

<i>Programas</i>	<i>Restricciones</i>						<i>Especificaciones</i>
	1	2	3	4	5	6	A
Mayavi	x	x	*				
Matplotlib	x	x	x	x	x	x	4
ParaView	x	x	x	x	x	x	4
Salome/Paravis*	x	x	x	x	x	x	4

* Paravis es el módulo de visualización de Salome, basado en ParaView.

En este apartado, después de aplicar el segundo filtro, se obtuvo que existen tres programas que cumplen con los requerimientos exigidos, ya que Mayavi posee un problema similar que Sfepy, en la etapa anterior; sin embargo, como parte del último filtro (“comparación de ventajas”), se recomienda usar ParaView para este caso, debido a que es una de las plataformas más usadas, completas y mejor acogidas para realizar el post-procesamiento, gracias a sus **características**. Pero, dependiendo del problema, puede ser conveniente usar al mismo tiempo o únicamente, la librería Matplotlib. Finalmente, es de importancia aclarar que para este trabajo, se hizo uso de Matplotlib con la justificación de que el problema tratado en este trabajo de investigación, posee una geometría sencilla.

2.3.5. Resultado general de la evaluación En resumen, como resultado de las evaluaciones anteriores, se tiene que un software libre de elementos finitos que sirva para la solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria, estará conformado por

los siguientes programas:

- **Herramienta CAD:** Salome / FreeCAD.
- **Mallado:** GMSH.
- **Solver:** FEniCS.
- **Herramienta de visualización:** ParaView / Matplotlib.

2.4. IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS

En lo que sigue a continuación, se mostrará la implementación del método de elementos finitos en FEniCS, para la solución de la ecuación diferencial parcial (3), como un problema de autovalores y autofunciones.

2.4.1. Instalación FEniCS es una plataforma de código abierto para resolver PDEs con interfaces en C++ y Python (Dolfin); donde para trabajar con este, muchas veces no es necesario tener instalado el programa en la raíz del computador; sino que puede trabajarse en la nube, ya sea en Google Colaboratory o Microsoft Azure notebooks, con ciertas [diferencias](#). Para efectos de este proyecto de investigación, se probó el código final en Google Colaboratory; sin embargo, se muestra no sólo la “instalación” en Google Colab, sino que también se menciona lo básico para instalar FEniCS en Windows y Mac (o Linux) usando Anaconda.

Para trabajar con FEniCS en Windows, primero se debe realizar la instalación de Ubuntu WSL (Windows Subsystem for Linux), según lo indica la [página](#) de microsoft; para proceder a instalar FEniCS para Ubuntu siguiendo los pasos en la página de [fenicsproject](#). Luego, para correr algún *demo* correctamente, se deben tener instaladas algunas librerías que se importan en el script como: python3, matplotlib y

CGAL, además de Xming para poder visualizar las gráficas, donde al final se tendrá que correr el comando `DISPLAY=:0.0`, para la generación de estas.¹²

Para el uso de FEniCS en Mac (o Linux) a través de Anaconda, primero se deberá instalar Anaconda con Python 3 entrando a la [página](#) oficial y seleccionar 64-Bit Command Line Installer (542 MB) para python 3.7 en la manzanita de macOS, luego se abre la terminal y después se ejecuta `$ bash Anaconda3-2019.03-MacOSX-x86_64.sh`. Posteriormente, se procede a instalar y activar FEniCS como un entorno (environment) nuevo, siguiendo las instrucciones de la página oficial de FEniCS. Finalmente, se escribe el comando `$ xcode-select -install` y se procede a instalar los siguientes paquetes: pandas, matplotlib, mshr y Jupyter lab (o Jupyter notebook, o spyder, dependiendo en cuál editor se quiere trabajar).

Para la instalación de FEniCS en Google Colab, primero se deberán dar permisos a Colab para Google Drive, donde se encuentran los Notebooks o Scripts que se quieren implementar y el lugar donde se guardarán los archivos generados, montando Drive en el servidor según el Anexo E, esto permite la ejecución en ambiente local sin afectar el uso en Colab. En seguida, se configura el ambiente de FEniCS en Google Colab (Anexo E).¹³ Cabe recordar que Colab da un tiempo de ejecución al usuario de 12 horas y después de cada 90 minutos de inactividad, la sesión se reinicia nuevamente.

2.4.2. Script de Python A continuación, se muestra el programa principal en Python, para el modelo del capítulo 1.

¹² Ver foro en stackoverflow: [“Show matplotlib plots in Ubuntu \(Windows subsystem for Linux\)”](#)

¹³ <https://learnsharewithdp.wordpress.com/2019/04/12/run-fenics-on-google-colab/>

```

from scripts.nanoFEniCS import *

R_t = [10, 37.5, 75]
B = [0, 2, 4]
F = [0, 3000, 30000]
ml = [0, -1, -2]

def encode_params(ranges, new):
    out = []
    for a in new:
        out += [ r+[a] for r in ranges ]
    return out

params = encode_params(encode_params(encode_params(encode_params([], R_t), B),
    ↪ F), ml)
df = pd.DataFrame([])
num_params = len(params)
i = 0
for p in params:#[:1]:
    i += 1
    R_t, B, F, ml = p
    print('( %d de %d ) Starting to process R_t: %0.1f, ml: %d, B: %0.1f, F: %0.1f
    ↪ ' % (i, num_params, R_t, ml, B, F))
    nano = nanoFEniCS(R_t, ml, B, F) # Instancia el objeto nanoFEniCS
    nano.solve(num_eigenvalues = 12, tolerance=1e-15, maximum_iterations=1000)
    ↪ # Resuelve el sistema de ecuaciones
    data = nano.get_data(plot_figures=False, save_figures=True, base_path='

```

```
↪ prob_density_plots') # Obtiene los datos y grafica
aux_df = pd.DataFrame.from_dict(data)
df = df.append(aux_df, ignore_index = True)
dipole_matrix = nano.get_dipole_matrix()
```

```
df.to_excel('outputs/1_calculatedData.xlsx', sheet_name='data')
```

El anterior algoritmo se basó en los atributos y métodos de un objeto que se creó, llamado `nanoFEniCS(R_t, ml, B, F)`, en el cual se realiza todo el cálculo por FEM utilizando las librerías de `fenics`, `mshr` y `matplotlib`.

Primero, se especifican los valores de los parámetros del modelo que hacen parte de los atributos de `nanoFEniCS`, y se instancia el objeto,

```
nano = nanoFEniCS(R_t, ml, B, F)
```

en donde se realiza todo el pre-procesamiento; después, se llama al método de solución del problema,

```
nano.solve(num_eigenvalues = 12, tolerance=1e-15, maximum_iterations=1000)
```

para el cual se debe introducir el número de autovalores a extraer, la tolerancia y el número máximo de iteraciones.

Finalmente se realiza el post-procesamiento mediante los métodos

```
data = nano.get_data() y nano.get_dipole_matrix();
```

donde para el primero, se debe especificar si se quiere que las gráficas sean mostradas en el notebook o guardadas en una carpeta de nombre especificado en `base_path`; así mismo, dentro de este método, los valores de energía son almacenados en el diccionario “data”, que luego es convertido en un `DataFrame` para

poder exportar la información en un archivo de excel.

En el último método, `dipole_matrix = nano.get_dipole_matrix()`, se calculan los elementos matriciales y se almacenan en la matriz `dipole_matrix`.

A continuación, se describirá a fondo cada una de las partes del algoritmo del objeto `nanoFEniCS` (ver Anexo E); las cuales corresponden a cada estadio del proceso de solución de una PDE por FEM, ya mencionadas anteriormente:

Pre-procesamiento: formulación del problema variacional Según (3), la ecuación diferencial a resolver tiene la siguiente forma:

$$\nabla \cdot (c\nabla u) + \vec{\beta} \cdot \nabla u + \eta u = Eu \quad (4)$$

Donde u corresponde a las autofunciones, E a los autovalores de energía; y c , $\vec{\beta}$ y η son parámetros asociados al problema específico. Ha de tenerse en cuenta que para la implementación en FEniCS, se debe adimensionalizar la ecuación diferencial (ver Anexo D).

En la formulación variacional, se tiene que la ecuación (4), definida en un dominio dado por $d\Omega = drdz$, está dada por:

$$\int_{\Omega} \left[-c\nabla v \cdot \nabla u + v\vec{\beta} \cdot \nabla u + \eta vu \right] d\Omega = \int_{\Omega} Eu v d\Omega \quad (5)$$

Donde u es la función de ensayo o “trial function”, la cual se define por $u(x) = \sum_i^N g_i(x)v_i$; siendo v_i el valor de la función de prueba o “test function” en el nodo i y $g_i(x)$ la función de forma. Esta ecuación integral, que surge de aplicar ya sea el método de Ritz o el de Galerkin ¹⁰, se puede escribir de la forma $Ax = \lambda Mx$, donde λ son los autovalores E , x los autovectores de A , y las matrices A y M están determi-

nadas por los números de las integrales de la izquierda y derecha, respectivamente.

La parte inicial del script para el objeto nanoFEniCS, comienza definiendo los parámetros del modelo, luego genera la malla y posteriormente con ella define el dominio mediante la función de FEniCS `FunctionSpace()`, que contiene toda la información de las celdas en que se divide el espacio (elementos), tal que con este dominio se obtienen las funciones “trial” y “test” (`u = TrialFunction(V)`, `v = TestFunction(V)`); por otro lado, se definen las condiciones de frontera y las expresiones necesarias para la formulación de las partes derecha e izquierda de la integral (5), las cuales posteriormente son ensambladas en las matrices A y M, a quienes se les aplica las condiciones de frontera.

Solver En la siguiente etapa, se resuelve el problema por medio del método `SLEPcEigenSolver (A,M)` donde la respuesta queda almacenada en `eigensolver`.

¹⁴

Cada solución tiene un autovalor y una autofunción, ambos complejos, así:

$$\lambda = r + jc \quad (6)$$

$$\chi = rx + jcx \quad (7)$$

Los cuales se extraen mediante la función,

```
r, c, rx, cx = eigensolver.get_eigenpair(n)
```

donde n es el índice del autovalor.

¹⁴ Para conocer más del método, se puede consultar la documentación en la página oficial de FEniCS en la sección de “The FEniCS API Documentation” o en: https://fenicsproject.org/docs/dolfin/2019.1.0/cpp/d9/df4/classdolfin_1_1SLEPcEigenSolver.html#a4054d880ffacd5f9a81180726b3dc85f

Post-procesamiento Finalmente, teniendo las soluciones de autovalores y autofunciones, se procede a realizar tres pasos para el post-procesamiento; el primero consiste en graficar las autofunciones, luego se exportan los autovalores en un archivo .xlsx, y por último se calculan los elementos matriciales. Todos estos procesos se compararán con los resultados obtenidos con COMSOL.

El método `get_data()`, consiste en una serie de funciones que crean y modifican las características de una gráfica, además de establecer la forma de guardar el archivo resultante en dos diferentes formatos, .xdmf y .png; donde el primero a su vez genera un archivo .h5, los cuales pueden ser usados para mostrar el resultado en el software ParaView, mediante (`set_labels_and_save()`). Por otra parte, posee las funciones para graficar las densidades de probabilidad en dos tipos de gráficas, una referente al perfil de la densidad $|\chi|^2$ y otra mostrando un mapa de colores de la misma (mediante `plot(u)`, con $u=|\chi|^2$), haciendo uso de subplots.

Para graficar el perfil de la densidad de probabilidad $|\chi|^2$, mostrado en las figuras 4, 5 y 6 (b), se utiliza la función: `plot_1D(u, p1, p2)`, donde se obtienen los resultados de la densidad en la línea generatriz media del NTC; es decir, la que tiene por radio de la base R_b y de la punta R_t , recordando que la geometría del NTC tiene un grosor w de 5 nm y está definida por un polígono de esquinas $[(R_b - w/2, 0), (R_b + w/2, 0), (R_t + w/2, H), (R_t - w/2, H)]$. El planteamiento geométrico para la definición de la función, está descrito en la figura 3, en la cual el punto verde de esta figura, dado por el vector \vec{R} , está representado en las figuras 4, 5 y 6 (b) en el eje de las ordenadas; mientras en las abscisas se encuentra representada $|\chi|^2$.

De esta forma, en las figuras 4 a 6 se muestran las gráficas obtenidas por COMSOL y FEniCS, para tres casos diferentes. De las cuales se puede notar que los

Figura 3. Representación vectorial de puntos sobre la línea generatriz del NTC, utilizada para realizar el algoritmo que permite graficar el perfil de densidad de probabilidad.

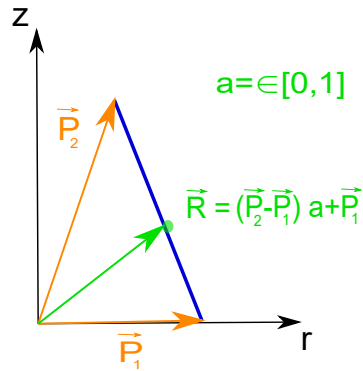


Tabla 7. Comparación entre los diez primeros autovalores de energía calculados con COMSOL y FEniCS

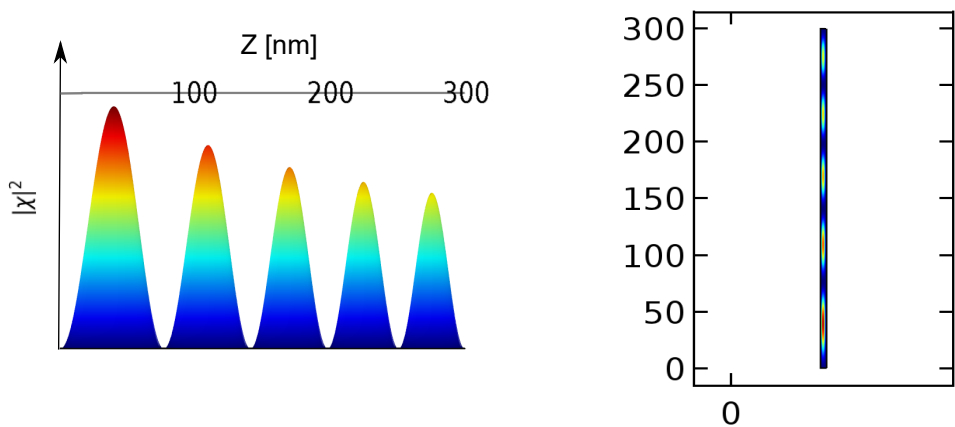
<i>Autovalor COMSOL</i> [meV]	<i>Autovalor FEniCS</i> [meV]	E_{abs} [meV]
121.0845	121.0998	0.0153
121.1819	121.1974	0.0155
121.3276	121.3431	0.0155
121.5381	121.5537	0.0156
121.8116	121.8274	0.0158
122.1475	122.1634	0.0159
122.5453	122.5615	0.0162
123.0050	123.0214	0.0164
123.5264	123.5431	0.0167
124.1093	124.1264	0.0171

resultados obtenidos haciendo uso de FEniCS, son semejantes a los de COMSOL.

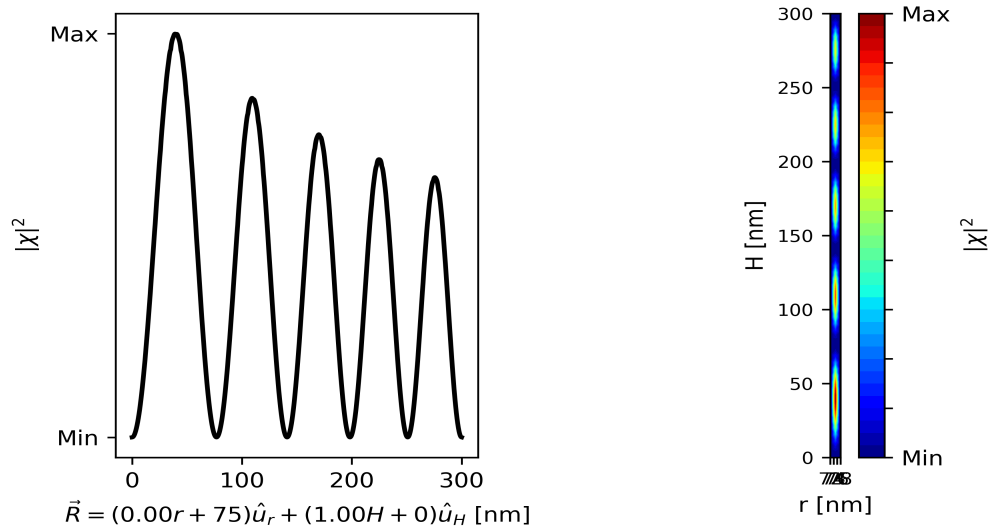
Así mismo, se obtuvieron las energías para el caso con campos y sin campos, a través de `get_data()`, y se compararon con las obtenidas por COMSOL (ver tabla 7), donde cabe destacar que se han tomado cuatro cifras decimales para la energía en meV, debido a que el programa que se tiene realizado en COMSOL fue optimizado para dar un resultado con siete decimales de energía en eV, tales que no cambiaran con un refinamiento de malla. Es así que, en esta tabla se puede observar que la diferencia entre ambos programas se encuentra en la quinta cifra significativa, donde dicho error va aumentando a medida que aumenta el autovalor.

Por último, se resalta que la parte restante del post- procesamiento, relacionada con las funciones de respuesta y de la misma forma con el método `nano.get_dipole_matrix()`, se comentará en los siguientes capítulos.

Figura 4. Perfil de densidad de probabilidad (izquierda) y mapa de colores (derecha), obtenidas por (a) COMSOL y (b) FEniCS, para el quinto autovalor y parámetros $m_l = -2$, $F = -3000[kV/cm]$, $B = 0[T]$ y $R_t = 75[nm]$ del NTC.



(a)



(b)

Figura 5. Perfil de densidad de probabilidad (izquierda) y mapa de colores (derecha), obtenidas por (a) COMSOL y (b) FEniCS, para el tercer autovalor y parámetros $m_l = -2$, $F = 0[kV/cm]$, $B = 4[T]$ y $R_t = 0,5R_b[nm]$ del NTC.

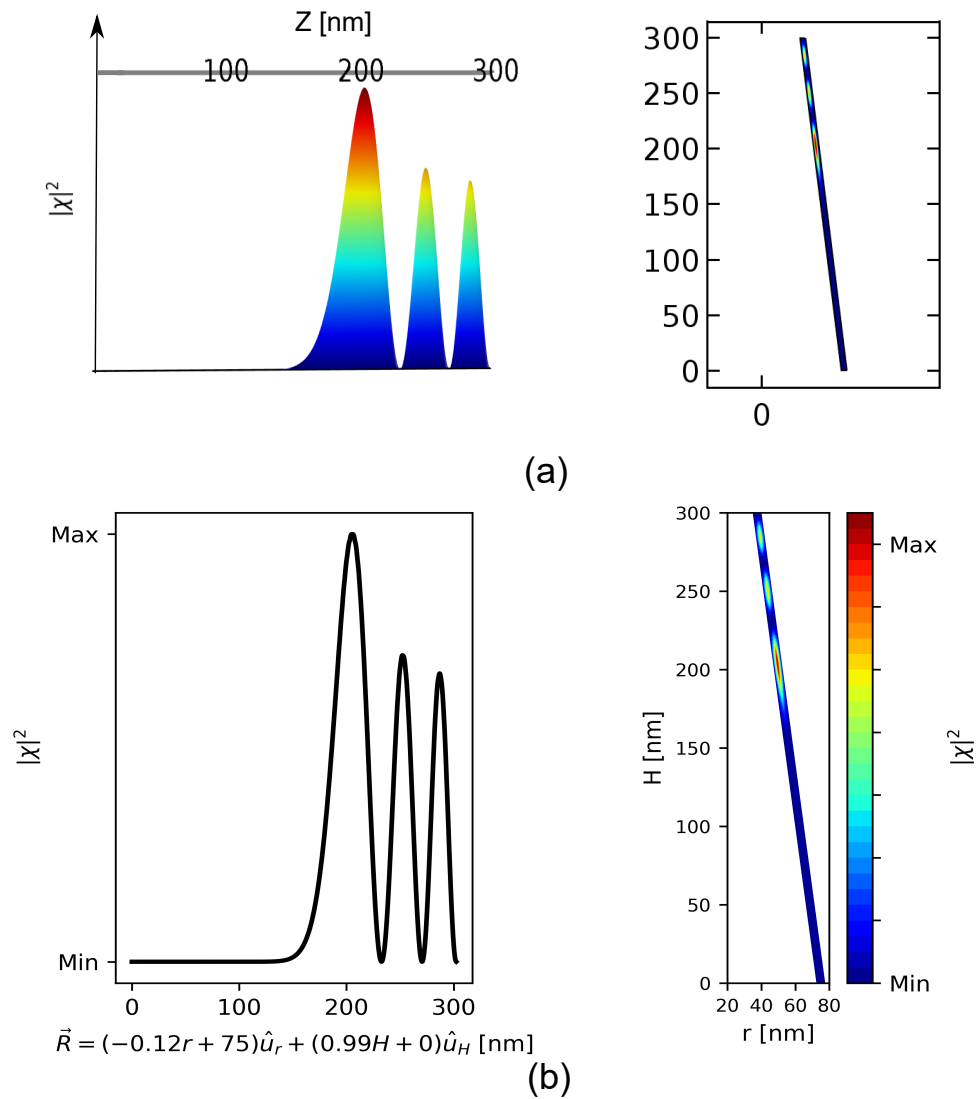
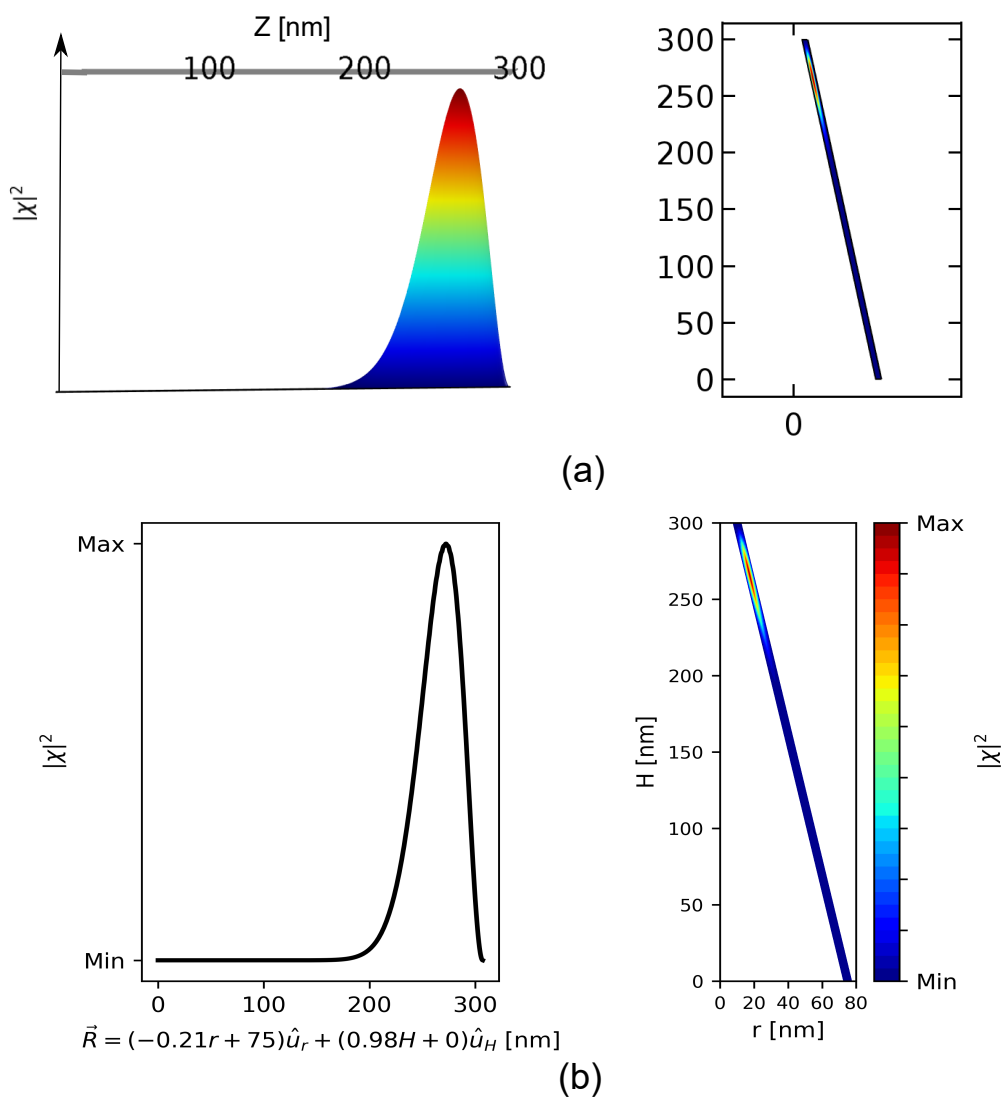


Figura 6. Perfil de densidad de probabilidad (izquierda) y mapa de colores (derecha), obtenidas por (a) COMSOL y (b) FEniCS, para el primer autovalor y parámetros $m_l = 0$, $F = 0[kV/cm]$, $B = 2[T]$ y $R_t = 10[nm]$ del NTC.



3. COEFICIENTE DE ABSORCIÓN ÓPTICA

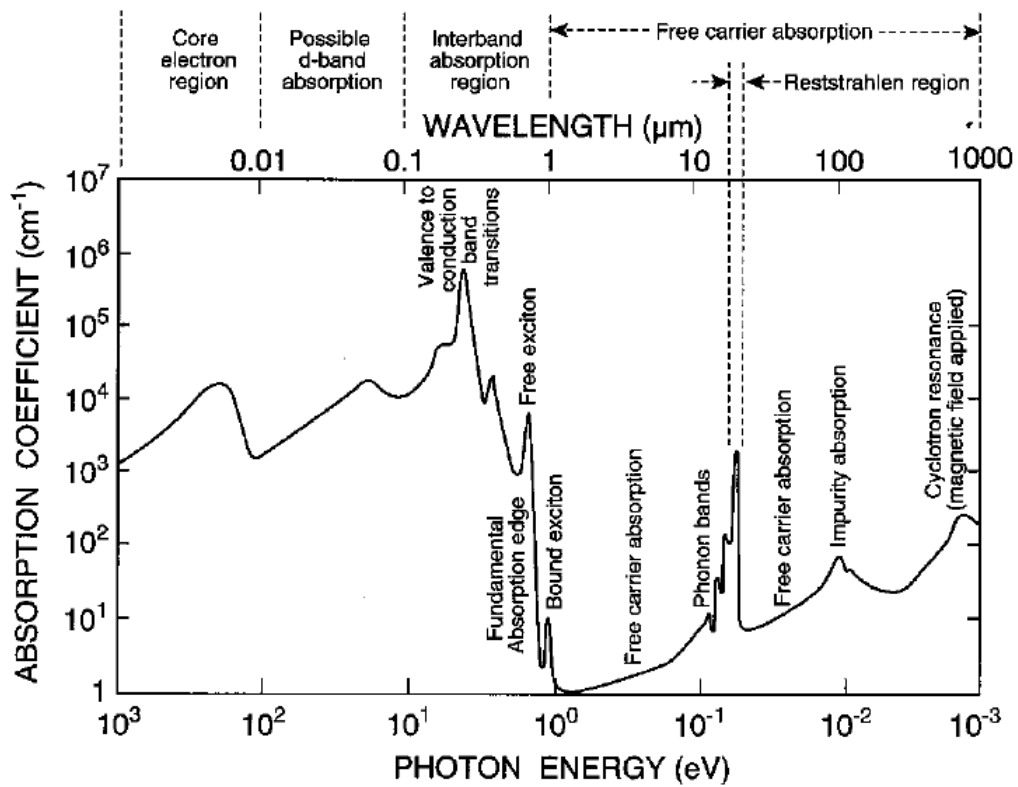
La absorción óptica es uno de varios fenómenos que ocurren como consecuencia de la interacción de una onda electromagnética y un medio material; en donde la energía de un fotón es tomada por otra partícula, en este caso por un electrón, para efectuar una transición desde un estado de baja energía a otro de mayor energía. De esta forma, la luz que es absorbida puede ser disipada en calor o ser reemitida con otra frecuencia (fotoluminiscencia).

Así mismo, una forma de caracterizar este fenómeno es mediante el coeficiente de absorción α , el cual es un parámetro que en general, depende de la frecuencia de la OEM, y que caracteriza qué tan fácil puede un material ser atravesado por un haz de luz, de una cierta frecuencia, e indica qué tan lejos puede llegar este haz antes de ser absorbido; de tal forma que, en un material donde el coeficiente de absorción es bajo, la luz se absorbe poco; y si el material es lo suficientemente delgado, parecerá transparente a esa longitud de onda. El coeficiente de absorción puede ser determinado experimentalmente a partir de la disminución de intensidad de un haz de luz que atraviesa un material de grosor x , usando la ley de Lambert-Beer (A. 43).

Existen muchos procesos físicos que controlan la cantidad de absorción u otras propiedades ópticas de un semiconductor. A su vez, estos procesos dependen de la longitud de onda de la radiación, las propiedades del semiconductor que se está estudiando y otros parámetros externos como la presión, la temperatura, etc. Además, del mismo modo que las propiedades eléctricas de un semiconductor, las propiedades ópticas también se ven afectadas por la introducción intencional de impurezas (tanto tipo p como n) o por defectos no deseados. Así pues, en la figura 7 se muestran algunas contribuciones al espectro de absorción de un semiconduc-

tor en bloque, como funciones de longitud de onda y la energía de los fotones de la radiación incidente; sin embargo, hay que resaltar que el espectro de absorción para un semiconductor real puede mostrar más estructura que esta figura; así como también, parte de este espectro puede reducirse o no estar presente.¹⁵

Figura 7. Espectro de absorción de un semiconductor en bloque "Bulk", en donde se muestran algunos procesos ópticos.



Fuente: Republicado con permiso de MacGraw-Hill Education, de Handbook of optics (ver cita 15), Copyright (1995). Permiso transmitido a través de Copyright Clearance Center, Inc. (Ver Anexo F).

¹⁵ PAUL M. AMIRTHARAJ y DAVID G. SEILER. "Handbook of Optics. Devices, measurements and properties". En: ed. por MICHAEL BASS y col. Second, ed. Vol. II. McGRAW-HILL, INC., 1995. Cap. 36.

Por otro lado, la interacción de una OEM con un semiconductor se puede describir, en la aproximación semiclásica, usando funciones de respuesta como ε and χ (ver anexos A y B). Siendo el coeficiente de absorción óptica, según las ecuaciones (A. 52) y (B. 19):

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{4\pi}{c\varepsilon_0 n_r \mathcal{V}} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \frac{1}{\omega} \sum_i \sum_{f>i} |P_{if}|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (8)$$

Donde \mathcal{V} y n_r son el volumen y el índice de refracción del semiconductor, respectivamente; $|P_{if}|$ es el elemento if de la matriz de transición dipolar (MTD) y ΔE_{if} la diferencia de energía del estado i y el estado f .

Además, si se considera que las líneas espectrales observadas en experimentos, en realidad poseen un cierto ensanchamiento o 'broadening' debido a diferentes factores como: tiempo de vida o tiempo de relajación dado por el principio de incertidumbre, efecto Doppler, presión, entre otros; se puede aproximar ΔE_{if} como una función que incluye alguno de dichos factores, en donde el efecto del tiempo de vida produce idealmente una línea espectral con forma lorentziana¹⁶; tal que el espectro de absorción para N_e electrones no interactuantes, estará determinado por:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{4\pi n_e}{c\varepsilon_0 n_r} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \frac{1}{\omega} \sum_i \sum_{f>i} \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma |P_{if}|^2}{(\hbar\omega - \Delta E_{if})^2 + (\hbar\Gamma)^2} \quad (9)$$

Siendo $n_e = N_e/\mathcal{V}$ la densidad de portadores y $\hbar\Gamma$ el ancho medio al máximo medio (half-width at half-maximum), con Γ como el inverso del tiempo de relajación τ . De acuerdo con lo anterior, en este trabajo se muestra el cálculo del coeficiente de absorción que corresponde a la región del infrarrojo, donde se tiene absorción por

¹⁶ H.M. BAGHRAMYAN y col. "Influence of lateral electric field on intraband optical absorption in concentric double quantum rings". En: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 77 (2016), págs. 81-89.

portadores libres, ya que se consideran las transiciones intrabanda o intersubbanda; es decir, aquellas permitidas de un estado i a uno f dentro de una banda, en este caso la de conducción; y las cuales corresponden a las energías de un electrón libre dentro de un NTC de CdSe.

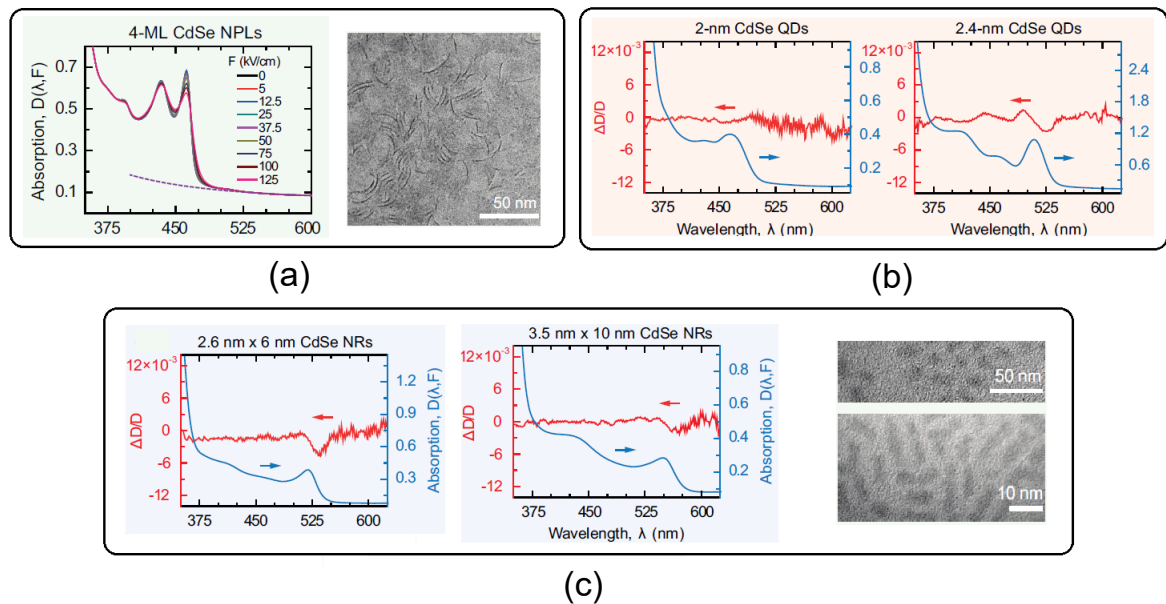
Finalmente, antes de continuar con los cálculos relacionados con α para el NTC, se mencionarán algunos trabajos experimentales sobre α en nanoestructuras de CdSe que se encuentran en la literatura. Así, con respecto al efecto de los campos sobre las propiedades ópticas, en el trabajo de Achtstein et al.¹⁷ se muestra el estudio comparativo de la electroabsorción entre QDs, nanobarras (Nbs) y nanoplatelets (NPLs) de CdSe sintetizados a través de química coloidal de alta temperatura (high-temperature colloidal chemistry); donde también se encuentra la medición de α para el caso en el cual no se perturba la estructura con campo eléctrico, es decir $F=0$; concluyendo que las estructuras con mayor electroabsorción son las NPLs, lo que los hace más favorables para la creación de dispositivos electro-ópticos (ver Figura 8). Por otra parte, referente a la geometría de la nano estructura, es pertinente conocer que también se ha estudiado teóricamente esta propiedad de absorción en un NTC de grafeno, bajo campos eléctrico y magnético.¹⁸

Ahora, respecto a la síntesis de nanoestructuras y su caracterización óptica, una forma de cuantificar la absorción es mediante la medición de la absorbancia, pues ambas están relacionadas mediante la ley de Beer-Lambert. Así, para QDs de Cd-

¹⁷ A. W. ACHTSTEIN y col. "Electroabsorption by 0D, 1D, and 2D Nanocrystals: A Comparative Study of CdSe Colloidal Quantum Dots, Nanorods, and Nanoplatelets". En: *ACS Nano* 8.8 (2014), págs. 7678-7686.

¹⁸ P. ULLOA, M. PACHECO y A. LATGÉ. "Optical properties of graphene nanocones under electric and magnetic fields". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.45 (2017), pág. 455304.

Figura 8. Espectro de absorción de tres diferentes nanoestructuras de CdSe bajo campos eléctricos F . (a) Espectro (izquierda) e imágenes TEM (derecha) de NPLs compuestos de cuatro monocapas bajo diferentes F ; (b) Espectros de QDs con dimensiones de 2 y 2.4 nm y (c) Espectros (izquierda) e imágenes TEM (derecha) de Nbs con tamaños de 2.6 nm x 6 nm y 3.5 nm x 10 nm; para $F=125$ kV/cm.



Fuente: Adaptada con permiso de ACS Nano 2014,8,8,7678-7686 (A. W. ACHTSTEIN y col. "Electroabsorption by 0D, 1D, and 2D Nanocrystals: A Comparative Study of CdSe Colloidal Quantum Dots, Nanorods, and Nanoplatelets"). Copyright (2014) American Chemical Society. (Ver Anexo F)

Se se tiene reportado por Humbert et al.¹⁹ su fabricación sobre substratos de vidrio y Silicio usando la técnica de RFMS, en donde los resultados para la absorbancia son comparados con los espectros para QDs obtenidos por soluciones comerciales

¹⁹ C. HUMBERT y col. "Linear and nonlinear optical properties of functionalized CdSe quantum dots prepared by plasma sputtering and wet chemistry". En: *journal of colloid and interface science* 445 (2015), págs. 69-75.

y wet chemistry; en el trabajo de Bhand et al.²⁰ se muestra la síntesis de películas delgadas de polianilina y "tetrapods"(TPs) de CdSe, por medio de deposición de baño químico y vía solvotermal, a las cuales luego caracterizan ópticamente mediante curvas de absorción, transmitancia y fotoluminiscencia.

3.1. MODELO

Recordando que las funciones de onda para el NTC presentado en el capítulo 1, están dadas por una parte axial y una parte angular ($\psi(r, \varphi, z) = \chi(r, z)e^{im_i\varphi}$). Se tiene que para los estados iniciales y finales:

$$\psi_i(r, \varphi, z) = \chi_i(r, z)e^{im_i\varphi} \quad (10)$$

$$\psi_f(r, \varphi, z) = \chi_f(r, z)e^{im_f\varphi} \quad (11)$$

Además, sabiendo que se estableció la polarización de la OEM en z , $\vec{u}_p = \hat{z}$, el elemento matricial P_{if} estará dado por:

$$\begin{aligned} P_{if} &= \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle \\ &= \iiint_{\mathcal{V}} \chi_f^*(r, z) e^{-im_f\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) e^{im_i\varphi} \right) r dr d\varphi dz \\ &= \iint_S \chi_f^*(r, z) r \frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) dr dz \int_0^{2\pi} e^{i(m_i - m_f)\varphi} d\varphi \\ P_{if} &= 2\pi \delta_{m_i, m_f} \iint_S \chi_f^*(r, z) r \frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) dr dz \end{aligned} \quad (12)$$

Siendo \mathcal{V} el volumen del NTC y S la sección transversal del mismo. Ahora, según la

²⁰ GANESH. R. BHAND y col. "Optical, structural, and morphological properties of PANI/CdSe TPs nanocomposite thin films". En: *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 28.17 (2017), págs. 12555-12563.

ecuación (12), se observa que la regla de selección, para este caso, indica que sólo se permiten las transiciones para las cuales $m_{l_i} = m_{l_f}$; de tal forma que aquellas que no cumplan esta condición, constituyen transiciones prohibidas y por lo tanto no contribuyen al espectro de absorción.

3.2. MÉTODO

A continuación se enumeran los pasos que se siguieron para resolver el problema anterior.

1. **Cálculo:** A partir de los resultados obtenidos del trabajo realizado por nosotros⁴ en COMSOL, para las funciones de onda y las energías; se calcularon las integrales dadas en (12) para $m_{l_i} = m_{l_f}$ haciendo uso del mismo software.
2. **Validación:** Se validaron los cálculos en COMSOL, reproduciendo el cálculo de los elementos de la matriz de transición P_{if} de un electrón en una caja bidimensional, para los cuales ya se conoce su solución exacta (ver Anexo C).
3. **Migración de plataforma:** Se realizaron los mismos cálculos de energía, funciones de onda (ver sección 2.4) y P_{if} para el NTC, esta vez usando FEniCS, y se compararon con los resultados previamente obtenidos por COMSOL.

3.3. IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL

3.3.1. Validación Para calcular los elementos matriciales, primero se debe tener la solución de los estados pertenecientes al sistema de estudio; en este caso, dichos resultados para el NTC bajo campos externos, ya fueron calculados y validados en un trabajo anterior (tesis de pregrado) en la plataforma COMSOL Multiphysics; entonces, lo que concierne al presente trabajo, es el cálculo de dichos elementos matriciales, para luego obtener el espectro de absorción óptica.

Ahora bien, una de las formas para la validar un cálculo numérico, es mediante la comparación de los resultados con un modelo teórico con solución exacta. En este caso, se escogió el problema de un electrón, con masa efectiva $0,13m_e$, en una caja de potencial bidimensional, de lados $L_x = 11$ nm y $L_y = 7$ nm, y en la cual incide perpendicularmente una OEM plana con polarización $\hat{u}_p = \hat{i}$. Las soluciones a este caso se encuentran en el Anexo C.

El cálculo en COMSOL se realizó usando el módulo de espacio 2D y un solver de EDP en forma de coeficientes. Las integrales que conforman un post-procesamiento, se computaron haciendo una integral de superficie, donde el integrando estaba dado por:

$$\text{conj}(u_{norm}) * \text{with}(1, \text{const} * ux)$$

Donde $u_{norm} = \text{const} * u$, es la función de onda normalizada, $\text{conj}(u)$ indica el complejo conjugado de u , ux es el gradiente de u respecto a la coordenada x , y $\text{with}(i, u)$ es un operador que permite seleccionar la i -ésima solución para el autovector u . Así, los resultados se pueden observar en la tabla 8.

Tabla 8. Diez primeros autovalores de energía, números cuánticos correspondientes y error absoluto, para un electrón en un pozo 2D

<i>Autovalor COMSOL</i> [meV]	<i>Autovalor Teoria</i> [meV]	n_x	n_y	<i>Err_{abs}</i> [meV]
82.9367	82.9367	1	1	0
154.6525	154.6525	2	1	0
260.0309	260.0309	1	2	0
274.1790	274.1790	3	1	0
331.7468	331.7468	2	2	0
441.5161	441.5160	4	1	0
451.2733	451.2733	3	2	0,0001
555.1884	555.1881	1	3	0,0004
618.6104	618.6103	4	2	0,0002
626.9043	626.9039	2	3	0,0004

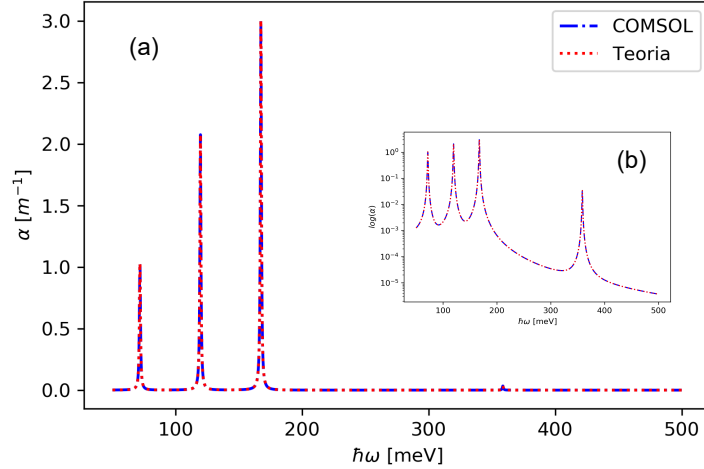
Donde se puede notar que, según el error calculado, se obtiene un resultado exacto, como mínimo, hasta la séptima cifra decimal. De la misma forma, se tabularon los valores para los elementos matriciales del problema en cuestión (ver tabla 9), teniendo en cuenta que para este caso, la primera regla de selección que aparece consiste en que las transiciones con diferentes números cuánticos en y (n_y) están prohibidas; de lo cual se observa que lo obtenido mediante COMSOL, esta vez para los elementos matriciales, está de acuerdo con lo teórico; ya que, según la segunda regla de selección, sólo son permitidas las transiciones en las cuales el resultado de $n'_x \pm n_x$ corresponde a números impares (ver Anexo C). Sin embargo se observa también que se obtienen resultados exactos, por lo menos, hasta 6 cifras significativas.

Tabla 9. Elementos ($P_{if} = P_{n_x n'_x}$) de la MTD para la transición permitida $n_y = n'_y = 1$ y error absoluto

n_x	n'_x	$P_{n_x n'_x} COMSOL[1/m]$	$P_{n_x n'_x} Teoria[1/m]$	$Err_{abs}[1/m]$
1	2	242424250	242424242	8
1	3	2×10^{-6}	0	2×10^{-6}
1	4	96969744	96969697	47
2	3	436363683	436363636	47
2	4	2×10^{-6}	0	2×10^{-8}
3	4	623376812	623376623	189

Por último, en la figura 9 se muestra la parte del espectro asociada a la tabla 9, en el cual se utilizó un ancho de $\hbar\Gamma = 0.5meV$ para la curva dada por una distribución de Cauchy-Lorentz (C. 18). En ella se observa que el espectro obtenido por COMSOL no posee diferencia significativa a la solución exacta.

Figura 9. Comparación del espectro de absorción para un electrón en una caja 2D de $CdSe$. (a) solución exacta (rojo) y obtenido por COMSOL (azul), (b) logaritmo de la absorción, en función de la energía de absorción; los picos corresponden a transiciones dadas entre niveles con número cuántico $n_y = n'_y = 1$, y $n'_x \pm n_x = impar$



3.3.2. Resultados y análisis Para la realización de los cálculos pertenecientes a las propiedades ópticas estudiadas en este trabajo, se fijó la altura $\aleph = 300[nm]$, el radio de la base $R_b = 75[nm]$ y el espesor del NTC $w_t = w_b = 5[nm]$; mientras, dependiendo del comportamiento a analizar, se varió el parámetro correspondiente a su radio superior R_t , el cual está relacionado con el grado de conicidad del sistema, descrito por el ángulo de apertura θ , de la siguiente forma:

$$\tan \theta = \frac{R_t - R_b}{\aleph} \quad (13)$$

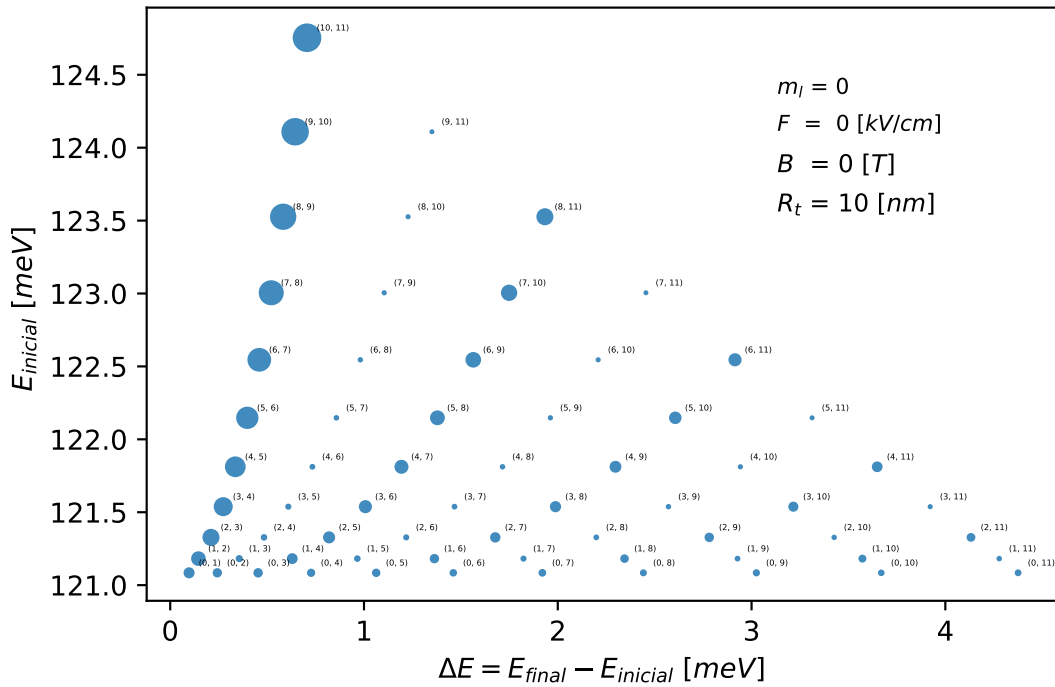
Elementos Matriciales Con el fin de obtener teóricamente el espectro de absorción de un material, se realizaron una serie de preguntas referentes a los elementos P_{if} de la matriz de transición dipolar (MTD). Así, en lo que sigue de esta sección, se pretende responder a los siguientes interrogantes:

- ¿Cuáles transiciones son las que más contribuyen al espectro de absorción óptica?
- ¿Cómo están distribuidos los valores de P_{if} para diferentes transiciones?
- ¿Cómo representar de manera sencilla los valores de P_{if} ?
- ¿Cómo determinar el ancho de la distribución de Cauchy-Lorentz con un criterio físico objetivo?

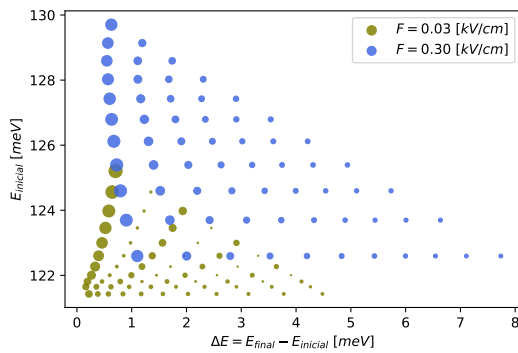
Normalmente, en la física de estado sólido se tienden a realizar gráficas de puntos, contornos, superficie y campos vectoriales; sin embargo, también es posible realizar gráficas que usualmente son usadas en la analítica de datos, como por ejemplo las de burbujas, barras, histogramas, etc., para estudiar cierto tipo de datos que se manejan en física teórica. En el presente caso, se realizó una gráfica de burbujas (ver figura 10a) para la representación y estudio del comportamiento de los elementos matriciales; este tipo de diagrama de dispersión permite representar tres dimensiones en dos dimensiones, donde la tercera variable es el tamaño de los puntos o burbujas.

Así, el eje de las abscisas de la figura 10a corresponde a la diferencia de energía entre dos estados permitidos o lo que es lo mismo, la energía del fotón incidente que provoca la transición, y corresponde a la ubicación del pico en el espectro de absorción; el eje de las ordenadas es la energía del estado inicial y el tamaño de las burbujas (diámetro) está asociado con la magnitud de los elementos P_{if} de la MTD. Además, cabe resaltar que para entender mejor la correspondencia de cada burbuja, se han puesto las etiquetas pertenecientes a los índices de los estados iniciales y finales de las transiciones.

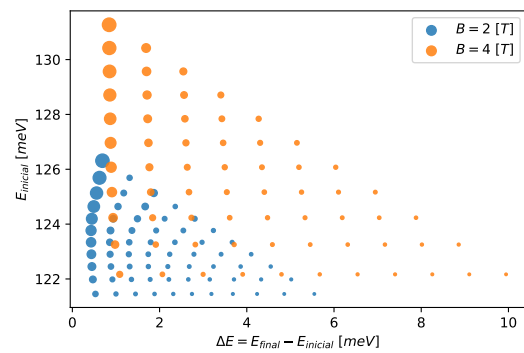
Figura 10. Gráfica de Burbujas de los elementos matriciales P_{if} para un NTC con radio superior $R_t = 10[nm]$ y $m_l = 0$; para los casos de (a) ausencia de campos externos, (b) dos valores de campo eléctrico F y campo magnético $B = 0[T]$, (c) dos valores de B y $F = 0[kV/cm]$.



(a)



(b)



(c)

El tamaño de las burbujas y la separación entre estas, determinan en cuánto contribuye cada uno de los términos matriciales a las propiedades ópticas consideradas en este trabajo. Aunado a esto, como en este tipo de gráficas se puede extraer suficiente información inherente a las propiedades ópticas; es posible definir el ancho de los picos según el principio de incertidumbre, así:

“ Un electrón se encuentra en un estado de energía E' con una cierta incertidumbre $\Delta E'$. Dicha incertidumbre $\Delta E'$ debe ser menor que la diferencia entre un par de estados consecutivos, dado que $\Delta E'$ determina el estado del electrón. De acuerdo a esto, el valor del tiempo medio de relajación τ debe ser mayor a $\hbar/\Delta E'$, donde para el caso de transiciones intrabanda se puede considerar $\Delta E' = E_1 - E_0$, siendo E_0 el estado más bajo de la banda de conducción y E_1 el primer estado excitado”

Donde se aclara que E_0 es el estado más bajo de la banda de conducción, debido a que se está trabajando con electrones en dicha banda.

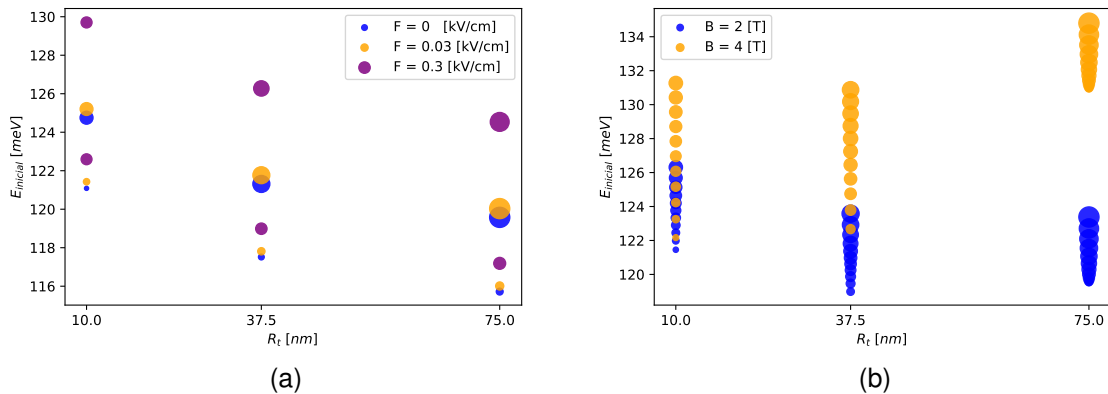
En el presente trabajo, se escogió el valor del ancho $\hbar\Gamma = 0,1 [meV]$, ya que como se mencionó al principio de este capítulo, Γ está relacionado con $1/\tau$; y por ello, se puede hacer uso del criterio anterior, que da cuenta que el valor de este ancho es aproximadamente igual a la diferencia de energía de dos estados consecutivos, o en palabras de Li y Xia ²¹, al espaciamiento de energía de los estados propios. De igual forma, este valor de $\hbar\Gamma$ está relacionado con el de la energía de la primera transición observada en 10a.

²¹ LI SHU-SHEN y XIA JIAN-BAI. “Intraband optical absorption in semiconductor coupled quantum dots”. En: *Physical Review B* 55.23 (1997), págs. 15434-15437.

Ahora, se realizaron las figuras 10b y 10c con el fin de analizar el efecto de los campos externos uniformes, aplicados en dirección del eje de simetría (\hat{z}) del NTC, sobre los elementos matriciales P_{if} . En ellas se observa que la introducción de los campos genera un incremento en las energías de transición, debido al aumento en el confinamiento, ya sea de tipo eléctrico o magnético.

Es interesante resaltar que, según la figura 10b, el aumento del campo eléctrico externo hace que las probabilidades de transición entre estados sucesivos sea casi la misma, a diferencia del caso sin campo, donde es mayor para los estados superiores. Así mismo, es posible notar que en la figura 10c, a medida que se aumenta el valor de B , la separación de las energías de transición aumenta y tiende a ser más uniforme con respecto a un campo B menor; ya que para el campo de 4[T] el confinamiento magnético se hace dominante respecto al confinamiento estructural, y por lo tanto los niveles energéticos se asemejan a los de un oscilador armónico cuántico.

Figura 11. Gráficas de burbujas de los elementos matriciales P_{if} para diferentes valores de R_t y transiciones entre estados sucesivos (a) (0,1) y (10,11) con diferentes valores de campo F y $B = 0[T]$; (b) (n,n+1) con $n=0,\dots,11$ para dos valores de campo B y $F = 0[kV/cm]$.



En las figuras 11a y 11b, se muestran otro tipo de diagramas de burbujas para los P_{if} , su dependencia de R_t y campos externos; donde se toman en consideración sólo las transiciones entre niveles de energías sucesivos, los cuales representan las mayores probabilidades de todas las combinaciones posibles de transiciones, según las figuras 10b y 10c. Esto se realizó con el objetivo de mostrar no sólo los efectos de los campos sobre los elementos matriciales, sino también el efecto que produce la conicidad del nanotubo, relacionada con el radio superior R_t .

Para la figura 11a se observa que el comportamiento de la energía inicial aumenta con el campo eléctrico y a medida que el radio R_t aumenta, esta disminuye. Además, se observa que el valor de la probabilidad de transición para estados sucesivos es casi la misma, cuando se aumenta la conicidad del nanotubo y el valor del campo eléctrico simultáneamente; esto se puede corroborar comparando con el caso del nanotubo cilíndrico $R_t = 75[nm]$ y los casos cuando $B = 0[T]$, donde transiciones entre niveles sucesivos más altos poseen mayor probabilidad.

Contrario al comportamiento de la energía inicial para campos eléctricos, cuando se aplica el campo magnético, lo anterior no se mantiene; ya que según la figura 11b, se tiene que si $B = 4 [T]$ las energías iniciales para la transición de (0,1) son $Ei_{R_b} > Ei_{0,5R_b} > Ei_{10}$ y para (10,11) $Ei_{R_b} > Ei_{10} > Ei_{0,5R_b}$; pero si $B = 2 [T]$ para (0,1) $Ei_{10} > Ei_{R_b} > Ei_{0,5R_b}$ y para (10,11) $Ei_{R_b} < Ei_{0,5R_b} < Ei_{10}$; este comportamiento está relacionado con la pendiente de la curva de energía vs. B para $m_l = 0$, obtenida en el anterior trabajo ⁴. Además, se observa que en general cuando se aumenta la conicidad, la probabilidad de transición decrece.

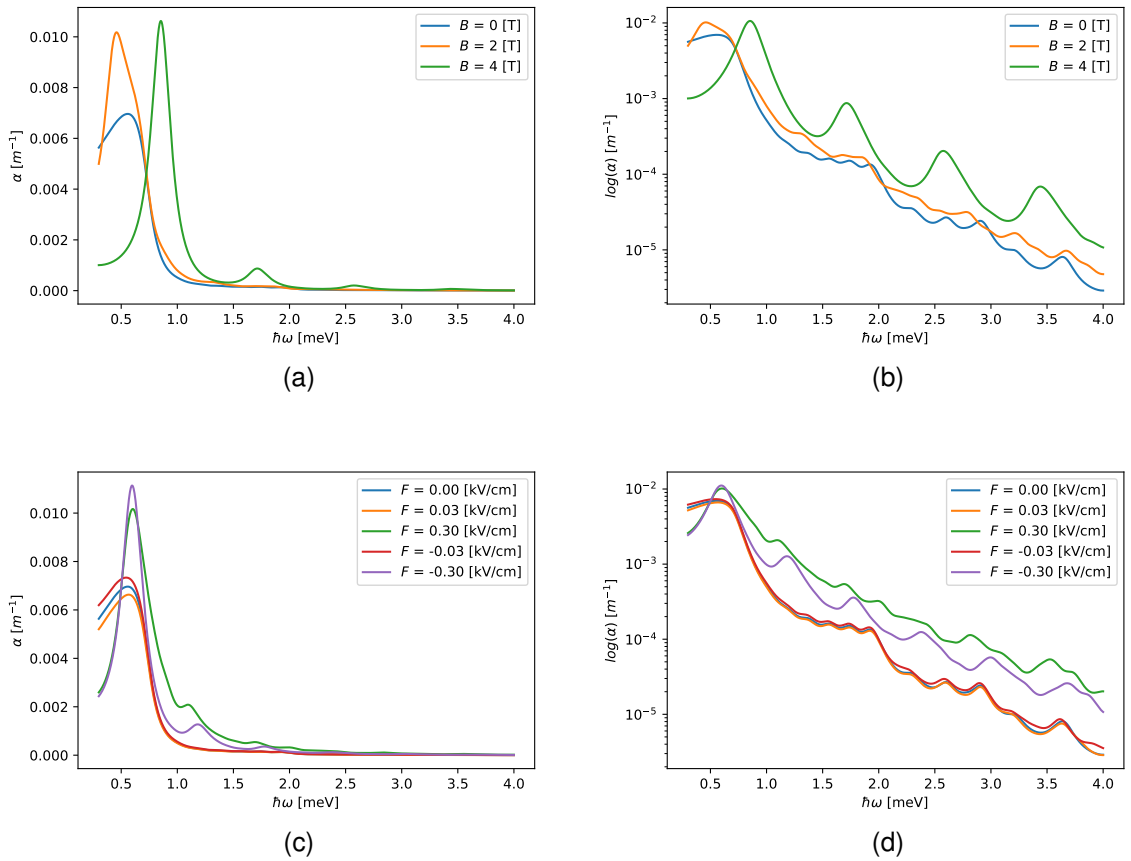
Espectros En esta parte del proyecto, se muestran los resultados de los cálculos de los espectros de absorción para el NTC en COMSOL, considerando $N_e = 6x10^3$ y $\hbar\Gamma = 0,1[meV]$, para todas las combinaciones de transiciones posibles entre los 12

primeros estados de energía, como resultado del análisis realizado anteriormente; ya que como se puede ver en la figura 10a, existen transiciones que poseen una probabilidad de ocurrencia considerable y por consiguiente, no sería suficiente incluir una o dos de ellas para describir las propiedades ópticas en estudio. Además, para todos los casos estudiados, se consideraron únicamente las transiciones con $m_i = m'_i = 0$, teniendo en cuenta la regla de selección y el hecho de que la modificación de los números cuánticos m_i , es decir $m_i \neq 0$, no afectan notablemente los elementos matriciales ya sea en magnitud o en energía de transición.

Primero, se analizaron los efectos de los campos eléctrico y magnético por separado, dejando constante el parámetro geométrico $R_t = 10[nm]$ (ver figura 12).

De las figuras 12a y 12b, se puede notar que el campo magnético genera un corrimiento en los picos de absorción, es decir, modifica las energías de transición; donde se tiene un corrimiento hacia el rojo para un campo de 2 [T] respecto al caso sin campo, lo cual se debe a un fuerte aporte de transiciones entre niveles sucesivos superiores $(n, n + 1)$ (ver figura 10c), por la presencia importante del confinamiento estructural y el magnético; mientras que para un campo de 4 [T] se observa un corrimiento del pico hacia el azul, ya que en contraste con lo anterior, existe un predominio del confinamiento magnético; es decir, este corrimiento se debe al término diamagnético, que para campos mayores genera una mayor separación entre niveles y por tanto, mayor energía de transición.

Figura 12. Espectros de absorción de un NTC de radio superior $R_t = 10[nm]$, con transiciones permitidas entre números cuánticos magnéticos $m_l = 0$ y diferentes valores de campos (a) Magnéticos con $F = 0[kV/cm]$ y (c) Eléctricos con $B = 0[T]$, además de sus correspondientes gráficas en semilog (b) y (d).



Además, con la introducción del campo magnético, ha de notarse que cuando este aumenta, transiciones de mayor energía toman relevancia, de tal forma que se observan más picos en comparación de campos bajos. También se observa un aumento en la altura de los picos; dicho de otra forma, la probabilidad de transición se incrementa debido a un aumento en el momento dipolar eléctrico, pues a mayor campo magnético, el electrón se localiza más hacia la parte superior del cono, y se tiene una mayor longitud en z para que oscile al interactuar con la OEM polarizada

linealmente en z .

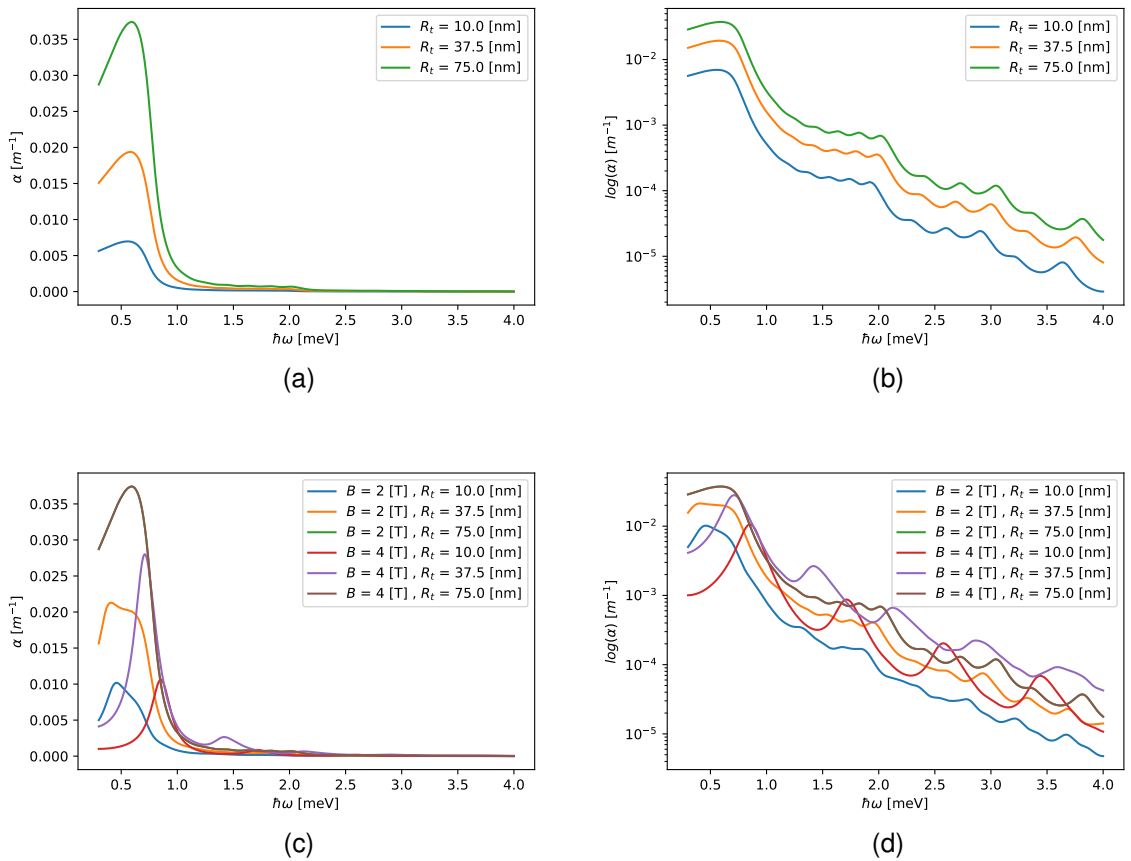
Por su parte, como se puede observar en la figura 12c, el efecto del campo eléctrico sobre el espectro de absorción es el de modificar la magnitud de los picos o probabilidad de transición, lo cual concuerda con lo obtenido experimentalmente para otra nanoestructura de CdSe en la figura 8 (a); donde para el caso que aborda este trabajo, la magnitud de los picos en lugar de disminuir como sucede en la figura 8, se comportan de la siguiente forma: para campos eléctricos bajos en dirección $+z$, el pico disminuye con respecto al caso de no aplicación de campos (curva azul), contrario a lo que sucede cuando F va en dirección $-z$; mientras que para campos mayores el pico aumenta independiente del sentido del campo. Así mismo, al aumentar F en cualquier sentido ($\pm z$), se observa la aparición de picos adicionales (aunque de menor probabilidad), a energías de transición ligeramente mayores.

Lo anterior se puede explicar observando la figura 10b, en la cual se tiene que el aporte de las transiciones entre niveles sucesivos superiores se hace dominante, y corresponden a transiciones que se dan para energías del fotón menores al caso del estado base con el primer estado excitado, lo que se debe a que la separación entre los niveles de energía se va reduciendo para los estados superiores gracias al predominio del confinamiento eléctrico. Por tal motivo, casi no hay diferencia entre el pico del campo positivo respecto al del campo negativo pues el aporte del confinamiento estructural no es muy grande.

El análisis anterior fue llevado a cabo para un radio R_t constante; sin embargo, si se varía este parámetro geométrico y se dejan constantes los campos externos, como se puede observar en las figuras 13a y 13b, se observa que el efecto consiste en modificar el tamaño del pico. Además, cuando se aplica un campo magnético

simultáneo, se tiene que para $B = 2[T]$, al aumentar la conicidad, la intensidad del pico disminuye; pero para $B = 4[T]$ además de lo anterior, el pico muestra un ligero corrimiento hacia energías mayores. Así mismo es de notar que para un nanotubo cilíndrico $R_t = R_b$, el campo magnético no posee ningún efecto sobre el espectro (curvas verde y marrón superpuestas).

Figura 13. Espectros de absorción de un NTC para transiciones permitidas entre números cuánticos magnéticos $m_l = 0$, campo eléctrico $F = 0[kV/cm]$ y (a) Campo magnético $B = 0[T]$ y tres valores de radio superior R_t ; (c) diferentes valores de B y R_t ; con sus correspondientes gráficas en semilog (b) y (d).



Así mismo, no se mostró el efecto del campo eléctrico con el cambio de la conicidad del NTC, debido a que el resultado es similar al obtenido en las figuras 12c y 13a, donde los efectos de aumentar la conicidad son independientes de los asociados al cambio del campo eléctrico; las diferencias surgen de la aplicación del campo magnético.

Cabe resaltar que los comportamientos de los espectros anteriormente descritos, pueden ser observados también mediante los gráficos de burbujas presentados en la sección de elementos matriciales.

3.4. IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS

Para determinar las funciones de respuesta usando FEniCS, se calculó la MTD M mediante el método `nano.get_dipole_matrix()`, del objeto `nanoFEniCS` (ver Anexo E), en el cual se extraen y normalizan las autofunciones de los estados n y m ($m \geq n$), y donde cabe resaltar que en FEniCS las integrales se realizan mediante la función `assemble()`; seguidamente, se procede a calcular cada elemento de la matriz teniendo en cuenta que $|M_{if}|^2 = |a + jb|^2 = a^2 + b^2$, entonces:

$$\begin{aligned} |M_{if}|^2 &= \left| \iint_S \chi_f^*(r, z) r \frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) dr dz \right|^2 \\ &= \left| \iint_S u_j^* r \frac{\partial}{\partial z} u_i dr dz \right|^2 \end{aligned} \quad (14)$$

Donde u_i corresponde a la autofunción compleja dada por:

$$u_i = R1x + jC1x \quad (15)$$

$$u_j^* = R2x - jC2x \quad (16)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial z} = \frac{\partial R1x}{\partial z} + j \frac{\partial C1x}{\partial z} \quad (17)$$

De tal forma que, para encontrar el elemento matricial $|M_{if}|$ se deben calcular las siguientes dos integrales:

$$a = \iint_S r \left(R2x \frac{\partial R1x}{\partial z} + C2x \frac{\partial C1x}{\partial z} \right) drdz \quad (18)$$

$$b = \iint_S r \left(R2x \frac{\partial C1x}{\partial z} - C2x \frac{\partial R1x}{\partial z} \right) drdz \quad (19)$$

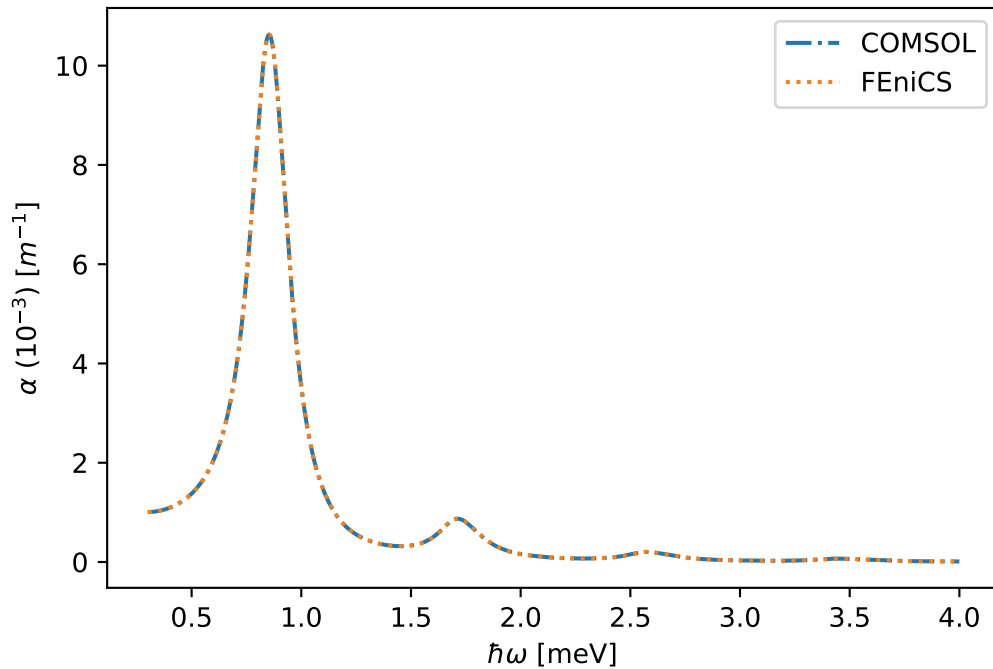
Así, dentro del método se definen las anteriores expresiones para a y b, en las cuales se calcula la derivada de cada componente de u_i con la función `nabla_grad()` [1], donde el número 1 se refiere a la segunda coordenada, es decir, z. Además, ha de notarse en el Anexo E que solo se calcularon los términos por encima de la diagonal de la MTD, dado que M es una matriz simétrica; por lo tanto se aplicó el método `np.transpose()` a cada uno de sus elementos, donde aquellos de la diagonal son inicialmente divididos por 2, para que al realizar esta operación no se obtenga el doble del valor original; es en ese sentido que se llena la matriz de transición dipolar.

A continuación, se muestra la tabla 10 que contiene la diferencia de energía, los elementos de la MTD M_{if} para ciertas transiciones etiquetadas por los números i e f y los correspondientes errores, obtenidos por COMSOL y FEniCS, para los parámetros del problema $R_t = 10[nm]$, $m_l = 0$, $F = 0[kV/cm]$ y $B = 4[T]$; aunado a esto, en la figura 14 se observa la comparación de los espectros de absorción obtenidos mediante ambos software.

Tabla 10. Elementos $|M_{if}|$ de la MTD para la transición permitida $m_l = 0$, energías de transición y errores absolutos obtenidos por COMSOL (C) y FEniCS (F), para los parámetros del problema $R_t = 10[nm]$, $F = 0[kV/cm]$ y $B = 4[T]$.

i	f	$\Delta E C [meV]$	$\Delta E F [meV]$	$Err E_{abs} [meV]$	$ M_{if} C$	$ M_{if} F$	$Err M_{abs}$
0	1	1.0860	1.0864	4×10^{-4}	0.4851	0.4855	4×10^{-4}
0	2	2.0649	2.0657	8×10^{-4}	0.2720	0.2727	7×10^{-4}
1	2	0.9789	0.9792	3×10^{-4}	0.7417	0.7423	6×10^{-4}
1	3	1.9125	1.9131	6×10^{-4}	0.3782	0.3793	1×10^{-3}
2	3	0.9336	0.9339	3×10^{-4}	0.9759	0.9766	7×10^{-4}
2	4	1.8410	1.8415	5×10^{-4}	0.4742	0.4756	1×10^{-3}
3	4	0.9074	0.9077	3×10^{-4}	1.1965	1.1973	8×10^{-4}

Figura 14. Comparación del espectro de absorción obtenido por COMSOL y FEniCS para un NTC con radio superior $R_t = 10[nm]$ y parámetros $m_l = 0$, $F = 0[kV/cm]$, $B = 4[T]$.



En la gráfica 14 se aprecia el espectro de absorción calculado por FEniCS al cual se superpone el calculado por COMSOL, de tal forma que a simple vista, se confirma la exactitud entre ambos métodos para la solución del problema anterior. Justificado también por los resultados observados en la tabla anterior, donde se obtuvieron los errores absolutos para cada uno de los parámetros involucrados en la graficación, los cuales tendrían un error porcentual al rededor de un máximo de 0.2 % entre los valores calculados por cada software.

3.5. ABSORCIÓN EN TÉRMINOS DEL OPERADOR POSICIÓN

Teniendo en cuenta que la absorción está dada por la ecuación (8), donde $P_{if} = \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle$ está escrito en términos del operador momentum, y que según la mecánica cuántica:

$$[H, \vec{r}] = -\frac{\hbar^2}{m^*} \vec{\nabla} \quad (20)$$

$$\langle f | [H, \vec{r}] | i \rangle = (E_f - E_i) \langle f | \vec{r} | i \rangle \quad (21)$$

y por lo tanto,

$$\langle f | \vec{\nabla} | i \rangle = -\frac{m^*}{\hbar^2} \Delta E_{if} \langle f | \vec{r} | i \rangle \quad (22)$$

tal que, de las ecuaciones anteriores también se obtiene que:

$$\langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle = -\frac{m^*}{\hbar^2} \Delta E_{if} \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{r} | i \rangle \quad (23)$$

Es decir, los elementos de la MTD en función del momentum pueden ser escritos también en función del operador posición, siguiendo la anterior relación; tal que es posible expresar la absorción óptica dada en (8) como:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{4\pi}{c\varepsilon_0 n_r \mathcal{U}} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \frac{1}{\omega} \sum_i \sum_{f>i} |\langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (24)$$

$$= \frac{4\pi}{c\varepsilon_0 n_r \mathcal{U}} \left(\frac{e}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\omega} \sum_i \sum_{f>i} \Delta E_{if}^2 |\langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{r} | i \rangle|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (25)$$

$$= \frac{4\pi e^2 \omega}{c\varepsilon_0 n_r \mathcal{U}} \sum_i \sum_{f>i} |\langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{r} | i \rangle|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (26)$$

Donde se ha usado la propiedad del delta de Dirac $f(t)\delta(t - \nu) = f(\nu)\delta(t - \nu)$.

A continuación se muestra la comparación del resultado numérico en COMSOL de ambas formas de elementos matriciales, donde para el caso abordado en esta investigación se tiene:

$$\langle f | \frac{\partial}{\partial z} | i \rangle = -\frac{m^*}{\hbar^2} \Delta E_{if} \langle f | z | i \rangle \quad (27)$$

$$\iint_S \chi_f^*(r, z) r \frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) dr dz = -\frac{m^*}{\hbar^2} \Delta E_{if} \iint_S \chi_f^*(r, z) r z \chi_i(r, z) dr dz \quad (28)$$

Tabla 11. Elementos de la MTD en función de los operadores momentum y posición, para transiciones del estado base $E_i = 121.4532[meV]$ a los cuatro primeros estados excitados de un NTC de $R_t = 10[nm]$ con parámetros del problema: $B = 2[T]$, $F = 0[kV/cm]$ y $m_l = 0$.

$E_f [meV]$	$\Delta E_{if} [meV]$	P_m	$P_p [m^2]$	$-(m^*/\hbar^2)\Delta E_{if}P_p$
121.9830	0.5298	0.3919	-4.3368×10^{-16}	0.3920
122.4531	0.9999	-0.2303	1.3500×10^{-16}	-0.2303
122.9013	1.4481	0.1774	-7.1819×10^{-17}	0.1774
123.3378	1.8846	-0.1488	4.6299×10^{-17}	-0.1488

En la anterior tabla, los valores de P_m y P_p corresponden a las integrales de la ecuación (28), donde el subíndice m se refiere a momentum y p a posición, es así que:

$$P_m = \iint_S \chi_f^*(r, z) r \frac{\partial}{\partial z} \chi_i(r, z) dr dz \quad (29)$$

$$P_p = \iint_S \chi_f^*(r, z) r z \chi_i(r, z) dr dz \quad (30)$$

De la tabla 11, se puede observar que el valor de P_m calculado a partir del valor de P_p (primera columna desde la derecha) es similar al valor de P_m obtenido directamente por FEM usando COMSOL. Cabe aclarar que sólo se realizaron los cálculos por medio de COMSOL, debido a que anteriormente se demostró que los elementos P_m calculados por FEniCS concuerdan aceptablemente con los calculados por COMSOL.

Ahora, si bien es posible observar que ambos enfoques son análogos; el enfoque correspondiente al usar los elementos de la MTD en términos del operador posición tiene mejor estabilidad numérica, debido al comportamiento de la frecuencia en la expresión para la absorción. A pesar de ello, el método seleccionado en este trabajo fue el de elementos matriciales calculados por medio del operador momentum, basándose en el análisis de las propiedades ópticas en la visión de Cardona⁹ y Bastard²², donde se dedujeron los pasos para llegar a dichas ecuaciones expuestas por estos dos autores, y se introdujeron algunas aclaraciones a conceptos tratados de forma diferente en estas referencias (ver anexos).

²² G. BASTARD. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. EDP Sciences, 1992.

4. CAMBIO EN EL ÍNDICE DE REFRACCIÓN

El índice de refracción de un medio es una cantidad que proporciona información sobre cuánto se reduce la velocidad de la onda electromagnética dentro este. Así, este depende de la frecuencia de radiación y además puede cambiar dependiendo de diferentes factores, como por ejemplo la densidad, tal que a mayor densidad mayor es el valor del índice de refracción. Así mismo, como se muestra en los anexos A y B, se tiene que el cambio en el índice de refracción se relaciona con la parte real de la función dieléctrica o permitividad, y proporciona información sobre la propagación de la OEM dentro del material. Entonces, el cambio en el índice de refracción usando las ecuaciones (A. 53) y (B. 21), está dado por:

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \frac{2e^2\hbar^2}{n_r^2\mathcal{U}m^*\varepsilon_0} \sum_i \sum_{f>i} \left(\frac{2}{m^*\hbar\omega_{if}} \right) \frac{|P_{if}|^2}{\omega_{if}^2 - \omega^2} \quad (31)$$

Donde n_r representa el índice de refracción del semiconductor. Así mismo, la anterior ecuación muestra una resonancia a la frecuencia de transición; ya que como es sabido, cuando un material absorbe una OEM usualmente tiende a re-emitir después de un intervalo breve de tiempo, el cual afecta la velocidad aparente de la luz dentro del material; entonces, mientras la frecuencia de la OEM sea cercana a la frecuencia de transición, más largo será este retraso temporal y la velocidad macroscópica aparente será más pequeña, por lo tanto más grande será el índice de refracción.

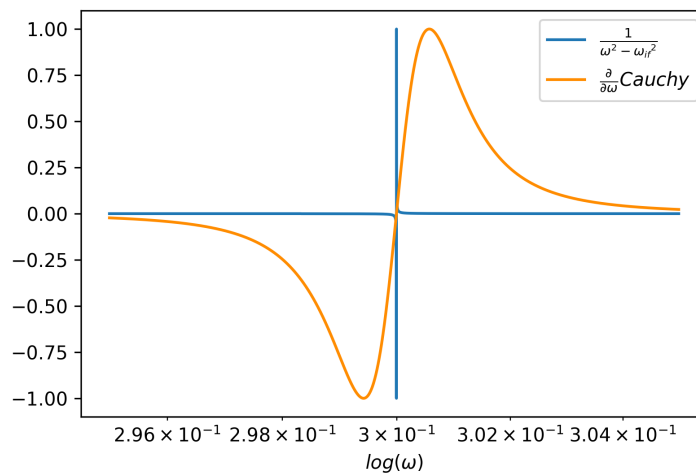
Es así que, al igual que sucedió en el capítulo anterior con el coeficiente de absorción, debido a que en la naturaleza no se observan transiciones puras, y para poder graficar esta cantidad física, es necesario aproximar la singularidad con una función finita que incluya a Γ como parámetro. Por lo tanto, se propone realizar el cambio de

$\frac{1}{\omega_{if}^2 - \omega^2}$ por la derivada de la función de densidad de Cauchy-Lorentz, utilizada en α ; ya que como se puede observar en la figura 15, esta última posee un comportamiento similar al de la función original. Entonces, el cambio del índice de refracción, para un sistema con densidad de portadores no interactuantes $n_e = N_e/\mathcal{U}$, se modela como:

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \frac{2n_e e^2 \hbar^2}{n_r^2 m^* \varepsilon_0} \sum_i \sum_{f>i} \left(\frac{2}{m^* \hbar \omega_{if}} \right) \frac{\Gamma(\omega_{if} - \omega) |P_{if}|^2}{\pi [(\omega_{if} - \omega)^2 + \Gamma^2]^2} \quad (32)$$

Cabe destacar que existen otros modelos, como el del formalismo de la matriz densidad, donde mediante la definición de un operador fenomenológico $\hat{\Gamma}$, cuyos elementos diagonales están dados por el inverso del tiempo de relajación τ , se obtiene de forma natural las expresiones para las propiedades ópticas $\alpha(\omega)$ y $\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}$ que incluyen el ancho de las resonancias.

Figura 15. Comparación de funciones para la definición del cambio en el índice de refracción; resonancia (azul) y derivada de la función de densidad de Cauchy-Lorentz (naranja)



Por otro lado, diferentes estudios teóricos y experimentales se han llevado a cabo sobre el índice de refracción $n(\omega)$ en nanoestructuras. Dentro de los primeros, se tiene el de Nguyen et al., donde estudian el efecto de un campo magnético perpendicular a una monocapa de grafeno, sobre el cambio en el índice de refracción $\Delta n(\omega)/n_r$ y la absorción ²³; el estudio realizado por Movlaroooy et al. del espectro óptico bajo campos eléctricos paralelos y perpendiculares al eje de simetría de un nanotubo de carbón, donde muestran los cálculos por primeros principios para las partes real e imaginaria de la permitividad. ²⁴ Y la investigación de Çakir y colaboradores, sobre el $\Delta n(\omega)/n_r$ asociado a las transiciones intersubbanda en un punto cuántico esférico de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ en presencia de una impureza ²⁵.

Dentro de los segundos, se encuentran por ejemplo la investigación de Jaiswal et al.²⁶, en donde miden las propiedades ópticas de una película delgada de Titanio, como el índice de refracción y el coeficiente de extinción, a varias temperaturas de deposición y post-deposición. Los estudios de Pasanen et al. para estas dos propiedades en el rango del infrarojo cercano, para películas delgadas de perovskitas de haluro de metal²⁷; Y los análisis de Kravets y colaboradores, relacionados con

²³ CHUONG V. NGUYEN y col. "Linear and nonlinear magneto-optical absorption coefficients and refractive index changes in graphene". En: *Optical Materials* 69 (2017), págs. 328-332. DOI: [10.1016/j.optmat.2017.04.053](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.04.053).

²⁴ T. MOVLAROOY y col. "Optical absorption and electron energy loss spectra of single-walled carbon nanotubes". En: *Computational Materials Science* 49.3 (2010), págs. 450-456.

²⁵ B. ÇAKIR, Y. YAKAR y A. ĞZMEN. "Linear and nonlinear refractive index changes in spherical quantum dot". En: *Progress In Electromagnetics Research M* 21 (2011), págs. 77-92.

²⁶ JYOTI JAISWAL y col. "Enhanced Optical Absorption of Ti Thin Film: Coupled Effect of Deposition and Post-deposition Temperatures". En: *JOM* 69.11 (2017), págs. 2383-2389.

²⁷ HANNU P. PASANEN y col. "Refractive index change dominates the transient absorption response of metal halide perovskite thin films in the near infrared". En: *Physical Chemistry Chemical Physics* 21.27 (2019), págs. 14663-14670.

efecto del campo eléctrico sobre las propiedades ópticas de una monocapa del semiconductor disulfuro de molibdeno MoS_2 ²⁸.

De acuerdo con lo anterior y utilizando los resultados de los elementos de la MTD, obtenidos en el capítulo anterior; se muestran los resultados de los cálculos para el cambio en el índice de refracción, en la región del infrarrojo, realizados en COMSOL y FEniCS.

4.1. IMPLEMENTACIÓN EN COMSOL

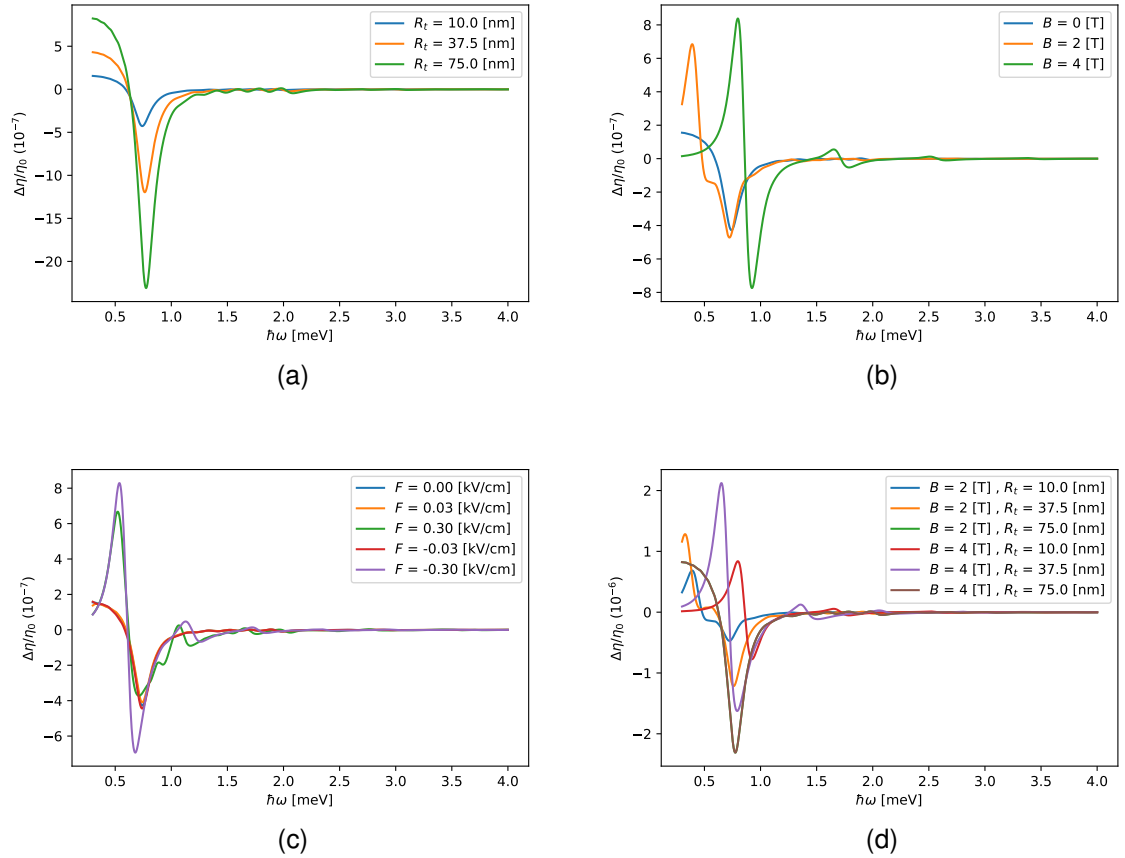
En la figura 16 se muestran los resultados de los cálculos para el cambio en el índice de refracción de un NTC, considerando $N_e = 6 \times 10^3$; para cuatro casos diferentes.

En la figura 16a se estudia el efecto de la conicidad del NTC, dada por el cambio en el radio medio superior R_t del mismo, sobre el cambio del índice de refracción $\Delta n/n_r$ con $\Delta n = n - n_r$, sin campos eléctricos ni magnéticos; donde igualmente al espectro de absorción, la intensidad de esta función de respuesta se reduce cuando la conicidad del nanotubo aumenta.

Respecto al comportamiento del índice de refracción cuando se le aplica un campo magnético uniforme (figura 16b), se tiene un corrimiento hacia el azul, la intensidad de las resonancias aumenta y se observa la aparición de otras de menor magnitud a energías mayores.

²⁸ VASYL G. KRAVETS y col. "Measurements of electrically tunable refractive index of MoS2 monolayer and its usage in optical modulators". En: *npj 2D Materials and Applications* 3.1 (2019).

Figura 16. Cambio en el índice de refracción del NTC respecto a la energía del fotón, para transiciones con $m_l = 0$ y (a) diferentes valores de radios superior R_t con $B = F = 0$, (b) diferentes valores de campo magnético B con $F = 0$ [kV/cm] y $R_t = 10$ [nm], (c) diferentes valores de campo eléctrico F con $B = 0$ [T] y $R_t = 10$ [nm], (d) varios valores de B y R_t con $F = 0$.



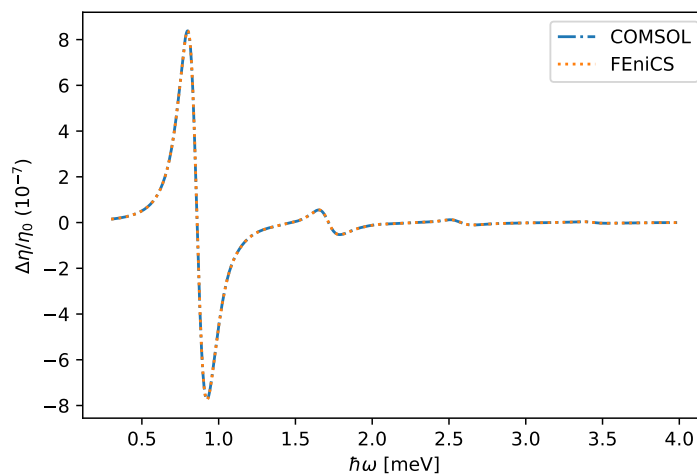
Cuando se introducen únicamente campos eléctricos (figura 16c), se encuentra que el máximo en el cambio del índice de refracción es mayor para el caso de campos en dirección -z en comparación con campos en z. Así mismo, se tiene que a medida que aumenta la magnitud del campo, aparecen oscilaciones en $\Delta n/n_r$ para valores de energías mayores a la primera resonancia, las cuales son de mayor frecuencia para un campo en -z.

Por último, en la figura 16d, se muestra el efecto simultáneo del campo magnético y la conicidad del nanotubo. Al igual que para la absorción, el cambio en el índice de refracción con respecto al campo magnético no se modifica para un nanotubo cilíndrico ($R_t = R_b$), debido a la simetría respecto a z y al hecho de ser un nanotubo muy delgado (5 [nm] con respecto a la altura H de 300 [nm]); sin embargo, para un campo magnético igual a 4[T], al reducir el valor de R_t se muestra una disminución de la magnitud de $\Delta n/n_r$ y un corrimiento al azul de las resonancias.

4.2. IMPLEMENTACIÓN EN FEniCS

Para este caso, se utilizaron los resultados de la MTD obtenidos en el capítulo anterior para la comparación de los software COMSOL Y FEniCS, los cuales se incorporaron en la ecuación (32). De tal forma que, al graficar las curvas de cambio en el índice de refracción para ambos software, se obtuvo la figura 17 en la cual se observa, al igual que en el espectro de absorción, que los resultados no difieren significativamente.

Figura 17. Comparación del cambio en el índice de refracción obtenido por COMSOL y FEniCS para un NTC con radio superior $R_t = 10$ [nm] y parámetros $ml = 0$, $F = 0$ [kV/cm], $B = 4$ [T].



5. CONCLUSIONES

En este trabajo de investigación se calcularon las funciones de respuesta: absorción óptica $\alpha(\omega)$ y cambio en el índice de refracción $\Delta n(\omega)/n_r$, de un nanotubo de Cd-Se en forma de cono truncado, sometido a campos externos eléctrico y magnético uniformes, sobre el cual incide una onda electromagnética polarizada linealmente en z . Lo anterior se realizó mediante el método de elementos finitos (FEM) en un software comercial y posteriormente haciendo uso de un software libre, teniendo en cuenta el modelo semiclásico y la aproximación de masa efectiva. El trabajo fue llevado a cabo considerando tres objetivos de investigación que fueron trazados para su realización, los cuales son:

1. Implementar, con software libre, un “Python Script” que permita paralelizar los procesos de generación de malla y “solver” de un cálculo por el método de elementos finitos.
2. Implementar y validar el cálculo de la absorción óptica y el cambio en el índice de refracción, $\Delta n(\omega)/n_r$.
3. Estudiar el efecto de campos externos uniformes, eléctrico y magnético, en la absorción óptica y el cambio en el índice de refracción.

A continuación se describen las conclusiones más importantes asociadas a cada uno de los objetivos propuestos para esta investigación.

Para la solución del primer objetivo, se realizó una evaluación de diferentes librerías o software para cada una de las partes que componen la estructura de un programa FEM: Modelado del dominio (Herramienta CAD), mallado, solver y visualización.

Esta evaluación se llevó a cabo mediante la aplicación de tres filtros llamados, restricciones, especificaciones y ventajas; que arrojaron como resultado los siguientes software:

- **Herramienta CAD:** Salome / FreeCAD.
- **Mallado:** GMSH.
- **Solver:** FEniCS.
- **Herramienta de visualización:** ParaView / Matplotlib.

Estos resultados se basaron en la investigación bibliográfica y algunas pruebas de las características de cada programa. De igual forma, durante el proceso evaluativo se hizo énfasis en la capacidad de los programas de mallado y solver, para paralelizar los procesos. A partir de esto, se decidió realizar un Python Script utilizando FEniCS como librería de elementos finitos, y en primera instancia la librería estándar de FEniCS “mshr”, para la definición del dominio y el mallado, junto con matplotlib para la visualización. Este script se validó a través de la comparación de resultados para los cálculos de la energía y densidad de probabilidad del nanotubo cónico (NTC), obtenidos por el software comercial COMSOL Multiphysics.

Ahora, con relación al segundo objetivo, se implementó el cálculo de la absorción óptica $\alpha(\omega)$ y el cambio en el índice de refracción $\Delta n(\omega)/n_r$ mediante la obtención de los elementos de la matriz de transición dipolar (MTD) en términos del operador momentum, en COMSOL y luego usando el Python Script. Donde para la validación del FEM, se realizó el cálculo teórico de los elementos de la MTD para un electrón dentro de una caja de potencial bidimensional, el cual posee solución exacta, y se compararon con los obtenidos numéricamente por FEM; dando un error absoluto de un orden de magnitud máximo de 10^{-7} entre los diez primeros autovalores.

De la misma forma, cabe resaltar que las ecuaciones utilizadas para el cálculo de las funciones de respuesta fueron deducidas siguiendo varias referencias consultadas, y cuyo análisis se encuentra en el apartado de anexos.

Posteriormente, con el fin de visualizar las curvas de $\alpha(\omega)$ y $\Delta n(\omega)/n_r$, se necesitó aproximar los términos de singularidad y resonancia presentes en las expresiones de dichas funciones de respuesta, por medio de una distribución de Cauchy-Lorentz y su derivada, respectivamente; se estableció un valor para el ancho medio al máximo medio, $\hbar\Gamma$, de esta distribución haciendo uso del principio de incertidumbre.

Así mismo, se propuso un método que permite visualizar cómo es la contribución de cada elemento de la MTD a dichas funciones de respuesta; este método consistió en realizar gráficas de burbujas, normalmente usadas en analítica de datos, con las cuales se estudió también, el efecto de los parámetros geométricos y de campos externos sobre estas, para con ello realizar un análisis más claro del comportamiento de las funciones $\alpha(\omega)$ y $\Delta n(\omega)/n_r$.

Por último, para el cumplimiento del tercer objetivo, se realizaron gráficas de las funciones de respuesta para diferentes valores de radio superior R_t del nanotubo, campo magnético y campo eléctrico, que corresponden a los utilizados en el trabajo de pregrado. Los resultados muestran que la introducción de los campos genera un incremento en las energías de transición debido al aumento en el confinamiento, ya sea de tipo eléctrico o magnético, de tal forma que a campos mayores comienzan a tomar relevancia transiciones de mayor energía; además, se observó que el efecto principal del campo eléctrico es el de aumentar la magnitud de las resonancias o picos, y el efecto más notorio del campo magnético sobre $\alpha(\omega)$ y $\Delta n(\omega)/n_r$ es el de generar un corrimiento de las resonancias tal que:

Para un campo de 2[T] se tiene un corrimiento hacia el rojo, debido a un aporte considerable de transiciones entre niveles sucesivos superiores ($n, n+1$), gracias a los confinamientos estructural y magnético; y para un campo de 4[T] se obtiene un corrimiento hacia el azul, ya que para este último predomina el confinamiento magnético sobre el estructural, y las energías de transición se hacen uniformes, donde los niveles de energía se asemejan a los de un oscilador armónico cuántico.

Los resultados también muestran la dependencia geométrica del NTC sobre las funciones de respuesta; donde a mayor conicidad, menor es la magnitud de la resonancia. Además, se encontró que $\alpha(\omega)$ y $\Delta n(\omega)/n_r$ no se ven afectadas para un nanotubo cilíndrico cuando se introduce un campo magnético, contrario a lo que sucede para un nanotubo cónico; en contraste con lo anterior, para el caso de la aplicación de un campo eléctrico, los efectos de este y el cambio de conicidad del sistema son independientes entre sí.

BIBLIOGRAFÍA

- ACHTSTEIN, A. W. y col. "Electroabsorption by 0D, 1D, and 2D Nanocrystals: A Comparative Study of CdSe Colloidal Quantum Dots, Nanorods, and Nanoplatelets". En: *ACS Nano* 8.8 (2014), págs. 7678-7686 (vid. pág. 47).
- AMIRTHARAJ, PAUL M. y DAVID G. SEILER. "Handbook of Optics. Devices, measurements and properties". En: ed. por MICHAEL BASS y col. Second, ed. Vol. II. MCGRAW-HILL, INC., 1995. Cap. 36 (vid. pág. 45).
- BAGHRAMYAN, H.M. y col. "Influence of lateral electric field on intraband optical absorption in concentric double quantum rings". En: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 77 (2016), págs. 81-89 (vid. pág. 46).
- BAHAA E. A. SALEH, MALVIN CARL TEICH. *Fundamentals of Photonics*. Second, ed. WILEY, 2007 (vid. págs. 84, 91).
- BASTARD, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. EDP Sciences, 1992 (vid. págs. 68, 98).
- BHAND, GANESH. R. y col. "Optical, structural, and morphological properties of PANI/CdSe TPs nanocomposite thin films". En: *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 28.17 (2017), págs. 12555-12563 (vid. pág. 48).
- ÇAKIR, B., Y. YAKAR y A. ĀZMEN. "Linear and nonlinear refractive index changes in spherical quantum dot". En: *Progress In Electromagnetics Research M* 21 (2011), págs. 77-92 (vid. pág. 71).

- DAVIES, JOHN H. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*. Cambridge University Press, 1997 (vid. pág. 96).
- FORERO, A. M. y col. *Oscilaciones cuánticas en las propiedades electrónicas de un nanotubo cónico*. Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander. 2017 (vid. págs. 16, 18, 20, 22, 24, 50, 58).
- GELLER, MICHAEL R. “Quantum Phenomena in Low-Dimensional Systems”. En: *arXiv* (2001). eprint: [cond-mat/0106256v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0106256v1) (cond-mat.mes-hall) (vid. pág. 17).
- HUMBERT, C. y col. “Linear and nonlinear optical properties of functionalized CdSe quantum dots prepared by plasma sputtering and wet chemistry”. En: *journal of colloid and interface science* 445 (2015), págs. 69-75 (vid. pág. 48).
- IHN, THOMAS. *Semiconductor Nanostructures*. Oxford University Press, 2009. 580 págs. (vid. pág. 17).
- JAISWAL, JYOTI y col. “Enhanced Optical Absorption of Ti Thin Film: Coupled Effect of Deposition and Post-deposition Temperatures”. En: *JOM* 69.11 (2017), págs. 2383-2389 (vid. pág. 71).
- JIN, JIANMING. *The Finite Element Method in Electromagnetics*. Second, ed. Wiley-IEEE Press, 2002 (vid. págs. 23, 36).
- KRAVETS, VASYL G. y col. “Measurements of electrically tunable refractive index of MoS₂ monolayer and its usage in optical modulators”. En: *npj 2D Materials and Applications* 3.1 (2019) (vid. pág. 72).
- MIRANDA, D.A. “Caracterización de las aleaciones cristalinas $Hg_{(1-x)}Cd_xSe$, para $x \leq 0,5$ ”. Tesis doct. Universidad de los Andes (ULA), 2011 (vid. págs. 95, 97).

MITIN, VLADIMIR V., DMITRY I. SEMENTSOV y NIZAMI Z. VAGIDOV. *Quantum Mechanics for Nanostructures*. Cambridge University Press, 2010. 448 págs. (vid. pág. 17).

MOVLAROOY, T. y col. "Optical absorption and electron energy loss spectra of single-walled carbon nanotubes". En: *Computational Materials Science* 49.3 (2010), págs. 450-456 (vid. pág. 71).

NGUYEN, CHUONG V. y col. "Linear and nonlinear magneto-optical absorption coefficients and refractive index changes in graphene". En: *Optical Materials* 69 (2017), págs. 328-332. DOI: [10.1016/j.optmat.2017.04.053](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.04.053) (vid. pág. 71).

OITDA. *Annual Technical Report 2017*. Optoelectronics Industry y Technology Development Association. Mar. de 2018. URL: <http://www.oitda.or.jp/main/ar/atr2017.pdf> (vid. págs. 15, 16).

PASANEN, HANNU P. y col. "Refractive index change dominates the transient absorption response of metal halide perovskite thin films in the near infrared". En: *Physical Chemistry Chemical Physics* 21.27 (2019), págs. 14663-14670 (vid. pág. 71).

SHIK, ALEXANDER. *Quantum Wells: Physics and Electronics of Two-Dimensional Systems*. WORLD SCIENTIFIC PUB CO INC, 11 de ene. de 1998. 104 págs. (vid. pág. 17).

SHU-SHEN, LI y XIA JIAN-BAI. "Intraband optical absorption in semiconductor coupled quantum dots". En: *Physical Review B* 55.23 (1997), págs. 15434-15437 (vid. pág. 56).

SILVESTRE, SANTIAGO. *Optoelectrónica, fotónica y sensores*. En línea. URL: https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/103770/LM14_R_ES.pdf?sequence=1. TechPedia. European Virtual Learning Platform for Electrical and Information Engineering (vid. pág. 15).

TING-KUN, LIU. “R&D Expenditure, Spillovers and Productivity-Empirical Study of Taiwanese Optoelectronic Industry”. En: *Asian Economic and Financial Review* 9.8 (2019), págs. 888-900 (vid. pág. 15).

ULLOA, P., M. PACHECO y A. LATGÉ. “Optical properties of graphene nanocones under electric and magnetic fields”. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.45 (2017), pág. 455304 (vid. pág. 47).

YU, PETER y MANUEL CARDONA. “Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (Graduate Texts in Physics)”. En: Springer, 2010. Cap. 6, págs. 253-276 (vid. págs. 18, 68, 98).

ANEXOS

Anexo A. Absorción de la luz y cambio en el índice de refracción de un medio

Una onda electromagnética (OEM) monocromática está descrita por su frecuencia angular ω , vector de onda \vec{q} , campo eléctrico \vec{F} y campo magnético \vec{B} ; por consiguiente también de un vector potencial \vec{A} . Dicha onda puede propagarse en ausencia (vacío) y presencia de medio material; de tal forma que cuando se propaga en un medio material, los parámetros que la describen se ven afectados por este.

Así, una OEM monocromática que ingresa en un medio material puede ser absorbida o dispersada. En el primer caso, absorción, cambia la magnitud de los campos que definen su función de onda; en el segundo, dispersión, además de la magnitud cambia la dirección de propagación y, para el caso de interacciones inelásticas, su frecuencia.

Ecuaciones de Maxwell para la OEM

Las ecuaciones de Maxwell en ausencia de cargas externas permiten describir los campos eléctricos y magnéticos de la onda en un medio, como sigue:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{D}} = 0 \quad (\text{A. 1})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{A. 2})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{A. 3})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{H}} = \vec{J}_{libre} + \frac{\partial \vec{\mathcal{D}}}{\partial t} \quad (\text{A. 4})$$

Donde $\vec{\mathcal{D}}$ es el vector desplazamiento eléctrico, \vec{F} el campo eléctrico, $\vec{\mathcal{H}}$ el vector

de intensidad de campo magnético y \vec{B} el campo magnético o inducción magnética.

Por otra parte, el medio a considerar, donde la OEM se propaga, posee las siguientes características ²⁹:

- **Lineal**: el vector polarización o densidad volumétrica de momento dipolar eléctrico $\vec{\mathcal{P}}$ está relacionado linealmente con el campo eléctrico \vec{F} , cumpliéndose el principio de superposición.

$$\vec{\mathcal{P}} = \varepsilon_0 \sum_j \chi_{Eij}(\vec{r}, \omega) \vec{F}_j \quad (\text{A. 5})$$

Donde χ_{ij} es el tensor (de segundo orden) de susceptibilidad eléctrica.

- **Isótropo**: en todas las direcciones el comportamiento del medio es el mismo, entonces la relación entre $\vec{\mathcal{P}}$ y \vec{F} es independiente de la dirección de \vec{F} .

$$\vec{\mathcal{P}} = \varepsilon_0 \chi_E(\vec{r}, \omega) \vec{F} \quad (\text{A. 6})$$

De (A. 6), se observa que $\vec{\mathcal{P}}$ y \vec{F} son paralelos.

- **Homogéneo**: si la relación entre $\vec{\mathcal{P}}$ y \vec{F} es independiente de la posición \vec{r} . Es decir, el comportamiento del medio es el mismo en cualquier punto.

$$\vec{\mathcal{P}} = \varepsilon_0 \chi_E(\omega) \vec{F} \quad (\text{A. 7})$$

- **Con pérdidas**: cuando la corriente de conducción no es despreciable. Entonces, si una onda electromagnética se propaga dentro de este tipo de material,

²⁹ MALVIN CARL TEICH BAHAA E. A. SALEH. *Fundamentals of Photonics*. Second, ed. WILEY, 2007.

para el caso de medio homogéneo, se puede aproximar que la densidad de corriente \vec{J}_{libre} es proporcional al campo eléctrico, ley de Ohm, así:

$$\vec{J}_{libre} = \sigma \vec{F} \quad (\text{A. 8})$$

Donde σ es la conductividad del medio.

Se tiene que por la definición de $\vec{\mathcal{D}} = \epsilon_0 \vec{F} + \vec{\mathcal{P}}$ y reemplazando en esta la ecuación (A. 7), la relación entre $\vec{\mathcal{D}}$ y \vec{F} es:

$$\vec{\mathcal{D}} = \epsilon \vec{F} \quad (\text{A. 9})$$

$$\epsilon = \epsilon_0 (1 + \chi_E) \quad (\text{A. 10})$$

Donde ϵ es la permitividad eléctrica o también llamada función dieléctrica. Así mismo, se aplican dichas suposiciones al campo magnético, donde en lugar del vector $\vec{\mathcal{P}}$ ahora se tiene el vector magnetización o densidad volumétrica de momento dipolar magnético \vec{M} y la relación lineal de este está dada con el vector de intensidad de campo magnético así:

$$\vec{M} = \chi_m \vec{\mathcal{H}}. \quad (\text{A. 11})$$

Donde χ_m es la susceptibilidad magnética. Ahora, usando la definición que aparece implícita en las ecuaciones de Maxwell para la materia $\vec{\mathcal{H}} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$ y reemplazando (A. 11) en ella, se tiene que:

$$\vec{B} = \mu \vec{\mathcal{H}} \quad (\text{A. 12})$$

Siendo $\mu = \mu_0 (1 + \chi_m)$ la permeabilidad magnética.

De esta forma, las ecuaciones de Maxwell para una OEM en un medio con carga neta nula, lineal, isótropo, homogéneo, con pérdidas y no magnético ($\mu = \mu_0$), están

dadas por:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0 \quad (\text{A. 13})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{A. 14})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{A. 15})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \sigma \vec{F} + \mu_0 \varepsilon \frac{\partial \vec{F}}{\partial t} \quad (\text{A. 16})$$

Onda Plana

Una onda plana se caracteriza porque el parámetro oscilante asociado a ella es homogéneo en la región definida por un plano. Entonces, para el caso de la descripción del vector potencial magnético de la onda plana monocromática, este sería de la forma:

$$\vec{A} = A \hat{u}_p e^{j(\vec{q} \cdot \vec{r} \pm \omega t)} \quad (\text{A. 17})$$

Donde A es la magnitud del potencial vector en unidades de Vs/m , ω , la frecuencia angular, \vec{q} , el vector de onda, \vec{r} , vector posición, t , el tiempo y u_p , un vector unitario que define la polarización de la onda. Además, el signo " \pm " se utiliza para recordar que la onda electromagnética se puede propagar en los dos posibles sentidos definida una cierta dirección. Las expresiones para los campos eléctricos y magnéticos son:

$$\vec{F} = F_0 \vec{u}_p e^{j(\vec{q} \cdot \vec{r} \pm \omega t)} \quad (\text{A. 18})$$

$$\vec{B} = B_0 \vec{u}'_p e^{j(\vec{q} \cdot \vec{r} \pm \omega t)} \quad (\text{A. 19})$$

Permitividad compleja ε^*

Derivando los campos (A. 18) y (A. 19) respecto al tiempo, e insertando en (A. 15) y (A. 16), se obtienen las siguientes ecuaciones, para el rotacional de F y B respecti-

vamente:

$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = j\omega\vec{B} \quad (\text{A. 20})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = -j\omega\mu_0\varepsilon^*\vec{F} \quad (\text{A. 21})$$

Donde se define la permitividad compleja ε^* como:

$$\varepsilon^* = \varepsilon \left(1 - \frac{j\sigma}{\omega\varepsilon} \right) \quad (\text{A. 22})$$

Y la conductividad compleja σ^* como:

$$\sigma^* = \sigma + j\omega\varepsilon \quad (\text{A. 23})$$

De tal forma que la conductividad compleja σ^* se relaciona con la permitividad compleja ε^* ,

$$\sigma^* = j\omega\varepsilon^* \quad (\text{A. 24})$$

De la ecuación (A. 22), se puede conocer si un medio dado a una frecuencia ω de la OEM incidente, actúa como dieléctrico o conductor. Así:

- **Medio Conductor:** Si domina la corriente de conducción ($J \gg \frac{\partial D}{\partial t} \rightarrow \frac{\sigma}{\omega\varepsilon} \gg 1$).
- **Medio Dieléctrico:** Si domina la corriente de desplazamiento ($\frac{\partial D}{\partial t} \gg J \rightarrow \frac{\sigma}{\omega\varepsilon} \ll 1$).

Índice de refracción complejo n^*

La velocidad con la que se propaga una onda electromagnética dentro de un medio está determinada por la raíz cuadrada del inverso del producto entre la permitividad

compleja ε^* y la permeabilidad magnética μ_0 ,

$$v = \left| \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon^*}} \right|$$

lo cual se puede deducir de las ecuaciones (A. 20) y (A. 21). Dado que la velocidad de la luz está dada por $\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}$, entonces, el índice de refracción complejo será:

$$n^* = c\sqrt{\mu_0 \varepsilon^*} \quad (\text{A. 25})$$

Para ondas electromagnéticas que se propagan en medios, el índice de refracción es una cantidad compleja n^* cuya parte real n_r , comúnmente conocido como índice de refracción, es el cociente entre la velocidad de la luz y la velocidad de la OEM en el medio, y la parte imaginaria κ corresponde con el coeficiente de extinción:

$$n^* = n_r + j\kappa \quad (\text{A. 26})$$

Elevando al cuadrado la ecuación (A. 25) y reemplazando las componentes de estas cantidades complejas,

$$n_r^2 - \kappa^2 + 2jn_r\kappa = \mu_0 c^2 (\varepsilon_r + j\varepsilon_I) \quad (\text{A. 27})$$

Se obtiene que la parte imaginaria de la permitividad ε_I y la parte real de la permitividad eléctrica ε_r están dadas por:

$$\varepsilon_I = \frac{2}{\mu_0 c^2} n_r \kappa \quad (\text{A. 28})$$

$$\varepsilon_r = \frac{n_r^2 - \kappa^2}{\mu_0 c^2} \quad (\text{A. 29})$$

Si se define $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ tal que cumpla la siguiente relación: $\varepsilon_0(\varepsilon_1 + j\varepsilon_2) = \varepsilon_r + j\varepsilon_I$;

Entonces, se tiene que:

$$\varepsilon_1 = n_r^2 - \kappa^2 \quad (\text{A. 30})$$

$$\varepsilon_2 = 2n_r\kappa \quad (\text{A. 31})$$

Relaciones entre \vec{A} , \vec{B} y \vec{F}

De acuerdo a las ecuaciones (A. 18) y (A. 19) y teniendo en cuenta que $\vec{\nabla} \rightarrow j\vec{q}$; (A. 20) y (A. 21) pueden ser expresadas como:

$$\vec{q} \times \vec{F} = \omega \vec{B} \quad (\text{A. 32})$$

$$\vec{q} \times \vec{B} = \omega \mu_0 \varepsilon^* \vec{F} \quad (\text{A. 33})$$

Ahora, nótese que las anteriores ecuaciones implican que,

$$q = \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon^*} \quad (\text{A. 34})$$

Y por lo tanto, según (A. 25), q se puede escribir en términos del índice de refracción complejo n^* :

$$|\vec{q}| = q = \frac{\omega}{c} n^* = \frac{\omega}{c} n_r + j \frac{\omega}{c} \kappa \quad (\text{A. 35})$$

Lo cual quiere decir que, cuando la OEM incide en un medio material, su propagación se ve afectada, de tal forma que parte de la onda es atenuada por el medio. Ya que, la parte real de q está relacionada con la propagación (índice de refracción) y la parte imaginaria con la atenuación de la OEM (coeficiente de extinción).

Siguiendo con lo expresado en (A. 32) y (A. 33), dado que $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, se puede

escribir el potencial vector \vec{A} en términos del campo eléctrico \vec{F} y magnético \vec{B} como:

$$\vec{B} = j\vec{q} \times \vec{A} \quad (\text{A. 36})$$

$$\vec{A} = \frac{1}{j\omega} \vec{F} \quad (\text{A. 37})$$

Vector de Poynting \vec{S} e intensidad I de una onda plana

El vector de Poynting \vec{S} representa el flujo direccional de energía de la onda electromagnética y está dado por:

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{F} \times \vec{B} \quad (\text{A. 38})$$

Usando las ecuaciones (A. 36) y (A. 37), para una onda electromagnética plana se tiene:

$$\vec{S} = \frac{\omega}{\mu_0} A^2 \vec{q} \quad (\text{A. 39})$$

El valor medio del vector de Poynting en un periodo corresponde con la intensidad I de la onda,

$$I = \frac{\omega |\vec{q}|}{2\mu_0} A^2 = \frac{\omega^2 |n^*|}{2\mu_0 c} A^2 \quad (\text{A. 40})$$

Coefficiente de absorción α

Al escribir el potencial vector de una OEM en un medio con pérdidas, usando (A. 35), se tiene:

$$\vec{A} = (A_0 e^{-\frac{\omega}{c} \kappa \hat{u}_q \cdot \vec{r}}) \hat{u}_p e^{j(\frac{\omega}{c} n_r \hat{u}_q \cdot \vec{r} \pm \omega t)} \quad (\text{A. 41})$$

Si la OEM se propaga en dirección paralela al eje x , la anterior ecuación se puede escribir como:

$$\vec{A} = (A_0 e^{-\frac{\omega}{c} \kappa x}) \hat{u}_p e^{j(\frac{\omega}{c} n_r x \pm \omega t)} \quad (\text{A. 42})$$

Nótese que la amplitud del potencial vector \vec{A} de la onda electromagnética es atenuada en un factor $e^{-\frac{\omega}{c} \kappa x}$. La intensidad de la onda electromagnética antes de in-

gresar al medio I_0 y a una distancia x de la frontera del medio, I (ver Figura 18), se relacionan por la ley de Lambert-Beer:

$$I = I_0 e^{-\alpha x} \quad (\text{A. 43})$$

Donde la intensidad I corresponde con el valor medio del vector de Poynting $\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{F} \times \vec{B}$ en un periodo. Como, según (A. 40), $I_0 = \frac{\omega^2 |n^*|^2}{2c\mu} |A_0|^2$ y $|A|^2 = |A_0|^2 e^{-2\frac{\omega}{c}\kappa x}$, entonces al comparar con la ley de Lambert-Beer, se obtiene:

$$\frac{\omega^2 |n^*|^2}{2c\mu} |A_0|^2 e^{-2\frac{\omega}{c}\kappa x} = \frac{\omega^2 |n^*|^2}{2c\mu} |A_0|^2 e^{-\alpha x} \quad (\text{A. 44})$$

De esta forma, el coeficiente de absorción se relaciona con el coeficiente de extinción:

$$\alpha = 2\frac{\omega}{c}\kappa \quad (\text{A. 45})$$

Así, la magnitud del vector de onda q en (A. 35) se expresa como sigue:

$$q = \frac{\omega}{c}n_r + j\frac{\alpha}{2} \quad (\text{A. 46})$$

Relación entre el coeficiente de absorción α y el cambio en el índice de refracción $\Delta n/n_r$ con la función dieléctrica compleja ε^*

Si se tiene un medio no absorbente ($n^* \in \mathbb{R}$) de índice de refracción n_r , el cual sirve como huésped de una suspensión diluida (partículas no interactuantes) de impurezas, caracterizadas por una susceptibilidad $\chi^* = \chi' + j\chi''$, donde $\chi' \ll 1$ y $\chi'' \ll 1$ ²⁹; e incide una OEM, con número de onda dado por la ecuación (A. 34) y (A. 46), tal que:

$$q = \omega\sqrt{\mu_0\tilde{\varepsilon}^*} = \frac{\omega}{c}n + j\frac{\alpha}{2} \quad (\text{A. 47})$$

Donde en este caso, $\tilde{\varepsilon}^*$, n y $\tilde{\alpha}$ corresponden a la función dieléctrica compleja, el

índice de refracción y el coeficiente de absorción del sistema medio + partículas diluídas, respectivamente.

Entonces, siguiendo con (A. 10) y recordando que se está considerando un medio lineal, $\tilde{\varepsilon}^* = \varepsilon_0 (1 + \chi_M + \chi' + j\chi'')$, con χ_M como la susceptibilidad del medio; se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}\sqrt{1 + \chi_M + \chi' + j\chi''} &= n + j\frac{c}{\omega} \frac{\alpha}{2} \\ \sqrt{1 + \chi_M} \sqrt{1 + \frac{\chi' + j\chi''}{1 + \chi_M}} &= n + j\frac{c}{\omega} \frac{\alpha}{2}\end{aligned}$$

Ahora, por (A. 30) se encuentra el índice de refracción del medio, el cual es: $n_r = \sqrt{1 + \chi_M}$; por lo tanto:

$$n_r \sqrt{1 + \frac{\chi' + j\chi''}{n_r^2}} \approx n + j\frac{c}{\omega} \frac{\alpha}{2} \quad (\text{A. 48})$$

Usando las condiciones mencionadas anteriormente para la susceptibilidad de las partículas diluídas ($\chi' \ll 1$ y $\chi'' \ll 1$), se puede aproximar (A. 48) así:

$$n_r \left(1 + \frac{\chi' + j\chi''}{2n_r^2} \right) \approx n + j\frac{c}{\omega} \frac{\alpha}{2} \quad (\text{A. 49})$$

Ahora, separando la parte real de la parte imaginaria y definiendo $\Delta n = n - n_r$, se tiene que el coeficiente de absorción óptica y el cambio en el índice de refracción, del medio con las partículas diluídas, están dados respectivamente por:

$$\alpha = \frac{\omega \chi''}{c n_r} \quad (\text{A. 50})$$

$$\frac{\Delta n}{n_r} = \frac{\chi'}{2n_r^2} \quad (\text{A. 51})$$

Finalmente, reemplazando las partes real e imaginaria de la susceptibilidad eléctri-

ca, por las de la función dieléctrica compleja ε^* y recordando, como se observa al inicio del anexo, que estas cantidades son función de la frecuencia de la OEM, se obtiene:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{cn_r} \varepsilon_2(\omega) \quad (\text{A. 52})$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \frac{1}{2n_r^2} [\varepsilon_1(\omega) - 1] \quad (\text{A. 53})$$

Donde $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_1(\omega)$ y $\varepsilon_I(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_2(\omega)$.

Anexo B. Teoría semiclásica de la función dieléctrica

A continuación se estudiará la interacción de la radiación electromagnética con los electrones dentro de un cristal, haciendo uso de la aproximación semiclásica; es decir, la radiación se considera clásicamente como onda y los electrones como partículas cuánticas.

Características de la OEM

Sea una OEM descrita por el potencial vectorial $\vec{A}(\vec{r}, t)$ y el potencial escalar $\phi(\vec{r}, t)$, que incide sobre un cristal semiconductor; sus campos eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y magnético $\vec{B}(\vec{r}, t)$ estarán determinados por la siguiente ecuación:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (\text{B. 1})$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (\text{B. 2})$$

Donde se ha considerado el gauge de Coulomb cuando no hay fuentes presentes, $\phi(\vec{r}, t) = 0$ y $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Así, escribiendo el potencial vectorial como $\vec{A} = |\vec{A}| \hat{u}_p$, en términos del campo eléctrico incidente, se tiene que:

$$|\vec{A}| = -\frac{F_0}{2|\vec{k}|} \left[e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + e^{-j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (\text{B. 3})$$

Siendo F_0 la amplitud del campo eléctrico, \vec{k} el vector de onda y ω la frecuencia angular.

Características del semiconductor

Gracias a las condiciones de simetría de un cristal y bajo ciertas aproximaciones como la de Born-Oppenheimer y la aproximación de campo promedio, es posible simplificar el Hamiltoniano de un cristal al de un sólo electrón; el cual supone que cada electrón se mueve en un potencial promedio, $V_e(\vec{r})$, formado por los demás electrones y el núcleo,³⁰ así:

$$H_{1e} = \frac{p^2}{2m} + V_e(\vec{r}) \quad (\text{B. 4})$$

$$H_{1e} \Psi_{nk}(\vec{r}_l) = E_{nk} \Psi_{nk}(\vec{r}_l) \quad (\text{B. 5})$$

Donde la ecuación (B. 5), corresponde a la ecuación de Schrödinger para un electrón, con la función de onda de Bloch $\Psi_{nk}(\vec{r}_l)$.

Por otro lado, también se puede tener en cuenta que para resolver el problema de un electrón dentro de un semiconductor con dimensiones finitas, es posible considerar al electrón que está en la banda de conducción (para el caso de este trabajo), como si se comportara como partícula libre (o cuasi libre), pero ahora con una masa diferente, a la cual se le denomina masa efectiva m^* . En general, esta masa está relacionada con la curvatura de la banda de conducción y está dada por la ecuación:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_c(k)}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (\text{B. 6})$$

En donde $E_c(k)$ es la energía de la banda de conducción y k el número de onda. Así

³⁰ D.A. MIRANDA. "Caracterización de las aleaciones cristalinas $Hg_{(1-x)}Cd_xSe$, para $x \leq 0,5$ ". Tesis doct. Universidad de los Andes (ULA), 2011.

mismo, es posible aproximar la función $E_c(k)$ que define la banda de conducción, a una función cuadrática por medio de la expansión en series de Taylor; tal que, en este enfoque de aproximación de masa efectiva, se puede decir que la estructura de bandas del semiconductor es parcialmente ignorada, reteniendo sólo el valor de la masa efectiva en el extremo de la banda³¹. De esta forma, el hamiltoniano del electrón dentro de un semiconductor queda determinado por:

$$H_e = \frac{p^2}{2m^*} + V(\vec{r}) \quad (\text{B. 7})$$

En donde $V(\vec{r})$ es una perturbación introducida al cristal semiconductor, que puede ser un pozo cuántico, una barrera, una impureza, etc.

Interacción de la OEM con el semiconductor

Teniendo en cuenta el principio de correspondencia, se escribe el Hamiltoniano para la descripción de la interacción entre la OEM dada por (B. 1-B. 3) y un electrón dentro de un semiconductor, como:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left| \vec{p} + e\vec{A} \right|^2 + V(\vec{r}) \quad (\text{B. 8})$$

Luego, utilizando la expresión para el gauge de Coulomb $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ y teniendo en cuenta que el momentum $\vec{p} = -i\hbar\nabla$, entonces se reescribe la anterior ecuación así:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{e}{m^*} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2m^*} A^2 + V(\vec{r}) \quad (\text{B. 9})$$

Despreciando el término cuadrático en \vec{A} , para calcular las propiedades ópticas li-

³¹ JOHN H. DAVIES. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*. Cambridge University Press, 1997.

neales, y de (B. 7) se tiene que:

$$H = H_e + \frac{e}{m^*} \vec{A} \cdot \vec{p} = H_e + H_{eR} \quad (\text{B. 10})$$

Siendo H_{eR} el hamiltoniano de interacción electrón-radiación. Por su parte, la aproximación más simple para calcular la función dieléctrica a partir de H_{eR} , es aquella en la que se supone que \vec{A} es lo suficientemente pequeño tal que el hamiltoniano de interacción introduzca correcciones de energía menores en comparación con los autovalores del hamiltoniano sin perturbar, y de este modo se pueda aplicar la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo, en la forma de la regla de oro de fermi³⁰, que proporciona la probabilidad de transición de un estado inicial $|i\rangle$ a un estado final $|f\rangle$ por unidad de tiempo y está dada por:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{eR} | i \rangle|^2 n(E) \quad (\text{B. 11})$$

Donde $n(E)$ corresponde a la densidad de estados finales (la cantidad de estados por unidad de energía).

Probabilidad de transición por unidad de tiempo $R(\hbar\omega)$

Cuando la onda electromagnética incide sobre el sistema donde se encuentra confinado el electrón, este podrá absorber una cierta energía asociada con $\hat{H}_{eR} = \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{p}$, la cual producirá que el electrón pase de un cierto estado $|i\rangle$ a otro $|f\rangle$. Las transiciones solo podrán ocurrir para las diferencias de energía permitidas, las cuales están dadas por $\Delta E_{if} = E_f - E_i$. Como existen varios estados probables para las transiciones, dados por la densidad de estados $n(E) = \frac{dN}{dE}$, donde N es el número de partículas, será necesario considerar todas las transiciones probables para una cierta diferencia de energía E_{if} . La estimación de la probabilidad de transición por unidad de tiempo asociada al operador \hat{H}_{eR} se puede describir por medio de la re-

gla de oro de Fermi, como fue dicho en la ecuación (B. 11). Luego, la probabilidad de transición dipolar eléctrica por unidad de tiempo para la absorción (se ha utilizado la exponencial compleja positiva en i de la ecuación (B. 3), pues su compleja conjugada describe un proceso de emisión estimulada⁹), está dada por ²²:

$$R(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \sum_{f>i} \left| \langle f | \hat{H}_{eR} | i \rangle \right|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (\text{B. 12})$$

Donde $R(\hbar\omega)$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo y se asume que a pesar de estar en la aproximación semiclásica, la energía de la onda electromagnética se absorbe en energías cuantizadas $\hbar\omega$, es decir, fotones; en otras palabras, se absorbe energía de la OEM cuando se cumple que $\Delta E_{if} = \hbar\omega$. Note que $\delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega)$ tiene unidad de inverso de energía.

Considerando ahora la aproximación dipolar, en la cual se considera que el vector de onda \vec{k} de la radiación incidente es pequeño, comparado con el vector de onda de la red cristalina, y por tal motivo, su variación no es significativa dentro de un número finito de celdas del cristal, siendo así que $\vec{A} = A\hat{u}_p \approx -\frac{F_0}{2|k|}\hat{u}_p e^{-j\omega t}$ y por tanto $\hat{H}_{eR} = \frac{e}{m^*}\vec{A} \cdot \vec{p} = -j\hbar A \frac{e}{m^*}(\hat{u}_p \cdot \vec{\nabla})$ y $\left| \langle f | \hat{H}_{eR} | i \rangle \right|^2 \approx \left(\frac{e\hbar A}{m^*} \right)^2 \left| \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle \right|^2$; se puede definir $\rho(\omega)$ como:

$$\rho(\omega) = \sum_i \sum_{f>i} \left| \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle \right|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (\text{B. 13})$$

Entonces,

$$R(\hbar\omega) = 2\pi\hbar A^2 \left(\frac{e}{m^*} \right)^2 \rho(\omega) \quad (\text{B. 14})$$

Note que las unidades de $R(\hbar\omega)$ son de inverso del tiempo (s^{-1}).

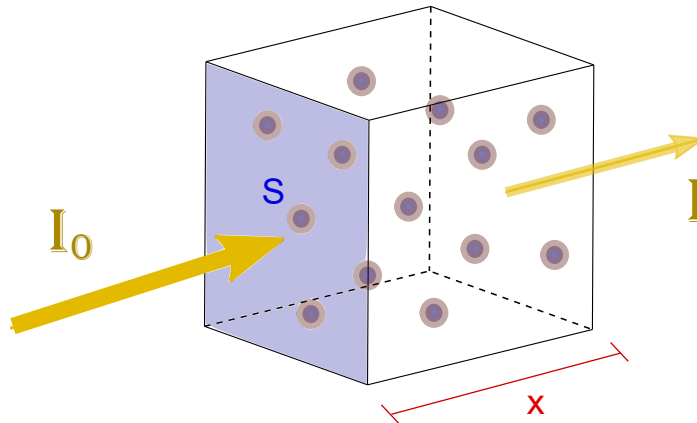
Pérdida de potencia por unidad de volumen

La pérdida de potencia de una onda electromagnética que se desplaza a una velocidad v y atraviesa un cierto volumen \mathcal{V} en un intervalo de tiempo Δt (ver Figura 18), está dada por la variación de su intensidad,

$$-S\Delta I = -\Delta I \frac{\mathcal{V}}{v\Delta t} = -\frac{dI}{dt} \Delta t \frac{\mathcal{V}}{v\Delta t} \quad (\text{B. 15})$$

donde $S = \frac{\mathcal{V}}{x} = \frac{\mathcal{V}}{v\Delta t}$ es el área del frente de onda con intensidad I . Asumiendo que

Figura 18. Disminución de la intensidad de una OEM al interactuar con un material (semiconductor + partículas diluidas) de volumen $\mathcal{V} = Sx$ (Ley de Lambert-Beer).



se puede aplicar el principio de igual probabilidad a priori; entonces, todas las transiciones posibles tendrán la misma probabilidad, por lo tanto, la pérdida de energía de la onda se puede aproximar con $\hbar\omega$ veces la probabilidad de transición por unidad de tiempo $R(\hbar\omega)$, es decir:

$$-\frac{dI}{dt} \cong \frac{v}{\mathcal{V}} \hbar\omega R = \frac{v}{\mathcal{V}} \hbar\omega R \quad (\text{B. 16})$$

Función dieléctrica

Aplicando la regla de la cadena a la variación de la Intensidad respecto al tiempo,

$$\frac{dI}{dt} = \frac{dI}{dx}v$$

Y por la ley de Lambert-Beer (A. 43),

$$-\frac{dI}{dt} = \alpha vI$$

Se tiene que, usando (A. 40), (B. 16) y (B. 14), la absorción está dada por:

$$\alpha = 4\pi\hbar^2 \frac{\mu_0 c}{\omega |n^*|^2 \mathcal{U}} \left(\frac{e}{m^*} \right)^2 \rho(\omega) \quad (\text{B. 17})$$

Por último, comparando lo anterior con (A. 52), haciendo $|n^*| = n_r$; la parte imaginaria de la función dieléctrica $\varepsilon_I(\omega)$ queda totalmente determinada:

$$\varepsilon_I(\omega) = \frac{4\pi}{\mathcal{U}} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \frac{\rho(\omega)}{\omega^2} \quad (\text{B. 18})$$

Donde, si se reemplaza (B. 13) en la anterior ecuación y se hace $P_{if} = \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle$, se obtiene explícitamente la parte imaginaria de la función dieléctrica:

$$\varepsilon_I(\omega) = \frac{4\pi}{\mathcal{U}} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \frac{1}{\omega^2} \sum_i \sum_{f>i} |P_{if}|^2 \delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega) \quad (\text{B. 19})$$

Por otra parte, usando la relación de Kramers-Kronig para hallar la parte real de la función dieléctrica:

$$\frac{\varepsilon_r(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 = \frac{2}{\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\frac{\varepsilon_r(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 = \frac{2}{\pi\varepsilon_0} \left[\frac{4\pi}{\mathcal{U}} \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right)^2 \right] \sum_i \sum_{f>i} |P_{if}|^2 \int_0^\infty \frac{\delta(\Delta E_{if} - \hbar\omega')}{\omega' (\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \quad (\text{B. 20})$$

Finalmente, resolviendo la integral se tiene que:

$$\frac{\varepsilon_r(\omega)}{\varepsilon_0} - 1 = \frac{4e^2\hbar^2}{\mathcal{U}m^*\varepsilon_0} \sum_i \sum_{f>i} \left(\frac{2}{m^*\hbar\omega_{if}} \right) \frac{|P_{if}|^2}{\omega_{if}^2 - \omega^2} \quad (\text{B. 21})$$

Anexo C. Electrón en una caja de potencial bidimensional

Descripción del sistema

Sea un electrón confinado en una caja bidimensional de lados L_x y L_y , con barreras de potencial infinitas ($V(x, y) = \infty$ fuera de la caja), y potencial $V(x, y) = 0$ dentro de la caja. Tal que, la ecuación de Schrödinger que describe el sistema es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi_{n_x n_y}(x, y) = E \Psi_{n_x n_y}(x, y) \quad (\text{C. 1})$$

Donde la función de onda asociada al electrón cumple con las condiciones de frontera de Dirichlet $\Psi_{n_x n_y}(x, y)|_{d\Omega} = 0$ y está dada por:

$$\Psi_{n_x n_y}(x, y) = \varphi_{n_x}(x) \vartheta_{n_y}(y) \quad (\text{C. 2})$$

Siendo,

$$\varphi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \text{sen} \left(\frac{n_x \pi}{L_x} x \right) \quad (\text{C. 3})$$

$$\vartheta_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \text{sen} \left(\frac{n_y \pi}{L_y} y \right) \quad (\text{C. 4})$$

Así mismo, como parte de la solución de (C. 1), se obtiene que la energía está determinada por los dos números cuánticos n_x y n_y , como sigue:

$$E_{n_x n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \quad (\text{C. 5})$$

Elementos matriciales

Sea una OEM plana monocromática, de frecuencia angular ω , que atraviesa el sistema anterior con una dirección de propagación paralela al eje z , y polarizada en

una cierta dirección \hat{u}_p :

$$\hat{u}_p = \cos\theta\hat{i} + \text{sen}\theta\hat{j} \quad (\text{C. 6})$$

Para calcular el coeficiente de absorción α , es necesario determinar los elementos matriciales $P_{if} = \langle f | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | i \rangle$ con los cuales se define $\rho(\omega)$ (B. 13). Donde, usando la ecuación (C. 6) en la definición de los elementos matriciales P_{if} , se obtiene:

$$P_{if} = P_{n_x n_y, n'_x n'_y} = \iint \varphi^*_{n'_x}(x) \vartheta^*_{n'_y}(y) \left(\cos\theta \frac{\partial}{\partial x} + \text{sen}\theta \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi_{n_x}(x) \vartheta_{n_y}(y) dx dy \quad (\text{C. 7})$$

$$\begin{aligned} P_{if} = & \cos\theta \int_0^{L_x} \varphi^*_{n'_x}(x) \frac{d\varphi_{n_x}(x)}{dx} dx \int_0^{L_y} \vartheta^*_{n'_y}(y) \vartheta_{n_y}(y) dy + \\ & + \text{sen}\theta \int_0^{L_y} \vartheta^*_{n'_y}(y) \frac{d\vartheta_{n_y}(y)}{dy} dy \int_0^{L_x} \varphi^*_{n'_x}(x) \varphi_{n_x}(x) dx \end{aligned} \quad (\text{C. 8})$$

Al reemplazar (C. 3) y (C. 4) en la anterior ecuación, y realizar las derivadas se obtiene,

$$\begin{aligned} P_{if} = & \frac{4\cos\theta}{L_x L_y} \left[\frac{n_x \pi}{L_x} \int_0^{L_x} \text{sen} \left(\frac{n'_x \pi x}{L_x} \right) \cos \left(\frac{n_x \pi x}{L_x} \right) dx \right] \int_0^{L_y} \text{sen} \left(\frac{n'_y \pi y}{L_y} \right) \text{sen} \left(\frac{n_y \pi y}{L_y} \right) dy + \\ & + \frac{4\text{sen}\theta}{L_x L_y} \left[\frac{n_y \pi}{L_y} \int_0^{L_y} \text{sen} \left(\frac{n'_y \pi y}{L_y} \right) \cos \left(\frac{n_y \pi y}{L_y} \right) dy \right] \int_0^{L_x} \text{sen} \left(\frac{n'_x \pi x}{L_x} \right) \text{sen} \left(\frac{n_x \pi x}{L_x} \right) dx \end{aligned} \quad (\text{C. 9})$$

Nótese que hay dos tipos de integrales, las cuales corresponden a,

$$\int_0^L \text{sen} \left(\frac{n' \pi}{L} \chi \right) \text{sen} \left(\frac{n \pi}{L} \chi \right) d\chi = \frac{L}{2} \delta_{n', n} \quad (\text{C. 10})$$

$$\frac{n \pi}{L} \int_0^L \text{sen} \left(\frac{n' \pi}{L} \chi \right) \cos \left(\frac{n \pi}{L} \chi \right) d\chi = \frac{2nn'}{n'^2 - n^2} \quad (\text{C. 11})$$

Donde, la ecuación (C. 11) se cumple si y solo si, $n' \neq n$ y $n' \pm n \rightarrow \text{impar}$.

$$P_{if} = \langle n'_x n'_y | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | n_x n_y \rangle = \frac{2\cos(\theta)}{L_x} \left(\frac{2n_x n'_x}{n'^2_x - n_x^2} \right) \delta_{n'_y, n_y} + \frac{2\sin(\theta)}{L_y} \left(\frac{2n_y n'_y}{n'^2_y - n_y^2} \right) \delta_{n'_x, n_x} \quad (\text{C. 12})$$

De esta manera, ρ está dado por,

$$\rho(\omega) = \sum_{n_x, n_y} \sum_{(n'_x, n'_y) > (n_x, n_y)} \left| \langle n'_x n'_y | \hat{u}_p \cdot \vec{\nabla} | n_x n_y \rangle \right|^2 \delta(E_{n'_x, n'_y} - E_{n_x, n_y} - \hbar\omega) \quad (\text{C. 13})$$

Reglas de Selección

Para calcular el coeficiente de absorción α es necesario determinar los valores diferentes de cero en la sumatoria que define $\rho(\omega)$. Los valores permitidos para ω son aquellos donde $\Delta E = \hbar\omega$, siendo,

$$\Delta E = E_{n'_x, n'_y} - E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n'^2_x - n_x^2}{L_x^2} + \frac{n'^2_y - n_y^2}{L_y^2} \right) \quad (\text{C. 14})$$

Los términos diferentes de cero en la sumatoria cumplen con las siguientes propiedades:

- Solo son diferente de cero los números cuánticos $(n'_i + n_i)$ impares y los $(n'_i - n_i)$ impares.
- Contribución de la componente en x de la onda electromagnética, $\cos(\theta)$:
Solo contribuyen los estados $n'_y = n_y$.
- Contribución de la componente en y de la onda electromagnética, $\sin(\theta)$:
Solo contribuyen los estados $n'_x = n_x$.

Onda polarizada en $\theta = 0$

Al tomar $\theta = 0$ se obtiene:

$$\Delta E_{n'_x, n_x} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n'^2_x - n^2_x}{L_x^2} \right) \quad (\text{C. 15})$$

En el caso de ρ ,

$$\rho(\omega) = \delta_{n'_y, n_y} \sum_{n_x} \sum_{n'_x > n_x} \frac{4}{L_x^2} \left(\frac{2n_x n'_x}{n'^2_x - n_x^2} \right)^2 \delta \left(\Delta E_{n'_x, n_x} - \hbar\omega \right) \quad (\text{C. 16})$$

Dado que solo los valores impares son permitidos, se pueden definir unas nuevas variables l_1 y l_2 que solo toman valores impares,

$$n'_x + n_x = 2l_1 + 1$$

$$n'_x - n_x = 2l_2 + 1$$

Entonces,

$$\Delta E_{l_2, l_1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_x^2} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \quad (\text{C. 17})$$

Además, si se tiene en cuenta que cada transición se observa como un pico con un cierto ancho $\hbar\Gamma$, se puede aproximar $\delta \left(\Delta E_{n'_x, n_x} - \hbar\omega \right)$ con una distribución de Cauchy, también conocida como lorentziana o distribución de Cauchy-Lorentz,

$$\mathcal{L}_{l_1, l_2}(\omega; \Gamma) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma}{(\hbar\omega - \Delta E_{l_2, l_1})^2 + (\hbar\Gamma)^2} \quad (\text{C. 18})$$

De esta manera, ρ se puede reescribir en términos de las nuevas variables así,

$$\rho(\omega) = \sum_{l_1} \sum_{l_2 > 0}^{l_1-1} 4 \left(\frac{l_1 - l_2}{L_x} \right)^2 \left[\frac{1}{2l_1 + 1} + \frac{1}{2l_2 + 1} \right]^2 \mathcal{L}_{l_1, l_2}(\omega; \Gamma) \quad (\text{C. 19})$$

Anexo D. Adimensionalización de la ecuación diferencial

La ecuación a resolver es:

$$\nabla \cdot (c\nabla u) + \vec{\beta} \cdot \nabla u + \eta u = Eu \quad (\text{D. 1})$$

Donde $u = \chi(r, z)$, $\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z}$ y:

$$c = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \quad (\text{D. 2})$$

$$\vec{\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\hat{u}_r}{r} \quad (\text{D. 3})$$

$$\eta = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{m_l^2}{r^2} + \frac{e\hbar}{2m^*} m_l B + \frac{e^2 r^2}{8m^*} B^2 + eFz + V \quad (\text{D. 4})$$

Ahora, definiendo los parámetros dimensionales en función de los adimensionales:

$$\begin{cases} z = a_0 \tilde{z} \\ r = a_0 \tilde{r} \\ E = E_0 \tilde{E} \\ V = E_0 \tilde{V} \end{cases} \quad (\text{D. 5})$$

En los cuales, $a_0 = 1 \times 10^{-9} [m]$, $E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^2}$ y en consecuencia $\nabla = \frac{1}{a_0} \tilde{\nabla}$.

Entonces, la ecuación adimensionalizada será:

$$\tilde{\nabla} \cdot (E_0 \tilde{\nabla} u) - \frac{a_0 E_0}{\tilde{r}} \frac{\partial u}{\partial \tilde{r}} + \left(\frac{E_0 m_l^2}{\tilde{r}^2} + \frac{e\hbar}{2m^*} m_l B + \frac{e^2 B^2}{8m^*} a_0 \tilde{r}^2 + eF a_0 z + E_0 \tilde{V} \right) u = E_0 \tilde{E} u \quad (\text{D. 6})$$

Pero, $m^* = m_e m_{eff}$ con $m_{eff} = m_{eff}(\tilde{r}, \tilde{z}) = \frac{1}{g_{eff}}$ y $E_0 = \epsilon g_{eff}$ con $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$; por lo

tanto, la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{1}{g_{eff}} \tilde{\nabla} \cdot (g_{eff} \tilde{\nabla} u) - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial u}{\partial \tilde{r}} + \left(\frac{m_l^2}{\tilde{r}^2} + \frac{ea_0^2}{\hbar} m_l B + \frac{a_0^4 e^2}{4\hbar^2} B^2 \tilde{r}^2 + \frac{2em_e a_0^3}{g_{eff} \hbar^2} F \tilde{z} + \tilde{V} \right) u = \tilde{E} u \quad (\text{D. 7})$$

Anexo E. Programa FEM en FEniCS

Montaje de Google Drive en servidor de Google Colab

```
try:
    from google.colab import drive
    drive.mount('/content/drive')
    basePath = '/content/drive/My_Drive/Colab_AnaForero'
    %cd $basePath
except:
    pass
```

FEniCS con Google Colab

```
import platform, sys
python_version=platform.python_version()
from distutils.version import LooseVersion, StrictVersion

if ( LooseVersion(python_version) < LooseVersion("3.0.0")):
    print("Python3 is needed!");
    print("How to fix: Runtime/Change_runtime_type/Python3");
    sys.exit()

try:
    from mshr import *
except:
    try:
        !conda install mshr
    except:
```

```

        pass

try:
    from dolfin import *; from mshr import *
except ImportError as e:
    !apt-get install -y -qq software-properties-common python-software-
        ↪ properties module-init-tools
    !add-apt-repository -y ppa:fenics-packages/fenics
    !apt-get update -qq
    !apt install -y --no-install-recommends fenics
    from dolfin import *; from mshr import *

import matplotlib.pyplot as plt;
from IPython.display import clear_output, display; import time; import dolfin.
    ↪ common.plotting as fenicsplot
import time

import os, sys, shutil

dolfin_version = dolfin.__version__
print ('dolfin_version:', dolfin_version)

```

Objeto nanoFEniCS

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Mon Oct 28 16:32:00 2019

@author: David A. Miranda and Ana M. Forero
"""

from __future__ import print_function
from fenics import *
from mshr import *
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import constants as cte

import numpy as np
import pandas as pd

import os

class nanoFEniCS():
    def __init__(self, R_t, ml, B, F):
        self.set_parameters(R_t, ml, B, F)

    def set_parameters(self, R_t, ml, B, F, m_eff=Constant(0.13), Potential=
        ↪ Expression('0.0',degree=1), R_b=75, w=5, H=300):
        #Input parameters
        self.ml = ml #Magnetic Quantum number
        self.B = B #Magnetic Field
```

```

self.F    = F #Electric Field
self.meff = m_eff #Adimensional effective mass function
self.Pot  = Potential #Potential
self.R_t  = R_t # nm
self.R_b  = R_b # nm
self.w    = w # nm
self.H    = H # nm

#Mesh parameters

domain_vertices = [Point(R_b - w/2, 0),
                   Point(R_b + w/2, 0),
                   Point(R_t + w/2, H),
                   Point(R_t - w/2, H)]

#Dimensional parameters
a0 = 1e-9 #m
me = cte.m_e #kg
Ry = (cte.hbar**2)/(2*me*m_eff*a0**2) #J
self.Ry_eV = Ry/cte.e #eV

#Dimensional PDE definition parameters "constants"
gamma = (a0**2)*B*cte.e/cte.hbar
alpha = 2*me*(a0**3)*cte.e*F/(cte.hbar**2)

#Create mesh and define function space
domain = Polygon(domain_vertices)
mesh = generate_mesh(domain, 30)
mesh = refine(mesh)

```

```

self.V = FunctionSpace(mesh, 'Lagrange', 3)

#Define boundary
def boundary(x, on_boundary):
    return on_boundary

#Apply essential boundary conditions
bc = DirichletBC(self.V,0.0, boundary)

#Define functions
u = TrialFunction(self.V)
v = TestFunction(self.V)

#Define expressions
degree = self.V.ufl_element().degree()
c_2 = Expression('-1/x[0]', degree=degree)
c_3 = Expression('(pow(ml,2)/pow(x[0],2))+ga*ml+(pow(ga,2)*pow(x
↪ [0],2)/4)+al*x[1]*m',
    degree = degree,
    ml=ml,
    m=m_eff,
    ga=gamma,
    al=alpha)

#Define variational problem
a = (inner(grad(u), grad(v)) + c_2*Dx(u,0)*v + c_3*u*v)*dx
m = u*v*dx

# COMPUTE SOLUTION

```

```

#Assemble stiffness matrix
A = PETScMatrix()
assemble(a, tensor=A)
M = PETScMatrix()
assemble(m, tensor=M)
bc.apply(A)
bc.apply(M)

self.A = A
self.M = M

def solve(self, num_eigenvalues = 4, solver='arpack', spectrum='smallest_
↳ magnitude', tolerance=1e-15, maximum_iterations=10000):
#Create eigensolver
eigensolver = SLEPcEigenSolver(self.A,self.M)
eigensolver.parameters['spectrum'] = spectrum #'smallest magnitude' #'
↳ smallest real'
eigensolver.parameters['solver'] = solver
eigensolver.parameters['tolerance'] = tolerance
eigensolver.parameters['maximum_iterations'] = maximum_iterations

#Solve for eigenvalues
eigensolver.solve(num_eigenvalues)
nconv = eigensolver.get_number_converged()
print('Se calcularon %d autovalores de %d:' % (nconv,
↳ num_eigenvalues))

self.num_eigenvalues = min([num_eigenvalues, nconv])

```

```

self.solution = eigensolver

def get_data(self, n = np.Inf, plot_figures=True, save_figures=True, dpi
↳ =200, hspace=0.5, wspace=0.1, base_path='prob_density_plots'):

    if not os.path.exists('outputs/'+base_path):
        os.makedirs('outputs/'+base_path)
    num_eigenvalues = n
    if n == np.Inf or n > self.num_eigenvalues:
        num_eigenvalues = self.num_eigenvalues
    if n < 0:
        print('Error! n must be greater than zero.')

    #plt.figure(dpi=dpi)
    #n1 = np.int16(np.sqrt(num_eigenvalues))
    #n2 = num_eigenvalues - n1

    data = {
        'm1' : [],
        'B' : [],
        'F' : [],
        'n' : [],
        'R_t': [],
        'R_b': [],
        'H' : [],
        'w' : [],
        'Energy [meV]': []
    }

```

```

def set_xlabel_to_nm(fontsize=12, intercale=False):
    locs, labels = plt.xticks()
    if intercale:
        locs = [locs[2*k] for k in range(np.int16(len(locs)/2)-4)]
    plt.xticks(locs, ['%0.0f' % (d) for d in locs], fontsize=8)

def set_ylabel_to_nm(fontsize=12, intercale=True):
    locs, labels = plt.yticks()
    plt.yticks(locs, ['%0.0f' % (d) for d in locs], fontsize=8)

def set_labels_and_save(plot_figures=plot_figures, save_figures=
    ↪ save_figures, base_path=base_path):
    set_xlabel_to_nm()
    set_ylabel_to_nm()
    plt.title(r'$E_{\square} = \square \%0.2f_{meV}$' % (n+1, 1000*self.Ry_eV*r), y
        ↪ =1.15)
    plt.xlabel('r_{\square}[nm]')
    plt.ylabel('H_{\square}[nm]')
    plt.set_cmap('jet')
    cbar.ax.set_ylabel(r'$|\chi|^2$')
    cbar_ticks = cbar.ax.get_yticklabels()
    cbar.ax.set_yticklabels(['Min']+((len(cbar_ticks)-2)*[''])+['Max'])
    if save_figures:
        file_name = r'outputs/%s/E%d_ml%0.0f_F%0.0f_B%0.0f_Rt%0.0f' %
            ↪ (base_path, n+1, self.ml, self.F, self.B, 10*self.R_t)
        #print('\t\t', file_name)
        file = XDMFFile(file_name+'.xdmf')
        file.write (u)
        plt.savefig(file_name+'.png', dpi=600)

```

```

    if plot_figures:
        plt.show()
    else:
        plt.close()

def plot_1D(u, p1, p2):
    p12 = p2 - p1
    u12 = p12/np.linalg.norm(p12)
    Y = np.linspace(0, 1, 1000)
    points = [y*p12+p1 for y in Y]
    X = np.array([u(p) for p in points])
    X = -X
    plt.plot(X, Y*np.linalg.norm(p12), 'k', lw=2)
    plt.ylabel(r'$\vec{R}_{\square\square}(\%0.2f_{\square r_{\square}+\square}\%0.0f)\hat{u}_{\square r_{\square}+\square}(\%0.2f_{\square H_{\square}+\square}\square \rightarrow \%0.0f)\hat{u}_{\square H_{\square}[nm]}' % (u12[0], p1[0], u12[1], p1[1]))
    plt.xlabel(r'$|\chi|^2$')
    plt.gca().invert_xaxis()
    #locs, xticks = plt.xticks()
    #plt.xticks([locs[0], locs[-1]], ['Max', 'Min'])
    plt.xticks([X.min(), X.max()], ['Max', 'Min'])

for n in range(num_eigenvalues):
    #extract first eigenpair
    r, c, rx, cx = self.solution.get_eigenpair(n) #real and complex
    #\rightarrow part of the eigenvalue and eigenvector x, respectively.
    E = r*self.Ry_eV
    #print(type(E.values[0]))
    data['ml'].append(self.ml)
    data['B'].append(self.B)

```

```

data['F'].append(self.F)
data['n'].append(n)
data['R_t'].append(self.R_t)
data['R_b'].append(self.R_b)
data['H'].append(self.H)
data['w'].append(self.w)
data['Energy[meV]'].append(np.float('%0.100f' % (1e3*E)))

to_show = 'UUUU'
for k in data.keys():
    if type(1) == type(data[k][-1]):
        to_show += '%s: %dUU' % (k, data[k][-1])
    else:
        to_show += '%s: %0.2fUU' % (k, data[k][-1])
print(to_show)

#Assign eigenvector to function
u = Function(self.V)
u.vector()[:] = rx*rx + cx*cx
p1 = np.r_[self.R_b, 0]
p2 = np.r_[self.R_t, self.H]

#Plot eigenfunction and probability density
plt.figure(dpi=100)
plt.subplot(1,2,1)
plot_1D(u, p1, p2)

plt.subplot(1,2,2)
p1 = plot(u)

```

```

        cbar = plt.colorbar(p1)
        set_labels_and_save(plot_figures=plot_figures, save_figures=
            ↪ save_figures)
    return data

def get_dipole_matrix(self, verbose=False):
    V = self.V
    eigensolver = self.solution
    num_eigenvalues = self.num_eigenvalues

    u = Function(V)
    h = Function(V)
    R1x = Function(V)
    C1x = Function(V)
    R2x = Function(V)
    C2x = Function(V)
    l = interpolate(Expression("x[0]", degree = 1), V)
    r0 = project(l, V)

    Mnm = np.zeros((num_eigenvalues,num_eigenvalues))

    for n in range(num_eigenvalues):
        r, c, rx, cx = eigensolver.get_eigenpair(n)
        u.vector()[:] = rx*rx + cx*cx
        R1x.vector()[:] = rx
        C1x.vector()[:] = cx
        I1 = assemble(u*dx)
        cons1 = 1/sqrt(I1)
        for m in range(n, num_eigenvalues):

```

```

if verbose:
    print('\tElemento matricial M_%d,%d' % (n+1,m+1))
r2, c2, rx2, cx2 = eigensolver.get_eigenpair(m)
h.vector()[:] = rx2*rx2 + cx2*cx2
I2 = assemble(h*dx)
cons2 = 1/sqrt(I2)
R2x.vector()[:] = rx2
C2x.vector()[:] = cx2
a= cons1*cons2*assemble(r0*(R2x*nabla_grad(R1x)[1] + C2x*
    ↪ nabla_grad(C1x)[1])*dx)
b= cons1*cons2*assemble(r0*(R2x*nabla_grad(C1x)[1] - C2x*
    ↪ nabla_grad(R1x)[1])*dx)
Mnm[n,m] = sqrt(a**2+b**2)
if n == m: Mnm[n,m] /= 2

Mnm += np.transpose(Mnm)

return Mnm

```

Anexo F. Permisos concedidos para el uso de figuras citadas en el trabajo

Permiso para la figura 7:



Marketplace™

McGraw-Hill Education - License Terms and Conditions

Order Date	29-Nov-2019
Order license ID	1006487-1
ISBN-13	9780070479746
Type of Use	Republish in a thesis/dissertation
Publisher	MCGRAW-HILL PROFESSIONAL PUBLISHING
Portion	Chart/graph/table/figure

LICENSED CONTENT

Publication Title	Handbook of optics	Country	United States of America
Author/Editor	BASS, MICHAEL., OPTICAL SOCIETY OF AMERICA., OPTICAL SOCIETY OF AMERICA STAFF	Rightholder	McGraw-Hill Education
		Publication Type	Book
Date	01/01/1994		
Language	English, English		

REQUEST DETAILS

Portion Type	Chart/graph/table/figure	Distribution	Other territories and/or countries
Number of charts / graphs / tables / figures requested	1	Enter territories/countries	Colombia
Format (select all that apply)	Electronic	Translation	Original language of publication
Who will republish the content?	Academic institution	Copies for the disabled?	No
Duration of Use	Life of current edition	Minor editing privileges?	No
Lifetime Unit Quantity	Up to 499	Incidental promotional use?	No
Rights Requested	Main product	Currency	USD

NEW WORK DETAILS

Title	DETERMINACIÓN DE LA ABSORCIÓN ÓPTICA Y EL CAMBIO EN EL ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE UNA NANOESTRUCTURA DE CdSe POR EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y MAGNÉTICOS UNIFORMES	Institution name	UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
		Expected presentation date	2020-02-01
Instructor name	DAVID ALEJANDRO MIRANDA MERCADO		

ADDITIONAL DETAILS

Order reference number	N/A	The requesting person / organization to appear on the license	Ana Milena Forero
------------------------	-----	---	-------------------

REUSE CONTENT DETAILS

Title, description or numeric reference of the portion(s)	FIGURE 2 Absorption spectrum of a typical semiconductor showing a wide variety of optical processes.	Title of the article/chapter the portion is from	CHAPTER 36. OPTICAL PROPERTIES OF SEMICONDUCTORS
Editor of portion(s)	Paul M . Amirtharaj and David G . Seiler	Author of portion(s)	BASS, MICHAEL.; OPTICAL SOCIETY OF AMERICA.; OPTICAL SOCIETY OF AMERICA STAFF
Volume of serial or monograph	2	Issue, if republishing an article from a serial	N/A
Page or page range of portion	Ch 36	Publication date of portion	1994-01-01

PUBLISHER TERMS AND CONDITIONS

It is the responsibility of the user to verify that the text, figures, images and other material that they wish to use are owned by McGraw-Hill Education. McGraw-Hill Education can only grant permission for the material that they own. Please check the caption of any figures, images, charts, etc., as well as any credits pages at the front or back of the book. McGraw-Hill Education may restrict the portion of the title that may be used.

CCC Republication Terms and Conditions

1. Description of Service; Defined Terms. This Republication License enables the User to obtain licenses for republication of one or more copyrighted works as described in detail on the relevant Order Confirmation (the "Work(s)"). Copyright Clearance Center, Inc. ("CCC") grants licenses through the Service on behalf of the rightsholder identified on the Order Confirmation (the "Rightsholder"). "Republishing", as used herein, generally means the inclusion of a Work, in whole or in part, in a new work or works, also as described on the Order Confirmation. "User", as used herein, means the person or entity making such republication.
2. The terms set forth in the relevant Order Confirmation, and any terms set by the Rightsholder with respect to a particular Work, govern the terms of use of Works in connection with the Service. By using the Service, the person transacting for a republication license on behalf of the User represents and warrants that he/she/it (a) has been duly authorized by the User to accept, and hereby does accept, all such terms and conditions on behalf of User, and (b) shall inform User of all such terms and conditions. In the event such person is a "freelancer" or other third party independent of User and CCC, such party shall be deemed jointly a "User" for purposes of these terms and conditions. In any event, User shall be deemed to have accepted and agreed to all such terms and conditions if User republishes the Work in any fashion.
3. Scope of License; Limitations and Obligations.
 - 3.1. All Works and all rights therein, including copyright rights, remain the sole and exclusive property of the Rightsholder. The license created by the exchange of an Order Confirmation (and/or any invoice) and payment by User of the full amount set forth on that document includes only those rights expressly set forth in the Order Confirmation and in these terms and conditions, and conveys no other rights in the Work(s) to User. All rights not expressly granted are hereby reserved.
 - 3.2. General Payment Terms: You may pay by credit card or through an account with us payable at the end of the month. If you and we agree that you may establish a standing account with CCC, then the following terms apply: Remit Payment to: Copyright Clearance Center, 29118 Network Place, Chicago, IL 60673-1291. Payments Due: Invoices are payable upon their delivery to you (or upon our notice to you that they are available to you for downloading). After 30 days, outstanding amounts will be subject to a service charge of 1-1/2% per month or, if less, the maximum rate allowed by applicable law. Unless otherwise specifically set forth in the Order Confirmation or in a separate written agreement signed by CCC, invoices are due and payable on "net 30" terms. While User may exercise the rights licensed immediately upon issuance of the Order Confirmation, the license is automatically revoked and is null and void, as if it had never been issued, if complete payment for the license is not received on a timely basis either from User directly or through a payment agent, such as a credit card company.
 - 3.3. Unless otherwise provided in the Order Confirmation, any grant of rights to User (i) is "one-time" (including the editions and product family specified in the license), (ii) is non-exclusive and non-transferable and (iii) is subject to any and all limitations and restrictions (such as, but not limited to, limitations on duration of

use or circulation) included in the Order Confirmation or invoice and/or in these terms and conditions. Upon completion of the licensed use, User shall either secure a new permission for further use of the Work(s) or immediately cease any new use of the Work(s) and shall render inaccessible (such as by deleting or by removing or severing links or other locators) any further copies of the Work (except for copies printed on paper in accordance with this license and still in User's stock at the end of such period).








- 3.4. In the event that the material for which a republication license is sought includes third party materials (such as photographs, illustrations, graphs, inserts and similar materials) which are identified in such material as having been used by permission, User is responsible for identifying, and seeking separate licenses (under this Service or otherwise) for, any of such third party materials; without a separate license, such third party materials may not be used.
 - 3.5. Use of proper copyright notice for a Work is required as a condition of any license granted under the Service. Unless otherwise provided in the Order Confirmation, a proper copyright notice will read substantially as follows: "Republished with permission of [Rightsholder's name], from [Work's title, author, volume, edition number and year of copyright]; permission conveyed through Copyright Clearance Center, Inc. " Such notice must be provided in a reasonably legible font size and must be placed either immediately adjacent to the Work as used (for example, as part of a by-line or footnote but not as a separate electronic link) or in the place where substantially all other credits or notices for the new work containing the republished Work are located. Failure to include the required notice results in loss to the Rightsholder and CCC, and the User shall be liable to pay liquidated damages for each such failure equal to twice the use fee specified in the Order Confirmation, in addition to the use fee itself and any other fees and charges specified.
 - 3.6. User may only make alterations to the Work if and as expressly set forth in the Order Confirmation. No Work may be used in any way that is defamatory, violates the rights of third parties (including such third parties' rights of copyright, privacy, publicity, or other tangible or intangible property), or is otherwise illegal, sexually explicit or obscene. In addition, User may not conjoin a Work with any other material that may result in damage to the reputation of the Rightsholder. User agrees to inform CCC if it becomes aware of any infringement of any rights in a Work and to cooperate with any reasonable request of CCC or the Rightsholder in connection therewith.
4. Indemnity. User hereby indemnifies and agrees to defend the Rightsholder and CCC, and their respective employees and directors, against all claims, liability, damages, costs and expenses, including legal fees and expenses, arising out of any use of a Work beyond the scope of the rights granted herein, or any use of a Work which has been altered in any unauthorized way by User, including claims of defamation or infringement of rights of copyright, publicity, privacy or other tangible or intangible property.
 5. Limitation of Liability. UNDER NO CIRCUMSTANCES WILL CCC OR THE RIGHTSHOLDER BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, CONSEQUENTIAL OR INCIDENTAL DAMAGES (INCLUDING WITHOUT LIMITATION DAMAGES FOR LOSS OF BUSINESS PROFITS OR INFORMATION, OR FOR BUSINESS INTERRUPTION) ARISING OUT OF THE USE OR INABILITY TO USE A WORK, EVEN IF ONE OF THEM HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES. In any event, the total liability of the Rightsholder and CCC (including their respective employees and directors) shall not exceed the total amount actually paid by User for this license. User assumes full liability for the actions and omissions of its principals, employees, agents, affiliates, successors and assigns.
 6. Limited Warranties. THE WORK(S) AND RIGHT(S) ARE PROVIDED "AS IS". CCC HAS THE RIGHT TO GRANT TO USER THE RIGHTS GRANTED IN THE ORDER CONFIRMATION DOCUMENT. CCC AND THE RIGHTSHOLDER DISCLAIM ALL OTHER WARRANTIES RELATING TO THE WORK(S) AND RIGHT(S), EITHER EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING WITHOUT LIMITATION IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY OR FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. ADDITIONAL RIGHTS MAY BE REQUIRED TO USE ILLUSTRATIONS, GRAPHS, PHOTOGRAPHS, ABSTRACTS, INSERTS OR OTHER PORTIONS OF THE WORK (AS OPPOSED TO THE ENTIRE WORK) IN A MANNER CONTEMPLATED BY USER; USER UNDERSTANDS AND AGREES THAT NEITHER CCC NOR THE RIGHTSHOLDER MAY HAVE SUCH ADDITIONAL RIGHTS TO GRANT.
 7. Effect of Breach. Any failure by User to pay any amount when due, or any use by User of a Work beyond the scope of the license set forth in the Order Confirmation and/or these terms and conditions, shall be a material breach of the license created by the Order Confirmation and these terms and conditions. Any breach not cured within 30 days of written notice thereof shall result in immediate termination of such license without further notice. Any unauthorized (but licensable) use of a Work that is terminated immediately upon notice thereof may be liquidated by payment of the Rightsholder's ordinary license price therefor; any unauthorized (and unlicensable) use that is

not terminated immediately for any reason (including, for example, because materials containing the Work cannot reasonably be recalled) will be subject to all remedies available at law or in equity, but in no event to a payment of less than three times the Rightsholder's ordinary license price for the most closely analogous licensable use plus Rightsholder's and/or CCC's costs and expenses incurred in collecting such payment.

8. Miscellaneous.

- 8.1. User acknowledges that CCC may, from time to time, make changes or additions to the Service or to these terms and conditions, and CCC reserves the right to send notice to the User by electronic mail or otherwise for the purposes of notifying User of such changes or additions; provided that any such changes or additions shall not apply to permissions already secured and paid for.
- 8.2. Use of User-related information collected through the Service is governed by CCC's privacy policy, available online here: <https://marketplace.copyright.com/rs-ui-web/mp/privacy-policy>
- 8.3. The licensing transaction described in the Order Confirmation is personal to User. Therefore, User may not assign or transfer to any other person (whether a natural person or an organization of any kind) the license created by the Order Confirmation and these terms and conditions or any rights granted hereunder; provided, however, that User may assign such license in its entirety on written notice to CCC in the event of a transfer of all or substantially all of User's rights in the new material which includes the Work(s) licensed under this Service.
- 8.4. No amendment or waiver of any terms is binding unless set forth in writing and signed by the parties. The Rightsholder and CCC hereby object to any terms contained in any writing prepared by the User or its principals, employees, agents or affiliates and purporting to govern or otherwise relate to the licensing transaction described in the Order Confirmation, which terms are in any way inconsistent with any terms set forth in the Order Confirmation and/or in these terms and conditions or CCC's standard operating procedures, whether such writing is prepared prior to, simultaneously with or subsequent to the Order Confirmation, and whether such writing appears on a copy of the Order Confirmation or in a separate instrument.
- 8.5. The licensing transaction described in the Order Confirmation document shall be governed by and construed under the law of the State of New York, USA, without regard to the principles thereof of conflicts of law. Any case, controversy, suit, action, or proceeding arising out of, in connection with, or related to such licensing transaction shall be brought, at CCC's sole discretion, in any federal or state court located in the County of New York, State of New York, USA, or in any federal or state court whose geographical jurisdiction covers the location of the Rightsholder set forth in the Order Confirmation. The parties expressly submit to the personal jurisdiction and venue of each such federal or state court. If you have any comments or questions about the Service or Copyright Clearance Center, please contact us at 978-750-8400 or send an e-mail to info@copyright.com.

Permiso para la figura 8:



Home Help Email Support Sign in Create Account



Electroabsorption by 0D, 1D, and 2D Nanocrystals: A Comparative Study of CdSe Colloidal Quantum Dots, Nanorods, and Nanoplatelets
Author: Alexander W. Achtstein, Anatol V. Prudnikau, Maxim V. Ermolenko, et al
Publication: ACS Nano
Publisher: American Chemical Society
Date: Aug 1, 2014
Copyright © 2014, American Chemical Society

PERMISSION/LICENSE IS GRANTED FOR YOUR ORDER AT NO CHARGE

This type of permission/license, instead of the standard Terms & Conditions, is sent to you because no fee is being charged for your order. Please note the following:

- Permission is granted for your request in both print and electronic formats, and translations.
- If figures and/or tables were requested, they may be adapted or used in part.
- Please print this page for your records and send a copy of it to your publisher/graduate school.
- Appropriate credit for the requested material should be given as follows: "Reprinted (adapted) with permission from (COMPLETE REFERENCE CITATION). Copyright (YEAR) American Chemical Society." Insert appropriate information in place of the capitalized words.
- One-time permission is granted only for the use specified in your request. No additional uses are granted (such as derivative works or other editions). For any other uses, please submit a new request.

If credit is given to another source for the material you requested, permission must be obtained from that source.

[BACK](#) [CLOSE WINDOW](#)

© 2019 Copyright - All Rights Reserved | [Copyright Clearance Center, Inc.](#) | [Privacy statement](#) | [Terms and Conditions](#)
Comments? We would like to hear from you. E-mail us at customer@copyright.com