

DOS PARTÍCULAS EN HILOS CUÁNTICOS CRUZADOS

SILVIA ALEJANDRA SOTELO LÓPEZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2008

i

DOS PARTÍCULAS EN HILOS CUÁNTICOS CRUZADOS

SILVIA ALEJANDRA SOTELO LÓPEZ

**Trabajo de Grado para optar al título de
FÍSICO**

Director:

DIRECTOR: Dr. ILIA MIKHAILOV

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2008

ii

Resumen

DOS PARTÍCULAS EN HILOS CUÁNTICOS CRUZADOS*

Autor: Silvia Alejandra Sotelo López **

Palabras clave: Nanotecnología, Sistemas de baja dimensionalidad, Heteroestructuras, Hilos cuánticos Cruzados.

Se analiza el espectro energético de la heteroestructura con dos partículas separadas en dos hilos cruzados con confinamiento parabólico a lo largo de sus ejes. Se ha encontrado que la ecuación de onda bí-particular correspondiente a este modelo se reduce a un problema de campo central uni-particular en un espacio de dos dimensiones, el cual en este trabajo hemos resuelto numéricamente utilizando el método de barrido trigonométrico. Los casos de atracción y repulsión se consideran por separado. Se muestra como el espectro de energía en el límite de confinamiento extremadamente fuerte no depende del tipo de interacción y en ambos casos es similar al de un oscilador armónico. Por el contrario, cuando el confinamiento es muy débil el espectro energético para los casos de atracción y repulsión de las dos partículas es muy diferente. En este límite, el espectro de energía para el caso de atracción es similar al de un átomo de hidrógeno en un espacio de dos dimensiones con el nivel del estado base fuertemente separado de los otros niveles correspondientes a los estados excitados. En cambio, en el caso de repulsión todos los niveles de energía se funden a medida que el confinamiento se hace más y más débil. Se presentan curvas novedosas para las dependencias de los niveles de energía con respecto a las longitudes de los hilos y la distancia entre ellos, para los casos de atracción y repulsión; también las funciones de densidad de distribución a lo largo de los hilos para algunos de los niveles más bajos.

*Trabajo de Grado

**Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: PhD. Ilia Mikhailov

Abstract

THE ENERGY SPECTRUM OF TWO PARTICLES IN CROSSED-WIRES HETEROSTRUCTURE*

Author: Silvia Alejandra Sotelo López**

Keywords: Nanotechnology, Low-Dimensional Systems, Heterostructures, Crossed Quantum wires.

We analyze the energy spectrum of the heterostructure with two particles separated in two crossed wires with parabolic confinement along their axis. We find that the two-particle wave equation corresponding to this model is reduced to one-particle central force problem in two-dimensional space which we solve in this work numerically by using trigonometric sweep method [1]. The cases of the attraction and the repulsion are considered separately. We show that the energy spectrum in the limit of the extremely strong confinement in both cases does not depend on the type of the interaction and it is similar to one of the harmonic oscillator. On the contrary, as the confinement is very weak the two-particle energy spectra for the cases of the attraction and the repulsion are very different. In this limit, the energy spectrum for the case of the attraction is similar to one of two-dimensional hydrogen atom with a strongly separated ground state level from other levels corresponding to excited states. Conversely, in the case of the repulsion all energy levels merges as the confinement becomes more and more weak. We present novel curves for the dependencies of the energy levels on the lengths of wires and distance between the wires for the cases of the attraction and the repulsion and the density distribution functions along the wires for some low-lying levels, too.

*Graduate Thesis

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: PhD. Ilia Mikhailov

Contenido

	pág.
Resumen	vi
Abstract	vii
Introducción	1
1. Modelo	6
1.1 Morfología del Sistema	6
1.2 Descripción del movimiento de portadores de carga en un bloque de semiconductor	6
1.3 Aproximación de masa efectiva (AME)	7
1.4 Potenciales de interacción y confinamiento	9
1.5 Excitón	10
1.6 Parámetros de material	11
1.7 Ecuación de Schrodinger adimensional	12
2. Teoría	13
2.1 Separación de las variables	13
2.2 Solución de la ecuación radial	14
2.3 Densidad de Probabilidad de la distribución de carga	17
3. Resultados	19
3.1 Análisis de los casos límite de confinamiento débil y fuerte	19
3.2 Efecto de la separación entre los QWWs en el espectro energético	26
3.3 Densidad de distribución de dos portadores de carga en QWWs cruzados	29
4. Conclusiones	33
5. Bibliografía	34

Introducción

Desde la década de los 60's [1] la posibilidad de evidenciar los efectos cuánticos a escala macroscópica en el comportamiento de los portadores de carga a temperatura ambiente ha concentrado la atención de numerosas investigaciones. Éstas tienen como objetivo el estudio teórico y el desarrollo de técnicas experimentales para fabricar estructuras, donde las escalas de energías y longitudes de ondas de De Broglie de los portadores de carga permitan observar dichos efectos. Teniendo en cuenta que la masa efectiva del electrón en un buen semiconductor es menor que el valor correspondiente al del electrón libre en el vacío en uno-dos ordenes y la constante dieléctrica de estos materiales es un orden mayor que en el vacío, las longitudes de las ondas De Broglie de los portadores de carga en estos materiales son de escala nanométrica, esto es, dos-tres ordenes superior a los valores correspondientes en los sistemas atómicos. Por esta razón, los investigadores consideraron que si fuese posible fabricar a partir de estos materiales unas estructuras con cambios bruscos en sus propiedades a escala nanométrica, se podría observar en éstas los efectos cuánticos relacionados con el confinamiento de estas ondas de De Broglie y considerarlas sistemas de baja dimensionalidad.

El crecimiento de láminas epitaxiales¹ ultra delgadas favoreció al inicio de la construcción de sistemas cuánticos de baja dimensionalidad [1, 2] con base en heteroestructuras semiconductoras, para las cuáles se logró alterar la composición a escala nanométrica. La alteración de la composición permite variar en forma controlada los parámetros fundamentales dentro de los cristales semiconductores: las brechas entre las bandas, las masas efectivas de los portadores de carga y su movilidad, los índices de refracción, los espectros energéticos de los portadores, entre otros [3]. Esta implementación

¹ Hace referencia al proceso de depositar una lámina de monocristales sobre un sustrato monocristalino.

extraordinaria ha generado grandes expectativas, ya que el reordenamiento de los átomos y las moléculas, además del aprovechamiento de las propiedades exhibidas a esta escala proporcionan una de las claves tecnológicas más importantes para el desarrollo de avances científicos e industriales significativos.

Las primeras heteroestructuras desarrolladas fueron los pozos cuánticos bidimensionales (QWs)² [4, 5]. Inicialmente se ubicó una capa delgada de un material semiconductor (p. e. GaAs) entre dos de otro material semiconductor similar (p. e. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) en forma de un “emparedado”. Como la brecha entre las bandas de valencia y de conducción en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es mayor que en GaAs, esta estructura representa para los portadores de carga un pozo cuántico elemental capaz de lograr el confinamiento tanto de electrones, como de huecos en la dirección perpendicular a las capas, mientras que el movimiento paralelo a estas no sufre alteración. Como consecuencia de este confinamiento, el espectro energético de los portadores se discretiza.

Durante los años 70's, el avance en el desarrollo teórico y experimental de QWs, además de sus aplicaciones innovadoras, condujo a que las investigaciones se orientaran al estudio de sistemas de menor dimensionalidad, como es el caso de los hilos cuánticos (QWWs)² [6] en los que se logra restringir el movimiento de los portadores en dos direcciones, pero con libertad en la movilidad a lo largo del eje del hilo; y más recientemente los puntos cuánticos (QDs)² [7, 8] en los que esta restricción se extiende a todas las dimensiones espaciales. De esta manera, se abren más posibilidades para variar en forma controlada la densidad de estados de los portadores de carga, las energías del electrón libre y de enlace de excitones y donadoras. Estos sistemas de baja dimensionalidad son bastante atractivos por sus aplicaciones potenciales en futuros

² Siglas en inglés: quantum well (QW), quantum well wire (QWW) and quantum dot (QD).

dispositivos de alto rendimiento, debido a que ellos tienen características ópticas y eléctricas más llamativas en comparación con un bloque de semiconductor [9, 10].

Hoy en día existen diversas técnicas para la fabricación de QWWs: la litografía por haz de electrones y grabado [11, 12, 13], epitaxia [14], o el crecimiento en sustratos no-planares [15, 16]. No obstante, el camino más prometedor para la fabricación de arreglos ordenados de QWWs es el modo de Stranski-Krastanow [17] de crecimiento de películas delgadas de semiconductores en el que las tensiones superficiales producidas por una ligera diferencia en la constante de red del sustrato y del material que se deposite sobre éste, hace posible que se produzcan formaciones de tipo islas auto-organizadas durante un crecimiento capa por capa usando epitaxia por haces moleculares (MBE)³ o epitaxia por fase gaseosa (MOCVD)⁴. La ventaja de esta técnica es que permite obtener nanoestructuras libres de perturbaciones y sin defectos de borde, lo que hace que sus propiedades opto-eléctricas sean únicas [18].

Los avances en la fabricación de los sistemas de baja dimensión despertaron gran interés en el estudio teórico de los efectos de confinamiento sobre las propiedades de portadores de carga al interior de QWs, QWWs [19, 20, 21].

Estudios anteriores han permitido establecer que la energía de enlace de los estados acoplados de los portadores de carga (excitones neutros y cargados positiva- y negativamente, donadoras, etc.) se incrementa significativamente en estas estructuras debido al confinamiento. En la mayoría de los casos este análisis fue realizado usando diferentes métodos aproximados y técnicas computacionales tales como la

³Siglas en inglés: Molecular Beam Epitaxy (MBE)

⁴Siglas en inglés: Metal Organic Chemical Vapour Deposition (MOCVD)

diagonalización numérica [22-24], simulaciones basadas en técnicas de Monte Carlo [25], diferencias finitas [26], técnicas variacionales [27], etc.

En estas investigaciones ha surgido interés especial por los modelos exactamente solubles que permiten en forma precisa analizar los efectos relacionados con la interacción entre partículas en condiciones de confinamiento fuerte. Zhu y colaboradores han estudiado el caso de repulsión ($e-e$) y han obtenido soluciones exactas usando la expansión en series de potencias para dos electrones en un QD parabólico [28] y en un anillo cuasi-unidimensional [29]. Para estos mismos modelos los investigadores del Grupo FICOMACO de la UIS han utilizado el método de barrido trigonométrico [30, 31] y han obtenido resultados semejantes.

Problemas similares para dos electrones ($e-e$) o para un par electrón-hueco ($e-h$), conocido como excitón, confinados en sistemas cuasi-unidimensionales o QWWs, también se estudiaron ampliamente y se logró evidenciar nuevos efectos relacionados con el confinamiento sobre las propiedades de transporte [32] y ópticas [33]. Uno de los problemas teóricos relacionados con QWWs que se estudió últimamente es sobre el comportamiento de un sistema de partículas ubicadas en hilos separados que interactúan entre sí. Por ejemplo, en el trabajo desarrollado por Rosi con sus coautores [34] se estudió el espectro energético y las funciones de onda de un electrón y un hueco, los cuales se encontraban confinados en QWWs separados y paralelos. Este estudio fue realizado a partir de la expansión del potencial de interacción en términos multipolares y suponiendo que tanto el electrón como el hueco experimentan un confinamiento transversal parabólico. En otro artículo, Sidor y colaboradores [35] analizaron las transiciones ópticas de un excitón en un par de hilos cuánticos auto-ensamblados de InAs/InP, estudiando por separado el acoplamiento horizontal y vertical y comparando la energía de fotoluminiscencia entre ambas configuraciones.

El análisis de sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras semiconductoras cuasi-unidimensionales se simplifica significativamente en el límite adiabático cuando el ancho del hilo es despreciable en comparación con su longitud. En este límite el movimiento de los portadores de carga se puede considerar como unidimensional y en algunos casos particulares es posible encontrar la solución de la ecuación de onda que describe sus movimientos en una forma exacta. A pesar que en el modelo unidimensional no se tiene en cuenta algunos detalles de la estructura real, éste permite encontrar tendencias generales relacionadas con la cuantización del espectro energético debido al confinamiento de los portadores de carga.

En este trabajo, se estudio un nuevo modelo exactamente soluble para dos partículas ubicadas por separado en dos hilos unidimensionales cruzados. (Es importante tener en cuenta que para este tipo de configuración de QWWs no se encontraron trabajos teóricos publicados en la literatura). Se demuestra que si las masas de las partículas son iguales y el confinamiento a lo largo de estos hilos tiene una forma parabólica, la ecuación de Schrödinger para este sistema es completamente separable y puede resolverse de forma exacta. Hay que tener en cuenta que en la Mecánica Cuántica hay muy pocos modelos para sistemas de dos partículas que permiten encontrar una solución exacta y es por eso que cada uno de estos modelos genera un interés especial no solo para futuras aplicaciones prácticas sino también desde el punto de vista teórico, ya que abren nuevas posibilidades para analizar efectos de correlación en los sistemas con interacción electrostática.

Con base en la solución exacta encontrada, en este trabajo se estudian dos casos particulares, el primero teniendo en cuenta la atracción entre las partículas y el segundo su repulsión. En ambos casos se han calculado las energías de varios niveles energéticos más bajos en función de la longitud de los hilos y se estudia la densidad de distribución de las partículas en el caso de atracción y repulsión.

1. Modelo

1.1 Morfología del Sistema

Se considera un sistema formado por dos portadores de carga, cada uno está confinado dentro uno de los dos hilos cuánticos de GaAs sumergidos en una matriz de material de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$, perpendiculares entre sí y separados por una distancia d , (figura 1).

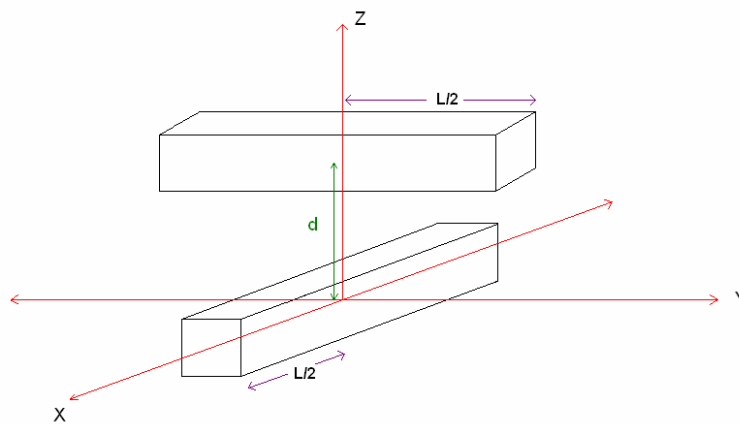


Figura 1: El modelo de hilos cuánticos cruzados.

1.2 Descripción del movimiento de portadores de carga en un bloque de semiconductor.

Para analizar el efecto de la interacción electrostática entre dos los portadores de carga en QWWs cruzados primero se discutirán las principales aproximaciones que se usan para describir su comportamiento en un bloque de semiconductor teniendo en cuenta que la red cristalina, por lo general, no tiene la periodicidad perfecta. Las estructuras reales presentan diferentes tipos de defectos que rompen la simetría traslacional en los cristales, tales como: vacancias, impurezas y dislocaciones, además esta simetría está perturbada por el movimiento vibratorio de los átomos. Sin embargo, todas estas perturbaciones pueden ser consideradas como efectos de segundo orden. Por esta razón, es apropiado aproximar los cristales semiconductores a redes cristalinas perfectas, donde los núcleos iónicos permanecen fijos en los puntos reticulares, mientras los electrones en la banda de

conducción tienen una movilidad apreciable en el cristal. Además, cada uno de estos electrones está sumergido en un mismo potencial periódico con la misma simetría traslacional que la red cristalina. Por lo tanto, la ecuación de onda para un portador en un cristal puede escribirse como:

$$H\psi(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m}\psi(\vec{r}) + V_{red}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \varepsilon_0\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

$$V_{red}(\vec{r}) = V_{red}(\vec{r} + \vec{T}) \quad (2)$$

Aquí V_{red} es la energía de interacción promedio entre el portador y todas otras partículas que forman cristal. Para resolver la ecuación de onda (1) se utiliza el teorema de Bloch, según el cual las funciones propias de la ecuación de onda para un potencial periódico (que satisface la ecuación (2)) son productos de una onda plana con una función envolvente $u(\vec{r})$ que posee la misma periodicidad que la red cristalina, dada por $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$ [36].

El problema se complica cuando además se aplica un potencial externo V_{ext} y para resolver la ecuación de onda correspondiente:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{r}) + [V_{red}(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \quad (3)$$

ya no se puede aplicar el teorema de Bloch. Pero en este caso para la mayoría de los campos externos se puede usar la aproximación de masa efectiva (AME).

1.3 Aproximación de masa efectiva (AME)

Muchos de los problemas más importantes en la teoría del estado sólido conciernen al movimiento de portadores de carga en redes periódicas perturbadas. Como ejemplos se pueden mencionar los problemas concernientes a la influencia sobre el espectro energético de impurezas o campos eléctricos y magnéticos. [37, 38, 39]. La AME es ampliamente utilizada para solucionar este tipo de problemas. El hamiltoniano y la ecuación de onda de un portador de carga en un cristal perturbado son:

$$H = H_0 + V \quad (4)$$

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (5)$$

Aquí H_0 es el Hamiltoniano que representa al portador en una red cristalina perfecta y V la perturbación relacionada con las contribuciones de diferentes potenciales como consecuencia del confinamiento, de las impurezas, de los campos externos, etc.

El Hamiltoniano H_0 se puede simplificar cuando se desprecia la estructura de banda del semiconductor cristalino y se tiene en cuenta únicamente la energía $\varepsilon_0(k)$ en el borde de la banda de conducción y de valencia. La teoría de bandas permite aproximar la energía $\varepsilon_0(k)$ a una parábola, similar a la energía de una partícula libre pero con un parámetro de masa m^* que es proporcional a la curvatura de la banda. Las expresiones explícitas son:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_0(k)}{\partial k^2} \quad (6.a)$$

$$\varepsilon_0(k) = \frac{p^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (6.b)$$

La ecuación de onda de este sistema sin perturbar esta dada por:

$$H_0\psi_0 = \varepsilon_0\psi_0 \quad (7)$$

Por esta razón la ecuación de onda (5) puede expresarse como:

$$[\varepsilon_0(-i\hbar\nabla) + V]\psi_n = \varepsilon_n\psi_n \quad (8)$$

Remplazando al momento en la expresión (6.b) por su respectivo operador $p = -i\hbar\nabla$ y teniendo en cuenta que n es un número cuántico y es por esto que la energía toma la forma de:

$$\varepsilon_0(k) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \quad (9)$$

En la AME la ecuación de onda para el sistema de dos portadores con masas efectivas m_1^* y m_2^* , ubicados en dos hilos cruzados, teniendo en cuenta (8) y (9), se puede escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_n + V \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \quad (10)$$

1.4 Potenciales de interacción y confinamiento.

Para este sistema de dos partículas, V representa la contribución del potencial de interacción electrostático entre ellas y los potenciales de confinamiento dentro de cada uno de los hilos. Debido a que la matriz de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ posee una brecha entre las bandas de conducción y valencia mayor que la de los hilos de GaAs es posible confinar dentro cada QWW tanto electrones de la banda de conducción como a huecos de la banda de valencia. Por esta razón se consideran dos posibles variantes para la interacción entre las partículas V_c : la repulsión entre dos electrones ($e-e$) cuando $\tau = +1$ y la atracción entre un par electrón-hueco ($e-h$) cuando $\tau = -1$:

$$V_c = \frac{e^2 \tau}{\epsilon \sqrt{x^2 + y^2 + d^2}} \quad (11)$$

En este trabajo se asume que el potencial de confinamiento a lo largo de los hilos tiene una forma parabólica y se caracteriza con un parámetro ω que está asociado con la longitud del hilo l_0 , a través de las relaciones:

$$V_{cpx} = \frac{1}{2} m_1^* \omega^2 x^2; \quad V_{cpy} = \frac{1}{2} m_2^* \omega^2 y^2 \quad (12.a)$$

$$l_0 = \left(\frac{\hbar}{m^* \omega} \right)^{1/2} \quad (12.b)$$

1.5 Excitón

Un caso particular de un sistema de dos partículas lo representa un par electrón-hueco ligado. Los electrones en los cristales están repartidos en bandas de energía separadas por regiones prohibidas en las que no existen orbitales⁵ electrónicos ondulatorios (bandas de energías prohibidas⁶). Los huecos son orbitales vacantes en una banda y se comportan en los campos eléctricos y magnéticos aplicados como si tuviesen carga positiva $+e$ [36].

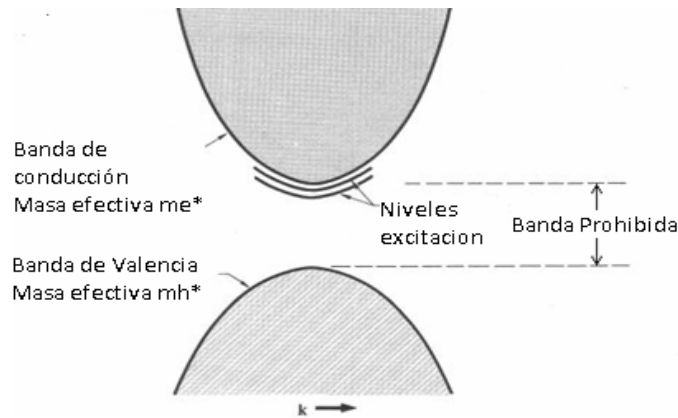


Figura 2: Esquema simplificado del modelo de bandas.

Cuando un electrón de la banda de conducción y un hueco de la banda de valencia se acoplan debido a la atracción entre ellos, se forma un excitón. Este excitón puede moverse a través del cristal y transportar energía. Además, pueden formarse mediante la absorción de fotones en cualquier punto crítico⁷, dado por:

$$\nabla[\varepsilon_c(k) - \varepsilon_v(k)] = 0 \quad (13)$$

Aquí $\varepsilon_c(k)$ y $\varepsilon_v(k)$ son las curvas de dispersión de la banda de conducción y de valencia respectivamente.

⁵ Se entiende por orbitales a las soluciones a la ecuación onda correspondiente al un sistema de un solo electrón.

⁶ La reflexión de Bragg de las ondas de los electrones en los cristales es la causa de bandas prohibidas de energía.

⁷ En estos puntos críticos del espacio k la densidad conjunta de estados $D_c(\varepsilon_v + \hbar\omega)D_v(\varepsilon_v)$ es singular.

1.6 Parámetros de material

En este trabajo se considera el modelo de los QWWs de GaAs embebidos en una matriz de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$. Los portadores de carga están confinados en la región de GaAs y por esta razón los parámetros físicos de este material son los apropiados para describir las propiedades del portador. Los valores encontrados en la literatura para la masa efectiva de los electrones y la constante dieléctrica en el GaAs están dados por: $m_e^* = 0.0665m_e$ y $\epsilon = 12.5$, respectivamente [40] (m_e es la masa del electrón en reposo). El radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo quedan definidos a partir de estos parámetros y para el caso del GaAs los valores se aproximan a: $a_0^* \approx 9.8nm$ y $R_y^* \approx 5.83meV$ respectivamente.

1.7 Ecuación de Schrodinger adimensional

El Hamiltoniano para el sistema de dos partículas separadas debido a su localización dentro de hilos cuánticos cruzados entre sí puede definirse teniendo en cuenta los potenciales de confinamiento dados por las fórmulas (12.a) y de la interacción entre ellas dado por (11), tal que:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m_1^* \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} m_2^* \omega^2 y^2 + \frac{e^2 \tau}{\epsilon \sqrt{x^2 + y^2 + d^2}} \quad (14)$$

Las masas m_1^* y m_2^* en el caso de repulsión son iguales y equivalentes a la masa del electrón, mientras que en el caso de atracción generalmente las masas son diferentes. Sin embargo, en este trabajo por comodidad matemática se asumió que la diferencia entre las masas en este caso es despreciable. Es por eso que a partir de este momento se considera únicamente el caso: $m_1^* = m_2^* = m^*$

La ecuación de onda según (8) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \psi + \left[\frac{1}{2} m^* \omega^2 (x^2 + y^2) + \frac{e^2 \tau}{\epsilon \sqrt{x^2 + y^2 + d^2}} \right] \psi = \epsilon \psi \quad (15)$$

Para facilitar el desarrollo de los cálculos y su interpretación se tomaron como unidades de longitud y energía al radio de Bohr a_0^* y el Rydberg efectivo R_y^* , respectivamente, definidos como:

$$R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} = \frac{e^2}{2 \epsilon a_0^*} \quad (16.a)$$

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} \quad (16.b)$$

Al hacer las sustituciones $x = a_0^* x_1$ y $y = a_0^* x_2$, $\epsilon = \tilde{\epsilon} R_y^*$ se obtiene la ecuación de onda adimensional:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right] \psi + \left[\tilde{\omega}^2 (x_1^2 + x_2^2) + \frac{2\tau}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + d_h^2}} \right] \psi = \tilde{\epsilon} \psi \quad (17)$$

Donde $d = a_0^* d_h$ y $\tilde{\omega} = \hbar \omega / 2R_y^*$. El último parámetro $\tilde{\omega}$, está relacionado con la longitud de confinamiento adimensional dado en unidades de radios de Bohr a través de la fórmula: $l = (1/\tilde{\omega})^{1/2}$.

2. Teoría

2.1 Separación de las variables

En el límite adiabático, cuando el ancho del hilo es despreciable en comparación con su longitud, el confinamiento es mucho mayor en la dirección perpendicular al hilo y por lo tanto el movimiento a lo largo de éste es el único que tiene relevancia. La ecuación de onda (17) que se ha formulado para dos partículas confinadas en QWWs cruzados con las coordenadas x_1 y x_2 a lo largo de los hilos se puede interpretar como una ecuación para una única “partícula imaginaria” en un campo bidimensional cuyo potencial depende sólo del cuadrado de la distancia desde el origen si se considera a x_1 y x_2 como coordenadas cartesianas en el plano X_1OX_2 :

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right]\Psi(x_1, x_2) + V(x_1^2 + x_2^2)\Psi(x_1, x_2) = \tilde{\varepsilon}\Psi(x_1, x_2) \quad (18)$$

$$V(x_1^2 + x_2^2) = \tilde{\omega}^2(x_1^2 + x_2^2) + \frac{2\tau}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + d_h^2}} \quad (19)$$

La simetría axial del sistema sugiere utilizar las coordenadas polares para resolver la ecuación diferencial. El uso de coordenadas polares definidas como:

$$\rho^2 = x_1^2 + x_2^2; \quad \tan \varphi = \frac{x_2}{x_1} \quad (20)$$

nos permite reducir la ecuación de onda (18) a la forma siguiente:

$$-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2}\Psi(\rho, \varphi) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}\Psi(\rho, \varphi) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\Psi(\rho, \varphi) + V_{ef}(\rho)\Psi(\rho, \varphi) = \tilde{\varepsilon}\Psi(\rho, \varphi) \quad (21)$$

$$V_{ef}(\rho) = \tilde{\omega}^2 \rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} \quad (22)$$

Se puede ver que esta ecuación corresponde a un problema de campo central en dos dimensiones, en el que se hace posible una separación completa de las variables que permite representar la función de onda $\Psi(\rho, \varphi)$ en forma de un producto de dos funciones, cada una con una única variable $\Psi(\rho, \varphi) = U(\rho)\Phi(\varphi)$. Siguiendo el procedimiento estándar de separación de variables uno puede reducir la ecuación (21) a un par de ecuaciones independientes, una para el movimiento angular de la “partícula imaginaria” y la otra para su movimiento radial:

$$\Phi''(\varphi) = -m^2\Phi(\varphi) \quad (23)$$

$$-U''(\rho) - \frac{1}{\rho}U'(\rho) + \left[\frac{m^2}{\rho^2} + \tilde{\omega}^2 \rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} \right] U(\rho) = \tilde{\varepsilon}U(\rho) \quad (24)$$

Aquí m es un número entero, que corresponde al número cuántico orbital. La ecuación diferencial que depende de la parte angular tiene solución analítica inmediata dada por:

$$\Phi(\varphi) = \exp(im\varphi); \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (25)$$

2.2 Solución de la ecuación radial.

La ecuación diferencial (24) que describe el movimiento de la “partícula imaginaria” en la dirección radial puede resolverse sólo numéricamente, debido a la complicada forma del potencial efectivo. Para elaborar un algoritmo se ha reescrito la ecuación en la forma del problema de Sturm-Liouville

$$-U''(\rho) - \frac{1}{\rho}U'(\rho) + V(\rho)U(\rho) = 0; \quad 0 < \rho < \infty \quad (26)$$

$$V(\rho) = \frac{m^2}{\rho^2} + \tilde{\omega}^2 \rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} - \tilde{\varepsilon} \quad (27)$$

con las condiciones de frontera:

$$U'(0) = 0; \quad U(\rho_{\max}) = 0; \quad \rho_{\max} \rightarrow \infty \quad (28)$$

La primera de estas dos condiciones permite evitar la singularidad en el segundo término de la ecuación (26) para $\rho = 0$. Sin embargo, ésta es insuficiente para compensar otra singularidad que se encuentra contenida en el primer término en la expresión del potencial efectivo — ecuación (27) — para $\rho = 0$. Para evitar esta última singularidad se sugiere un cambio de variables:

$$U(\rho) = \rho^m W(\rho) \quad (29)$$

Sustituyendo (29) en (26) se obtiene:

$$-W''(\rho) - \frac{2m+1}{\rho} W'(\rho) + \left[\tilde{\omega}^2 \rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} - \tilde{\varepsilon} \right] W(\rho) = 0 \quad (30)$$

con las condiciones de frontera:

$$W'(0)/W(0) = 2\tau \rho / (2m+1) \sqrt{\rho^2 + d_h^2} \rightarrow 0; \quad W(\rho_{\max}) = 0; \quad \rho_{\max} \rightarrow \infty \quad (31)$$

La primera de estas condiciones nos permite compensar las singularidades que se presentan en la ecuación (30). Para resolver el problema de contorno dado por las ecuaciones (30) y (31) se requiere una técnica numérica. En este caso particular ha sido aplicado el *Método de Barrido Trigonométrico* que permite reducir el problema de contorno para una ecuación diferencial de segundo orden a un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden. En este método se utiliza el cambio de variables:

$$W(\rho) = A(\rho) \cos \theta(\rho); \quad W'(\rho) = A(\rho) \operatorname{sen} \theta(\rho) \quad (32)$$

Al sustituir (32) en (30) después manipulaciones algebraicas se obtiene la ecuación diferencial de primer orden respecto a la función $\rho(\theta)$:

$$\theta' = -\text{sen}^2\theta - \left(\frac{2m+1}{\rho}\right)\text{sen}\theta\cos\theta + \left(\tilde{\omega}^2\rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} - \tilde{\varepsilon}\right)\cos^2\theta \quad (33)$$

La primera condición de frontera (31) expresada para la función $\rho(\theta)$ adquiere la forma:

$$\theta(0) = \text{arctg} \left[\frac{2\tau\rho}{(2m+1)\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} \right]_{\rho \rightarrow 0} \quad (33.a)$$

La ecuación (33) junto con la condición inicial (33.a) forman un problema de Cauchy que tiene solución única para cada valor de la energía $\tilde{\varepsilon}$ la cual podemos designar como $\rho(\theta, \tilde{\varepsilon})$. La segunda condición de frontera (31) entonces nos da una ecuación trascendente respecto las energías $\tilde{\varepsilon}$:

$$\theta(\rho_{\max}, \tilde{\varepsilon}) = -\frac{\pi}{2} - \pi n; \quad \rho_{\max} \rightarrow \infty; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (33.b)$$

donde n es el número cuántico radial. La solución del problema de Cauchy se puede encontrar empleando un método numérico convencional, por ejemplo el método Runge-Kutta. Una vez encontradas la función de onda $\rho(\theta)$ y la energía $\tilde{\varepsilon}$, es posible obtener la función $A(\rho)$ mediante la integración de:

$$A(\rho) = \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^\rho \left[\text{sen}2\theta \left(1 + \tilde{\omega}^2\rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} - \tilde{\varepsilon} \right) - \frac{2m+1}{\rho} \text{sen}^2\theta \right] d\rho \right] \quad (34)$$

2.3 Densidad de Probabilidad de la distribución de carga

En concordancia con la hipótesis de De Broglie, $\psi(\vec{r}, t)$ puede interpretarse como la amplitud de probabilidad de la presencia de la partícula en una región del espacio. Ya que las posibles posiciones de la partícula forman un continuo, la probabilidad de encontrarla en un cierto volumen $d^3r = dx dy dz$, en un tiempo t , es proporcional a d^3r . Es por eso que la probabilidad puede definirse a partir de $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, que puede ser interpretada como la densidad de probabilidad que satisface:

$$P(\vec{r}, t)d^3r = C|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (35.a)$$

Donde C es una constante de normalización. Además, teniendo en cuenta que $\psi(\vec{r}, t)$ es una función compleja, la intensidad del campo materia será el producto de la función ψ con su complejo conjugado ψ^* :

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t)\psi^*(\vec{r}, t) \quad (35.b)$$

Para el caso de las dos partículas en QWWs cruzados, se ha considerado una solución estacionaria para la ecuación de onda dada por:

$$\Psi(x, y, t) = \Psi(x, y) \exp(-i\varepsilon_{n,m}t/\hbar) = \Psi(\rho, \varphi) \exp(-i\varepsilon_{n,m}t/\hbar) \quad (36)$$

En el último término de (36) se ha tenido en cuenta que este problema puede expresarse para una partícula hipotética en un campo central.

A partir de (35.a), la probabilidad $P(\rho, \varphi)d\rho d\varphi$ de encontrar una partícula entre ρ y $\rho + d\rho$ y φ y $\varphi + d\varphi$ esta dada por:

$$P(\rho, \varphi)d\rho d\varphi = U_{n,m}^*(\rho)\Phi_m^*(\varphi)U_{n,m}(\rho)\Phi_m(\varphi)\rho d\rho d\varphi \quad (37)$$

Donde ρ está asociado con la proporcionalidad del elemento diferencial en coordenadas polares. En esta expresión se ha tenido en cuenta que la función de onda estacionaria (36) permite que la densidad de probabilidad sea independiente del tiempo.

La expresión (25) para la función de onda angular conduce a $\Phi_m(\varphi)\Phi_m^*(\varphi) = 1$ y por lo tanto la densidad de probabilidad depende únicamente de ρ . Es por esto que la función de densidad de probabilidad para dos partículas en hilos cuánticos cruzados entre sí puede expresarse como:

$$P(\rho) = U_{n,m}^*(\rho)U_{n,m}(\rho)\rho \quad (38)$$

3. Resultados

3.1 Análisis de los casos límite de confinamiento débil y fuerte.

Aunque la ecuación diferencial que describe el movimiento relativo en el caso general no puede resolverse en una forma analítica, en los límites $l \rightarrow 0$ y $l \rightarrow \infty$ esta ecuación tiene soluciones exactas que conducen a expresiones analíticas para el espectro energético.

Para el primer caso en ($l \rightarrow 0$), el término del potencial de confinamiento es el que adquiere relevancia en el potencial efectivo V_{ef} (22), ya que la raíz cuadrada de la frecuencia característica $\tilde{\omega}$ es inversamente proporcional a la longitud del hilo, ($\tilde{\omega} \rightarrow \infty$), por lo tanto la ecuación de onda radial se reduce a:

$$U''(\rho) + \frac{1}{\rho}U'(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2}U(\rho) + (\tilde{\varepsilon} - \tilde{\omega}^2\rho^2)U(\rho) = 0 \quad (39)$$

Esta es la ecuación de onda para un oscilador circular, cuya solución no depende del tipo de interacción y puede escribirse como:

$$U(\rho) = \rho^{|m|} \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{\omega}\rho^2\right)F(\rho) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2.. \quad (40)$$

Al sustituir (40) en (39), esta última se convierte en:

$$F'' + \left(\frac{2|m|+1}{\rho} - 2\tilde{\omega}\rho\right)F' - [2\tilde{\omega}(|m|+1) + \tilde{\varepsilon}]F = 0 \quad (41)$$

Haciendo el cambio de variable $t = \tilde{\omega}\rho^2$, la ecuación (41) se transforma en una ecuación de Kummer [36]:

$$t \frac{d^2F}{dt^2} + [(|m|+1) - t] \frac{dF}{dt} - \left[\frac{1}{2}(|m|+1) - \frac{\tilde{\varepsilon}}{4\tilde{\omega}}\right]F = 0 \quad (42)$$

y sus soluciones están dadas las series hipergeométricas confluentes:

$$F(t) = {}_1F_1(a, |m|+1; t) \quad (43)$$

Donde:

$$a = \frac{1}{2}(|m|+1) - \frac{\tilde{\varepsilon}}{4\tilde{\omega}} \quad (44.a)$$

Para valores grandes de t , la función $F(t)$ divergirá como e^t , sin embargo esto se puede evitar, sí y solo sí:

$$a = -n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (45)$$

En este caso las series confluentes se convierten en polinomios y en particular para ${}_1F_1(-n, |m|+1; t)$ éstos corresponden a los de Laguerre $L_n^{(|m|)}(t)$ [37]. La función de onda que satisface la ecuación (39) es:

$$U_{n,m}(\rho) = C_{n,m} r^m e^{-\frac{\tilde{\omega}}{2}\rho^2} F(\tilde{\omega}\rho^2); \quad F(\tilde{\omega}\rho^2) = \frac{n!}{(|m|+1)_n} L_n^{(|m|)}(\tilde{\omega}\rho^2) \quad (46)$$

$$L_n^{(|m|)}(t) = \frac{t^{-|m|} e^t}{n!} \frac{d^n}{dt^n} (e^{-t} t^{n+|m|}) \quad ; \quad t = \tilde{\omega}\rho^2 \quad (47)$$

Teniendo en cuenta la expresión (45) los valores propios de la energía total para el sistema de dos partículas cuando $l \rightarrow 0$ se aproximan a:

$$\tilde{\varepsilon} = 2\tilde{\omega}(2n + |m| + 1) \quad (48)$$

En otro límite, cuando $l \rightarrow \infty$ el potencial de interacción electrostática es el que determina en gran medida el comportamiento del espectro energético total de la partícula, de acuerdo con esto la ecuación de onda puede escribirse como:

$$U''(\rho) + \frac{1}{\rho}U'(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2}U(\rho) + \left(\tilde{\varepsilon} - \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}} \right)U(\rho) = 0 \quad (49)$$

En el caso de atracción ($\tau = -1$) esta ecuación diferencial radial es semejante a la de un átomo hidrogenoide en dos dimensiones. Con base en el método de escalamiento dimensional [37] este problema puede resolverse exactamente de forma similar al átomo de hidrógeno en tres dimensiones. Utilizando la sustitución:

$$U = r^{-1/2}\Phi; \quad |\Phi|^2 = r|U|^2 \quad (50)$$

La ecuación (49) se reduce a la siguiente:

$$-\frac{1}{2}\Phi''(\rho) - \frac{(m^2 - 1/4)}{2\rho^2}\Phi(\rho) - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + d_h^2}}\Phi(\rho) = \frac{\tilde{\varepsilon}}{2}\Phi(\rho) \quad (51)$$

Expresada de esta manera, (cuando $d_h = 0$) la ecuación (51) tiene solución analítica ya que su forma es idéntica a la ecuación de onda para el átomo de hidrógeno en tres dimensiones. La diferencia se encuentra en la definición del número cuántico del momento angular orbital l , ya que en este caso ha sido reemplazado $l \rightarrow m - \frac{1}{2}$. Es por eso que los valores propios de la energía para el átomo hidrogenoide en dos dimensiones están dados por:

$$\tilde{\varepsilon}_{n,m} = -\frac{4}{[2(n+m)+1]^2} \quad n = 0,1,2... \quad (52)$$

Para analizar el caso de repulsión ($\tau = 1$) en el límite $l \rightarrow \infty$ hay que tener en cuenta que la energía cinética para esta situación es despreciable en comparación con la energía potencial, esta última contiene dos términos del mismo orden, la energía de confinamiento que trata de acercar a las partículas y la energía de repulsión entre ellas.

Para estimar el aporte de ambas se pueden utilizar las coordenadas y las energías según las fórmulas, $\rho = l\tilde{\rho}$, $H = \frac{\bar{H}}{l^2}$ y estimar la energía renormalizada como:

$$\bar{H}_{l \rightarrow \infty} \approx \tilde{\rho}^2 + \frac{2l^2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 l^2 + d_h^2}} \quad (53)$$

En este límite (cuasi-clásico) la energía renormalizada del estado base coincide con el mínimo del Hamiltoniano, que puede calcularse fácilmente para el caso $d_h = 0$:

$$H_{\rightarrow \infty} \propto H(\rho_{\min}) = 3l^{-4/3}; \quad \rho_{\min} = l^{1/3} \quad (54)$$

En la tabla 1 están consignados los valores para los primeros niveles de energía de acuerdo con las expresiones encontradas en (48) y (52), cuando $l \rightarrow 0$ y $l \rightarrow \infty$, y para este último en el caso particular de repulsión.

n	m	$\tilde{\varepsilon}_{n,m} / \tilde{\omega} [R_y^* a_0^{*2}]$	$\tilde{\varepsilon}_{n,m} [R_y^*]$
0	0	2	-4
1	0	6	0,444
2	0	10	-0,16
3	0	14	-0,082
0	1	4	-0,444
1	1	8	-0,16
2	1	12	-0,082
3	1	16	-0,049
0	2	6	-0,16
1	2	10	-0,082
2	2	14	-0,049
3	2	18	-0,033

Tabla 1: Algunos de los valores propios de la energía para el sistema de dos partículas en QWWs cruzados entre sí. $\tilde{\varepsilon}_{n,m} / \tilde{\omega}$ hace referencia al límite $l \rightarrow 0$ y $\tilde{\varepsilon}_{n,m}$ hace referencia al caso particular del excitón en el límite $l \rightarrow \infty$.

Es posible un análisis más detallado del comportamiento de los niveles de energía con la longitud del hilo considerando los resultados obtenidos por el método numérico de

Barrido Trigonométrico. Se obtuvo los primeros niveles de energía y se construyeron las curvas correspondientes a la variación de estos niveles en función del parámetro de la longitud l . La figura 3 muestra las curvas para el caso de repulsión y el efecto de la variación de la longitud sobre el potencial efectivo. La figura 3(a) muestra como varían las contribuciones de los potenciales de confinamiento e interacción electrostática repulsiva de acuerdo con la variación de l . A medida que l aumenta, $\tilde{\omega}$ disminuye y el potencial electrostático adquiere mayor importancia en comparación con la contribución del potencial de confinamiento parabólico sobre el hamiltoniano; por ejemplo en el caso de $\tilde{\omega} = 0.005$ ($l = 14.142$) la barrera de potencial electrostática determina en mayor proporción el perfil del potencial efectivo al que se somete el portador de carga. Sin embargo, cuando l disminuye, $\tilde{\omega}$ se hace mayor y por lo tanto el potencial de confinamiento parabólico es el que caracteriza al potencial efectivo, como se muestra en el caso de $\tilde{\omega} = 1.0$ ($l = 1.0$).

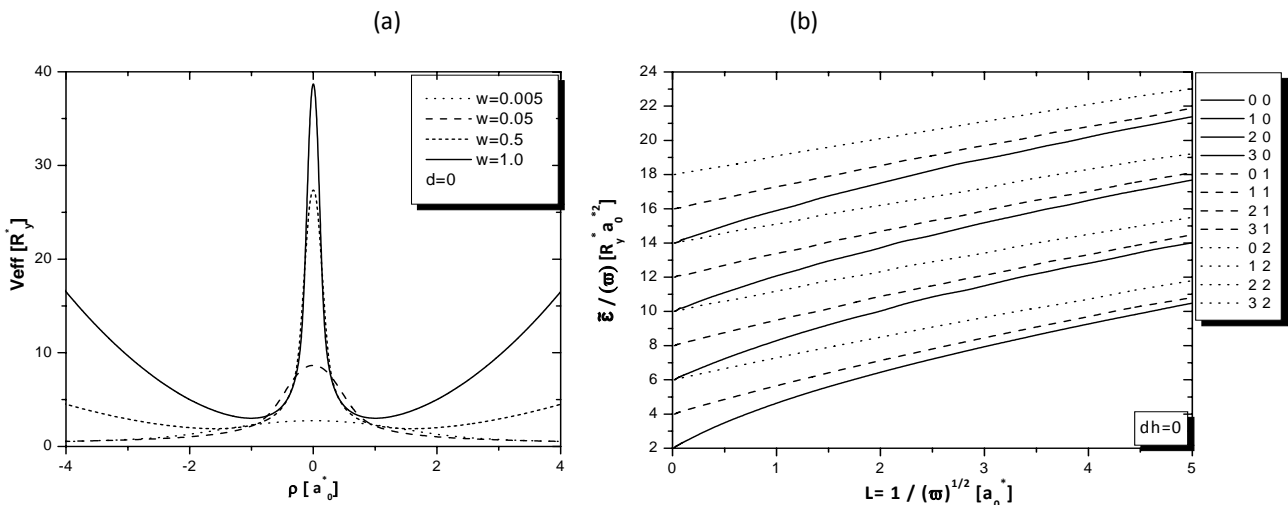


Figura 3: Efecto de la variación del parámetro de longitud cuando $\tau = +1$. (a) Efecto sobre el potencial efectivo al que se somete el sistema. (b) Efectos sobre los niveles energéticos $\tilde{\epsilon}_{n,m} / \tilde{\omega}$ cuando $l \rightarrow 0$. Las unidades están definidas a partir del Rydberg efectivo y el radio de Bohr⁸.

El efecto de la variación del parámetro l sobre potencial de confinamiento afecta directamente a los niveles energéticos como se muestra en la figura 3(b)⁹. En este caso es

⁸ Las parejas (n,m) de números cuánticos se representan en la parte izquierda de 3(b).

de gran utilidad la expresión analítica para la energía (48) encontrada en el límite cuando $l \rightarrow 0$, ya que ha permitido verificar como los niveles energéticos obtenidos por medio del método numérico coinciden con los valores de la tabla I para un oscilador armónico en dos dimensiones con una frecuencia característica $\tilde{\omega}$. A medida que va aumentando el valor del parámetro l , el potencial de confinamiento disminuye y los niveles energéticos decrecen. En la figura 4(a) se muestra este efecto sobre los niveles energéticos, donde se consideró valores para el parámetro l entre 8-16 a_0^* . A partir de esta gráfica es posible apreciar como el comportamiento de los niveles energéticos $\tilde{\mathcal{E}}_{n,m}$ es semejante a la expresión (54) cuando $l \rightarrow \infty$. Además se observó como las curvas tienden a fundirse cuando los niveles coinciden con el número cuántico radial n . Mientras que en la figura 4(b) se muestra como a medida que la longitud del hilo aumenta la energía comienza a manifestar su proporcionalidad con la longitud el hilo dada por $\tilde{\mathcal{E}}_{\rightarrow\infty} \propto l^{-4/3}$.

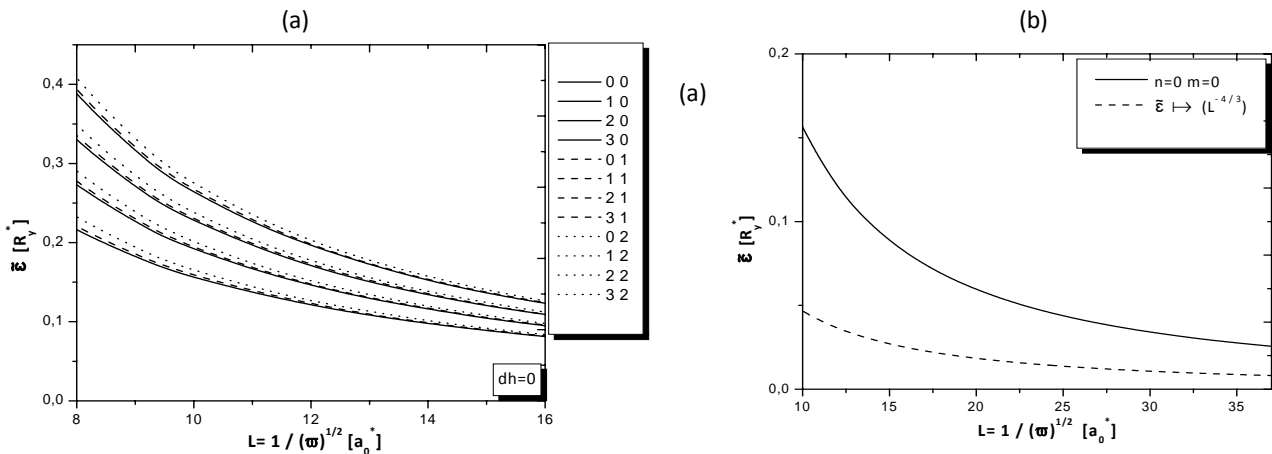


Figura 4: (a) Efecto de la variación del parámetro de la longitud para el límite $l \rightarrow \infty$ sobre los niveles energéticos $\tilde{\mathcal{E}}_{n,m}$. (b) Comparación entre la curva del nivel fundamental de energía $\tilde{\mathcal{E}}_{0,0}$ y $\tilde{\mathcal{E}} \propto l^{-4/3}$ en el caso de $l \rightarrow \infty$

En lo que respecta al caso de atracción, la figura 5(a) muestra el efecto de la variación de la longitud del hilo sobre el potencial efectivo y 5(b) los niveles energéticos para el caso de la interacción electrón-hueco. Cuando el parámetro l es pequeño, el potencial de

⁹ Es importante tener en cuenta que para $l \rightarrow 0$ se ha graficado $\tilde{\mathcal{E}}_{n,m} / \tilde{\omega}$ para mostrar claramente la semejanza con el oscilar en dos dimensiones.

confinamiento parabólico es el que determina el espectro energético y es por esto que el aporte del potencial de interacción entre electrón-hueco a la energía total es irrelevante. Nuevamente, en la gráfica 5(b) se verificó la distribución de los niveles energéticos cuando $l \rightarrow 0$ a partir de la expresión analítica para la energía (48) cuyos valores son semejantes a los consignados en la Tabla I. Por lo tanto, en el límite $l \rightarrow 0$ los espectros energéticos de los casos de repulsión y atracción coinciden con el espectro de un oscilador armónico circular en dos dimensiones. Sin embargo cuando el potencial repulsivo empieza a aumentar su contribución a la energía total, el parámetro l ha aumentado, el potencial de confinamiento ha disminuido y los niveles energéticos han decrecido. En la figura (6) se aprecia como en los valores próximos a $l \approx 7a_0^*$ el efecto de confinamiento se ha reducido significativamente y los niveles energéticos empiezan aproximarse a la situación del átomo de hidrógeno en dos dimensiones.

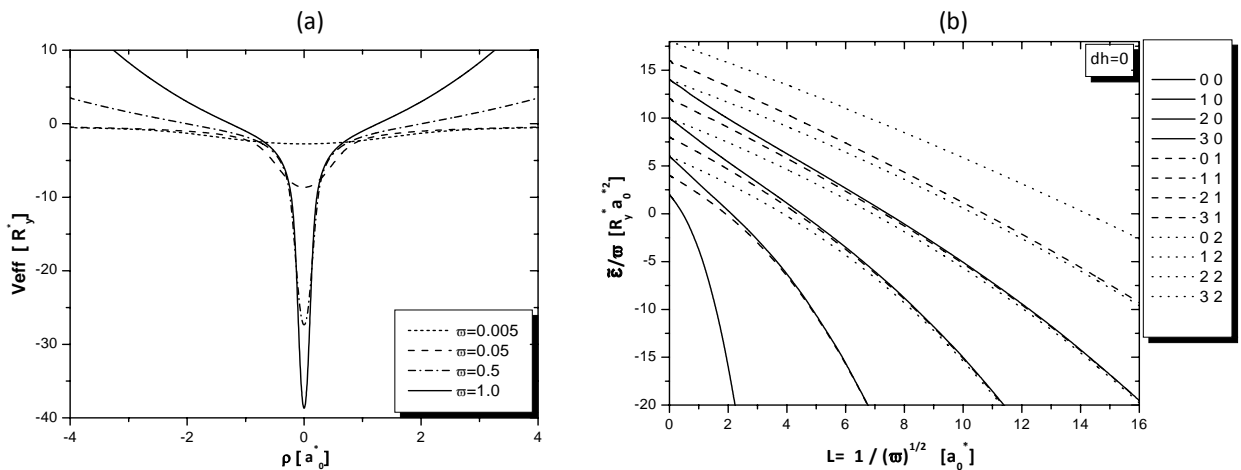


Figura 5: Efecto de la variación del parámetro de longitud cuando $\tau = -1$. (a) Efecto sobre el potencial efectivo al que se somete el sistema. (b) Efectos sobre los niveles energéticos $\tilde{\epsilon}_{n,m} / \tilde{\omega}$ cuando $l \rightarrow 0$. Las unidades están definidas a partir del Rydberg efectivo y el radio de Bohr.

Por lo tanto, en el límite cuando $l \rightarrow \infty$, los niveles energéticos se comportan correctamente como se predijo a partir de la expresión analítica (52). Además es importante destacar que bajo estas circunstancias el nivel fundamental se encuentra fuertemente separado de los niveles excitados.

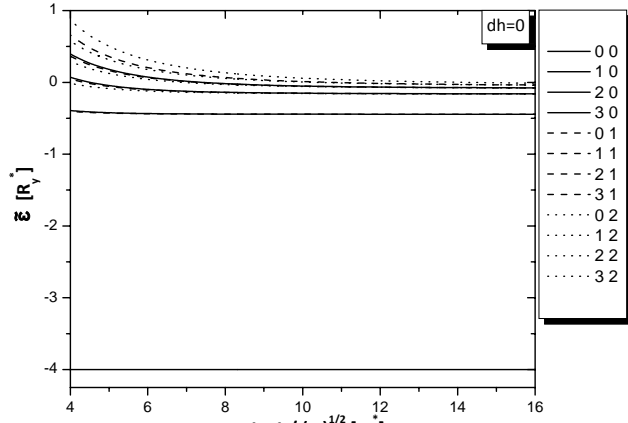


Figura 6: Efecto de la variación del parámetro $L = 1 / (\omega)^{1/2} [a_0]$ de la longitud para el limite $l \rightarrow \infty$ sobre los niveles energéticos $\tilde{\varepsilon}_{n,m}$. Bajo estas circunstancias el estado fundamental esta fuertemente separado del los estados excitado.

3.2 Efecto de la separación entre los QWWs en el espectro energético.

La variación de la distancia entre los hilos también tiene efectos sobre el espectro energético de los portadores de carga en QWWs cruzados. Se calculó los niveles de energía en función de la longitud del QWW teniendo en cuenta valores diferentes para la distancia entre los hilos d_h .

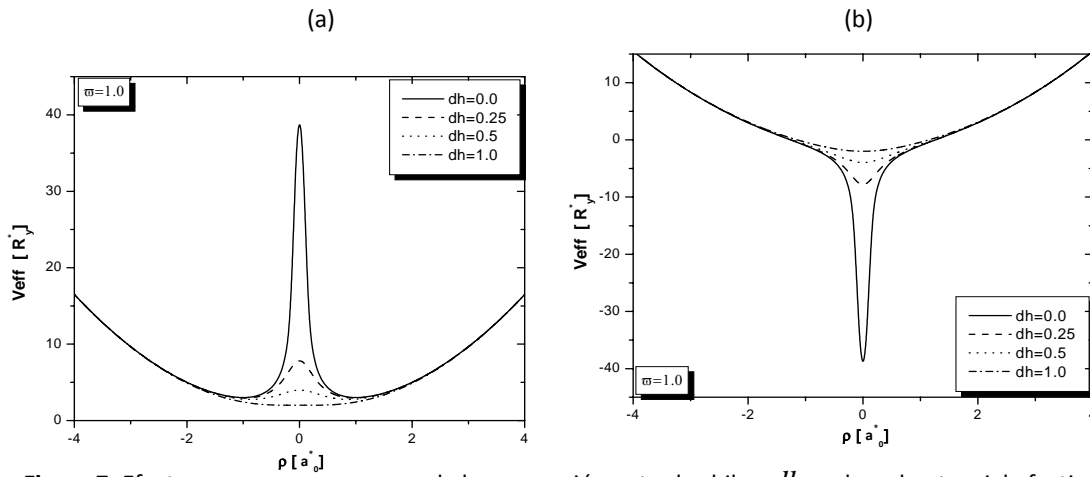


Figura 7: Efecto de la separación entre los hilos, dh , sobre el potencial efectivo. (a) Repulsión. (b) Atracción.

En la figura 7 se puede apreciar el efecto de la variación de la distancia entre los hilos sobre el potencial efectivo cuando $l = 1a_0^*$. De acuerdo con ésta, a medida que aumenta el parámetro d_h tanto la barrera de potencial en el caso de repulsión, como el pozo de potencial en caso de atracción se hacen más débiles.

Estos cambios en el potencial efectivo conducen a una variación en el espectro energético de los portadores de carga. En la figura 8 se muestra el efecto sobre los primeros niveles energéticos para el caso de repulsión. En ésta se observó un decrecimiento del espectro energético en el intervalo $l \approx 0 - 3a_0^*$. Sin embargo, debido a la naturaleza repulsiva del

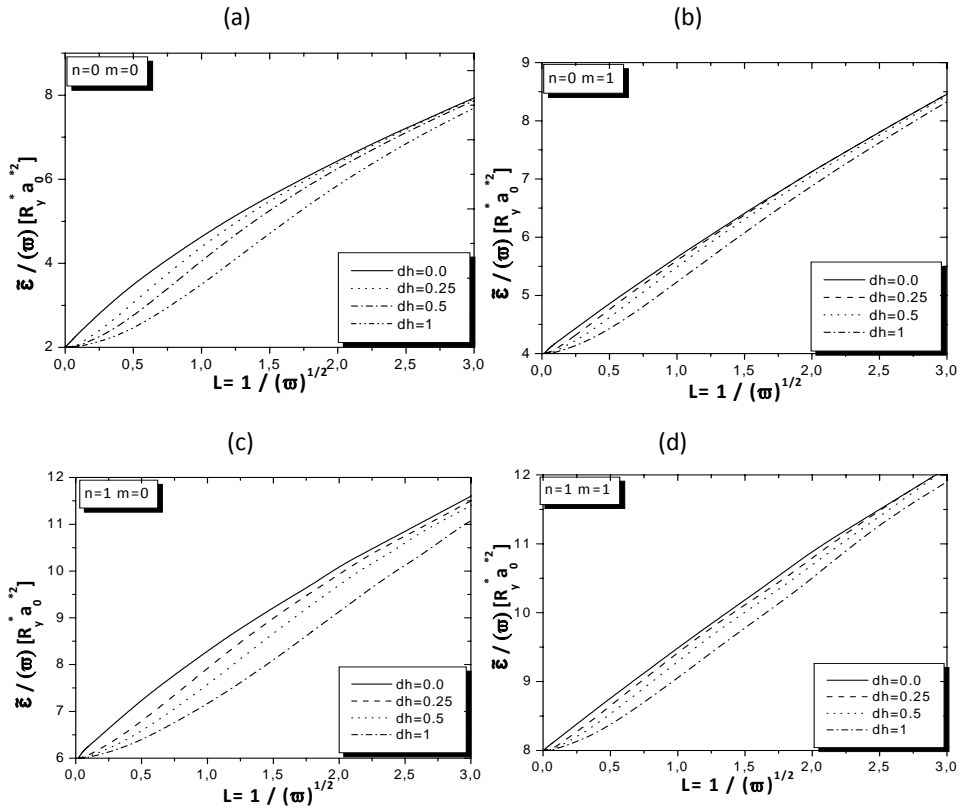


Figura 8: Efecto de la distancia entre los QWs, dh , sobre los niveles energético para $\tau = +1$. (a)

$$\tilde{\epsilon}_{0,0}/\tilde{\omega} \text{ (b) } \tilde{\epsilon}_{0,1}/\tilde{\omega} \text{ (c) } \tilde{\epsilon}_{1,0}/\tilde{\omega} \text{ (d) } \tilde{\epsilon}_{1,1}/\tilde{\omega}.$$

potencial de interacción entre las partículas, para valores mayores que $3a_0^*$ los cambios en el espectro son despreciables y por lo tanto ambas partículas se comportarán como si

estuviesen libres en cada QWW, teniendo en cuenta que tanto el potencial repulsivo y el potencial de confinamiento disminuyen significativamente para estos valores de l y d_h . Además, comparando las figuras (8a) - (8b) y (8c) - (8d) se observó que con el aumento del número cuántico orbital m el efecto de la variación del parámetro d_h disminuye. Esto se puede apreciar en la expresión para la ecuación diferencial relacionada con el movimiento radial (24). Para $m = 0$ el término centrífugo no aparece y cualquier cambio en la interacción electrostática se manifiesta con más fuerza que en el caso $m \neq 0$ en el que el término centrífugo sí contribuye.

Por otra parte, la figura 9 muestra el efecto de la variación de d_h sobre el estado fundamental y tres estados excitados en el caso electrón-hueco. Estas gráficas coinciden en el crecimiento de los niveles de energía cuando aumenta la distancia entre los hilos y se manifiesta con mayor fuerza con el aumento de la longitud del hilo. Teniendo en cuenta la energía renormalizada (53) es posible establecer que cuando $l \rightarrow 0$ el potencial de confinamiento gobierna la expresión del potencial efectivo y sin importar el parámetro d_h los resultados continúan siendo semejantes a los del oscilador circular.

No obstante, cuando $l \rightarrow \infty$ el término de atracción contribuye en mayor medida al potencial efectivo. De tal forma la expresión para la energía renormalizada puede expresarse proporcional a l de acuerdo con: $\bar{V}_c \propto -2l^3$ si $d_h = 0$ ó $\bar{V}_c \propto \frac{-2l^3}{d_h}$ si $d_h \neq 0$.

Y por lo tanto, a medida que aumenta la distancia entre los hilos d_h el potencial de atracción se debilita y los niveles de energía crecen. Además, se observa que el estado fundamental de energía aumenta rápidamente al variar d_h , en comparación con los demás estados excitados; ésta es una consecuencia de la estrecha relación entre el estado fundamental y la interacción electrostática que se manifiesta también en la fuerte separación entre el estado fundamental y el primer estado excitado.

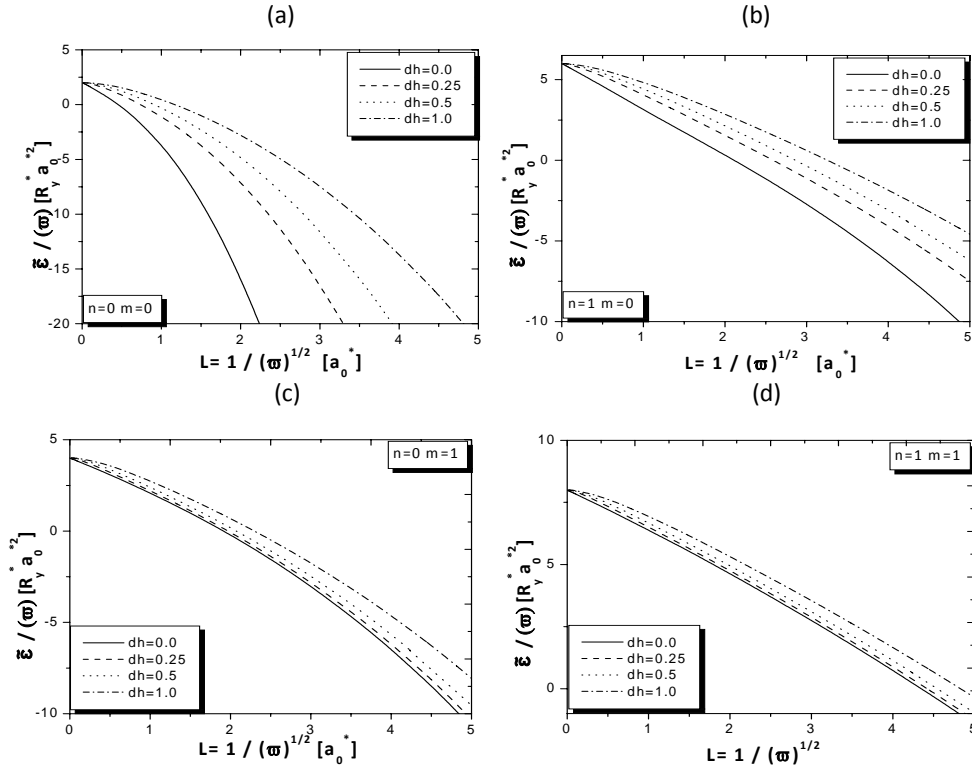


Figura 9: Efecto de la distancia entre los QWVs, dh , sobre los niveles energético para. $\tau = -1$ (a) $\tilde{\epsilon}_{0,0}/\tilde{\omega}$ (b) $\tilde{\epsilon}_{0,1}/\tilde{\omega}$ (c) $\tilde{\epsilon}_{1,0}/\tilde{\omega}$ (d) $\tilde{\epsilon}_{1,1}/\tilde{\omega}$.

3.3 Densidad de probabilidad de dos portadores de carga en QWVs cruzados.

Además de los niveles de energía de este sistema de dos portadores de carga en QWVs cruzados, también se encontró las correspondientes funciones de densidad de probabilidad asociadas con cada nivel energía $\tilde{\epsilon}_{n,m}$. Cuando se considera la partícula hipotética, es posible describir su función de densidad a partir de las gráficas de la parte superior de las figuras 10-11, mientras que las gráficas de la parte inferior de 10-11 representan la densidad de probabilidad total de encontrar el conjunto de parejas (x_1, x_2) que satisfacen la relación para cada ρ , teniendo en cuenta que $d_h = 0$ y que n, m es el par de números cuánticos asociados con la energía. Como se mencionó anteriormente, esta densidad de probabilidad depende únicamente de la densidad de probabilidad radial, y se determinar a partir de:

$$P(\rho) = |\psi_{n,m}(\rho)|^2 \rho = U_{n,m}^*(\rho) U_{n,m}(\rho) \rho = \rho^{2m+1} (W_{n,m}(\rho))^2 \quad (55)$$

Donde la función $W_{n,m}(\rho)$ (32) se obtuvo por el método numérico de *Barrido Trigonómico*. En la figura 10 se muestra las densidades de probabilidad para el caso de los dos electrones y en la figura 11 las densidades de probabilidad para el caso de electrón-hueco. En estas situaciones se consideró los valores para $n = 0,1,2$ con el mismo número cuántico orbital $m = 0$, cuando $\tilde{\omega} = 0.5$. Tanto en el caso de atracción como el caso de repulsión el número de nodos en la función de onda, $-n+1$ máximos en la función de densidad—, coincide con el número cuántico radial n . Por ejemplo, para la función de onda en $n = 0$ no se tiene ningún nodo radial —un máximo—, en $n = 1$ se tiene uno —dos máximos— y así sucesivamente. Además, por inspección de las figuras se encuentra que la densidad de probabilidad radial para cada uno de los diferentes pares de números cuánticos tiene valores apreciables sólo en intervalos restringidos de la coordenada radial.

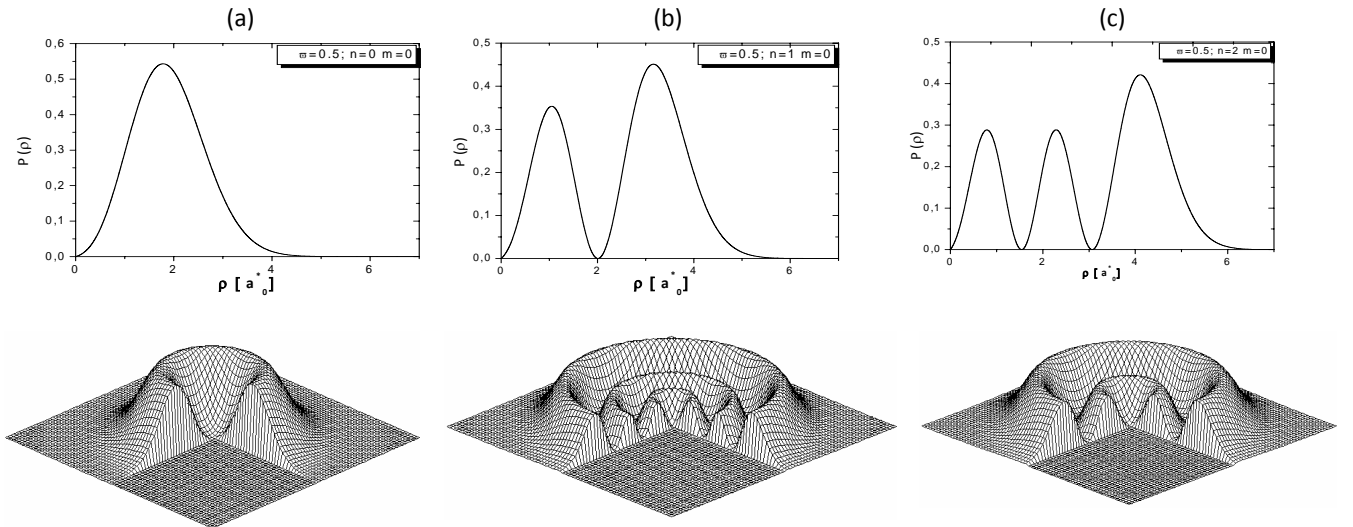


Figura 10: Densidad de probabilidad para dos electrones en QWVs cruzados, ($d_h = 0$, $\tilde{\omega} = 0.5$) en el estado fundamental y primeros estados excitados En la parte superior la densidad de probabilidad $|\psi(\rho)|^2$. Para $m = 0$ (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 2$ En la parte inferior la densidad de probabilidad $|\psi(x_1, x_2)|^2$

A partir de la figura 10 es posible estimar los intervalos más probables de encontrar a la partícula cuando se encuentra bajo un potencial de repulsión asociado con la energía $\tilde{\varepsilon}_{n,m}$. En el caso en el que $n = 0$ y $m = 0$, el intervalo es $(1.6 - 1.8)a_0^*$; si $n = 1$ y $m = 0$, el intervalo es $(3.0 - 3.2)a_0^*$ y para el estado $n = 2$ y $m = 0$ el intervalo es $(4.6 - 4.8)a_0^*$. Para el caso de atracción, la figura 11 permite estimar los intervalos más probables de encontrar a la partícula con la energía $\tilde{\varepsilon}_{n,m}$. Cuando $n = 0$ y $m = 0$, el intervalo es $(0.16 - 0.36)a_0^*$; si $n = 1$ y $m = 0$, el intervalo es $(1.6 - 2.0)a_0^*$ y para el estado $n = 2$ y $m = 0$ el intervalo es $(3.0 - 3.3)a_0^*$.

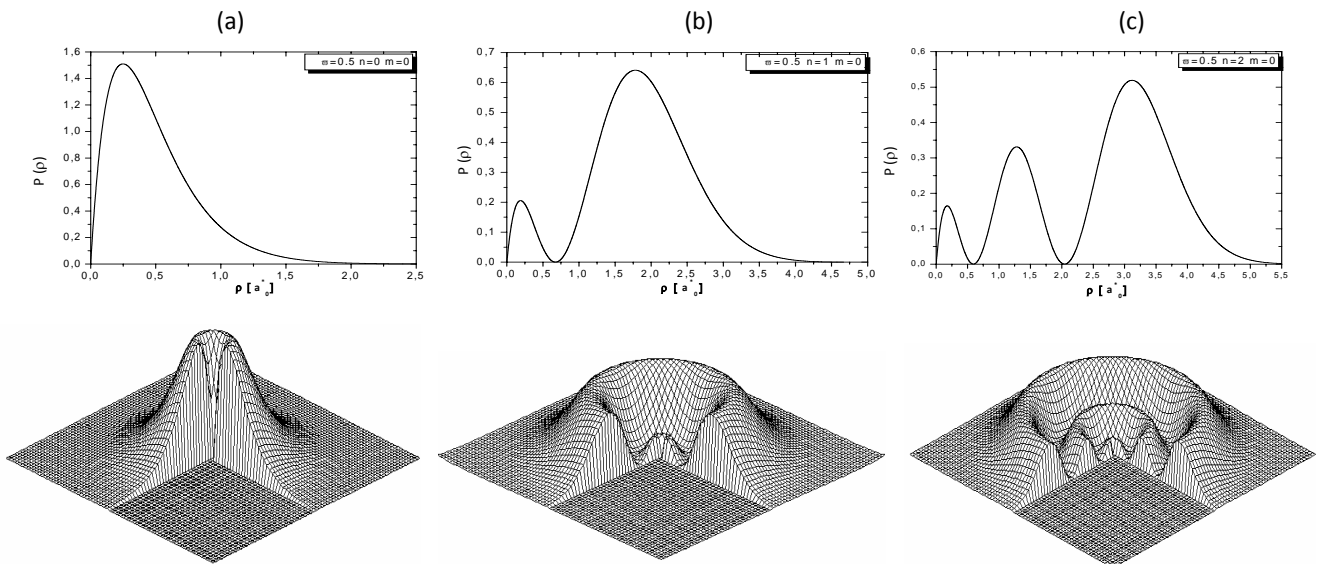


Figura 11: Densidad de probabilidad para el par electrón-hueco en QWVs cruzados, ($d_h = 0$, $\tilde{\omega} = 0.5$) en el estado fundamental y primeros estados excitados En la parte superior la densidad de probabilidad $|\psi(\rho)|^2$. Para $m = 0$ (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 2$. En la parte inferior la densidad de probabilidad $|\psi(x_1, x_2)|^2$

En las figuras 12-13 se consideró por separado las densidades de probabilidad en el caso de repulsión y atracción, respectivamente para tres valores de n ($n = 0, 1, 2$) con diferentes valores del número cuántico orbital, ($m = 0, 1, 2$). En el caso de repulsión se puede observar como el máximo de la densidad de probabilidad se desplaza a la derecha y su densidad de probabilidad aumenta ligeramente cuando aumenta m .

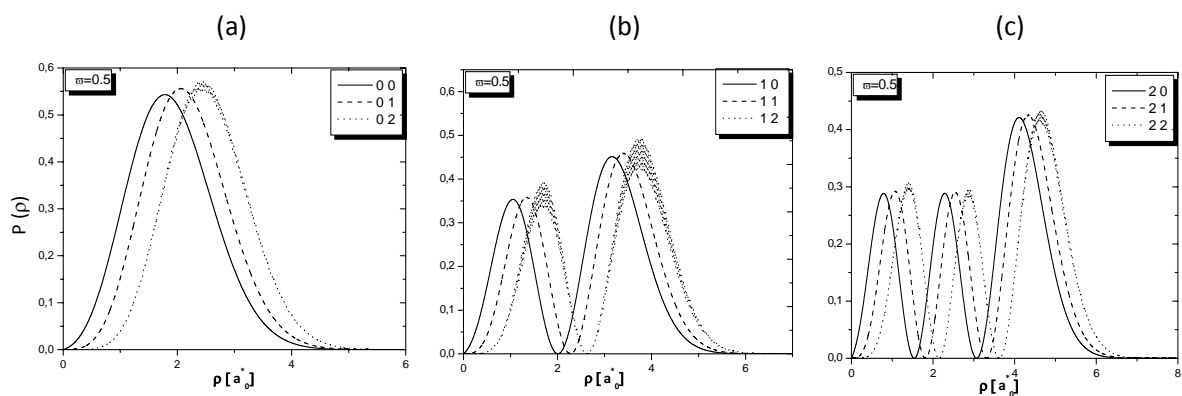


Figura 12: Comparación de la Densidad de probabilidad $|\psi(\rho)|^2$ de dos electrones cuando $m = 0,1,2$ para diferentes valores del número cuántico radial. (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 0$.

En el caso de atracción se observa que los máximos se desplazan a la derecha pero su densidad de probabilidad disminuye con el aumento de m . En el caso particular de la figura 13(a), el estado de mayor densidad de probabilidad se encuentra en el estado fundamental, donde el máximo de la función de densidad se encuentra distanciado apreciablemente de los máximos para m mayores a cero.

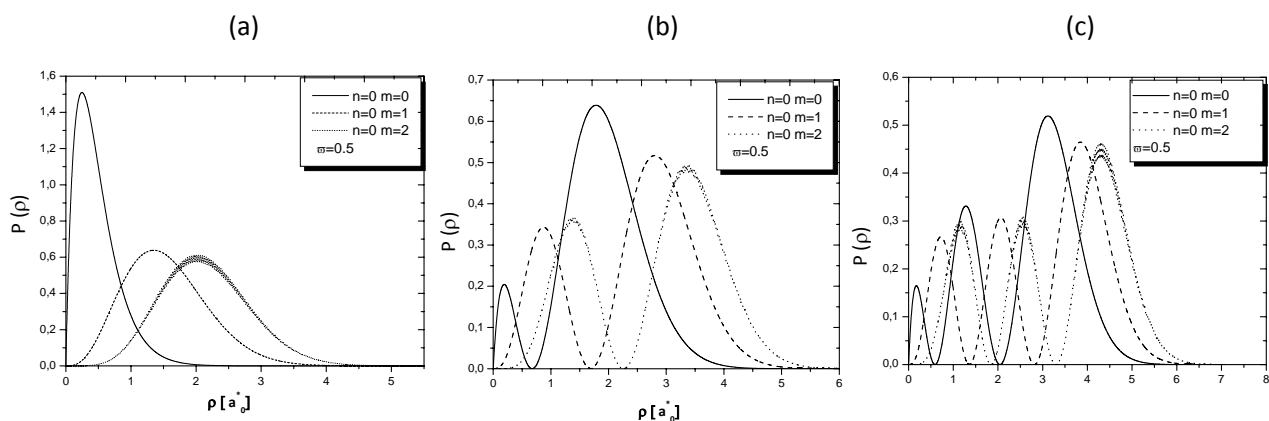


Figura 12: Comparación de la Densidad de probabilidad $|\psi(\rho)|^2$ del excitón cuando $m = 0,1,2$ para diferentes valores del número cuántico radial. (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 0$.

4. Conclusiones

- Se han calculado los niveles energéticos y las densidades de probabilidad asociadas con estos niveles para un sistema formado por dos partículas confinadas cada en un QWW con el confinamiento parabólico a lo largo de ellos y cruzados entre sí.
- Se han obtenido las soluciones analíticas para los límites de l , cuando $l \rightarrow 0$ y $l \rightarrow \infty$. En el primer caso, el espectro de energía es similar al de un oscilador circular, sin importar el tipo de interacción que exista entre las dos partículas. Al contrario, cuando $l \rightarrow \infty$ el espectro energético del sistema depende fuertemente del tipo de interacción. Para el caso de atracción los niveles de energía casi no dependen de la longitud del hilo y el espectro es similar al de átomo de hidrógeno en dos dimensiones, mientras que para el caso de repulsión las energías de los correspondientes niveles disminuyen con el aumento de la longitud de los hilos como $\propto l^{-4/3}$.
- Se ha encontrado que con el aumento de la distancia entre los hilos los niveles de energía del excitón suben y en forma más apreciable para el estado fundamental; mientras que para el caso de los dos electrones los niveles de energía bajan levemente.

5. Referencias

1. M.A. Reed and W.P. Kirk, *Nanostructure Physics and Fabrication*, Academic Press, (1989)
2. J.Davies, *The physics of Low-Dimensional Semiconductors: an introduction*, Cambridge University Press, (1998).
3. Zh., I. Alferov *Double Heterostructure Concept and its Applications in Physics, Electronics and Technology*, Nobel Lecture, (2000).
4. R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* 33, 827 (1974).
5. L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu., *Appl. Phys. Lett.* 24, 8227 (1994).
6. P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan, and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 41, 635 (1982).
7. M. A. Reed, R. T. Bate, K. Bradshaw, W. M. Duncan, W. Frensley and J.W. Lee, H. D. Smith, *J. Vacuum Sci. Technol. B*, 4, 358 (1986).
8. J. Cibert, P. M Petroff, G. J Dolan, S. J.Pearton, A. C. Gossard, and J. H. English, *Appl. Phys. Lett.* 49, 1275 (1986).
9. Y. Arakawa and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* 40, 939 (1982).
10. H. Temkin, G. J. Dolan, M. B. Panish, and S. N. G. Chu, *Appl.Phys. Lett.* 50, 413 (1987).
11. H.G. Craighead, R. E. Howard, P.F. Liao, W.J. Skocpol and L.D. Jackel, *Science* 221,4606(1983).
12. M. B. Stern, H. G. Craighead, P. F. Liao and P. M. Mankiewich, *Appl. Phys. Lett.* 45, 410 (1984).
13. U. Wieser, D. lamundo, U. Kunze, T. Hackbarth and U. König, *Semicond. Sci. Technol.* 15 862 (2000).
14. M. Higashiwaki, M. Yamamoto, S. Shimomura, and S. Hiyamizu, *Appl. Phys. Lett.* 71, 2005 (1997).
15. M. Walther, E. Kapon, D. M. Hwang, E. Colas, and L. Nunes, *Phys. Rev. B* 45, 6333 (1992).
16. X. Wang, M. Ogura, and H. Matsuhata, *Appl. Phys. Lett.* 66, 1506 (1995).
17. I. N. Stranski and L. Von Krastanow, *Akad. Wiss. Let. Mainz Math. Natur K1 IIb* 146, 797 (1939).
18. J. Y. Marzin, J.M. Gérard, A. Izraël, and D. Barrier, *Phys. Rev. Lett.* 73, 716 (1994).
19. G. W. Bryant, *Phys. Rev. Lett.* 59, 1140 (1987).
20. T. Sako and G. H. Diercksen, *J. Phys. Condens. Matter* 17, 5159 (2005).
21. T. Sako and G. H. Diercksen, *J. Phys. Condens. Matter* 20, 155202 (2008).
22. D. Pfannkuche, V. Gudmundsson and P. Maksym, *Phys. Rev. Lett. B* 47, 2244 (1993).
23. P.A. Maksym and T. Chakraborty, *Phys. Rev. Lett.* 65, 108 (1990).
24. H. Pan and J.L. Zhu, *J. Phys: Condensed Matter* 15, 7287 (2003).
25. F. Bolton, *Sol. Stat. Elec.* 37, 1159 (1994).

26. A. Matulis and F.M. Peeters, *Phys. Condens. Matter* 6, 7751 (1994).
27. A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, *Phys. Rev. B* 61, 15887 (2000).
28. J. Zhu Y. Jing-Zhi , Zhi-Qiang, and K. Yoshiyuki, *Phys. Condens. Matter* 8, 7857 (1996).
29. J. Zhu, Z. Dai and X. Hu, *Phys. Rev. B* 68, 45324 (2003).
30. D.I. Mikhailov and F.J. Betancur, *Phys. Stat. Sol. (b)* 213,325 (1999).
31. J. Betancur, W. Gutiérrez, D.I. Mikhailov and H. Paredes, *Braz. J. Phys.* (2006).
32. M. Fabrizio, A. O. Gogolin, and S. Scheidl, *Phys. Rev. Lett.* 72, 2235 (1994).
33. S. Glutsch and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* 47, 4315 (1993).
34. J.A. Reyes and M. del Castillo-Mussot, *Phys. Rev. B* 57, 1690 (1998).
35. Y. Sidor, B. Patoens, F.M. Peeters, T. Ben, A. Ponce, F.M. Sales, S.I. Molina, D. Fuster, L. González and Y. González, *Phys. Condens. Matter* arXiv:cond-mat/0702206v1 (2007).
36. C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, Wiley (1996).
37. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer (1994).
38. M. Abramowicz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (1972).
39. D. Herschbach, J. Avery and O. Goscinski, *Dimensional Scaling in Chemical Physics*, Kluwer Academic Publisher, (1993)