

APROXIMACIÓN ADIABÁTICA PARA SISTEMAS DE DOS  
PARTÍCULAS EN PUNTOS CUÁNTICOS  
AUTOENSAMBLADOS

LUIS FRANCISCO GARCÍA RUSSI

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2007

APROXIMACIÓN ADIABÁTICA PARA SISTEMAS DE DOS  
PARTÍCULAS EN PUNTOS CUÁNTICOS  
AUTOENSAMBLADOS

LUÍS FRANCISCO GARCÍA RUSSI

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

Director:  
Dr. ILIA D. MIKHAILOV

Codirector:  
Dr. JAVIER BETANCUR CASTAÑO



UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2007

*A mi madre  
Blanca Russi de García  
divino efluvio de vida,  
amor, cariño y  
comprensión.*

# AGRADECIMIENTOS

---

---

Quiero agradecer a mi Padre Dios por haberme dado la fortaleza para adelantar mis estudios y haber propiciado todas las circunstancias que favorecieron mi superación académica.

A la Universidad Industrial de Santander por haberme concedido la comisión para realizar mis estudios de Doctorado, al Rector Miguel José Pinilla, a la Secretaria General Lilia Amanda Patiño de Cruz, al Asesor Jurídico Ernesto Trujillo, al Decano de Ciencias Libardo Morán, a los miembros del Consejo de Escuela de Física y a los actuales directivos de la UIS, en especial al Doctor Jorge Camacho Pico.

A La Universidad Nacional de Colombia, por haberme permitido realizar mi pasantía bajo la dirección del Profesor Jereson Silva Valencia a quien debo manifestar mis sentimientos de gratitud.

Al Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM), a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión (VIE) y a la Dirección de Investigación y Extensión de la Facultad de Ciencias (DIEF).

Agradezco muy especialmente al Profesor Ilia D. Mikhailov por su total dedicación, paciencia y colaboración sin límites para poder desarrollar todas y cada una de las actividades durante el transcurso de mis estudios. Su sabia dirección, su fortaleza, su incomparable capacidad creativa, su genial facilidad para resolver los enigmas de la ciencia, sus inmensas capacidades docentes, su laboriosidad, su tesón, su perseverancia, su constancia, su altísima formación académica, su sabiduría incomparable que desborda las posibilidades humanas, su férrea disciplina, su inagotable capacidad de trabajo, su memoria prodigiosa, su devoción por la enseñanza. Su corazón y su cerebro destilan oro puro fundido en el crisol de la inmortalidad. Su personalidad, su don de gentes, su sincera amistad y su calidad humana trascienden el contenido de las palabras. Sin su decidida ayuda no hubiera podido desarrollar mis estudios doctorales. Gracias a él tuve el privilegio de aprender a pensar y discurrir sobre los intrincados tópicos de la Física Teórica. Sus sabias enseñanzas, impartidas en las excelsas clases magistrales, son poderoso faro que iluminan mi espíritu y nutren mi entendimiento para ponerlo al servicio de la educación en mi Universidad y en mi Patria. Por su inmensa colaboración estaré por siempre agradecido.

## *AGRADECIMIENTOS*

---

A Javier Betancur, quien con generosidad me facilitó los libros de su espléndida biblioteca me hizo oportunas sugerencias y me brindo su decidido apoyo.

A Ancisar Flórez, quien con prontitud aprobó el proyecto de investigación en el cual participaba por primera vez.

A Harold Gutiérrez, quien me facilitó oportunamente un libro de inestimable valor.

A Jairo Marín por su solidaridad y compañerismo.

A Freddy Rodríguez, William Gutiérrez, Juan Carlos Piña, Eduardo Galván, Carlos Gómez, William Amado, Ligia Jaimes, Yaneth Fernández y los demás compañeros de Postgrado en Física, que no ahorraron esfuerzo para prestarme su valiosa ayuda.

A mi Madrecita Blanquita Russi de García, regalo divino que Dios me confirió.

A Luz Marina Ramos quien soportó con resignación mi indiferencia por la consagración exigida para la presentación de los exámenes.

A mis codeudores solidarios: Efraín García Russi, Elsa García Russi, José Miguel Hernández, Carolina Sandoval, Nelly Ramos, Bilson Rodríguez, Edilia Quintero y Edgar Carvajal.

A Carmencita Tarazona, por haberme brindado su valiosa colaboración, su cálido afecto y su especial amistad.

A muchas personas cuyos nombres conservo en mi corazón que me animaron y me colaboraron con fraternal amor.

Para todos ellos y para muchas personas que por su extensión me reservo nombrar, mi gratitud eterna por haber contribuido con este eslabón en mi formación profesional.

Dios los bendiga y los guarde por siempre disfrutando de salud, dinero amor y completo bienestar.

# CONTENIDO

---

---

<b>INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>22</b>
<b>1. MODELO MATEMÁTICO.....</b>	<b>31</b>
1.1 Descripción matemática de los perfiles de puntos cuánticos auto-ensamblados con diferentes morfologías .....	32
1.2 Parámetros de los materiales .....	34
1.3 Potencial de confinamiento .....	35
1.4 Hamiltoniano para sistemas de dos partículas confinadas en un punto cuántico auto-ensamblado.....	37
<b>2. ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS PARTÍCULAS.....</b>	<b>38</b>
2.1 Inestabilidad del estado base de dos electrones en puntos cuánticos [37]	38
2.2 Estado base y los dos primeros estados excitados de dos electrones en un punto cuántico esférico [43].....	45
2.3 Dos partículas en discos y anillos cuánticos [41].....	60
2.4 Dos electrones en un anillo cuántico muy delgado [38,39].....	73
2.5 Dos electrones en anillos cuánticos acoplados [40,49].....	78
<b>3. ESTADOS LIGADOS DE UNO Y DOS ELECTRONES EN PRESENCIA DE CARGAS POSITIVAS .....</b>	<b>85</b>
3.1 Método de dimensión fractal para impurezas donadoras confinadas en heterojunturas semiconductoras.....	86
3.2 Donadora neutra en un punto cuántico con simetría axial [46, 47].....	91

3.3	Energía de enlace de una donadora cargada negativamente en un punto cuántico con simetría axial [46, 47].....	98
3.4	Estado base de un trión $X^-$ en un disco cuántico [45].....	109
3.5	Estado base de un trión $X^-$ en un anillo cuántico [45] .....	113
3.6	Donadora en superredes cilíndricas [48] .....	115
<b>4.</b>	<b>ESTADOS LIGADOS DE UN PAR ELECTRÓN-HUECO .....</b>	<b>124</b>
4.1	Excitón en una pirámide cuántica [49].....	125
4.2	Efecto de capa húmeda sobre el estado base de un excitón en un anillo cuántico [50] .....	131
4.3	Distribución de carga en puntos cuánticos con un exciton atrapado [52]	145
<b>5.</b>	<b>CONCLUSIONES .....</b>	<b>154</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA .....</b>	<b>159</b>
	<b>ANEXO A. MÉTODO DE CÁLCULO DEL JACOBIANO PARA UN SISTEMA DE DOS PARTÍCULAS .....</b>	<b>169</b>
	<b>ANEXO B. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER MEDIANTE EL MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO .....</b>	<b>173</b>

## LISTA DE TABLAS

---

---

<b>TABLA 1.</b> Propiedades de algunos materiales semiconductores compuestos binarios.....	34
<b>TABLA 2.</b> Parámetros de los materiales para compuestos ternarios $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y el $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ .....	35
<b>TABLA 3.</b> Energías de iones y átomos de dos electrones.....	42
<b>TABLA 4.</b> Energías de dos electrones en puntos cuánticos parabólicos.....	42
<b>TABLA 5.</b> Energía exacta de los niveles $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones para anillos acoplados verticalmente $\beta=0.001$ (resultados obtenidos) y para un solo anillo (según Referencia [18]).....	82
<b>TABLA 6.</b> Energías de enlace de la donadora neutra $D^0$ y la donadora cargada negativamente $D^-$ y los cocientes $\sigma = E_b(D^-) / E_b(D^0)$ en tres dimensiones 3D, dos dimensiones 2D y en casi-una-dimensión Q1D (modeladas para donadoras en campos magnético muy fuertes) correspondiente a los máximos valores en bloque, en pozos cuánticos QW, en hilos cuánticos cilíndricos QWW y en puntos cuánticos esféricos SQD, con altura de barrera de $40R_Y^*$ .....	106

## LISTA DE FIGURAS

---

---

- FIGURA 1.** Brechas de energía en función de la constante de red de algunos semiconductores compuestos binarios ..... 25
- FIGURA 2.** Densidad de estados de dos portadores de carga en bloque, QW, QWW Y SAQD ..... 26
- FIGURA 3.** Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-ensamblados con diferentes formas y con parámetros  $R_i = 10nm$ ,  $R_e = 20nm$ ,  $d_0 = 6nm$ : a) disco, b) anillo de de sección transversal rectangular, c) anillo de sección transversal elipsoidal, d) lente, e) cono, f) cono truncado, g) volcán..... 33
- FIGURA 4.** Energías de varios niveles más bajos de dos electrones confinados en un punto cuántico esférico de  $GaAs / Ga_{0.7}As_{0.3}Al$  con un potencial rectangular ( $w/a_0^* = 0.05$ ) como una función del radio comparadas con el estado ionizado (línea punteada) cuando uno de los dos electrones escapa del punto ..... 43
- FIGURA 5.** Energía del estado base de dos electrones en un punto cuántico de  $GaAs / Ga_{0.7}As_{0.3}Al$  como una función del radio para un modelo de potencial de barrera suave con diferentes espesores de la capa difusa ..... 44
- FIGURA 6.** Potencial de confinamiento (línea continua) y partes radiales de las funciones de onda del electrón con momento angular  $l=0$  (línea a trazos) y  $l=1$  (línea punteada) en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga(Al)As con un núcleo de radio  $R_c = 0,5a_0^*$  y radio de la barrera  $R_b = 2,5a_0^*$  con regiones de transición  $W_c = W_b = 0,5a_0^*$  y 7% de concentración de Al en el núcleo y 40% en la barrera..... 48
- FIGURA 7.** Energías uní-particulares de un punto cuántico esférico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con dos electrones para el estado base y algunos estados s excitados como una función del radio, obtenidas mediante la solución del problema de valores propios de una partícula (2.2.2). Las líneas gruesas corresponden a los límites superior e inferior del espectro discreto de dos electrones ..... 50
- FIGURA 8.** Curvas de potencial efectivo para la interacción entre dos electrones en los estados  $1S$ ,  $2^1P$  Y  $2^3P$  en puntos cuánticos esféricos de barrera suave (a) sin y (b) con núcleo repulsivo ..... 52

- FIGURA 9.** Energía (normalizada) del estado base de dos electrones en un punto cuántico con potencial parabólico como una función de  $\gamma^{-1/2}$  (las circunferencias corresponden a los resultados exactos de la Referencia [61] y los rectángulos oscuros corresponden a los resultados obtenidos) ..... 53
- FIGURA 10.** Energía de enlace del estado base de dos electrones en un punto cuántico esférico como una función del radio exterior para diferentes (a) alturas de la barrera del núcleo  $V_c$  y (b) radios de los núcleos  $R_c$  ..... 54
- FIGURA 11.** Energía de enlace de dos electrones como una función del radio (a) para los tres niveles más bajos en un punto cuántico esférico de pozo cuadrado (b) para el nivel del estado base en un punto cuántico esférico con tres diferentes espesores de la región de transición ..... 55
- FIGURA 12.** Dependencia de (a) la función de correlación par y (b) la densidad de probabilidad sobre la distancia entre los dos electrones en el estado base dentro de un SAQD de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con ( $x_c = 0.3$ ) y sin ( $x_c = 0$ ) núcleo repulsivo ..... 57
- FIGURA 13.** Energía de dos electrones en los estados 1S, 2<sup>1</sup>P Y 2<sup>3</sup>P como una función del radio del SAQD (a) sin y (b) con núcleo repulsivo para los modelos con barreras suaves y con barreras de pozo cuadrado ..... 58
- FIGURA 14.** Energías renormalizadas de dos electrones como funciones de las dimensiones del punto cuántico en (a) SAQD GaAs/Ga<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As sin núcleo repulsivo para los estados 1S, 2<sup>1</sup>P Y 2<sup>3</sup>P y en (b) SAQD de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con núcleo repulsivo para los modelos con barreras de pozo cuadrado ..... 60
- FIGURA 15.** Distribución de la concentración de indio  $X(\rho, z = 0)$  (a) dada por la relación (2.3.2) y el potencial de confinamiento lateral para el electrón (b),  $V_e(\rho, z = 0)$  dado por la relación  $V_e = 0.7\Delta E_g [X_R - X]$ , en anillos cuánticos de InGaAs con diferentes valores del espesor de la región de transición W ..... 63
- FIGURA 16.** El Jacobiano  $P_0(r)$ , la SPCF  $P(r)$  y el potencial efectivo como funciones de la separación interparticular para (a) dos electrones y (b) un excitón en un disco cuántico de Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As/GaAs con radio del disco  $R_D = 1a_0^*$  ..... 69
- FIGURA 17.** Funciones  $P_0(r)$ ,  $P(r)$  y  $V_{eff}(r)$  para (a) dos electrones y (b) un excitón en un anillo cuántico de Ga<sub>0.85</sub>In<sub>0.15</sub>As/Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As/GaAs con  $R_C = 0.5a_0^*$  y  $R_D = 1a_0^*$  ..... 70

- FIGURA 18.** Energía de correlación de dos electrones como una función del radio exterior  $R_D$  en anillos cuánticos de Ga<sub>0.85</sub>In<sub>0.15</sub>As/Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As/GaAs con diferentes radios de núcleo repulsivo,  $R_C$  1, 5 y 10nm ..... 71
- FIGURA 19.** Energía de correlación del exciton de hueco pesado como una función del radio exterior  $R_D$  de un anillo cuántico con potencial rectangular (líneas a trazos) y radio interior 10nm con potencial de barrera finita de fondo parabólico para tres valores del radio interior 1, 5, y 10nm (líneas sólidas)..... 73
- FIGURA 20.** Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón como una función del radio interior del anillo cuántico  $R_i$ , para algunos estados singlete más bajos en anillos cuánticos con altura  $d$  y dos diferentes valores del ancho  $R_e - R_i$ . La notación (M,m) es usada para los niveles de energía E(M,m) ..... 77
- FIGURA 21.** Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón como una función de la altura del anillo cuántico para algunos estados bajos para dos valores diferentes de anchos y radios de un anillo cuántico. La notación (M,m) se usa para los niveles de energía E(M,m) ..... 77
- FIGURA 22.** Energías totales normalizadas  $\tilde{E}(M,m,s)$  de dos electrones contra el radio  $R$  en anillos cuánticos verticalmente acoplados para diferentes razones  $\beta$  entre la distancia y el radio de los anillos 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete ..... 80
- FIGURA 23.** Energía total normalizada  $\tilde{E}(M,m,s)$  de dos electrones contra la distancia  $d$  entre anillos acoplados verticalmente con dos radios diferentes  $R = 1a_0$  \* (curvas superiores) y  $R = 5a_0$  \* (curvas inferiores) ..... 83
- FIGURA 24.** Energías normalizadas  $\tilde{E}(\pm M,m,s)$  contra la intensidad del campo magnético  $\gamma$  para dos electrones en anillos verticalmente acoplados de radios  $R = 1a_0$  \* y separación entre ellos  $d = 0.1a_0$  \* ..... 84
- FIGURA 25.** Energía de enlace del estado base de una donadora localizada en medio del eje de un disco, una lente y un cono en función de la base del radio  $R_e$ . Las líneas continuas corresponden a estructuras con altura máxima del punto cuántico de 2nm y las líneas a trazos con altura máxima del punto cuántico de 4nm..... 92
- FIGURA 26.** Energías de enlace del D<sup>0</sup>, localizado sobre la base de los puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes formas como una función de la distancia desde su eje..... 94

- FIGURA 27.** Energías de enlace del  $D^0$  en un cono como una función de la distancia desde el eje para diferentes valores de  $\xi_z$  ..... 95
- FIGURA 28.** Gráficas de contorno de las energías de enlace de la donadora neutra correspondiente a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de simetría de los puntos cuánticos con diferentes perfiles ..... 96
- FIGURA 29.** Energías del estado base de la donadora neutra  $D^0$  como una función de la distancia desde la posición de la donadora al eje en puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$  ..... 97
- FIGURA 30.** Energía del estado base de una donadora neutra  $D^0$  en función de la distancia desde su posición hasta el eje en un punto cuántico de forma de volcán con diferentes radios  $R_0$  ..... 98
- FIGURA 31.** Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente localizada en medio del eje de un disco, una lente y un cono en función del radio de la base  $R_e$ . Las líneas continuas corresponden a estructuras con espesor de 2nm y las líneas a trazos a un espesor de 4nm 99
- FIGURA 32.** Energías de enlace de un  $D^-$  localizado sobre la base de los puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes formas en función de la distancia desde el eje..... 101
- FIGURA 33.** Energías de enlace del  $D^-$  en un cono en función de la distancia desde el eje para diferentes valores de  $\xi_z$  ..... 103
- FIGURA 34.** Gráficas de contorno de las energías de enlace de la donadora cargada negativamente correspondiente a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de simetría de los puntos cuánticos con diferentes perfiles ..... 103
- FIGURA 35.** Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente  $D^-$  como una función de la distancia desde la posición de la donadora al eje en puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$  ..... 104
- FIGURA 36.** Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente  $D^-$  como una función de la distancia desde el eje en puntos cuánticos de forma de volcán con diferentes radios  $R_0$ ..... 105
- FIGURA 37.** Cociente  $\sigma = E_b(D^-)/E_b(D^0)$  como una función del radio de la base en un cono, una lente y en un disco con dos diferentes espesores de 2nm (líneas sólidas) y 4nm (líneas a trazos)..... 106

- FIGURA 38.** Gráficas de contorno de la diferencia de las energías de enlace de las donadoras neutras descentradas con diferentes posiciones y las energías de enlace de las donadoras cargadas negativamente centradas en un plano a través del eje de simetría de a) el disco y b) el cono. Las partes sombreadas de las figuras indican las posiciones cuando las donadoras neutras son inestables con respecto a la transferencia del electrón a la donadora centrada ..... 108
- FIGURA 39.** Energías del electrón libre  $E(e^-)$  (líneas con puntos y rayas), de las donadoras en el centro y sobre la barrera  $E(D^0)$  (líneas a trazos), del hueco  $E(X)$  (línea continuas) y las energías de correlación correspondientes  $E_c(D^0)$  y  $E_c(X)$  como funciones del radio del disco cuántico para dos alturas diferentes del disco, a)  $d = 1\text{nm}$ , y b)  $d = 4\text{nm}$  ..... 111
- FIGURA 40.** Energías de la donadora cargada negativamente  $D^-$  y del trión  $X^-$  como una función del radio del disco cuántico comparadas con las respectivas energías de la donadora neutra  $D^0$  y del excitón  $X$  con el electrón libre para dos alturas diferentes del punto cuántico: a)  $1\text{nm}$  y b)  $4\text{nm}$  ..... 112
- FIGURA 41.** Energías laterales del  $D^-$  y del  $X^-$  como funciones del radio exterior del anillo cuántico de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  comparadas con las respectivas energías del  $D^0$  y del  $X$  con un electrón desacoplado. La altura y el radio interior del anillo son iguales a  $1\text{nm}$  y  $10\text{nm}$ , respectivamente ..... 113
- FIGURA 42.** Energías de correlación del  $D^-$  y el  $X^-$  como funciones del radio exterior del anillo cuántico de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$ ..... 114
- FIGURA 43.** Concentración de la distribución de Al a lo largo del eje  $z$ - de la nanosuperred ..... 116
- FIGURA 44.** Energías del estado base de la donadora  $D^0$  en función de la distancia desde (a) el eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje  $z$  y (b) la base de la NWSL para diferentes distancias desde el eje ..... 118
- FIGURA 45.** Energías del estado base del  $D^-$  en función de la distancia desde (a) el eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje  $z$ , y (b) la base de la NWSL para diferentes distancias desde el eje ..... 120
- FIGURA 46.** Gráficas de contorno de las energía de enlace de las donadoras neutra y cargada negativamente correspondientes a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de la superred cilíndrica de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  de  $40\text{nm}$  de radio y con  $n = 5$  pozos de  $10\text{nm}$  de ancho separados por barreras de  $5\text{nm}$  de ancho..... 122

- FIGURA 47.** Formas del potencial de confinamiento y sus correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral del electrón ..... 127
- FIGURA 48.** Energía de correlación del exciton como una función del radio de la base del cono para diferentes razones  $R_u / R_b$  ..... 129
- FIGURA 49.** Energía del excitón en un punto cuántico cónico (pirámide cuántica) como una función del radio del núcleo cuántico para tres diferentes alturas  $d_0=2\text{nm}$ ,  $d_0=4\text{nm}$  y  $d_0=8\text{nm}$ . ..... 130
- FIGURA 50.** Imagen 3D de un anillo cuántico ..... 131
- FIGURA 51.** Energía de enlace del estado base del excitón como una función del radio del disco cuántico en discos de (a) GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As y (b) In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As. Los parámetros del disco son mostrados en las figuras. Los resultados obtenidos (líneas continuas) son comparados con (a) cálculo variacional (símbolos diferentes) y (b) tratamiento completamente 3D (triángulos) ..... 136
- FIGURA 52.** Densidades de probabilidad de encontrar el electrón (líneas continuas) y el hueco (líneas punteadas) sobre el plano de simetría como una función de la distancia desde la posición de la partícula al eje de los QRs con radios exteriores (a)  $0.7 a_0^*$  y (b)  $1.5 a_0^*$ . El ancho de los QRs en ambos casos es igual a  $0.5 a_0^*$ . Las líneas continuas verticales muestran las correspondientes uniones de los anillos ..... 138
- FIGURA 53.** Gráficas de contorno de la distribución de densidad de carga radial en un plano a través del eje de simetría del disco cuántico (a y b) de radio 5nm y espesor 5nm y QR (c y d) con radio interior y exterior de radios 10 y 15nm y espesor 5nm sin capa húmeda (a y c) y con capa húmeda (b y d).. ..... 139
- FIGURA 54.** Energía de enlace del exciton como una función de la intensidad del campo magnético en un disco de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As (línea punteada) y varios anillos de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As con diferentes espesores de la capa húmeda (líneas continuas) ..... 141
- FIGURA 55.** Energía de enlace del exciton como una función de la intensidad del campo magnético en un disco de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As (línea a trazos) y varios anillos de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As con diferentes espesores de la capa húmeda (líneas continuas) ..... 142
- FIGURA 56.** Energía de enlace del exciton como una función del radio exterior de los anillos cuánticos de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As QRS con anchos fijos para diferentes valores de las intensidades del campo magnético externo. en la gráfica interior, se grafica la separación promedio del electrón-hueco dependiendo del radio exterior. Las mismas curvas convencionales son usadas en la figura principal..... 144

<b>FIGURA 57.</b> Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos .....	146
<b>FIGURA 58.</b> Curvas de potencial efectivo para el movimiento del electrón en el plano en puntos cuánticos con diferentes perfiles.....	147
<b>FIGURA 59.</b> Gráficas de contorno de la distribución de densidad radial de carga en un plano a través del eje de simetría del disco cuántico, lente y cono de radios 20nm con alturas de 3 nm sobre la capa húmeda y 2nm de espesor de la WL.....	149
<b>FIGURA 60.</b> Energías de enlace del excitón (líneas continuas) como funciones del radio de la base en QDs con diferentes perfiles. Las líneas a trazos son las energías de enlace del exciton estimadas mediante el uso de la relación de incertidumbre (ver los detalles en el texto).....	151
<b>FIGURA 61.</b> La energía de enlace del exciton en puntos cuánticos cónicos con diferentes alturas como una función de la base del radio.....	153

## **LISTA DE ANEXOS**

---

---

<b>ANEXO A.</b> Método de cálculo del Jacobiano para un sistema de dos partículas .....	169
<b>ANEXO B.</b> Solución de la ecuación de Schrödinger mediante el método de barrido trigonométrico .....	173

# NOTACIÓN

---

---

En esta tesis se ha utilizado la adimensionalidad de las unidades efectivas requerida para efectos de programación, pero para la posterior conversión de unidades se ha elegido como unidad de longitud el nanómetro (nm); como unidad de energía el milielectronvoltio (meV) y como unidad de campo magnético el Tesla (T). A continuación se presenta la lista de las notaciones empleadas para designar los distintos parámetros utilizados:

$m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg.}$	: Masa del electrón libre
$\epsilon = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 / \text{N} - \text{m}^2$	: Constante dieléctrica en el vacío
$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	: Carga del electrón
$c = 3 \times 10^8 \text{ m} / \text{s}$	: Velocidad de la Luz en el vacío
$h = 6.22 \times 10^{-34} \text{ J s}$	: Constante de Plank
AA	: Aproximación Adiabática
MBT	: Método de Barrido Trigonométrico
MDF	: Método de Dimensión Fractal
AME	: Aproximación de masa efectiva
WL	: Capa húmeda
QW	: Pozo cuántico
QWW	: Hilos cuánticos cilíndricos
QD	: Punto cuántico
QR	: Anillo cuántico
SQD	: Punto cuántico esférico
SAQD	: Punto cuántico autoensamblado
SL	: Superred
NWSL	: Nanosuperred cilíndrica
SPCF	: Función de correlación del par
$D^0$	: Impureza donadora neutra
$D^-$	: Impureza donadora negativa
$m_e$	: Masa efectiva del electrón
$m_h$	: Masa efectiva del hueco
$\gamma$	: Factor de Landau
$\frac{\mu}{\beta}$	: Momento Lineal
$\epsilon$	: Constante dieléctrica del material
$\tau$	: Parámetro de la interacción Coulombiana
$a_0$	: Radio de Bohr efectivo
$Ry^*$	: Rydberg efectivo

## NOTACIÓN

---

$g$	: Factor efectivo de Landé del electrón
$\vec{B}$	: Campo magnético
$\xi$	: Energía superficial
$\mu$	: Magnetón de Bohr
$\vec{A}$	: Potencial vectorial de campo magnético
$V_\rho$	: Potencial de confinamiento radial
$\Delta$	: Laplaciano

**TÍTULO:**

APROXIMACIÓN ADIABÁTICA PARA SISTEMAS DE DOS PARTÍCULAS EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS \*.

**AUTOR:**

GARCÍA RUSSI, Luís Francisco \*\*.

**PALABRAS CLAVES:**

Donadoras Neutras y Negativamente Cargadas, Exciton, Dos Electrones, Puntos Cuánticos Autoensamblados, Espectro Energético, Energía de Enlace, Aproximación de Masa Efectiva, Aproximación Adiabática, Principio Variacional, Método de Dimensión Fractal, Barrido Trigonométrico.

**RESÚMEN:**

Los métodos teóricos y las técnicas de cálculo elaborados en esta tesis realizan un análisis detallado de los efectos del tamaño y de la morfología de puntos cuánticos autoensamblados sobre los espectros energéticos de diferentes estados ligados para sistemas de pocas partículas, a fin de fabricar nuevos dispositivos opto-electrónicos de tamaños nanométricos y propiedades controladas.

Se calculan los espectros energéticos de los sistemas de una y dos partículas (donadoras neutras y negativamente cargadas, excitones y dos electrones) confinadas en puntos cuánticos de  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  fabricados mediante la técnica de Stranski-Krastanov. Para analizar el efecto de la morfología de estas estructuras sobre el espectro energético de una partícula libre y los estados ligados de sistemas de dos partículas se utiliza la aproximación adiabática, que permite separar el movimiento rápido en la dirección vertical, del movimiento lento en el plano horizontal y reducir los problemas tridimensionales a los similares en dos dimensiones, con potenciales renormalizados que tienen en cuenta el perfil del punto cuántico. Utilizando esta aproximación se logran separar completamente las variables en la ecuación de onda para los portadores de carga libre en puntos cuánticos con simetría axial, para poder encontrar el espectro energético y las funciones de onda uní-particulares. La función de onda para los estados ligados se busca en forma del producto de las funciones uní-particulares con una función envolvente que en el caso de las donadoras depende de la distancia desde el ión y en el caso de dos partículas de la distancia entre ellas.

Partiendo del principio variacional de Schrödinger y utilizando la técnica de derivación funcional se demuestra que la función envolvente es la solución de la ecuación de onda para un átomo hidrogenoide (en el caso de la donadora negativamente cargada para un ión  $\text{H}^-$ ) en un espacio efectivo cuya dimensión depende de la separación entre las partículas y de la geometría del punto cuántico.

---

\* Tesis de Grado

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Iliá D. Mikhailov (Director), Javier Betancur Castaño (Codirector)

**TITLE:**

ADIABATIC APPROXIMATION FOR TWO PARTICLES SYSTEMS IN SELF-ASSEMBLED QUANTUM DOTS

**AUTHOR:**

GARCÍA RUSSI, Luís Francisco \*\*.

**KEY WORDS:**

Neutral and Negatively Charged Donors, Exciton, Two Electrons, Binding Energy, Self-assembled Quantum Dots, Energy Spectrum, Binding energy, Effective Mass Approximation, Adiabatic Approximation, Variational Principle, Fractal Dimension Method, Trigonometric sweep.

**DESCRIPTION:**

The theoretical methods and calculus techniques elaborated in this thesis allow performing a detailed analysis of the morphology and size effects of self-assembled quantum dots of energetic spectrum of different binding states of few particles systems in order to fabricate new opto-electronic devices with nanometric size and controlled properties.

Energy spectra of one and two particles (neutral and negatively charged donors, excitons and two electrons) confined in quantum dots of  $\text{In}_{(1-x)}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{(1-y)}\text{Al}_y\text{As}$  recently fabricated by Stranski-Krastanov technique. To analyze the morphology effect of these structures on free one-particle energy spectrum and binding states of two particles systems the adiabatic approximation is used to allow separate the vertical direction fast movement of the horizontal plane low movement in order to reduce the three dimensional problems to bidimensional similar problems to renormalized potentials that take into account the quantum dot profile. Using this approximation is possible to separate the variables in the wave equation for finding the energy spectrum and one-particle wave functions. The wave functions for binding states is seeking as a product of one-particle wave functions with an envelope function which in the donor case depend of the distance since the ion and in the two particles case of the distance between them. Starting by the Schrödinger variational principle and using the functional derive technique it is shown that the envelope function is solution of the wave equation for like-hydrogen atom (in the negatively charged donor case for an ion  $\text{H}^-$ ) in the effective space which dimension depends of the separation between particles and the quantum dot geometry.

---

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Iliá D. Mikhailov (Director), Javier Betancur Castaño (Codirector)

# INTRODUCCIÓN

---

---

En las dos últimas décadas se ha desarrollado un gran número de investigaciones teóricas y experimentales sobre nanoestructuras semiconductoras o sistemas de baja dimensionalidad [1-6], tales como: pozos (QWs), hilos (QWWs), puntos cuánticos (QDs) y superredes (SLs). Por tener dimensiones características comparables a la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón, las nanoestructuras operan en el régimen cuántico y sus propiedades electrónicas son más sensibles a las variaciones de tamaño, geometría y composición que sus análogos en bloque. El Interés por las investigaciones de las nanoestructuras ha dado origen a una nueva línea en la fabricación de materiales llamada nanotecnología, como base para producir en el futuro dispositivos micro- y optoelectrónicos. La nanotecnología es una rama de la tecnología que se ocupa de la fabricación y control de estructuras y máquinas de tamaño nanométrico. Existen tres ramas de investigación en la nanotecnología, la nanotecnología seca, la nanotecnología húmeda y la nanotecnología computacional. La nanotecnología seca trata sobre la fabricación de estructuras en carbón (nanotubos), silicio, materiales inorgánicos, metales y semiconductores, además sobre autoensamblaje controlado por computadora y dispositivos ópticos, también tiene que ver con la fabricación y manipulación de nanoestructuras. La nanotecnología húmeda trata sobre materiales biológicos como membranas, material genético y otros componentes celulares. La nanotecnología computacional trata sobre el modelado y simulación de estructuras complejas de escala nanométrica. Richard Feynman fué el primero en referirse a las posibilidades de la nanociencia y de la nanotecnología, en el discurso que pronunció en Caltech (Instituto Tecnológico de California) el 29 de diciembre de 1959 titulado “En el fondo hay espacio de sobra” (There's Plenty Room at the Bottom). El mismo, en 1960 acuñó la siguiente frase: “Hay inmensidad de posibilidades en lo más profundo de la materia“. En 1986, Drexler puso de manifiesto que el hombre podría ejercer un control completo sobre la estructura de la materia. Entre los usos de la Nanotecnología se encuentra la fabricación de computadoras, que pasó de los sistemas operados con válvulas de vacío (conocidas como bulbos o ampollas de vacío); a los semiconductores tradicionales (conocidos como transistores de tipo (PNP o NPN); de ahí a los sistemas creados con base en circuitos integrados y por último a los microprocesadores que realizan procesos de manera paralela. Se dice que la construcción de “máquinas” ultramicroscópicas, podrían ejecutar en espacios microscópicos, tareas tan complejas como fabricar circuitos electrónicos y despejar vasos sanguíneos obstruidos en el cerebro.

El avance científico en el nanomundo ha revolucionado el desarrollo de la ciencia de la nano-escala y de la nano-ingeniería. Esta escala está comprendida entre

una fracción de un nanómetro (varios átomos) hasta alrededor de 100 nanómetros (el bloque). La mayoría de los fenómenos específicos se manifiestan a distancias entre 10-50 nanómetros. A esta escala pertenecen los componentes básicos de la materia utilizada, donde las propiedades fundamentales están definidas y se pueden enmarcar dentro de una función dependiente del tamaño, forma y diseño de ésta. Debido al carácter interdisciplinario y a los beneficios que la ciencia de la nanoescala reporta a la sociedad, la investigación básica aplicada ha recibido gran atención y soporte financiero, haciendo que el interés por esta disciplina esté creciendo prácticamente en todas las naciones industrializadas.

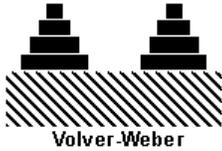
Para la fabricación de nanoestructuras semiconductoras, comúnmente se utilizan materiales semiconductores compuestos, pertenecientes a los grupos III-V y II-VI. Las heteroestructuras de estos grupos de materiales con buenas interfaces, pueden ser binarios como GaAs/AlAs, InAs/GaSb, InSb/CdTe o ternarios como GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Se han desarrollado diferentes técnicas, entre las que se destacan: la epitaxia de haces moleculares [7], la deposición metal-orgánica de vapor químico [3], la litografía basada en rayos moleculares [8] y la epitaxia de fase líquida [9].

Con estas técnicas se han crecido diferentes sistemas de baja dimensionalidad, tales como: QWs, QWWs y QDs, con materiales semiconductores en diversas composiciones. El mayor interés para futuras aplicaciones lo presentan los QDs, que son estructuras en las que se ha logrado el mayor confinamiento de portadores de carga. En los QDs el movimiento electrónico está restringido en todas las direcciones, por lo cual es común referirse a estos sistemas como cero-dimensionales. Los QDs, también se denominan átomos artificiales. Debido a la cuantización de la energía cinética de las partículas, relacionada con la restricción en el movimiento electrónico, el espectro energético en los QDs se enriquece esencialmente y esto abre nuevas perspectivas para crear novedosos dispositivos opto-electrónicos, con base en las nanoestructuras semiconductoras, cuyas propiedades se pueden modificar en forma controlable, con posibilidad de su miniaturización y aumento de la absorción y emisión óptica.

La técnica de fabricación de puntos cuánticos denominada Epitaxia de haces moleculares, se conoce por su acrónimo en inglés como MBE (Molecular Beam Epitaxy), que de acuerdo al valor de la densidad de energía superficial neta de la juntura,  $\Delta\xi = \xi_f + \xi_i - \xi_s$ , siendo  $\xi_f$  la densidad de la energía superficial de la película;  $\xi_s$  densidad de la energía superficial del sustrato;  $\xi_i$  densidad de la energía superficial de la interfaz, se obtienen diferentes modos de crecimiento que se denominan de la siguiente manera:



- Frank-van der Merwe:  $\Delta\xi \leq 0$  humedeciendo el sustrato se crece capa por capa.



- Volmer-Weber:  $\Delta\xi > 0$  sin humedecer, se crecen islas tridimensionales.



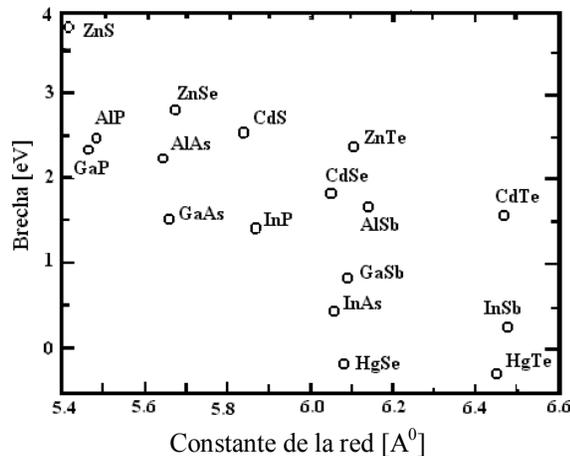
- Stranski-Krastanov:  $\Delta\xi \leq 0$  para las primeras capas, posteriormente  $\Delta\xi > 0$ , las islas crecen sobre una capa húmeda.

Los llamados puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs, “self-assembled quantum dots”, en inglés) fabricados mediante la técnica de Stranski-Krastanov, se pueden obtener utilizando un sustrato con parámetro de red diferente al de la película por crecer. El proceso de deposición del material se realiza mediante un flujo de átomos (por ejemplo: galio, indio o arsénico), el cual es enviado sobre una superficie ultra delgada o sustrato de arseniuro de galio (GaAs) mantenido a alta temperatura. Debido a la diferencia entre los parámetros o constantes de red y a la particular dinámica de crecimiento, se generan tensiones en la película y en las juntas que crecen en cada una de las capas siguientes y a partir de una capa hacen que la película empiece a depositarse de manera no uniforme, produciendo de manera natural un crecimiento en forma de pequeñas islas de tamaño nanométrico, que tienen por lo general una forma y tamaño similares y están separadas del sustrato a través de una capa húmeda. Estas islas se recubren con otra capa semiconductor con brecha de energía mayor que la de las islas (comúnmente del mismo material que el sustrato). Las heteroestructuras obtenidas de esta manera suelen denominarse puntos cuánticos auto-ensamblados, en donde los portadores quedan confinados en tres dimensiones si el tamaño de las islas es el adecuado.

El problema de controlar el tamaño de las islas es complicado, pero se hacen esfuerzos en este sentido, para poder reducir el ancho de las líneas en el espectro de luminiscencia. Una de las posibles maneras de controlar el tamaño de las islas consiste en variar la diferencia entre las constantes de la red del sustrato y de la película y simultáneamente las diferencias entre las brechas de la energía entre las bandas de valencia y las de conducción. Para aclarar esta idea en la Figura 1 se presenta el gráfico donde se muestran las brechas de energía contra las constantes de red de algunos semiconductores compuestos binarios. Se puede ver que dos materiales tradicionales como los compuestos binarios GaAs y AlAs

no sirven como candidatos para fabricar SAQDs a través de las técnicas de Stanski-Krastanov ya que tienen prácticamente las mismas constantes de red. Al contrario, los compuestos InAs y GaAs son evidentes candidatos para constituir el sustrato y la película, debido a una diferencia apreciable entre sus constantes de red, siendo la constante de red del GaAs 7% menor de la de InAs. Por otro lado la diferencia de las brechas en la juntura InAs/GaAs es mucho más grande del valor correspondiente a la juntura GaAs/AlAs y por esa razón el salto de potencial y el confinamiento en el primer caso es mucho más apreciable. Sin embargo se puede variar esta característica introduciendo cada material en porciones diferentes de los átomos de Al y utilizar con esta fin los componentes ternarios  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  y  $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ . Precisamente, los puntos cuánticos de  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  serán el objetivo principal de esta investigación

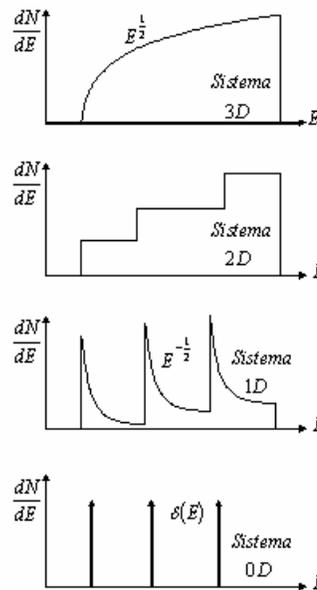
Figura 1. Brechas de energía en función de la constante de red de algunos semiconductores compuestos binarios.



En el proceso de fabricación de SAQDs se ha demostrado que los perfiles de los puntos cuánticos se pueden alterar drásticamente, interrumpiendo el proceso de crecimiento de éstos a través del recubrimiento por capas más delgadas (de espesor menor que 3 nm) que la altura del punto cuántico. En la etapa inicial del proceso de recubrimiento, el punto cuántico empieza a crecer en la dirección lateral de tal manera que el material del punto cuántico se redistribuye en forma anisotrópica, hasta que el proceso de crecimiento se interrumpe. Como consecuencia, los puntos cuánticos se transforman a veces en una especie de anillos estirados con un hueco en forma de cráter en el centro [10 -15]. A través de las técnicas de microscopía electrónica y de fuerza atómica los investigadores lograron establecer que los SAQDs fabricados mediante el método de crecimiento de Stranski-Krastanov tienen morfologías diferentes y en la mayoría de los casos sus formas no son bien conocidas, pero estudios estructurales sugieren que son similares a lentes, pirámides, discos o volcanes.

Como se encontró experimentalmente, los SAQDs tienen, por lo general, diámetros laterales que varían desde 10 hasta 70nm, espesores desde 2nm hasta 4nm y altura de capa húmeda desde 1nm hasta 2nm dependiendo de las condiciones de crecimiento. El tamaño reducido que tienen los SAQDs permite esperar que es posible controlar la presencia de solo uno o dos portadores de carga dentro de estas estructuras nanométricas. Además, debido a la restricción del movimiento de las partículas en todas las tres direcciones, el espectro energético en los SAQD es discreto a diferencia de los QWs y de los QWWs donde el espectro está dado por subbandas. Esto se puede ver comparando las densidades de estado de los portadores de carga en estas heteroestructuras y en bloque, representadas en la Figura 2.

Figura 2. Densidad de estados de Dos portadores de carga en bloque, QW, QWW y SAQD.



Se puede ver que las curvas de densidad de los estados se hacen más y más estructuradas a medida que la dimensión del espacio libre disminuye desde tres en un bloque de un semiconductor hasta cero en un SAQD, pasando por los valores 2 y 1 en los QW y en los QWW, respectivamente. Debido a estas propiedades singulares se espera que los SAQDs con una o dos partículas capturadas constituyan el sistema clave para los dispositivos opto-electrónicos.

Cuando nos referimos a sistemas de dos partículas confinadas en puntos cuánticos auto-ensamblados, estamos haciendo alusión a un sistema de dos electrones o a un sistema electrón-hueco llamado exciton. La formación del excitón se produce de la siguiente manera: un fotón es absorbido por un semiconductor, excitando un electrón desde la banda de valencia hasta la banda

de conducción y creando un par electrón-hueco enlazado debido a la atracción entre ellos (exciton). La creación de un excitón requiere una energía mínima igual a la brecha de energía entre las dos bandas menos la energía de enlace. Igualmente, el excitón como cualquier otra casi-partícula puede desplazarse libremente dentro del cristal hasta que no se encuentra con un punto cuántico donde queda atrapado, ya que la energía del excitón en la región interior del QD es inferior que en el bloque de cristal. Cuando el excitón queda confinado dentro de un QD, la separación entre las partículas disminuye, la energía de enlace crece mientras que la energía del exciton baja. Los excitones atrapados en los SAQDs también son objetos de investigación teórica de esta tesis.

Recientemente Lorke con sus colaboradores reportó la observación de un par de electrones en un SAQD de forma similar a un anillo [11-13]. Este descubrimiento impulso la aparición de una gran cantidad de publicaciones sobre el análisis teórico del espectro energético de dos partículas confinadas en un SAQD [16-18]. Pero en la gran mayoría de estos trabajos no se tiene en cuenta la morfología de los SAQD ya que se consideran modelos de confinamiento simplificado, bidimensional y/o con barreras infinitas. Para modelos bidimensionales de barrera infinita se consideraron los potenciales rectangulares o parabólicos [19-26]. En ambos casos el método más eficiente para analizar el espectro energético de dos electrones es el método de diagonalización exacta, teniendo en cuenta que las funciones uní-particulares para estos dos modelos pueden ser encontradas en forma analítica y, además, ellas forman una base completa. El método de diagonalización exacta en este caso consiste en formar una base completa de funciones de onda para los diferentes estados bi-particulares posibles, y a través de ellas representar el Hamiltoniano en forma de una matriz cuyos valores propios, calculados numéricamente definen el espectro energético de dos partículas. Hay que anotar que en el caso de potencial parabólico, cuando las masas de las dos partículas son iguales, el Hamiltoniano es completamente separable y existen diferentes métodos más simples que el de diagonalización que se utilizaron para analizar el espectro de dos electrones [27-32].

En realidad el potencial de confinamiento no es parabólico ya que en las juntas se presenta un salto de potencial finito y cuanto más delgada es la película que está formando el SAQD menor es la altura de la barrera debido a la subida de los niveles energéticos producida por el fuerte confinamiento. Por esta razón, el potencial de confinamiento real solo se puede considerar aproximadamente parabólico cerca del centro del SAQD, el cual sube inicialmente en esta forma al acercarse a las juntas y después en forma suave se transforma en un potencial constante [25]. Por esta razón en un grupo de trabajos sobre el espectro energético de una y dos partículas en QDs se consideraron modelos de confinamiento con diferentes formas de potenciales suaves [33]. Como en el espectro energético de una partícula en los QDs con este tipo de potenciales las funciones de onda uní-particulares correspondientes a niveles discretos no forman una base completa, el método de diagonalización en este caso ya no es eficiente y solo hay dos opciones, utilizar el método de diferencias finitas o el

variacional. Los cálculos a través del primer método son muy tediosos y por eso hay muy escasos trabajos, donde los utilizan para analizar el espectro energético de dos electrones [18] o de un exciton [34]. El método variacional con diferentes funciones de prueba se utilizó en una gran cantidad de trabajos tanto para analizar el estado base de dos electrones [26-31], como para el par electrón-hueco [32,35] confinados en puntos cuánticos con diferentes formas de potencial. Este método tiene insuficiencias bien conocidas. Primero, este método permite solo estimar el valor de la energía. Entre mayor sea el número de parámetros que se utilizan en este método mayor es la precisión del resultado de estimación. Pero con el aumento del número de parámetros se incrementa rápidamente el volumen de trabajo computacional. Segundo, el método variacional básicamente se utiliza solo para analizar el estado base, ya que el análisis de los estados excitados sugiere un cálculo tedioso relacionado con la necesidad de la ortogonalización de las funciones de onda.

Recientemente, el Grupo FICOMACO de la Escuela de Física de la UIS, con el fin de simplificar el cálculo matemático y evitar las complicaciones computacionales, ha propuesto un procedimiento variacional relacionado con el esquema de dimensión fraccional para estudiar el comportamiento del espectro del exciton bajo la influencia de un campo magnético [36]. En este esquema la función de onda del par electrón-hueco confinado en un QD se presenta en la forma del producto de las funciones de onda uní-particulares con una función envolvente que depende solo de la distancia entre las partículas. Considerando esta última función como variacional y utilizando el método de derivación funcional se ha encontrado para ella la ecuación diferencial, la cual coincidió con la parte radial de la ecuación de onda para el átomo de hidrógeno en un espacio efectivo cuyo Jacobiano depende de la separación entre las partículas. Esta dependencia (relacionada con la dimensión del espacio) generalmente no tiene forma de función de potencia (como en los espacios con la dimensión entera) y está dada por una integral múltiple cuya función subintegral es un producto de los cuadrados de las funciones uní-particulares del electrón y del hueco. Para una separación muy pequeña, cuando las partículas “no sienten” el confinamiento, esta dependencia es parabólica (típica para un espacio tridimensional) mientras que para separaciones muy grandes tiene una forma de un decaimiento (típica para un espacio cero-dimensional). Es decir, mientras se incrementa la separación, la dimensión del espacio efectivo cambia de tres a cero, aceptando para las separaciones intermedias los valores tanto enteros como fraccionarios. Esta es la razón por la que el método es llamado Dimensión Fractal (MDF).

Hasta el momento de iniciar esta investigación el MDF fue utilizado sólo para heterojunturas con alta simetría, QWs, QWW cilíndricos o QD esféricos para los cuales los jacobianos se calculan en forma relativamente sencilla. En este trabajo la aplicación del MDF se extiende a los SAQDs con una morfología más complicada con el fin de analizar las propiedades de los sistemas de una y dos partículas atrapados en puntos cuánticos con simetría axial y con diferentes perfiles, correspondientes a discos, lentes, conos y anillos. Esto sugiere la

consideración de modelos tridimensionales más realistas, que tienen en cuenta que los SAQDs son unas películas delgadas con un grosor variable, un poco más grande dentro del punto y más delgado en la región exterior correspondiente a la capa húmeda. Además, los modelos realistas deben considerar los cambios de los parámetros del material (masa efectiva, constante dieléctrica, brechas entre las bandas) no en una forma brusca sino en una forma paulatina. Esto implica considerar los modelos de barrera finita e incluir en la consideración los procesos relacionados con la alta posibilidad de tunelamiento de las partículas fuera de los SAQDs cuando el grosor de la película se hace demasiado pequeño en las direcciones de máximo confinamiento.

En esta tesis se asume que una herramienta adecuada para tratar matemáticamente esta situación en los puntos cuánticos casi-bidimensionales, es la Aproximación Adiabática (AA), que permite separar el movimiento rápido de las partículas en la dirección vertical, del movimiento lento en el plano de la película. Utilizando la AA en el marco del MDF en esta se analizan las propiedades de los estados ligados de los sistemas de dos partículas confinadas en SAQDs, teniendo en cuenta las características específicas de las heteroestructuras de  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ .

Esta tesis consta de cuatro capítulos. En el primer capítulo se discute la descripción de los modelos matemáticos que se utilizan para analizar el confinamiento en los SAQD's y se define el Hamiltoniano de dos partículas confinadas en un SAQD, que describe diferentes situaciones relacionadas con la presencia de dos electrones, un exciton o una donadora cargada negativamente. En el segundo capítulo se estudia el espectro energético de dos partículas en puntos cuánticos de diferentes formas y se analizan efectos relacionados con la estabilidad, el espín, las transiciones de Wigner, la morfología, el acoplamiento, etc. Los resultados de este capítulo fueron publicados en los artículos [37-43]. En el tercer capítulo se analiza el espectro de las donadoras neutras,  $D^0$  y cargadas negativamente  $D^-$ , confinadas en SAQDs, Se estudian los efectos del tamaño, de la morfología, de la posición de las donadoras sobre sus energías de enlace y la distribución de carga en la heterojuntura. Los resultados de este capítulo se publicaron en las Referencias [44-48]. En el cuarto capítulo se presentan los resultados del análisis sobre el espectro energético de los excitones atrapados en puntos cuánticos auto-ensamblados con perfiles correspondientes a discos, lentes, conos y anillos. Se analiza el efecto del tamaño, de la forma de los puntos cuánticos, de la existencia de la capa húmeda y del campo magnético sobre la energía de enlace del exciton. Además se estudia la distribución de carga dentro del punto cuántico con un exciton atrapado que aparece debido a la separación espacial entre los portadores de carga relacionada con la diferencia de sus masas efectivas. Estos resultados fueron publicados en la Referencias [41, 49, 50, 52]. Al final de la tesis se consideran las conclusiones y proyecciones futuras de este estudio y se presenta una reseña de sus posibles aplicaciones.

Los resultados de esta investigación también fueron presentados en los siguientes eventos Nacionales e Internacionales:

1. Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido (SLAFES 2002), llevado a cabo del 2 al 6 de Diciembre de 2002 en Mérida (Venezuela).
2. Congreso Internacional del Panamerican Advanced Studies Institute (PASI), llevado a cabo en Bariloche (Argentina), del 8 al 18 de Junio de 2003.
3. Congreso Latinoamericano de Ciencias de Superficies y sus Aplicaciones (CLACSA 2003), que se llevó a cabo en la ciudad de Pucón (Chile), del 7-12 de Diciembre de 2003.
4. XX Congreso Nacional de Física, celebrado del 1 al 5 de Septiembre de 2003, en la ciudad de Armenia.
5. VI Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada, que se llevó a cabo del 27 al 29 de octubre de 2004 en la Universidad de Antioquia Sede de Investigación Universitaria (SIU) de Medellín.
6. XVII Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES 2004), que se llevó a cabo en la Habana, diciembre 6-9 de 2004.
7. XXI Congreso Nacional de Física, celebrado en la Universidad del Atlántico (Barranquilla), que se llevó a cabo del 24 al 28 de Octubre de 2005.
8. Latin American Congress of Surface Science and its applications (Clacsa XII), celebrado en Angra dos Reis, Río de Janeiro-Brazil, durante los días 5 -9 de Diciembre del año 2005.
9. VII Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada (VII ENFMC), que se llevó a cabo en Tunja del 23 al 27 de Octubre de 2006.

# 1. MODELO MATEMÁTICO

---

---

En la actualidad, con la ayuda de los microscopios de Fuerza Atómica, ha sido posible la obtención de imágenes que muestran la morfología de los puntos cuánticos de InAs, crecidos mediante la técnica de Stranski-Krastanov, [13]. Estos puntos cuánticos exhiben formas irregulares, pero en la mayoría de los casos ellos son similares a conos, pirámides, discos, anillos o volcanes. Sus formas, principalmente, dependen de las condiciones de crecimiento, temperatura, presión, composición, duración, etc. Por ejemplo, la transformación de un punto cuántico de forma de lente a la forma de anillo, que fue descubierto en el proceso de crecimiento de un punto de InAs sobre GaAs indica que esto no es un proceso en equilibrio [53].

Particularmente, fue encontrado que la formación de un anillo cuántico o de una especie de volcán en erupción tiene lugar, entre otras circunstancias, cuando el espesor de la capa de GaAs es comparable con la altura del punto ó cuando un punto de InAs es parcialmente cubierto por una capa de AsGa, y se somete al proceso de sinterización. Entonces el In se difunde desde su posición original formando una especie de estructura como la superficie de un volcán [53].

En el artículo [11] se ha reportado que cuando un punto cuántico auto-ensamblado de InAs se crece sobre una capa de GaAs y después se cubre con una capa delgada de GaAs, al recocerse a una temperatura de 520 OC durante un minuto, se produce un cambio brusco en la forma del punto, cambiando drásticamente de la forma de una lente (de aproximadamente 20 nm de diámetro y 7 nm de altura) a una forma similar a un volcán, con incremento en el tamaño lateral (entre 60 y 140 nm en el diámetro exterior), con una reducción en la altura de alrededor de 2 nm y con un hueco bien definido en el centro de aproximadamente 20 nm. Pero independientemente de los tamaños que tengan los puntos cuánticos la mayoría de muestras fabricadas están caracterizadas casi siempre por una pequeña altura y muy pequeña razón entre la altura y el tamaño lateral [53].

Para analizar la correlación entre la forma y el tamaño del puntos cuánticos auto-ensamblados y el espectro energético de sistemas de una y dos partículas confinadas en ellos en este tesis con el objetivo de simplificar los cálculos se consideran solo las formas geométricas que tienen simetría axial. Esto nos permite al menos parcialmente separar las variables y de esta manera disminuir el volumen de los cálculos al resolver ecuación de Schrödinger cuya orden inicial para dos partículas es seis. A pesar de que la presencia de la simetría axial en

los modelos considerados limita nuestras posibilidades para analizar el efecto de la forma, estas posibilidades permiten con suficiencia, poder variar la forma desde un disco hasta un anillo, una lente, un cono o un volcán.

## 1.1 DESCRIPCIÓN MATEMÁTICA DE LOS PERFILES DE PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ENSAMBLADOS CON DIFERENTES MORFOLOGÍAS

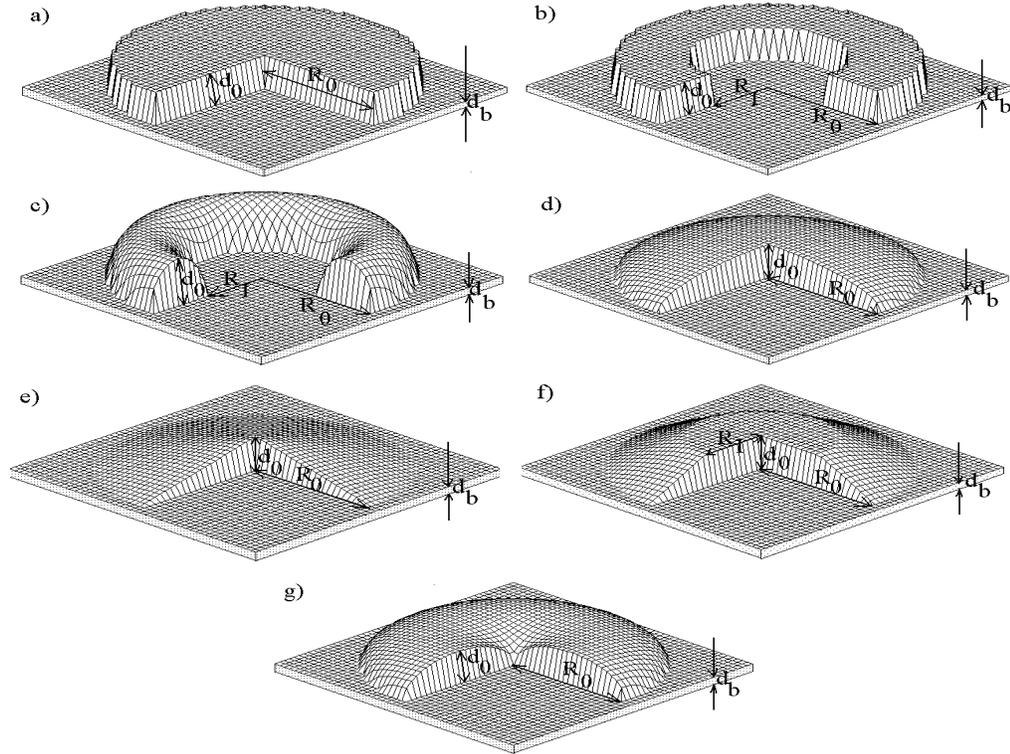
Cualquier punto cuántico auto-ensamblado es una película delgada con dos regiones diferentes: una región de grosor generalmente variable y caracterizada por un valor máximo  $d_0$  y otra, fuera del punto cuántico, llamada capa húmeda caracterizada por un grosor  $d_b$ , pequeño y constante. La primera región tiene un espesor mayor que la segunda región.

Las fronteras entre estas dos regiones, denominadas junturas, pueden ser bien definidas, con una región transitoria muy delgada (“hard-well model”) o borrosas con una región transitoria considerable (“soft-edge-barrier model”). Ambos tipos de modelos serán considerados en esta tesis. Como aquí solo se tratan modelos con simetría axial, existe la posibilidad de describir el perfil de punto cuántico para ambos tipos de modelos con una sola función  $d(\rho)$  que describe la dependencia del grosor de la película  $d$ , y de la distancia hasta el eje de simetría en coordenadas cilíndricas  $\rho$ .

Esta función fuera del punto cuántico (en la capa húmeda) acepta un valor constante  $d_b$ , mientras que dentro del punto cuántico se varía llegando a un valor máximo  $d_0$ . Más adelante se consideran unas formas de puntos cuánticos que corresponden a discos, anillos de sección transversal rectangular, anillos de sección transversal elipsoidal, lentes, conos truncados, pirámides y volcanes presentados en la Figura 3.

Para usar las notaciones unificadas para los modelos indicados en la Figura 3 introduciremos adicionalmente dos parámetros adicionales, el radio interior  $R_i$  que corresponde a una región circular interna de la película con un grosor constante y el radio exterior  $R_e$ , correspondiente a una región externa con un grosor constante. Para los casos de disco, lente pirámide y volcán en la Figura 3  $R_i = 0$ . Se supone que el grosor de la película varía solo en las regiones cuando  $\rho < R_i \cup \rho > R_e$ .

Figura 3. Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos auto-ensamblados con diferentes formas y con parámetros  $R_i = 10\text{nm}$ ,  $R_e = 20\text{nm}$ ,  $d_0 = 6\text{nm}$ : a) disco, b) anillo de de sección transversal rectangular, c) anillo de sección transversal elipsoidal, d) lente, e) cono, f) cono truncado, g) volcán.



Los perfiles de los puntos cuánticos mostrados en la Figura 3 se describen a través de funciones  $d(\rho)$  muy sencillas cuyas expresiones presentamos a continuación:

$$d(\rho) = \begin{cases} d_0 + d_b, & \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases} \quad \text{para disco} \quad (1.1.1)$$

$$d(\rho) = \begin{cases} d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho < R_i \cup \rho > R_e \end{cases} \quad \text{para anillo de paredes rectangulares} \quad (1.1.2)$$

$$d(\rho) = \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{\rho - R_i}{R_e - R_i}\right)^2} d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho < R_i \cup \rho > R_e \end{cases} \quad \text{para un anillo de paredes suaves:} \quad (1.1.3)$$

$$d(\rho) = \begin{cases} (1 - \rho/R_e)d_0 + d_b, & \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases} \quad \text{para cono:} \quad (1.1.4)$$

$$d(\rho) = \begin{cases} d_0 + d_b, & \rho < R_i \\ \left[ \frac{R_e - \rho}{R_e - R_i} \right] d_0 + d_b, & R_i < \rho < R_e \\ d_b, & \rho > R_e \end{cases} \quad \text{para cono truncado} \quad (1.1.5)$$

$$d(\rho) = d_0 \exp\left[-(\rho - R_0)^2 / R_0^2\right] + d_b, \quad R_0 = (R_i + R_e)/2 \quad \text{para volcán:} \quad (1.1.6)$$

## 1.2 PARÁMETROS DE LOS MATERIALES

Se denominan parámetros del material a ciertas cantidades que caracterizan de alguna manera a las propiedades, tales como: la brecha de energía entre las bandas de valencia y las bandas de conducción, la permitividad eléctrica relativa, la masa efectiva relativa y otros factores que son muy importantes para caracterizar los materiales semiconductores.

Algunas propiedades importantes de los materiales semiconductores que son más utilizados, se muestran en la Tabla 1, de acuerdo a [8], teniendo en cuenta las siguientes denotaciones:

Tabla 1. Propiedades de algunos materiales semiconductores compuestos binarios.

Propiedad	GaAs	AlAs	InAs	Unidades
$a$	0.5653	0.5660	0.6058	Nm
$\rho$	5.318	3.760	5.67	Mg m-3
$m_{hh}$	0.5	0.5	0.41	
$m_{lh}$	0.082	0.153	0.026	
$m_e$	0.067	0.150		
$\varepsilon_b$	13.2	10.1	15.1	

$a$  : Constante de red

$\rho$  : Densidad de masa

$m_{hh}$  : Masa relativa de huecos pesados

- $m_{lh}$  : Masa relativa de huecos ligeros  
 $m_e$  : Masa relativa del electrón  
 $\epsilon_b$  : Constante dieléctrica estática (permitividad relativa)

Para estimar los valores de los parámetros de un compuesto ternario a partir de esta tabla se puede utilizar el método de interpolación lineal. Por ejemplo, para el caso de una aleación ternaria de  $In_xGa_{1-x}As$ , la constante dieléctrica puede ser estimada como:

$$\epsilon = 15.1x + 13.2(1-x) = 1.9x + 13.2.$$

Conforme a [56], algunos valores de los parámetros correspondientes a compuestos ternarios  $In_xGa_{1-x}As$  y el  $In_xAl_{1-x}As$  se definen a través de las fórmulas de interpolación presentadas en la Tabla 2.

Tabla 2. Parámetros de los materiales para compuestos ternarios  $In_xGa_{1-x}As$  y el  $In_xAl_{1-x}As$ .

Parámetro	$In_xGa_{1-x}As$	$In_xAl_{1-x}As$
Brecha de Energía (eV)	$1.518 - 1.593x + 0.493x^2$	$3.0994 - 3.3814x + 0.7x^2$
Constante dieléctrica relativa	$12.4 + 21.5x$	$10.06 + 4.49x$
Masa efectiva relativa del electrón	$0.0665 - 0.0435x$	$0.1808 - 0.1578x$
Masa efectiva relativa del hueco	0,097 fuera del punto 0,45 dentro del punto	

### 1.3 POTENCIAL DE CONFINAMIENTO

El potencial de confinamiento en puntos cuánticos se debe a los saltos de las brechas entre las bandas de valencia y de conducción,  $\Delta G$  en las juntas, los cuales provienen del cambio de la concentración  $x$  de la tercera componente en los compuestos ternarios y son el resultado de la contribución del salto  $V_e$  del piso de la banda de conducción y del salto  $V_h$  del techo de la banda de valencia  $\Delta G = V_e + V_h$  [de aquí en adelante los subíndices e, h corresponden al electrón y al hueco, respectivamente). Debido a estos saltos, el movimiento de los portadores

de carga en las correspondientes bandas ya no es libre y este queda limitado por la acción de un potencial de confinamiento, el cual para un modelo muy simplificado es igual a cero dentro de la película y es igual a  $V_i$ ,  $i = e, h$  (la altura de la barrera) fuera de la película. Esta dependencia del potencial de confinamiento puede expresarse en una forma matemática sencilla en términos de la función del perfil del punto cuántico introducida en el párrafo anterior, usando la función de paso de Heaviside como:

$$V_i(\rho, z) = V_i \cdot [\theta(z - d(\rho)) + \theta(-z)], \quad i = e, h \quad (1.3.1)$$

Para analizar modelos de confinamiento un poco más complicados, que consideran la posibilidad de la existencia de una región transitoria, cuyo ancho es considerable, la función de Heaviside en la fórmula (1.3.1) debe ser reemplazada por otra función de paso suave la cual definiremos más adelante.

Para los modelos simplificados en los cuales la altura de la barrera se considera como infinita los puntos cuánticos pueden estudiarse como si se tratara de sistemas bidimensionales, teniendo en cuenta el valor muy pequeño del grosor de la película. Este tipo de modelo fue utilizado en la mayoría de trabajos publicados anteriormente para analizar el efecto de confinamiento sobre el espectro energético de dos partículas en puntos cuánticos.

En esta tesis se analizan modelos tridimensionales cuyos potenciales se describen a través de las fórmulas del tipo (1.3.1) ya que en un modelo realista con una barrera finita un movimiento estrictamente bidimensional no es posible. Con la disminución fuerte del grosor de la película todos los niveles energéticos de las partículas, debido al confinamiento, suben hasta tanto las funciones de onda de las partículas no desborden fuera de la película. Es decir, cuando la película no es muy delgada el movimiento de los portadores dentro de ella no es estrictamente bidimensional y cuando la película es demasiado delgada el movimiento tampoco es estrictamente bidimensional debido al fuerte desbordamiento de los portadores de carga en la dirección transversal.

Por tanto, surge una pregunta importante: ¿Es compatible la suposición sobre la posibilidad de utilización del modelo bidimensional con un potencial de confinamiento de barrera finita? La respuesta a este interrogante todavía no ha sido abordada en la literatura científica. Para encontrar un procedimiento riguroso que permita responder a esta pregunta en esta tesis se utiliza la aproximación de tipo adiabática con base en las técnicas de derivación funcional.

## 1.4 HAMILTONIANO PARA SISTEMAS DE DOS PARTÍCULAS CONFINADAS EN UN PUNTO CUÁNTICO AUTO-ENSAMBLADO

En los cálculos para dos partículas se desprecia la variación de la constante dieléctrica, pero las masas efectivas de los portadores de carga  $i$ ,  $m_i^*$ ,  $i = e, h$ , se consideran como variables con un comportamiento similar al potencial de confinamiento

$$m_i^*(\rho, z) = m_{iW}^* + (m_{iB}^* - m_{iW}^*) \cdot [\theta(z - d(\rho)) + \theta(-z)], \quad i = e, h, \quad (1.4.1)$$

donde  $m_{iW}^*$  y  $m_{iB}^*$ ,  $i = e, h$  son las masas efectivas de los portadores de carga dentro de la película (“well”) y fuera de esta (“barrier”). Usando el radio de Bohr efectivo,  $a_0 = \eta^2 \varepsilon / \mu e^2$  como unidad de longitud y el Rydberg efectivo,  $Ry^* = e^2 / 2\varepsilon a_0^*$  como unidad de energía, siendo  $\mu = m_{1W}^* m_{2W}^* / (m_{1W}^* + m_{2W}^*)$  la masa reducida, el Hamiltoniano adimensional de dos partículas en un punto cuántico auto-ensamblado, en las coordenadas cilíndricas puede escribirse de la siguiente manera:

$$H = H_1(\vec{r}_1) + H_2(\vec{r}_2) + 2\tau / r_{12}; \quad \tau = 0, \pm 1 \quad (1.4.2)$$

$$H_i(\vec{r}) = -\frac{\partial}{\partial z} \eta_i(\rho, z) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \eta_i(\rho, z) \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\eta_i(\rho, z)}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V_i(\rho, z); \quad i = 1, 2 \quad (1.4.3)$$

donde

$$\eta_i(\rho, z) = \mu / m_i^*(\rho, z). \quad (1.4.4)$$

Los Hamiltonianos  $H_i(\vec{r})$  (1.4.3) son de una sola partícula, en los cuales debido a la simetría axial, la variable angular se puede separar y finalmente la ecuación de Schrödinger es una ecuación con dos variables  $\rho$  y  $z$ . Como esta última ecuación no se puede resolver en una forma exacta hay que usar uno de los métodos aproximados. En esta tesis utilizaremos con este fin la aproximación adiabática aprovechando el hecho que debido al confinamiento muy fuerte en la dirección  $z$  el movimiento de la partícula en esta dirección es mucho más rápido.

El Hamiltoniano de dos partículas (1.4.2), describe dos partículas sin interacción para  $\tau = 0$ , dos partículas con repulsión para  $\tau = 1$  y dos partículas con atracción para  $\tau = -1$ . La ecuación de Schrödinger correspondiente es una ecuación con seis variables y para separarlas utilizaremos el método de Dimensión Fractal elaborado anteriormente en las Referencias [36, 117].

## **2. ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS PARTÍCULAS**

---

---

Los avances en la tecnología de la nano-escala ha hecho posible la fabricación de puntos cuánticos auto-ensamblados, los cuales como fue demostrado experimentalmente [11-13], pueden tener atrapados solo uno o dos electrones. Este hecho hace a estos materiales muy prometedores como base para una futura generación de dispositivos opto-electrónicos [87-89]. Por esta razón, el entendimiento de la estructura del espectro energético de dos partículas confinadas en un punto cuántico, es un paso clave para poder controlar propiedades físicas de los dispositivos de pocos electrones. Esta es la razón por la cual muchas investigaciones sobre puntos cuánticos de dos electrones han sido realizadas en las dos últimas décadas usando diferentes técnicas [17, 23, 24, 28, 90-94]. En el análisis teórico de un punto cuántico con dos electrones el potencial de confinamiento es usualmente modelado por un pozo rectangular o parabólico. Sin embargo, un potencial realista en puntos cuánticos, resultante de la diferencia de las brechas entre las bandas de dos materiales en las uniones, puede poseer diferentes formas dependiendo de la estructura, la aleación, el campo externo y otros factores [95-97]. La variedad de posibles formas del potencial de confinamiento en los puntos cuánticos sugiere la elaboración de un procedimiento numérico unificado para calcular el espectro de energía de puntos cuánticos con dos electrones o un par electrón-hueco que pueda aplicarse a cualquier forma de potencial. En el presente capítulo se propone uno de los posibles modos de tratar este problema con base en el método llamado Aproximación Adiabática. Los resultados de este capítulo fueron publicados en los artículos [37, 38, 39, 46, 49, 40, 41, 43]

### **2.1 INESTABILIDAD DEL ESTADO BASE DE DOS ELECTRONES EN PUNTOS CUÁNTICOS [37]**

Un sistema de dos electrones es el modelo más simple que provee una excelente prueba para varios métodos aproximados usados para analizar los efectos de correlación. Desde el advenimiento de la mecánica cuántica, este problema ha sido de interés y es el que ha sido más completamente tratado [80] para iones y átomos, tales como  $H^-$ ,  $Li^+$ ,  $He$ , etc., donde los dos electrones son mantenidos por el potencial de confinamiento de Coulomb. En años recientes el interés en este problema se ha incrementado en relación con el estudio del comportamiento de dos electrones confinados en puntos cuánticos. Variando el tamaño y la forma del punto cuántico es posible generar varias formas de potencial de

confinamiento, diferentes de las proporcionadas por la interacción de Coulomb y observar como esta variación se refleja en los cambios de la correlación de los electrones y de la distribución espacial. El modelo de confinamiento de dos electrones en un potencial parabólico que tiene solución exacta ha atraído mucho interés en las investigaciones teóricas [17, 20, 23, 26, 58, 60, 61, 62, 81-83]. Con el fin de comparar la eficiencia de diferentes técnicas se han usado diferentes aproximaciones para analizar este problema: Las técnicas cuánticas de Monte Carlo [81], las series de perturbación de Taylor y las renormalizadas [58,60], el método de expansión de corrimiento  $1/N$  [20] y los métodos numéricos exactos [61,82, 83].

Para este modelo se encontró que la inestabilidad del estado base de la estructura electrónica con respecto al aumento de la intensidad del campo magnético, produce la inversión de los niveles de energía. Otros tipos de inestabilidades del estado base se han discutido en los artículos [23,85] para sistemas de muchos electrones en un punto cuántico.

Para puntos cuánticos, cuando la separación entre los niveles del electrón es comparable con la discontinuidad de la banda de conducción en las juntas, la aproximación parabólica para el potencial de confinamiento es inadecuada y debe considerarse un modelo diferente con una barrera finita y con una variación brusca de la altura del potencial en las interfaces.

Un modelo de dos electrones en un disco cuántico con un potencial de confinamiento finito de paredes rectangulares fue analizado en el artículo [84] donde fue demostrada la importancia de los efectos de correlación en contraste con el modelo de potencial parabólico. Más adelante se analiza el comportamiento de la energía del estado base con la variación del radio del punto cuántico esférico utilizando el procedimiento que es aplicable a cualquiera forma de potencial de confinamiento.

Dentro del marco de la teoría de la masa efectiva, ignorando la diferencia de las masas efectivas electrónicas y de la constante dieléctrica dentro del punto y en la barrera, el Hamiltoniano de dos electrones en un punto cuántico puede escribirse como:

$$H = H_0(1,0) + H_0(2,0) + \frac{2}{r_{12}}; \quad H_0(i,\alpha) = -\Delta_i + V(r_i) + \frac{2\alpha}{r_i}; \quad i=1,2 \quad (2.1.1)$$

Aquí  $V(r)$  es el potencial de confinamiento y el parámetro  $\alpha$  ( $\alpha > 0$ ) es un parámetro de apantallamiento, similar al introducido previamente en la teoría de

los átomos de dos electrones. En contraste con los trabajos anteriores de otros autores se consideran varias formas de potencial de confinamiento  $V(r)$  de barrera suave, rectangular, parabólica y de Coulomb. Por ejemplo, en el caso cuando  $V(r) = -\frac{2Z}{r}$  el Hamiltoniano (2.1.1) describe átomos de dos electrones. La función de prueba para el Hamiltoniano (2.1.1) con dos parámetros variacionales  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  se escoge como la combinación lineal de las funciones de onda de un electrón  $\varphi_0(i, \alpha)$ , que son soluciones del problema de campo central  $H_0(i, \alpha)\varphi_0(i, \alpha) = \varepsilon_0(\alpha)\varphi_0(i, \alpha)$ ,  $i=1,2$  multiplicada por una función de correlación desconocida  $\Phi(r_{12})$ , que además se considera como una función variacional,

$$\psi_{\pm}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi(r_{12}) \sum_{i=1}^2 (\pm 1)^{1+i} \varphi_0(1, \alpha_i) \varphi_0(2, \alpha_{3-i}) \quad (2.1.2)$$

La función de onda (2.1.2) para  $(\alpha_1 < \alpha_2)$  describe la estructura de capa abierta con las órbitas  $\varphi_0(i, \alpha_1)$  interior y  $\varphi_0(i, \alpha_2)$  exterior, correspondientes a los estados singlete (signo +) o triplete (signo -) y para  $(\alpha_1 = \alpha_2)$  la estructura de capa cerrada. Las funciones de onda del estado base  $\varphi_0(i, \alpha)$  y las energías  $\varepsilon_0(\alpha)$  fueron encontradas numéricamente mediante el uso del método de barrido trigonométrico [61,62]. Usando (2.1.1) y (2.1.2) se puede obtener la siguiente expresión para el valor medio de la energía total, el cual se puede considerar como un funcional de la función  $\Phi(r_{12})$ :

$$E[\Phi] = \int_0^{+\infty} \left[ 2S_0(x) \left( \frac{d\Phi(x)}{dx} \right)^2 + S_1(x) \Phi^2(x) \right] dx \Big/ \int_0^{+\infty} S_0(x) \Phi^2(x) dx \quad (2.1.3)$$

donde:

$$\begin{aligned} S_0(x) &= \frac{x}{2} \sum_{i,j=1}^2 (\pm 1)^{i+j} S_0^{ij}(x); \quad S_0^{ij}(x) = \int_0^{\infty} \varphi(r_1, \alpha_i) \varphi(r_1, \alpha_j) r_1 P_0^{ij}(r_1, x) dr_1 \\ P_0^{ij}(r_1, x) &= \int_{|r_1-x|}^{r_1+x} \varphi(r_2, \alpha_{3-i}) \varphi(r_2, \alpha_{3-j}) r_2 dr_2; \quad S_1(x) = x \sum_{i,j=1}^2 (\pm 1)^{i+j} S_1^{ij}(x) \\ S_1^{ij}(x) &= \left[ \varepsilon_0(\alpha_i) + \frac{1}{x} \right] S_0^{ij}(x) + 2(\alpha_i - \alpha_j) \int_0^{\infty} \varphi(r_1, \alpha_i) \varphi(r_1, \alpha_j) P_0^{ij}(r_1, x) dr_1 \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

La energía total en (2.1.3) depende de la elección de la función  $\Phi(r_{12})$  y de los dos parámetros variacionales  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ . El valor del funcional (2.1.3) alcanza un mínimo  $E_0(\alpha_1, \alpha_2) = E[\Phi_0]$  para la función  $\Phi_0(r_{12})$  para la cual la derivada variacional  $\delta E[\Phi]_0 / \delta \Phi = 0$ . Siguiendo el procedimiento estándar del cálculo variacional se puede demostrar que la función  $\Phi_0(r_{12})$  es una solución de la siguiente ecuación tipo Schrödinger

$$\frac{-2}{S_0(x)} \frac{d}{dx} \left[ S_0(x) \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \right] + \frac{S_1(x)}{S_0(x)} \Phi(x) = E_0(\alpha_1, \alpha_2) \Phi(x) \quad (2.1.5)$$

Para encontrar la energía del estado base de dos electrones se puede definir la función  $E_0(\alpha_1, \alpha_2)$  de dos variables  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  como solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional que puede resolverse numéricamente por uno de los métodos conocidos y después encontrar el valor mínimo de la función  $E_0(\alpha_1, \alpha_2)$  y los variables  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  correspondientes a la posición de este mínimo.

A fin de chequear la confiabilidad de los cálculos se ha usado el procedimiento para encontrar las energías del estado base de átomos y puntos cuánticos en el potencial parabólico, problemas cuyas soluciones exactas son bien conocidas, considerando potenciales de confinamiento  $V(r) = -2Z/r$  y  $V(r) = -(r/R_0)^2$ , respectivamente.

Resolviendo numéricamente el problema de campo central (3.1.1) por medio del MBT [61,62], se construye la aproximación con splines cúbicos para las funciones  $S_0(x)$  y  $S_1(x)$  definidos por la relación (2.1.4). Con estas funciones almacenadas en el computador, finalmente se resuelve numéricamente la ecuación de Schrödinger (2.1.5) y se encuentra la energía  $E_0$  de dos electrones.

Los resultados para los cálculos de átomos con dos electrones y puntos cuánticos parabólicos con dos electrones se presentan en las tablas 2.1.1 y 2.1.2 que muestran una concordancia con los mejores resultados obtenidos previamente [61-80] suficientemente buena, considerando la simplicidad de la función de prueba empleada.

Para describir la discontinuidad de la banda de conducción en las juntas se considera un modelo de punto cuántico de  $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$  con potencial de

barrera suave, asumiendo que el desplazamiento de la banda de conducción del *GaAs* en dirección radial varía suavemente de acuerdo a la relación:

$$V(r) = V_0 \frac{1 - \exp(-r/w)}{1 + \exp[-(r-R)/w]} \quad (2.1.6)$$

El potencial del tipo (2.1.6) se conoce en Física Nuclear como el potencial de Wood-Saxon.

Tabla 3. Energías de iones y átomos de dos electrones.

Los mejores resultados que aparecen en la tercera columna son del libro [10].

Z	Energía (Resultados obtenidos)	Energía Mejores resultados de [10]
1 (H)	-1.0518	-1.0551
2 (He)	-5.8028	-5.8074
3 (Li <sup>+</sup> )	-14.5543	-14.5598
4 (Be <sup>++</sup> )	-27.3238	-27.3111
5 (B <sup>+++</sup> )	-44.0175	-44.0619
6 (C <sup>++++</sup> )	-64.8041	-64.8125

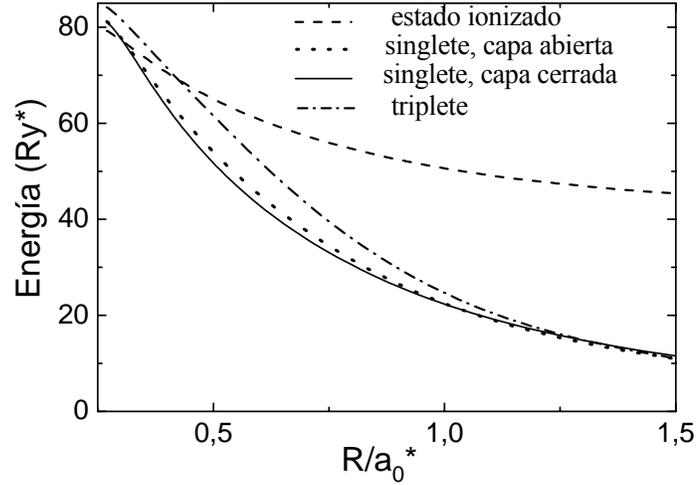
Tabla 4. Energías de dos electrones en puntos cuánticos parabólicos.

Los resultados exactos que aparecen en la tercera columna son del artículo [86].

$R_0$	$E * R_0^2$	$E * R_0^2$ (Resultado Exacto)
1.0	4.001	4.000
2.0	4.910	4.830
3.0	5.561	5.547
4.0	6.328	6.195

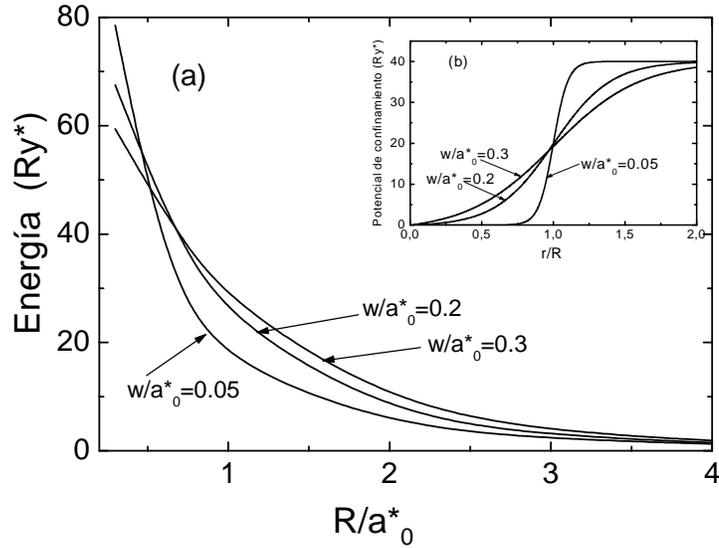
En la relación (2.1.6), el parámetro R define el radio del punto cuántico, mientras que  $w$  determina el espesor de la capa difusa en la interface, en la cual el potencial de confinamiento aumenta desde cero hasta  $V_0$  ( $V_0 \approx 40Ry^*$ ). Para  $w/R = 0$  se obtiene un simple potencial rectangular con un salto en la interfase. Las diferentes formas de las barreras desde la casi rectangular ( $w/R \rightarrow 0$ ) hasta la muy suave ( $w/R \rightarrow 1$ ) se pueden obtener variando el parámetro adimensional  $w/R$ .

Figura 4. Energías de varios niveles más bajos de dos electrones confinados en un punto cuántico esférico de  $GaAs/Ga_{0.7}As_{0.3}Al$  con un potencial casi rectangular ( $w/a_0^* = 0.05$ ) como una función del radio comparadas con el estado ionizado (línea punteada) cuando uno de los dos electrones escapa del punto.



En la Figura 4 se presentan los resultados del cálculo de las energías de dos electrones para diferentes estructuras electrónicas en función del radio del punto cuántico para un potencial casi rectangular correspondiente en (2.1.6) a  $w/a_0^* = 0.05$ . También en esta figura se muestra la energía de un punto cuántico ionizado (línea punteada) cuando uno de los dos electrones está situado en el pozo y el otro en la barrera. Se ve que la estructura electrónica de capa cerrada ( $\alpha_1 = \alpha_2$ ) tiene la energía más baja para los puntos cuánticos cuyos radios están entre  $0.3a_0^*$  y  $1a_0^*$ , mientras que para  $R > a_0^*$  la energía más baja corresponde a la estructura de capa abierta ( $\alpha_1 < \alpha_2$ ). Si el radio del punto cuántico es grande el confinamiento es débil y la repulsión de Coulomb, la cual en este caso se transforma en un factor predominante, conduce a la formación de dos orbitales, interior y exterior, de manera muy similar como en el ión negativo del átomo de hidrogeno, donde el efecto de correlación es predominante. Con el decrecimiento del radio del punto cuántico estos orbitales bajo el fuerte confinamiento se aproximan y para  $R < a_0^*$  el orbital exterior se expulsa hacia la región de la barrera, ambos electrones se quedan en el mismo orbital y el estado base se transforma en una estructura de capa cerrada. De la Figura 4 también se ve que la energía de la estructura electrónica triplete para todos los valores del radio del punto cuántico es siempre superior a la de un singlete. Para radios pequeños del punto cuántico se observa un cruce de las curvas del singlete, del triplete y del estado ionizado.

Figura 5. Energía del estado base de dos electrones en un punto cuántico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>As<sub>0.3</sub>Al como una función del radio para un modelo de potencial de barrera suave con diferentes espesores de la capa difusa.



La Figura 5(a), muestra las curvas de la energía del estado base de dos electrones contra el radio en un punto cuántico para el modelo de potencial con barrera suave con diferentes espesores de la capa de difusión de la interfase con  $w/a_0^* = 0.05, 0.2$  y  $0.3$ , correspondientes a las formas de potencial casi rectangular, suave y muy suave, mostradas en la figura insertada, Figura 5(b). Se pueden observar los cruces de las curvas en la Figura 5(a) cuando el radio del punto cuántico varía desde  $0.5a_0^*$  hasta  $0.8a_0^*$ .

Para valores intermedios y grandes del radio del punto cuántico ( $R/a_0^* > 0.8$ ) el confinamiento de la órbita electrónica es pequeño y los niveles de energía se sitúan próximos a la parte superior de la banda de conducción.

El confinamiento de la órbita electrónica en esta región de energía para un potencial suave es más fuerte que para uno rectangular y la forma del potencial correspondiente a  $w/a_0^* = 0.3$  produce el mayor confinamiento y la mayor energía de enlace, seguido por el  $w/a_0^* = 0.2$ , mientras que para  $w/a_0^* = 0.05$  se presenta el menor confinamiento y la menor energía de enlace. Cuando el radio del punto cuántico disminuye, los niveles de la energía suben hacia la parte superior de la banda de conducción.

Por consiguiente, cuando el radio es pequeño ( $R/a_0^* < 0.4$ ), el potencial correspondiente a  $w/a_0^* = 0.05$  presenta el mayor confinamiento y la mayor energía para el estado base de dos electrones seguido por  $w/a_0^* = 0.2$  y  $w/a_0^* = 0.3$  con la menor energía. Como consecuencia en la Figura 5 se observan varios cruces de las curvas en la región  $0.5 < R/a_0^* < 0.8$ .

## **2.2 ESTADO BASE Y LOS DOS PRIMEROS ESTADOS EXCITADOS DE DOS ELECTRONES EN UN PUNTO CUÁNTICO ESFÉRICO [43]**

A primera vista, para analizar el problema de dos electrones confinados en un punto cuántico esférico se podría usar uno de los métodos simples elaborados previamente para el átomo de Helio y para iones de dos electrones, considerando un punto cuántico como un átomo artificial cuyo núcleo origina una atracción diferente de la Coulombiana. Sin embargo, estos métodos son válidos solamente para puntos cuánticos relativamente pequeños donde el efecto de correlación debido al fuerte confinamiento es relativamente débil y la brecha entre el estado base y los estados excitados es relativamente grande, justo como para el átomo de Helio. En estas condiciones para dos electrones solamente los estados de importancia práctica son simplemente los excitados, aquellos en los que al menos un electrón está en el estado base puesto que los otros estados, doblemente, triplemente, etc., excitados solo tienen niveles en la parte del espectro continuo. Las funciones de onda de dos electrones para tales estados pueden tomarse aproximadamente como el producto de una función de correlación con la combinación simetrizada de las funciones de onda uní-particulares en la que una de ellas corresponde al estado base [80]. Inversamente, para puntos cuánticos de gran tamaño, donde el confinamiento es débil, el efecto de correlación es dominante. Esto resulta en una mezcla fuerte entre el estado base con los estados uní-particulares de orden superior y en el surgimiento de los estados doblemente excitados en el espectro discreto. Por consiguiente, hay un rango restringido de la dimensión para los puntos cuánticos con dos electrones cuyos estados en el espectro discreto son todos simplemente excitados y para los cuales la mezcla de los estados uní-particulares es relativamente débil.

Como la escala típica para la interacción Coulombiana es el radio de Bohr efectivo, se puede esperar que los puntos cuánticos con dos electrones cuya dimensión es menor o alrededor del radio de Bohr tengan propiedades espectrales similares a las de los átomos e iones con dos electrones y los métodos teóricos parecidos puedan ser usados para analizar el espectro de energía en ambos casos. Esta es la razón por la que en este párrafo se utilizan para los niveles energéticos más bajos de un punto cuántico esférico con dos electrones las mismas notaciones que se utilizaron previamente en la teoría de los átomos e

iones con uno y dos electrones. Particularmente, vamos a analizar el estado base 1S, y los primeros dos estados simplemente excitados, singlete  $2^1P$  y triplete  $2^3P$  en los cuales uno de los dos electrones está situado en orbital 1s y otro en 2p, usando para este propósito el método más simple elaborado previamente para iones con dos electrones y para el átomo de Helio.

El Hamiltoniano adimensional de dos electrones en un punto cuántico esférico puede escribirse como:

$$H = H_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + 2/r_{12}; \quad H_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{H}_0^0(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_0^0(\mathbf{r}_2); \quad \hat{H}_0^0(\mathbf{r}_i) = -\Delta_i + V(r_i); \quad i = 1, 2 \quad (2.2.1)$$

donde  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  son los vectores de posición de los dos electrones,  $r_{12}$  es la separación entre ellos y  $V(r)$  es el potencial de confinamiento. Como en los estados 1S,  $2^1P$  y  $2^3P$  de dos electrones, al menos un electrón está en el estado base, todos ellos se caracterizan solamente por tres números cuánticos  $n_r, l$ , y  $m$  del otro electrón, justo como para un átomo de un solo electrón.

Además, el número cuántico radial para todos los tres estados es cero ( $n_r = 0$ ) y en la ausencia de campo magnético ellos son degenerados con respecto al número cuántico magnético  $m$ . Por esta razón, ellos solo se diferencian por solo un número cuántico  $l$  y  $l = 0$  para el primer estado y  $l = 1$  para los otros dos estados.

Debido a la simetría esférica del potencial de confinamiento en el Hamiltoniano  $H_0$  de una partícula, éste puede separarse completamente y sus valores propios  $E^{(0)}(0, l, 0) \equiv E^{(0)}(l)$  y las funciones propias  $\psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  se pueden expresar en términos de la solución bien conocida del problema de campo central de una partícula como:

$$H_0 \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E^{(0)}(l) \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2); \quad (2.2.2)$$

$$E^{(0)}(l) = (\varepsilon_0 + \varepsilon_1); \quad \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [f_0(\mathbf{r}_1) f_l(\mathbf{r}_2) \pm f_l(\mathbf{r}_1) f_0(\mathbf{r}_2)] / \sqrt{2}$$

donde las funciones  $f_l(\mathbf{r}_i)$  se expresan en los términos de las armónicas esféricas como:

$$f_l(\mathbf{r}_i) = u_l(r_i) Y_{l0}(\vartheta, \varphi) \quad (2.2.2a)$$

con las partes radiales  $u_l(r)$  que son soluciones de la ecuación de onda unidimensional:

$$-u_l''(r) + \left[ l(l+1)/r^2 + V(r) \right] u_l(r) = \varepsilon_l u_l(r) \quad (2.2.2b)$$

correspondiente a la energía más baja  $\varepsilon_l$ . El signo en (2.2.2) es positivo para el estado singlete y negativo para el estado triplete.

Para encontrar las funciones propias  $u_l(r)$  se debe definir primero el potencial de confinamiento  $V(r)$ . La función de paso de Heaviside  $\theta(z, z_0)$ , igual a cero para  $z < z_0$  y a uno para  $z > z_0$ , comúnmente se usa para describir la variación abrupta del potencial de confinamiento en las uniones de las heteroestructuras. Un modelo más realista requiere de la existencia de una región de transición de espesor finito que puede ser relativamente pequeño o grande dependiendo de la perfección de las uniones en las heteroestructura. Para describir tal variación no abrupta del potencial en las uniones se propone usar una versión suave de la función de paso definida por:

$$\theta(z, z_0, W) = \begin{cases} 0; & z < z_0 - W \\ \left[ (z - z_0)^2 / W^2 - 1 \right]^2; & z_0 - W \leq z < z_0 \\ 1; & z \geq z_0 \end{cases} \quad (2.2.3)$$

El parámetro  $W$  en (2.2.3) está asociado con la región de transición comprendida entre los puntos  $z = z_0 - W$  y  $z = z_0$ . El perfil de la función de paso (2.2.3) se cambia desde uno casi rectangular cuando  $W \rightarrow 0$  a uno muy suave cuando  $W$  se hace grande. Se puede verificar que la función (2.2.3) y sus derivadas son continuas en todos los puntos incluyendo los puntos de frontera de la región de transición y diferentes formas de potencial se pueden obtener usando la función (2.2.3). En este párrafo se considera un modelo de punto cuántico esférico de GaAs de radio  $R_b$  con una isla esférica encerrada (región del núcleo) de radio  $R_c$ , donde la concentración de Al que sustituye al Ga es  $x_c$ . Además, se asume que el punto cuántico de GaAs está embebido en un matriz de Ga(Al)As (región de la barrera) donde la concentración de Al que sustituye al Ga es igual a  $x_b$ .

El potencial de confinamiento  $V(r)$  para tal heteroestructura se puede describir por medio de la siguiente relación:

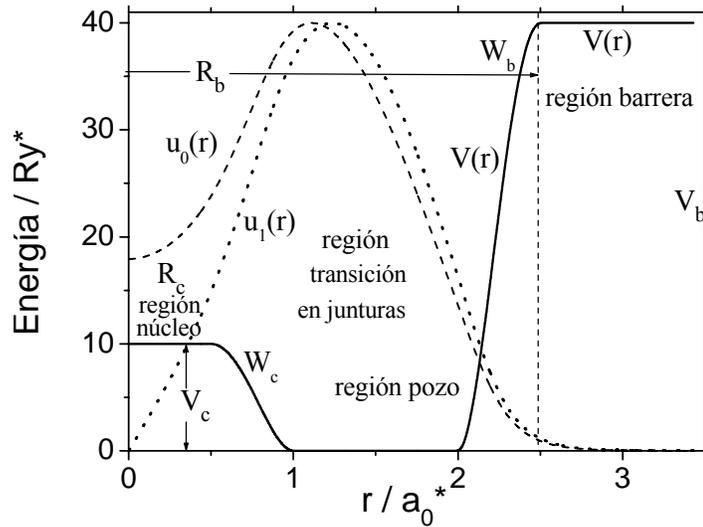
$$V(r) = V_c \theta(-r, -R_c, W_c) + V_b \theta(r, R_b, W_b) \quad (2.2.4)$$

Se ve que la función (2.2.4) tiene dos regiones de transición, una de ellas está próxima al núcleo donde el potencial decrece desde  $V_c$  en el punto  $r = R_c$  hasta 0 en el punto  $r = R_c + W_c$ , y otra región próxima a la barrera donde el potencial se incrementa suavemente desde 0 en el punto  $r = R_b - W_b$  hasta  $V_b$  en la barrera cuando  $r = R_b$ . En los cálculos se usan parámetros  $W_b, W_c$  de valor  $0.01a_0^*$  a fin de simular la forma rectangular y los valores  $W_b, W_c$  mayores que  $0.1a_0^*$  para modelar las formas de potencial de barrera suave. Los saltos de potencial  $V_c, V_b$  están relacionados con los saltos de las concentraciones  $x_c, x_b$  de Al por medio de la siguiente fórmula de interpolación

$$V_{c(b)} = 0.6 \left[ 1.36x_{c(b)} + 0.22x_{c(b)}^2 \right] \quad (eV) \quad (2.2.5)$$

Una vez se define la dependencia del potencial de confinamiento con respecto al radio, entonces se puede encontrar la parte radial de las funciones de onda uniparticulares con diferentes momentos angulares usando uno de los métodos numéricos (disparos o MBT) para resolver la ecuación (2.2.2b). Un ejemplo del resultado de tal cálculo se muestra en la Figura 6.

Figura 6. Potencial de confinamiento (línea continua) y partes radiales de las funciones de onda del electrón con momento angular  $l = 0$  (línea a trazos) y  $l = 1$  (línea punteada) en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga(Al)As con un núcleo de radio  $R_c = 0,5a_0^*$  y radio de la barrera  $R_b = 2,5a_0^*$  con regiones de transición  $W_c = W_b = 0,5a_0^*$  y 7% de concentración de Al en el núcleo y 40% en la barrera.



Teniendo en cuenta que debido al término de repulsión electrón-electrón los valores propios del Hamiltoniano (2.2.1) son siempre mayores que las correspondientes energías uní-particulares  $E^{(0)}(l)$ , se puede hacer una estimación cualitativa de los límites superior e inferior del espectro discreto de dos electrones en un punto cuántico, una vez que se haya encontrado la solución del problema uní-particular (2.2.2).

El límite superior del espectro discreto de dos electrones en un punto cuántico con altura de la barrera  $V_b$  es igual a la energía más baja del sistema ionizado  $E_{1s} + V_b$ , con un electrón localizado dentro del punto cuántico en el estado ligado más bajo  $1s$  y otro electrón que haya escapado a la región de la barrera, mientras que el límite inferior del espectro discreto es igual a la energía más baja del punto cuántico con dos electrones atrapados,  $E_{1s} + E_{1s}$ .

En la Figura 7 se presentan las energías uní-particulares para el estado base y algunos estados  $S$  simplemente excitados (líneas continuas) y doblemente excitados (líneas a trazos) como funciones del radio, calculadas para un punto cuántico esférico de GaAs /Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con potencial rectangular.

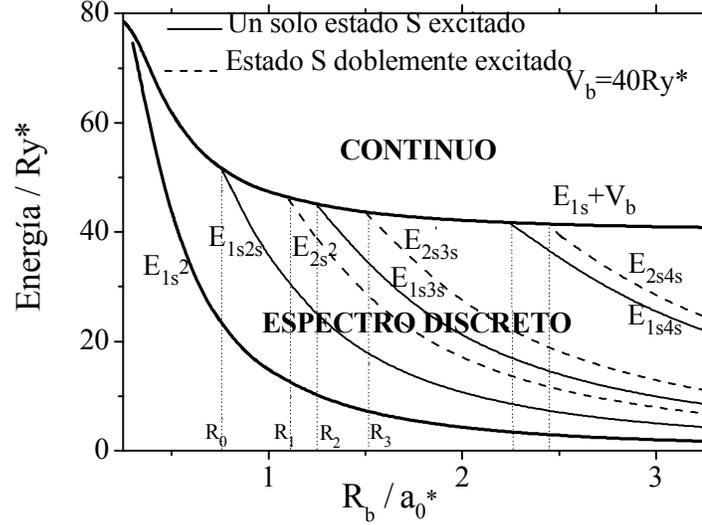
Los límites del espectro inferior y superior están dados en la Figura 7 por dos líneas continuas gruesas y el espectro discreto del punto cuántico esférico está situado entre ellas. De la Figura 7 se ve que entre mayor sea el radio del SQD más ancha es la región del espectro discreto de dos electrones y mayor es el número de niveles excitados en un SQD con dos electrones.

Cuando la dimensión del punto cuántico decrece, la energía  $E$  de los dos electrones crece aproximándose al límite superior del espectro discreto donde la energía de enlace  $E_b$ , definida como la energía mínima necesaria para el escape de uno de los dos electrones, está dada por la relación

$$E_b = E_{1s} + V_b - E \quad (2.2.6)$$

decrece aproximándose a cero, haciendo este estado inestable respecto a la ionización. De la Figura 7 se ve que cuando la dimensión del punto cuántico es muy pequeña ( $R < R_0$ ) solamente el estado base  $1S$  existe en el espectro discreto de dos electrones en un SQD. Cuando el radio aumenta y su valor está comprendido entre  $R_0$  y  $R_1$  ya son estables tres estados  $S$ :  $1S$ ,  $2^1S$  y  $2^3S$ .

Figura 7. Energías uní-particulares de un punto cuántico esférico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con dos electrones para el estado base y algunos estados S excitados como una función del radio, obtenidas mediante la solución del problema de valores propios de una partícula (2.2.2). Las líneas gruesas corresponden a los límites superior e inferior del espectro discreto de dos electrones.



La función de prueba más simple para un sistema de dos electrones  $\psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  que describe uno de los tres estados  $1S$ ,  $2^1P$  o  $2^3P$  es un producto de las funciones de onda uní-particulares en forma del determinante de Slater con una función envolvente arbitraria  $\Phi_l(r_{12})$  que depende solamente de la separación entre los electrones:

$$\psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Phi_l(r_{12}) \quad (2.2.7)$$

Esta función de prueba desprecia la mezcla de los estados uní-particulares y por eso solamente es válida si las distancias entre los niveles energéticos uní-particulares son mayores que el promedio de la energía de interacción electrón-electrón. De la Figura 7 se ve que esta condición se satisface solamente para puntos cuánticos pequeños donde en el espectro discreto hay muy pocos estados y por consiguiente la función de prueba (2.2.7) se puede considerar como una buena aproximación.

El principio variacional de Schrödinger dice que una función  $\Phi_l(r)$  para la cual el funcional  $E[\Phi_l] = \langle \psi_l \Phi_l | H | \psi_l \Phi_l \rangle / \langle \psi_l \Phi_l | \psi_l \Phi_l \rangle$  tiene mínimo, da los valores más próximos a la energía exacta, entre los que se pueden obtener usando las

funciones de prueba tipo (2.2.7). Tomando la derivada funcional con respecto a  $\Phi_l(r)$  se puede obtener, después de un proceso algebraico, la siguiente ecuación diferencial:

$$-2\Phi_l''(r) - 2w_l(r)\Phi_l'(r) + \frac{2}{r}\Phi_l(r) = (E - E_0(l))\Phi_l(r); \quad w_l(r) = \frac{J_l'(r)}{J_l(r)}; \quad l=0,1 \quad (2.2.8)$$

donde los Jacobianos  $J_l(r)$  están dados por:

$$J_l(r) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \left| \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right|^2 \delta(r - r_{12}) = 4\pi r^2 S_l(r); \quad l=0,1 \quad (2.2.9)$$

$$S_l(r) = \frac{1}{r} \left[ \int_{|r-r_1|}^{\infty} u_l^2(r_1) r_1 dr_1 \int_{|r-r_1|}^{r+r_1} u_0^2(r_2) r_2 dr_2 \pm \frac{3}{2} l \int_0^{\infty} u_0(r_1) u_l(r_1) dr_1 \int_{|r-r_1|}^{r+r_1} u_0(r_2) u_l(r_2) (r_1^2 + r_2^2 - r^2) dr_2 \right]$$

Usando la sustitución  $\Phi_l(r) = \chi_l(r) / \sqrt{J_l(r)}$  la ecuación de onda (2.2.8) se reduce a la forma unidimensional

$$-\chi_l''(r) + V_{eff}^{(l)}(r)\chi_l(r) = \mathcal{E}\chi_l(r); \quad (2.2.10)$$

$$\mathcal{E} = 0.5(E - E_0(l)); \quad V_{eff}^{(l)} = 1/r + 0.5 \left( J_l'(r) / \sqrt{J_l(r)} \right)' / \sqrt{J_l(r)}$$

Con el fin de encontrar el sentido físico de la función  $\chi_l(r)$  se puede calcular la densidad de probabilidad  $P_l(r)$  de encontrar dos electrones separados por la distancia  $r$  en los estados dados por la función de onda (2.2.7):

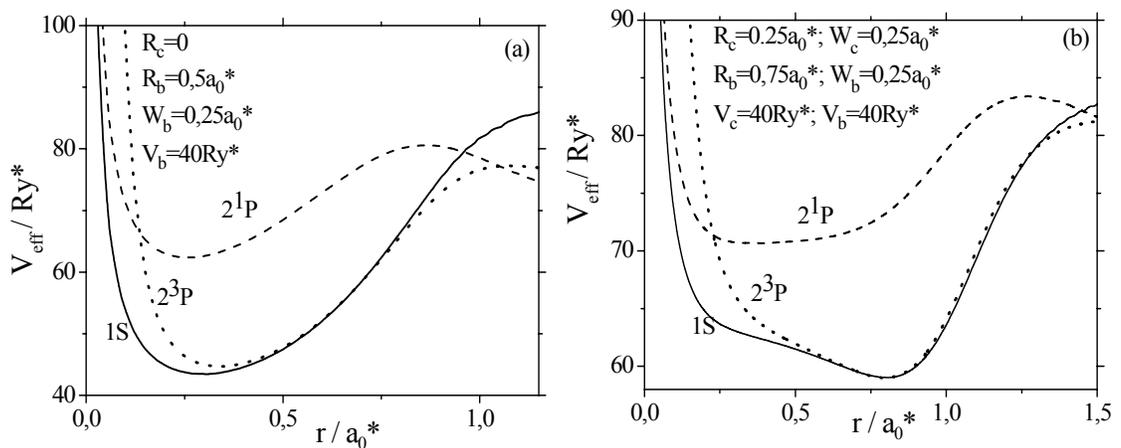
$$P_l(r) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \left| \psi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right|^2 \Phi_l^2(r_{12}) \delta(r - r_{12}) = \Phi_l^2(r_{12}) J_l(r) = \chi_l^2(r) \quad (2.2.11)$$

Se ve que  $P_l(r)$  coincide con el Jacobiano  $J_l(r)$  en la aproximación uní-particular cuando  $\Phi_l(r)=1$ , de otra manera coincide con  $\chi_l^2(r)$ . En otras palabras, la densidad de probabilidad de encontrar dos partículas no interactuantes con separación  $r$  está definida completamente por factores geométricos relacionados con la dependencia del Jacobiano sobre  $r$ , mientras que para partículas interactuantes es igual al cuadrado de la función  $\chi_l(r)$ , que siendo la solución de una ecuación unidimensional (2.2.10) además está sujeta al efecto de correlación causado por el término de repulsión de Coulomb en el potencial efectivo

renormalizado  $V_{eff}$ . Este resultado permite asumir la interpretación probabilística para la función  $\chi_l(r)$  considerada como la función de onda de solamente una coordenada generalizada correspondiente a la separación interparticular. El hecho que  $\chi_l(r)$  sea una solución de la ecuación de onda (2.2.10) típica para el movimiento unidimensional de una partícula en un campo con potencial  $V_{eff}$  también habla a favor de tal interpretación. El potencial efectivo (2.2.10) es repulsivo para pequeñas separaciones electrón-electrón  $r$ , donde decrece como  $1/r$ , y es atractivo para  $r$  grandes, incrementándose paulatinamente hasta llegar a ser casi constante, tendiendo al valor  $V_0 - E^{(0)}(l)$  cuando la separación entre los electrones excede al diámetro del punto cuántico esférico. En la Figura 8 se presentan ejemplos de las curvas de potencial efectivo para la interacción electrón-electrón en dos puntos cuánticos esféricos uno (a) sin y otro (b) con núcleo repulsivo.

Se ve que en ambos casos la mayor profundidad del pozo muestra el potencial efectivo correspondiente a la interacción entre electrones en el estado 1S, seguido por el estado  $2^3P$  y el pozo menos profundo tiene la curva de potencial para el estado  $2^1P$ . Como resultado la energía del estado triplete P es menor que la del estado singlete P debido a una interacción de intercambio que disminuye la separación entre los electrones en el estado singlete y aumenta la separación en el estado triplete. Puede verse que el mínimo de potencial en las Figuras 8 (a, b) corresponde al estado singlete en la mitad del pozo entre el núcleo y la barrera externa  $r \approx 0.5 \cdot (R_c + R_b)$  mientras que para el estado triplete se sitúa más cerca de la barrera externa  $r \approx 0.75 \cdot (R_c + R_b)$

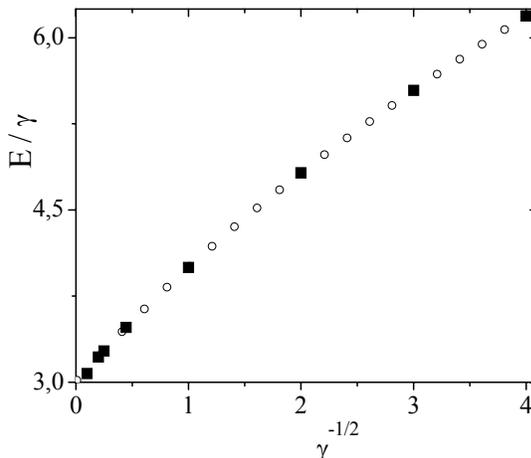
Figura 8. Curvas de potencial efectivo para la interacción entre dos electrones en los estados 1S,  $2^1P$  y  $2^3P$  en puntos cuánticos esféricos de barrera suave (a) sin y (b) con núcleo repulsivo



Entre más cerca estén los electrones uno de otro más fuerte es la repulsión entre ellos y la energía total de los dos electrones en el punto cuántico es menor. Resulta interesante que las posiciones de los mínimos de las curvas de potencial en la Figuras 8 (a, b) para los estados 1S y triplete casi coinciden pero los pozos de potencial para el estado 1S en ambos casos son más anchos y profundos que para el estado triplete y por consiguiente la energía del estado 1S es menor. Además comparando los potenciales en la Figura 8(a) y Figura 8(b) se puede observar que el desplazamiento de la posición del mínimo de los pozos de potencial hacia la mayor separación electrón-electrón debido a la presencia del núcleo repulsivo se realiza en tal forma que el fondo de las curvas de potencial correspondientes a los estados 1S y triplete permanecen casi superpuestos. Una vez que se encuentra la función  $V_{eff}(r)$ , entonces la solución de la ecuación (2.2.10) complementada con las dos condiciones de frontera  $\chi_l(0)=0$  y  $\chi_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  se puede encontrar usando el método de barrido trigonométrico [62].

Con el fin de chequear la exactitud del procedimiento numérico empleado, primero se calcula la energía del estado base para el modelo totalmente separable, de dos electrones en un punto cuántico con potencial de confinamiento parabólico  $V(r)=\gamma r^2/2$  donde el parámetro  $\gamma^{-1/2}$  se puede interpretar como el tamaño de la región de confinamiento de los electrones en el punto [60,61]. En la Figura 9 se presenta el resultado del cálculo de la energía normalizada del estado base como una función de  $\gamma^{-1/2}$ . Se ve una excelente concordancia entre los resultados obtenidos (señalados por rectángulos oscuros) y las soluciones exactas de la Referencia [61] (señalados por circunferencias).

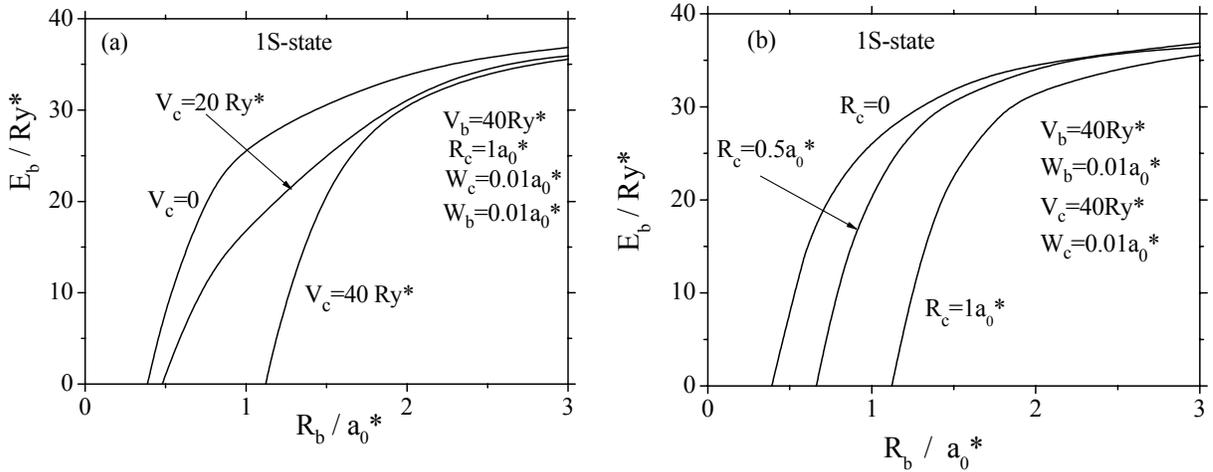
Figura 9. Energía (normalizada) del estado base de dos electrones en un punto cuántico con potencial parabólico como una función de  $\gamma^{-1/2}$  (las circunferencias corresponden a los resultados exactos de la Referencia [61] y los rectángulos oscuros corresponden a los resultados obtenidos).



El átomo de Helio puede considerarse como otro ejemplo de un punto cuántico esférico de dos electrones con potencial de confinamiento tipo Coulomb para el cual con el fin de evaluar la exactitud del procedimiento desarrollado puede considerarse como la función de onda del estado base de una partícula  $u_0(r) = C \exp(-2r)$ . El valor exacto bien conocido de la energía del estado base del átomo de Helio es  $-5.807 \text{ Ry}$  [80], mientras que el procedimiento desarrollado da  $-5.795 \text{ Ry}$ . Este resultado se puede comparar con el resultado de un cálculo con un solo parámetro variacional  $-5.695 \text{ Ry}$  [80] cuya simplicidad es comparable con el procedimiento desarrollado, pero la concordancia entre el resultado obtenido y el valor exacto es mucho mejor.

En la Figura 10 se presentan los resultados de los cálculos de las energías de enlace del estado base para dos electrones en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As (a) con diferentes alturas de las barreras del núcleo  $V_c = 0, 20, 30$  y  $40 \text{ Ry}^*$  y (b) con diferentes radios del núcleo  $R_c = 0, 0.5, 1a_0^*$ .

Figura 10. Energía de enlace del estado base de dos electrones en un punto cuántico esférico como una función del radio exterior para diferentes (a) alturas de la barrera del núcleo  $V_c$  y (b) radios de los núcleos  $R_c$ .

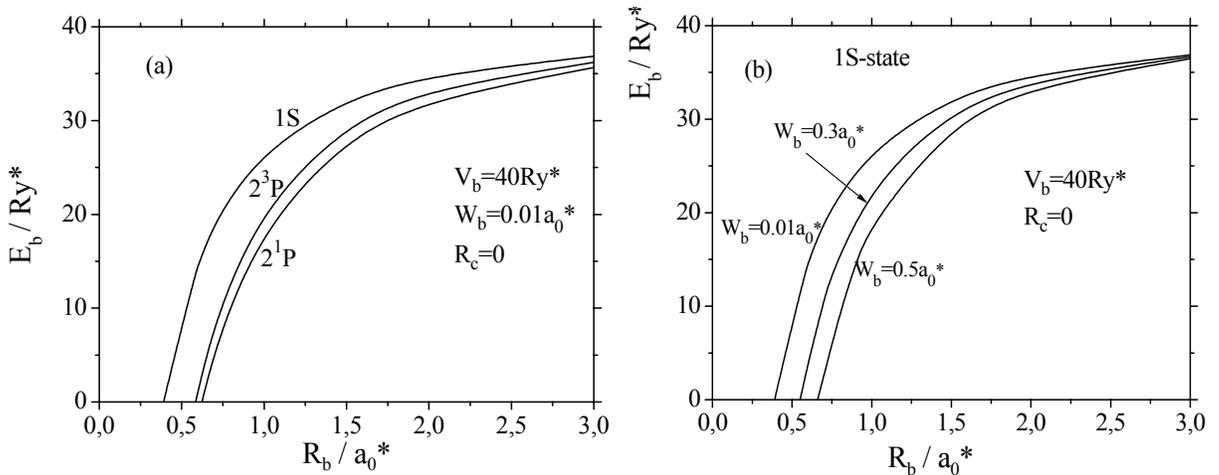


La Figura 10(a) da las dependencias de las energías de enlace del estado base sobre el radio exterior del punto cuántico esférico con el núcleo de radio  $R_c = 1a_0^*$ , altura de la barrera exterior  $V_b = 40 \text{ Ry}^*$  y para cuatro diferentes potenciales del núcleo repulsivo  $V_c = 0, 20$  y  $40 \text{ Ry}^*$ . Para el caso  $V_c = 40 \text{ Ry}^*$  cuando el radio decrece, la función de onda del electrón llega a ser más y más comprimida entre las barreras interior y exterior y la energía total de dos electrones  $E$  aumenta debido al decrecimiento de la distancia entre ellos hasta

que  $E$  alcanza el valor límite más bajo del continuo  $E_{1s} + V_b$  cuando uno de los electrones escapa del punto cuántico. Esta es la razón por la que en la Figura 10(a) la energía de enlace de los dos electrones para una altura de la barrera de  $40Ry^*$  decrece agudamente y tiende a cero cuando el radio exterior se reduce aproximadamente al valor  $1.1a_0^*$ . Al contrario, cuando la altura de la barrera del núcleo repulsivo  $V_c = 20Ry^*$  es menor que la altura de la barrera exterior la función de onda con la disminución de la brecha entre dos barreras se fuga principalmente a la región del núcleo y por esta razón la energía de enlace en este caso como se puede apreciar de la Figura 10(a) decrece mucho más suavemente. En la Figura 10(b) se comparan las energías de enlace de puntos cuánticos con dos electrones con diferentes radios del núcleo repulsivo. Se ve claramente que el aumento del radio del núcleo proporciona una caída de la energía de enlace debido a la disminución del ancho del pozo acompañada siempre por la subida de los niveles energéticos y la disminución de la energía de enlace.

En la Figura 11(a) se presentan las energías de enlace de los niveles 1S,  $2^3P$  y  $2^1P$  en un punto cuántico GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con dos electrones en función del radio considerando el modelo rectangular para el potencial de confinamiento. Se puede ver que el estado enlazado 1S, se presenta por primera vez cuando el radio se hace mayor que  $0.4a_0^*$ .

Figura 11. Energía de enlace de dos electrones como una función del radio (a) para los tres niveles más bajos en un punto cuántico esférico de pozo cuadrado (b) para el nivel del estado base en un punto cuántico esférico con tres diferentes espesores de la región de transición.



Cuando el radio se hace mayor que  $0.6a_0^*$  aparece el segundo estado enlazado, el triplete, etc. Se ve claramente que la energía de enlace del estado de triplete

siempre es superior que la energía de enlace del primer estado excitado de singlete. Esta es la razón por la que la interacción de intercambio entre los electrones en el estado de triplete mantiene a los electrones más alejados disminuyendo el valor de la repulsión Coulombiana.

En la Figura 11(b) presentamos la dependencia similar de la energía de enlace del estado base en puntos cuánticos de bordes suaves con diferentes anchos de la región transitoria.

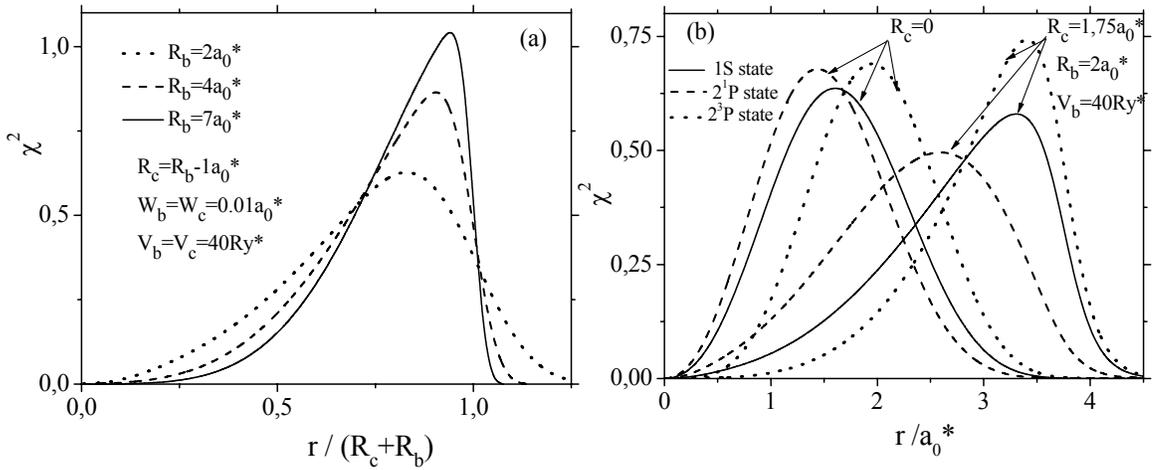
Se ve que la expulsión en la región de la barrera exterior de uno de los dos electrones cuando la energía de enlace se hace igual a cero con reducción del radio ocurre más temprano en las estructuras con las barreras suaves. Entre más amplia es la región transitoria, más estrecho es el pozo y más fuerte es el confinamiento dentro del punto, menor es la energía de enlace del punto cuántico con dos electrones y más rápido esta se hace igual a cero cuando el tamaño del punto disminuye.

Para facilitar la interpretación de las dependencias de las energías de los estados más bajos sobre la dimensión del QD y la forma del potencial de confinamiento, primero se analizan las curvas de la densidad de probabilidad  $P_i(r) = \chi_i^2(r)$  de encontrar dos electrones separados por la distancia  $r$  en los diferentes estados. En las Figuras 12(a) mostramos los resultados del cálculo de la función  $P_i(r)$  para el estado 1S en capas esféricas de ancho  $R_b - R_c = 1a_0^*$  con diferentes dimensiones. Estas curvas se pueden usar para estimar las contribuciones de las partes de energía cinética y potencial al total de la energía.

Cuando la energía cinética es predominante el movimiento de los electrones es débilmente correlacionado y la máxima densidad de distribución podría estar localizada más cerca del origen. Esto es debido al hecho que para el movimiento no correlacionado de los electrones hay una alta probabilidad de encontrar ambos electrones en los mismos puntos del espacio y por consiguiente hay una alta probabilidad de que los electrones se sitúen uno próximo al otro. Por el contrario, cuando la contribución de la energía potencial aumenta el movimiento de los electrones se hace más y más correlacionado. En el caso límite de energía potencial muy grande los dos electrones podrían tener una disposición con los electrones fijados en los extremos opuestos del diámetro como una consecuencia de la cristalización de Wigner. Ahora analicemos la construcción en una capa esférica muy angosta con radios interior  $R_c$  y exterior  $R_b$ , respectivamente. Asumiendo que los electrones están localizados en el centro del pozo, el ángulo  $\vartheta$  entre sus vectores de posición se puede calcular como  $\sin \vartheta/2 = r/(R_c + R_b)$  siendo  $r$  la separación entre los electrones. De la Figura 12(a) donde la separación

es escalada en unidades de  $R_c + R_b$ , se puede ver que cuando la dimensión del punto aumenta, el ángulo  $\mathcal{G}$  entre las posiciones de los vectores tiende a  $180^\circ$  y la distribución de probabilidad se hace más y más angosta como una manifestación de la cristalización de Wigner.

Figura 12. Dependencia de (a) la función de correlación par y (b) la densidad de probabilidad sobre la distancia entre los dos electrones en el estado base dentro de un SQD de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con ( $x_c = 0.3$ ) y sin ( $x_c = 0$ ) núcleo repulsivo.



En las Figura 12(b) mostramos los cálculos de la función  $P_l(r)$  para los estados 1S (líneas continuas), el 2<sup>1</sup>P (líneas a trazos) y el 2<sup>3</sup>P (líneas punteadas) en un SAQD de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As de radio 200Å sin núcleo repulsivo (las curvas correspondientes a  $R_c = 0$ ) y con núcleo repulsivo de radio 175Å (las curvas correspondientes a  $R_c = 1.75a_0^*$ ).

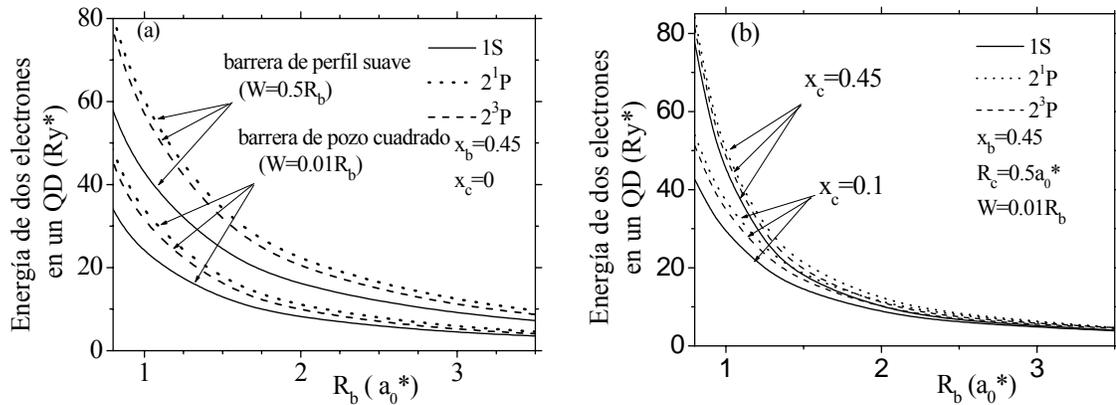
Se puede ver que las distribuciones de los estados excitado triplete y singlete en un punto cuántico esférico son muy similares con solamente la diferencia en que la distribución para el estado triplete se desplaza hacia las mayores separaciones.

Esta similitud como se ve en la Figura 12(b) desaparece con la presencia del núcleo repulsivo cuando ambos electrones en el estado singlete se pueden situar al mismo lado y al lado opuesto de la capa, mientras que en el estado triplete los electrones se sitúan principalmente solamente sobre los lados opuestos de la capa.

En la Figura 13 presentamos el cálculo de los resultados para las energías de dos electrones en los estados 1S, 2<sup>1</sup>P y 2<sup>3</sup>P en función del radio  $R_b$  de un SQD de

GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As, para dos diferentes casos, cuando el espesor de la región de transición es muy pequeña ( $W = 0.01R_b$ , modelo con barrera casi de pozo cuadrado) y cuando esta es muy grande ( $W = 0.5R_b$ , modelo con barrera de perfil suave). En ambos casos consideramos la concentración de Al en la barrera  $x_b = 0.45$ , para la cual la altura de la barrera es alrededor de  $68 \text{ Ry}^*$ .

Figura 13. Energía de dos electrones en los estados  $1S$ ,  $2^1P$  y  $2^3P$  como una función del radio del SQD (a) sin y (b) con núcleo repulsivo para los modelos con barreras suaves y con barreras de pozo cuadrado.



De la Figura 13(a) se ve que la brecha entre el nivel  $1S$  y el primer nivel excitado  $P$  decrece con el incremento del radio del QD y para todos los radios del QD la energía del estado triplete  $P$  es menor que la del estado singlete  $P$ , similarmente sucede con el átomo de Helio [75]. El comportamiento de las curvas para las dos formas diferentes de potencial es similar pero las energías correspondientes al QD con perfil de potencial de barrera suave, son mayores que en un QD con perfil de potencial de barrera de pozo cuadrado, debido al mayor confinamiento presentado en los potenciales con fondos suaves.

En la Figura 13(b) se muestran las curvas de las energías en un SAQD con un núcleo repulsivo débil cuando la concentración de Al dentro del núcleo es pequeña,  $x_c = 0.1$  y en un SAQD con un núcleo repulsivo fuerte cuando la concentración de Al dentro del núcleo es alta,  $x_c = 0.45$ , las cuales resultan muy similares a las mostradas en la Figura 13 (a). Las alturas de las barreras de estos núcleos son alrededor de  $14 \text{ Ry}^*$  y  $68 \text{ Ry}^*$ , respectivamente. Los resultados en la Figura 13 (b) son presentados solamente para el modelo con barreras de pozo casi cuadrado ( $W = 0.01R_b$ ). Comparando las correspondientes curvas en las Figuras 13(a) y 13(b) con formas de potencial de pozo cuadrado y con diferentes

concentraciones de Al en el núcleo repulsivo  $x_c$ , se puede ver que el incremento sucesivo de  $x_c$  produce un incremento de ambas energías del estado base y de los estados excitados del electrón expulsado fuera de la región del núcleo y la separación media entre ellos decrece. También se ve que la brecha entre el estado base y los estados excitados decrece cuando la concentración de Al crece. Este resultado se explica por la significativa modificación de la función de onda uniparticular correspondiente al estado 1s producida por el núcleo repulsivo con el incremento de la altura de la barrera. Cuando la concentración de Al en el núcleo crece, la altura de la barrera en el centro del QD llega a ser muy alta haciendo la probabilidad de la penetración de electrones en esta región insignificante y la forma de la función de onda del estado 1S similar a una del estado 2P.

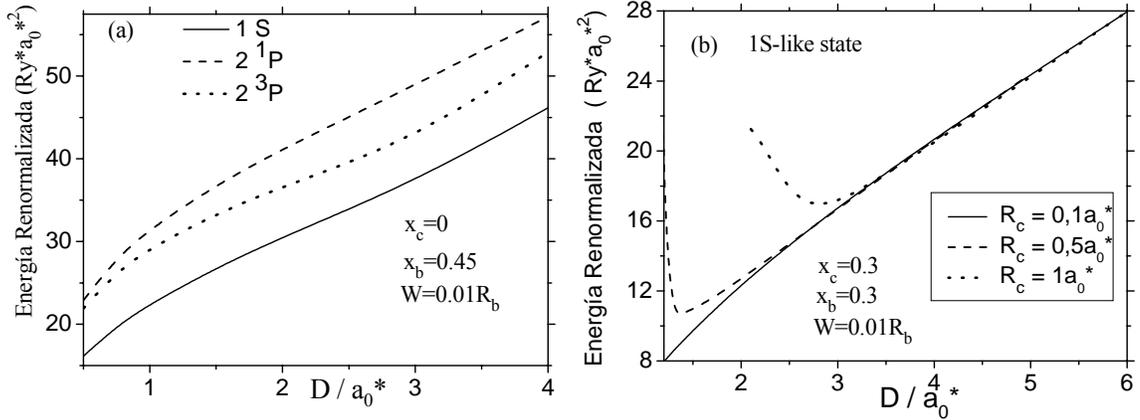
Para dar un significado físico de los resultados presentados en la Figura 13 modificamos la representación de la energía de dos electrones mediante el uso de la escala típica para la separación inter-electrón en un punto cuántico esférico  $D = R_c + R_b$ . Para analizar los tres estados de la energía de dos electrones en un punto igual a  $E(l) = E_0(0) + E_0(l) + \langle 2/r_{12} \rangle$  donde  $l=0$  para el estado base y  $l=1$  para los estados excitados. Teniendo en cuenta que para puntos cuánticos grandes las energías uni-particulares son inversamente proporcionales a la dimensión del punto al cuadrado  $E(l) : C_l/D^2$ ;  $l=0,1$  y la separación entre los electrones para el caso de cristalización, se puede verificar en este caso que la energía renormalizada definida como  $\tilde{E}(l) = D^2 E(l)$  aumenta linealmente con la dimensión del punto:

$$\tilde{E}(l) = C_0 + C_l + 2D/\rho \quad (2.2.7)$$

En la Figura 14(a) se presentan las curvas de las energías renormalizadas  $\tilde{E}(l)$  dependientes de la dimensión  $D$  de un SAQD de GaAs/Ga<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As con barrera de potencial cuadrado. Se puede ver que para todos los tres estados las energías renormalizadas se hacen casi lineales para dimensiones grandes del QD.

En la Figura 14(b) se puede ver una tendencia similar para la energía del estado base en los SAQDs de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con diferentes tamaños del núcleo repulsivo. La presencia del núcleo repulsivo disminuye la incertidumbre de las posiciones de los electrones confinados dentro de la capa entre las uniones interior y exterior aumentando de esta manera la contribución de la energía cinética e impidiendo la cristalización de Wigner. Como se ve en la Figura 14(b), cuanto mayor sea el tamaño del núcleo repulsivo, al aumentar la dimensión de los QD's, la cristalización de Wigner se produce más lejos.

Figura 14. Energías renormalizadas de dos electrones como funciones de las dimensiones del punto cuántico en (a) SAQD de GaAs/Ga<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As sin núcleo repulsivo para los estados 1S, 2<sup>1</sup>P y 2<sup>3</sup>P y en (b) SAQD de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con núcleo repulsivo para los modelos con barreras de pozo cuadrado.



## 2.3 DOS PARTICULAS EN DISCOS Y ANILLOS CUÁNTICOS [41]

La posibilidad de confinar un número controlado de electrones y huecos en puntos cuánticos atrajo mucho la atención en la última década [10]. Un interés particular ha sido relacionado al estudio teórico del efecto de correlación sobre el espectro del sistema de dos partículas tales como dos electrones y un excitón confinados en un punto cuántico. Con este propósito han sido usados los métodos variacional [37, 75, 113, 114], diagonalización matricial [32, 61, 82, 83, 90] y elementos finitos [17, 23, 58, 112] con modelos de confinamiento de potencial rectangular [17, 58, 114, 114], de barrera suave [75], parabólico [32, 83, 90] y de carga imagen [113, 114]. Recientemente Lorke y sus colaboradores reportaron la fabricación de puntos cuánticos autoensamblados de InGaAs con geometría de anillo conteniendo dos electrones [11]. A raíz de este descubrimiento se realizó una serie de publicaciones sobre el espectro de dos partículas en anillos cuánticos [19, 64, 74, 107-109]. Experimentalmente se encontró que puntos cuánticos fabricados de InGa/InAs con forma de anillos están caracterizados por una altura reducida (alrededor de 2 nm), un hueco en el centro bien definido de alrededor de 20 nm de diámetro y un tamaño lateral (entre 60 y 140 nm). Para tal geometría casi-bidimensional resulta un gran espaciamiento entre niveles del estado base y los primeros niveles excitados correspondiente al movimiento uniparticular en la dirección de crecimiento. En consecuencia, la parte baja de la energía del espectro uniparticular en estas heteroestructuras difiere solamente por el confinamiento lateral. Esta es la razón por la que los modelos bidimensionales son ordinariamente usados para analizar las propiedades electrónicas de los discos cuánticos y de los anillos cuánticos auto-ensamblados.

En particular, el efecto del campo magnético sobre los excitones confinados en anillos cuánticos se ha estudiado usando un modelo bidimensional con el potencial de confinamiento parabólico [74, 106-109, 115]. El efecto del núcleo repulsivo sobre el espectro de un exciton bidimensional en puntos cuánticos con geometría de anillo fue investigado en la Referencia [96] donde se asumió que la tensión (“strain”) que se presente en estas heteroestructuras puede tomarse en cuenta en el marco del modelo con una distribución de la concentración no homogénea de indio dada por una función que varía suavemente en la dirección radial del disco.

El problema de aplicabilidad de un modelo bidimensional al estudio de los estados más bajos en un disco cuántico circular de InGaAs con dos electrones se discutió en la Referencia [17] donde se mostró que el problema tridimensional de dos partículas puede aproximarse con una buena precisión a un problema similar bidimensional por medio de la renormalización de los parámetros y reemplazando la repulsión Coulombiana 3D por un potencial bidimensional el cual ya no tiene singularidad cuando la separación entre las partículas tiende a cero. También se encontró que el espectro magneto-óptico en un disco cuántico circular con confinamiento de paredes rectangulares es más enriquecedor que el de un modelo con confinamiento parabólico de barrera infinita. Se puede esperar que una amplia variedad de posibles perfiles de potencial de confinamiento desde el pozo cuadrado hasta la barrera suave pueda ser obtenida en puntos cuánticos de InGa/InAs debido a la presencia de “strain”. Por consiguiente, es interesante analizar el efecto de la forma del potencial sobre la estructura del espectro de energía correspondiente a los niveles más bajos de pocas partículas confinadas en puntos cuánticos. Un procedimiento variacional relacionado con la aproximación de dimensión fractal se propuso recientemente para analizar el estado base de sistemas de dos partículas tales como donadoras cargadas negativamente y un exciton confinado en un heteroestructura. [33, 75, 116]. En este procedimiento un problema de dos partículas se reduce a un problema de campo central para un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo isotrópico con dimensión fraccionaria.

Se estableció que este procedimiento proporciona un algoritmo eficiente cuya exactitud es comparable con la de los métodos sofisticados como el de expansión por series y Monte Carlo [33, 75, 116]. En este párrafo se utiliza una versión modificada del método de dimensión fractal con el fin de analizar el espectro de dos partículas en anillos cuánticos auto-ensamblados de InGaAs considerando diferentes formas de potencial de confinamiento. Además, se adopta la aproximación adiabática en la cual se asume que el movimiento rápido de las partículas en dirección  $z$  puede separarse del movimiento lento en el plano  $(x,y)$ , que se justifica solamente cuando la altura es mucho menor que su tamaño lateral [17]. Esta condición se satisface bien para anillos cuánticos auto-ensamblados [117], los cuales son objeto del presente estudio. La altura de los anillos fabricados se estima en 2nm, mientras que el radio exterior es del orden de 40nm.

Un potencial de confinamiento realista de los anillos cuánticos debe tener una profundidad finita, que resulta de la diferencia finita de la banda y de la variable suave en las fronteras del anillo cuántico debido a una modulación de la composición de la aleación y de los efectos de “strain” [33]. Para describir tal comportamiento del potencial de confinamiento en la frontera  $\rho = \rho_0$  en este párrafo se usa la siguiente función no abrupta de la función de paso con un parámetro con la primera derivada continua

$$\Theta(x, W) = \begin{cases} 0; & x < -W \\ (1 - x^2 / W^2)^2; & -W \leq x < 0 \\ 1; & x \geq 0 \end{cases} \quad (2.3.1)$$

que se convierte en la función de Heaviside  $\mathcal{H}(x)$  cuando el parámetro  $W \rightarrow 0$ . El parámetro  $W$  está asociado con el espesor de la región de transición en las fronteras. Entre mayor sea el parámetro  $W$  más suave es la forma de la función de paso.

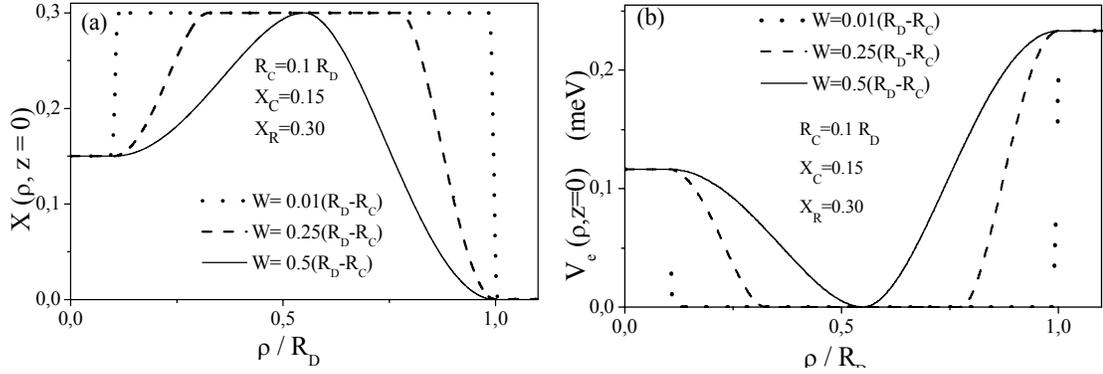
Siguiendo la Referencia [96] se asume que las formas del potencial de confinamiento, para el electrón  $V_e$  y para el hueco  $V_h$  dependen de la distribución de la concentración  $X$  de indio, como  $V_e = 0.7\Delta E_g [X_R - X]$  y  $V_h = 0.3\Delta E_g [X_R - X]$  donde  $\Delta E_g = 1.11eV$  es la diferencia entre las brechas de energía en el GaAs y en el InAs,  $X_R$  es la concentración de indio en el centro del anillo. Se asume que en el interior del anillo cuántico y en el hueco de la región central la distribución de la concentración de indio  $X$  es variable y está dada en coordenadas cilíndricas por  $X(\rho, z)$ , la cual es cero en la región exterior a la barrera,  $X_R$  en el interior del anillo y  $X_C$  en la región del hueco central (región del núcleo repulsivo). También se considera el disco cuántico como un caso particular del anillo cuántico cuando  $X_C = X_R$ . Siendo  $R_C, W_C$  y  $R_D, W_D$  los radios y los espesores de las regiones de transición de las fronteras interior y exterior del anillo respectivamente, la dependencia de la concentración de indio sobre la distancia  $\rho$  desde el eje, por ejemplo en el plano  $z = 0$ , usando la función (2.3.1) se puede expresar como:

$$X(\rho, z = 0) = X_R \Theta(R_D - \rho, W_D) + (X_C - X_R) \Theta(R_C - \rho, W_C) \quad (2.3.2)$$

Seguidamente se considerará un modelo de anillo en el cual los espesores de la región de transición de la frontera interior  $W_C$  y de la frontera exterior  $W_D$  tienen el mismo valor  $W_C = W_D \equiv W$ .

En la Figura 15(a) se presentan las curvas de distribución de la concentración de indio  $X(\rho, z=0)$  dadas por la relación (2.3.1) y en la Figura 15(b) las curvas del potencial de confinamiento del electrón  $V_e(\rho, z=0)$  en el plano  $z=0$  de anillos cuánticos de InGaAs con diferentes valores del espesor de la región de transición  $W$  y para el caso cuando el radio del núcleo es pequeño ( $R_C = 0.1R_D$ ).

Figura 15. Distribución de la concentración de indio  $X(\rho, z=0)$  (a) dada por la relación (2.3.2) y el potencial de confinamiento lateral para el electrón (b),  $V_e(\rho, z=0)$  dado por la relación  $V_e = 0.7\Delta E_g [X_R - X]$ , en anillos cuánticos de InGaAs con diferentes valores del espesor de la región de transición  $W$ .



En estas figuras la concentración de indio en el hueco central es igual al 15% ( $X_C = 0.15$ ) y en el centro del anillo es igual al 30% ( $X_R = 0.3$ ). De esta figura se puede ver que la distribución de la concentración del indio forma un rango amplio y la barrera finita del potencial de confinamiento se puede modelar variando los parámetros  $R_C$ ,  $W_C$ ,  $R_D$ ,  $W_D$ ,  $X_C$  y  $X_R$  en la relación (2.3.1), desde casi una pared rectangular cuando ( $W_C, W_D \rightarrow 0$ ) hasta uno muy suave con fondo casi parabólico cuando  $W_C + W_D \rightarrow R_D - R_C$ . En todos los casos el potencial en la dirección radial tiene dos barreras con diferentes alturas, la barrera interior en la unión del núcleo repulsivo con el anillo cuya altura es igual a  $V_{ce} = 0.7\Delta E_g (X_R - X_C)$  para el electrón y  $V_{ch} = 0.3\Delta E_g (X_R - X_C)$  para el hueco, y la barrera exterior cuya altura es igual a  $V_{be} = 0.7\Delta E_g X_R$  para el electrón y  $V_{bh} = 0.3\Delta E_g X_R$  para el hueco. Teniendo en cuenta que las partículas en su movimiento en la estructura de  $Ga_{1-x}In_xAs/GaAs$  se sitúan principalmente dentro del anillo se puede despreciar la variación de los parámetros físicos. Los siguientes valores correspondientes para el material  $Ga_{1-x}In_xAs$  fueron usados en los cálculos realizados: constante dieléctrica  $\epsilon = 12.5$ , masa efectiva isotrópica del

electrón  $m_e^* = (0.067 - 0.039X_W)m_0$  y masa efectiva isotrópica del hueco  $m_h^* = (0.045 + 0.285X_W)m_0$ , donde  $X_W$  es la concentración de In en el centro de pozo y  $m_0$  es la masa del electrón libre. Para comodidad matemática se ha utilizado como unidad de longitud el radio de Bohr efectivo  $a_0^* = \epsilon\eta^2 / \mu e^2$  y como unidad de energía el Rydberg efectivo  $Ry^* = e^2 / 2\epsilon a_0^*$  siendo  $\mu = m_1^* m_2^* / (m_1^* + m_2^*)$  la masa reducida del par de partículas cuyas masas individuales son  $m_1^*$  y  $m_2^*$ . Los resultados del cálculo que se presentan más adelante corresponden a los anillos cuánticos de Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As/GaAs (concentración de In en el centro del anillo  $X_W = 0.3$ ) con diferentes radios de los núcleos repulsivos  $R_c$  y concentraciones de indio en el centro del núcleo  $X_c$ . Para este tipo de estructura se asumen los siguientes valores de los parámetros del material para el problema de dos electrones:  $m_e^* = 0.056m_0$ ,  $\mu = 0.028m_0$ ,  $a_0^* \approx 237 \text{ \AA}$ ,  $Ry_{2e}^* \approx 2.43 \text{ meV}$  y para el problema del exciton:  $m_h^* = 0.135m_0$ ,  $\mu = 0.045m_0$ ,  $a_0^* \approx 147 \text{ \AA}$ ,  $Ry_{eh}^* \approx 3.92 \text{ meV}$ . Las alturas de las barreras adimensionales son: para el problema de dos electrones  $V_{be} = 233 \text{ meV} = 96 Ry_{2e}^*$  y para el problema del exciton  $V_{be} = 233 \text{ meV} = 59 Ry_{eh}^*$ ,  $V_{bh} = 100 \text{ meV} = 26 Ry_{eh}^*$ .

Para un punto cuántico con geometría de anillo el potencial  $V_i(\rho, z)$ , para el electrón ( $i=e$ ) y para el hueco ( $i=h$ ), cuya altura, espesor de la región de transición en la uniones, radios interior y exterior en las uniones son iguales a  $L_z, W, R_c$  y  $R_D$ , respectivamente, se describen usando la versión abrupta de la función de paso (2.3.1) de la siguiente forma. Dentro del anillo ( $R_c + W < \rho < R_D - W$ )I ( $|z| < L_z / 2 - W$ ), el potencial se toma como cero. En todas las regiones fuera del anillo excepto en el hueco central ( $\rho > R_D$ )Y ( $|z| > L_z / 2$ ), el potencial es igual a  $V_{be}$  para el electrón y  $V_{bh}$  para el hueco. Como la altura de la barrera es proporcional a la concentración de indio el potencial dentro del núcleo repulsivo se toma igual a  $V_{be}X_c / X_R$  para el electrón y a  $V_{bh}X_c / X_R$  para el hueco. Finalmente dentro de las regiones de transición próximas a las uniones el potencial decrece suavemente desde los valores de las alturas de las barreras hasta cero usando la función (2.3.1). Hay dos regiones próximas a las uniones laterales ( $|z| < L_z / 2$ )I ( $R_c < \rho < R_c + W$ ) y ( $|z| < L_z / 2$ )I ( $R_D - W < \rho < R_D$ ) y dos regiones de transición próximas a las uniones horizontales ( $L_z / 2 - W < |z| < L_z / 2$ )I ( $R_c < \rho < R_D$ ).

Para el potencial dado  $V_i(\rho, z)$  la forma adimensional para la ecuación de onda uní-particular correspondiente al estado base de las partículas no depende del ángulo axial

$$-\frac{\eta_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial \psi_i(\rho, z)}{\partial \rho} - \eta_i \frac{\partial^2 \psi_i(\rho, z)}{\partial z^2} + V_i(\rho, z) \psi_i(\rho, z) = E_i^{(0)} \psi_i(\rho, z); \quad (2.3.3)$$

$$\eta_i = \mu / m_i^*; i = 1, 2$$

Los subíndices  $i$  corresponden al electrón cuando  $i=e$  y al hueco cuando  $i=h$ . Para resolver la ecuación de valores propios (2.3.3) se usa la aproximación adiabática y las funciones de onda del estado base se pueden escribir como

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(\rho, z) = f_z^{(i)}(z) f_\rho^{(i)}(\rho); \quad i = 1, 2, \quad (2.3.4a)$$

donde  $f_z^{(i)}(z)$  es la solución de la ecuación de onda unidimensional correspondiente al nivel de energía más bajo  $E_z^{(i)}$  en un pozo cuántico de barrera suave

$$-\eta_i \frac{d^2 f_z^{(i)}(z)}{dz^2} + V_z^{(i)}(z) f_z^{(i)}(z) = E_z^{(i)} f_z^{(i)}(z); \quad V_z^{(i)}(z) = V_{bi} \Theta(|z| - L_z / 2, W_D); \quad i = 1, 2 \quad (2.3.4b)$$

y  $f_\rho^{(i)}(\rho)$  es la solución del problema de campo central correspondiente a la energía más baja de la partícula.

$$-\frac{\eta_i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial f_\rho^{(i)}(\rho)}{\partial \rho} + V_\rho^{(i)}(\rho) f_\rho^{(i)}(\rho) = E_i^{(0)} f_\rho^{(i)}(\rho);$$

$$V_\rho^{(i)}(\rho) = \left( V_{bi} - E_z^{(i)} \right) \Theta(\rho - R_D, W_D) + \left( V_{bi} \frac{X_C}{X_R} - E_z^{(i)} \right) \Theta(R_C - \rho, W_C); \quad (2.3.4c)$$

$$\eta_i = \mu / m_i^*; \quad i = 1, 2$$

Como el potencial de confinamiento en las regiones de la barrera es constante las soluciones de las ecuaciones (2.3.4b) y (2.3.4c) se pueden resolver en forma exacta en términos de la función exponencial y de Bessel respectivamente. Estas soluciones exactas permiten encontrar los valores de la razón  $f'/f$  en los puntos de las uniones, los cuales posteriormente se usan como condiciones de frontera

para resolver (2.3.4b) y después se resuelve la ecuación (2.3.4c) usando el método de barrido trigonométrico.

Puesto que no es posible resolver exactamente el problema de dos partículas se hace uso del método variacional. Debido al fuerte confinamiento el movimiento del centro de masa de las dos partículas es esencialmente más lento que el movimiento relativo y por consiguiente se puede esperar que la función de onda del estado base del sistema de las dos partículas sea más sensible a la variación de las coordenadas relativas que a las coordenadas del centro de masa. Basados en este argumento se puede asumir que la función de prueba de dos partículas para el estado base se puede expresar como el producto de las funciones de onda uní-particulares  $\psi_1(\mathbf{r}_1)$  y  $\psi_2(\mathbf{r}_2)$  con la función envolvente  $\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  que depende solamente de la distancia entre dos partículas.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (2.3.5)$$

Partiendo del principio variacional y usando el procedimiento descrito en las Referencias [36, 117, 128] se encuentra la siguiente ecuación diferencial para  $\Phi(r)$ :

$$-\frac{1}{P_0(r)}\frac{d}{dr}P_0(r)\frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2\tau}{r}\Phi(r) = [E - E_0^{(1)} - E_0^{(2)}]\Phi(r); \quad \tau = 0, \pm 1 \quad (2.3.6a)$$

donde  $P_0(r)$  está dado por la expresión:

$$P_0(r) = \int d\mathbf{r}_1 \int |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2 \delta(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - r) d\mathbf{r}_2 \quad (2.3.6b)$$

En la ecuación (2.3.6a)  $E$  es la energía de las dos partículas y  $E_0^{(i)}$ ,  $i=1,2$  son las energías uní-particulares. Los tres posibles valores  $0, \pm 1$  del parámetro  $\tau$  corresponden en (2.3.6a) a partículas neutras, con la carga del mismo signo y de signo contrario, respectivamente.

La ecuación de onda (2.3.6a) es similar a la del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo, isotrópico, en el cual la parte radial de Jacobiano está dada por la función  $P_0(r)$ . Las propiedades de la función  $P_0(r)$  están relacionadas según (2.3.6b) con el grado de confinamiento de las partículas en la heteroestructura definido por las funciones uní-particulares  $\psi_1(\mathbf{r}_1)$  y  $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ . Por ejemplo, en el

caso de partículas no confinadas,  $\psi_s(\mathbf{r}_s) \propto \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_s)$ ,  $s=1,2$  y se verifica que la expresión (2.3.6b) conduce a  $P_0(r) = r^2$ , que corresponde al Jacobiano del espacio tridimensional, mientras que la ecuación (2.3.6a) se convierte en la ecuación de onda para el átomo de hidrogeno. En caso contrario las funciones  $\psi_1(\mathbf{r}_1)$  y  $\psi_2(\mathbf{r}_2)$  deben ser encontradas resolviendo las ecuaciones (2.3.3) las cuales tienen en cuenta el efecto de confinamiento sobre el sistema de dos partículas. Esta es la razón por la cual en adelante se hace referencia a la función  $P_0(r)$  como al Jacobiano de la nanoestructura [24].

Usando las propiedades de función delta y la simetría axial de la función de onda dada por la expresión (2.3.4a) se puede simplificar la expresión para el Jacobiano de la nanoestructura (2.3.6b) y reducir la integral hasta el orden cuatro-dimensional en una forma reiterada. Con el fin de evaluar esta integral se necesita un método numérico de alta fidelidad. Esto se puede lograr introduciendo dos funciones auxiliares  $I(z)$  y  $G(\rho_1, \rho_2)$  definidas como:

$$I(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_z^{(1)2}(z_0 + z/2) f_z^{(2)2}(z_0 - z/2) dz_0 \quad (2.3.7a)$$

$$G(\rho_1, \rho_2) = \int_{z^2 \leq r^2 - (\rho_2 - \rho_1)^2} \frac{I(z)}{\sqrt{4\rho_1^2 \rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 + z^2 - r^2)^2}} dz \quad (2.3.7b)$$

Los valores de la función  $G(\rho_1, \rho_2)$  sobre una malla cuadrada fueron encontrados numéricamente evaluando la integral (2.3.7b) y fueron almacenados en la memoria de computador. Una vez estos valores sobre la malla son almacenadas en la memoria la función (2.3.7b) puede ser definida entonces en cualquier otro punto usando la interpolación por medio de splines cúbicos y usada posteriormente para encontrar el Jacobiano (2.3.6b) calculando numéricamente la siguiente integral bidimensional:

$$P_0(r) = r \int_0^{\infty} f_{\rho}^{(1)2}(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_{|\rho_1 - r|}^{\rho_1 + r} f_{\rho}^{(2)2}(\rho_2) G(\rho_1, \rho_2) \rho_2 d\rho_2 \quad (2.3.7c)$$

Las propiedades del estado base de un sistema de dos partículas con la función de onda definida a través de la relación (2.3.5a) y el significado físico de las funciones  $P_0(r)$  y  $\Phi(r)$  puede ser examinado a través de la función espacial de correlación del par (SPCF, "Spatial Pair Correlation Function")  $P(r)$ , la cual define

la densidad de probabilidad de encontrar dos partículas separadas una distancia  $r$ :

$$P(r) = \langle \delta(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - r) \rangle = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \delta(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - r) |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \quad (2.3.8a)$$

La función de onda par dos partículas sin interacción en el bloque se puede expresar como  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2) / \sqrt{V}$  y es fácil demostrar que la SPCF calculada para esta función de onda por medio de la relación (2.3.8a) coincide con la parte radial de Jacobiano en el espacio tridimensional, homogéneo e isotrópico es  $4\pi r^2$ , el cual corresponde al área de una esfera de radio  $r$ . En el caso de dos partículas sin interacción ( $\tau = 0$ ) confinadas en una nanoestructura la función de onda también es separable,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$  pero la SPCF  $P(r)$ , la cual en este caso coincide con el Jacobiano de nanoestructura  $P_0(r)$ , dada por las relaciones (2.3.6b) y (2.3.7), ya no puede ser encontrada en una forma explícita. En el caso general, cuando la interacción entre las partículas se tiene en cuenta ( $\tau \neq 0$ ) y la función de onda está dada por la expresión (2.3.5), la SPCF puede ser representada en la siguiente forma:

$$P(r) = \int d\mathbf{r}_1 \int |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2 \Phi^2(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \delta(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - r) d\mathbf{r}_2 = P_0(r) \Phi^2(r) = \chi^2(r) \quad (2.3.8b)$$

donde la nueva función introducida  $\chi(r) = \Phi(r) \sqrt{P_0(r)}$  puede ser considerada como la función de onda uní-particular correspondiente a la coordenada relativa del sistema de dos partículas cuyo valor al cuadrado coincide con la SPCF. Por lo tanto, el Jacobiano  $P_0(r)$  es una medida de la probabilidad de encontrar el electrón y el hueco separados por la distancia  $r$  en sus movimientos libres en el anillo cuántico donde el cuadrado del valor de la función  $\Phi(r)$  da la razón de las funciones espaciales de correlación  $\Phi^2(r) = P(r) / P_0(r)$ . Sustituyendo la relación entre  $\Phi(r)$  y  $\chi(r)$  en (2.3.6a) se obtiene la siguiente ecuación diferencial para la SPCF:

$$-\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \chi(r) = [E - E_0^{(1)} - E_0^{(2)}] \chi(r); \quad (2.3.9)$$

$$V_{\text{eff}}(r) = -2\tau / r + \left( \sqrt{P_0(r)} \right)'' / \left( \sqrt{P_0(r)} \right), \quad P(r) = \chi^2(r)$$

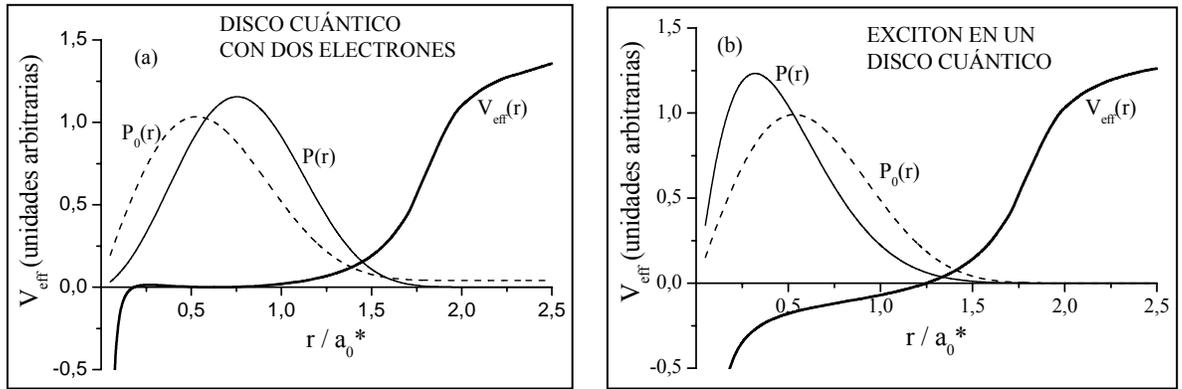
Esta ecuación describe el movimiento unidimensional de una partícula a lo largo del eje  $r$  en un campo con potencial efectivo  $V_{\text{eff}}(r)$  cuya solución permite analizar

directamente la SPCF para dos partículas interactuantes confinadas en una heteroestructura. Se puede verificar que para el movimiento de partículas libres cuando  $\tau = 0$  y  $E = E_0^{(1)} + E_0^{(2)}$  la solución de la ecuación (2.3.9) es  $\chi(r) = \sqrt{P_0(r)}$  y  $P(r) = P_0(r)$ .

En la Figura 16 se muestra la variación del Jacobiano  $P_0(r)$ , la SPCF  $P(r)$  y el potencial efectivo  $V_{eff}(r)$  en función de la separación interparticular para (a) dos electrones y (b) para un excitón en un disco cuántico con radio  $R_D = 1a_0^*$ .

Como se ve de la Figura 16, las curvas del Jacobiano  $P_0(r)$  (línea a trazos) para dos electrones y para el exciton son similares.

Figura 16. El Jacobiano  $P_0(r)$ , la SPCF  $P(r)$  y el potencial efectivo como funciones de la separación interparticular para (a) dos electrones y (b) un excitón en un disco cuántico de  $Ga_{0.85}In_{0.15}As/Ga_{0.7}In_{0.3}As/GaAs$  con radio del disco  $R_D = 1a_0^*$ .



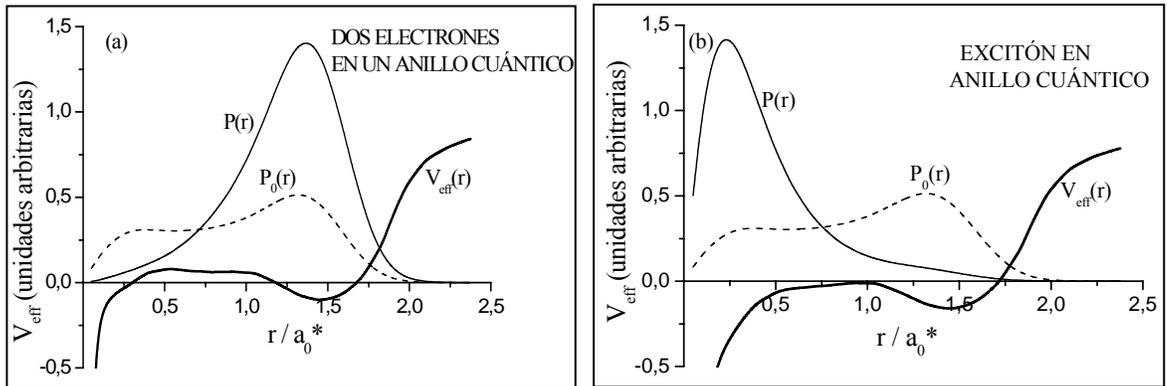
Cuando se tiene en cuenta la interacción entre las partículas la SPCF se transforma en una función  $P(r)$  graficada en la Figura 16 por líneas sólidas. Se puede ver en la Figura 16(b) que el máximo de la SPCF para el excitón se desplaza a la región de menor separación interparticular debido a la atracción electrón-hueco mientras que para dos electrones se desplaza a la región de mayor separación debido a la repulsión entre los electrones.

La diferencia entre las SPCFs en los casos de atracción y repulsión está relacionada con el comportamiento de las curvas de los potenciales efectivos en la región de pequeñas separaciones interparticulares. Para pequeños valores de  $r$ , el potencial efectivo para dos electrones se comporta aproximadamente como

$V_{\text{eff}}(r) \approx -1/4r^2 + 2/r$  mientras que para el excitón como  $V_{\text{eff}}(r) \approx -1/4r^2 - 2/r$ . Entre estos dos potenciales solamente el último produce niveles discretos con energías negativas similares a los estados hidrogenoides bidimensionales. En la Figura 16(b) la SPCF para el excitón corresponde a la densidad de probabilidad de las posibles separaciones interparticulares para el estado base hidrogenoide bidimensional con valor promedio bien conocido igual a la mitad del radio de Bohr. Por el contrario el disco con dos electrones tiene solamente estados ligados con energías positivas y con grandes separaciones electrón-electrón. Como se ve en la Figura 16(a) el potencial efectivo  $V_{\text{eff}}(r)$  para dos electrones se aumenta monótonicamente mientras que los electrones se sitúan dentro del disco cuántico y después cuando la separación electrón-electrón supera el valor del doble del radio del disco cuántico, el potencial se hace casi constante.

En la Figura 17 se muestran las curvas similares para (a) dos electrones y (b) un par electrón-hueco en un anillo cuántico de  $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}/\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}/\text{GaAs}$  con  $R_C = 0.5a_0^*$  y  $R_D = 1a_0^*$ .

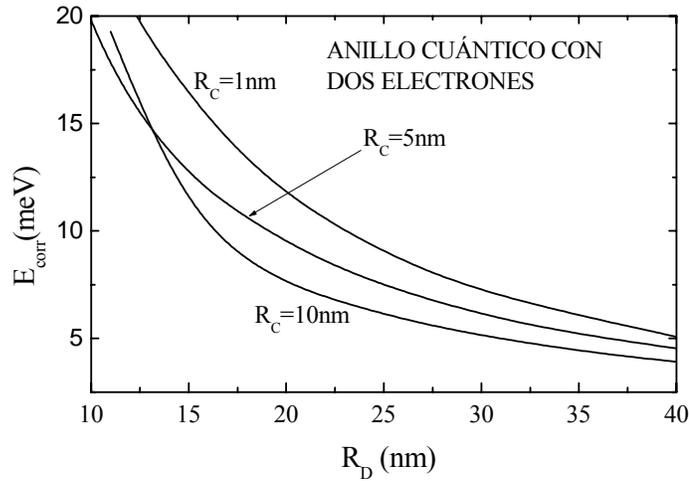
Figura 17. Funciones  $P_0(r)$ ,  $P(r)$  y  $V_{\text{eff}}(r)$  para (a) dos electrones y (b) un excitón en un anillo cuántico de  $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}/\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}/\text{GaAs}$  con  $R_C = 0.5a_0^*$  y  $R_D = 1a_0^*$ .



Se ve que las formas de  $P_0(r)$ , debido a la presencia del núcleo repulsivo de la nanoestructura, se modificaron desde una distribución uní-modal en el disco a una distribución bimodal en el anillo cuántico. El primer máximo de  $P_0(r)$ , correspondiente a la separación interparticular menor que  $(R_D - R_C)/2$ , describe en la Figura 17(a) una configuración de dos partículas situadas sobre el mismo lado del anillo cuántico.

El segundo máximo, correspondiente a una mayor separación aproximadamente igual a  $R_D + R_C$ , puede atribuirse a una configuración con dos partículas situadas en el centro del pozo sobre los lados opuestos del anillo. Como resultado, las curvas de potencial efectivo  $V_{eff}(r)$ , en la Figura 17 tienen un mínimo adicional poco profundo correspondiente a la configuración con dos partículas situadas a los lados opuestos del anillo cuando la separación entre ellas es aproximadamente igual a  $R_C + R_D$ . Comparando las posiciones de los máximos de la SPCF  $P(r)$  en la Figura 17 para los sistemas del exciton y de dos electrones, se puede ver que en el primer caso es más probable la configuración con las partículas localizadas en el mismo lado del anillo mientras que en el segundo caso es más probable tener la configuración con dos electrones localizados en los lados opuestos del anillo.

Figura 18. Energía de correlación de dos electrones como una función del radio exterior  $R_D$  en anillos cuánticos de  $Ga_{0.85}In_{0.15}As/Ga_{0.7}In_{0.3}As/GaAs$  con diferentes radios del núcleo repulsivo,  $R_C$  1, 5 y 10nm.



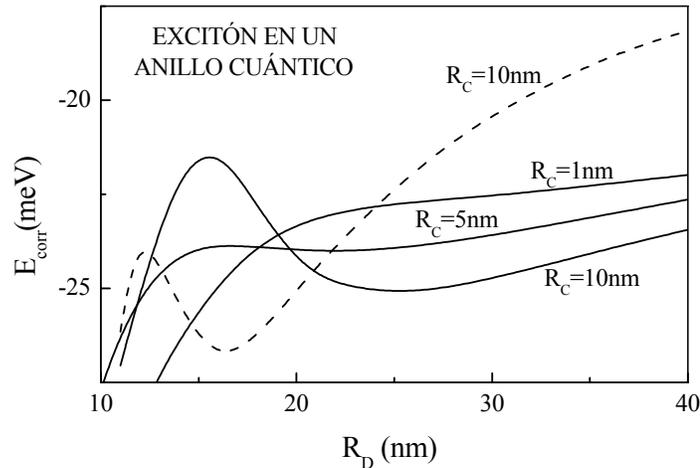
En las Figuras 18 y 19 se muestra la dependencia de la energía de correlación  $E_{corr}$  de dos partículas definida como la diferencia entre sus energías, calculada con y sin interacción  $E_{corr} = E - E_0^{(1)} - E_0^{(2)}$ , con respecto al radio exterior  $R_D$ , en anillos cuánticos de  $Ga_{0.85}In_{0.15}As/Ga_{0.7}In_{0.3}As/GaAs$  con diferentes radios interiores  $R_C$  1, 5 y 10nm. Esta energía es positiva para dos electrones y es negativa para el par electrón-hueco. Se consideran dos tipos de potencial de confinamiento, El primero es casi rectangular y se simula haciendo  $W$  igual a  $0.001(R_D - R_C)$  en la relación (2.3.1), el segundo tiene una forma con fondo casi parabólico y se simula haciendo  $W = 0.5(R_D - R_C)$ .

Como se ve en la Figura 18 la energía de correlación en un anillo cuántico con dos electrones decrece monótonamente y tiende a cero con el aumento del radio exterior del anillo cuántico. Como los electrones tienden a repelerse, ellos se sitúan, por lo general, en los lados opuestos del anillo. A medida que aumenta el radio del anillo interior la separación interparticular se hace mayor y la energía de correlación se hace menor. Esta es la razón por la que en la Figura 18 para radios exteriores del anillo cuántico mayores que 13nm, con radio interior de 10nm se obtiene la menor energía de correlación seguida por el anillo cuántico con radio interior de 5nm mientras que para el anillo cuántico con radio interior 1nm se encuentra la mayor energía de correlación. La intersección entre las curvas de la Figura 18 para anillos cuánticos con radios interiores de 5nm y 10nm en el punto correspondiente a un radio exterior alrededor de 13nm se atribuye al tunelamiento de los electrones en la región del núcleo cuando el ancho del pozo en el anillo cuántico con radio interior 10nm se hace bastante pequeño. Cuando el radio exterior se hace menor que 13nm, los electrones en el anillo cuántico son empujados afuera del pozo dentro del núcleo mientras que los electrones en el anillo cuántico con radio interior 5nm permanecen localizados dentro del pozo.

Un comportamiento diferente manifiestan las curvas similares para la energía del excitón de hueco pesado en anillos cuánticos con potenciales de confinamiento de fondo parabólico (líneas continuas) y rectangular (línea a trazos) presentados en la Figura 19. En contraste con el caso de dos electrones el par electrón-hueco en anillos cuánticos de pozo ancho están mayormente localizados sobre el mismo lado del anillo y por consiguiente la energía de correlación entre el electrón y el hueco en la Figura 19 crece con el aumento del radio exterior tendiendo a la energía de correlación bidimensional para el excitón libre ( $-4Ry^* \approx -15.7meV$ ). La aproximación de la energía de correlación a este valor en un anillo cuántico con potencial de pozo cuadrado es más rápida que en un anillo cuántico con potencial de fondo parabólico debido al mayor confinamiento producido por el potencial parabólico en las proximidades del fondo.

Cuando el radio interior del anillo cuántico disminuye, el valor absoluto de la energía de correlación del par electrón-hueco aumenta mientras el tamaño del pozo llega a ser más pequeño que el tamaño del excitón (~15nm) cuando el electrón y el hueco cambian la configuración del estado base desde un lado al lado opuesto. En consecuencia la separación entre las partículas aumenta drásticamente produciendo un decrecimiento en el valor absoluto de la energía de correlación. Entre mayor sea el radio interior o más suave sea la forma del potencial de confinamiento, mayor es el radio exterior para el cual ocurre este cambio en el comportamiento de la energía de correlación. Se puede observar que el mínimo para la energía de correlación de un anillo cuántico con potencial de fondo parabólico y radio interior 10nm aparece en la Figura 19 para radios exteriores mayores que (~25nm).

Figura 19. Energía de correlación del excitón de hueco pesado como una función del radio exterior  $R_D$  de un anillo cuántico con potencial rectangular (líneas a trazos) y radio interior 10nm con potencial de barrera finita de fondo parabólico para tres valores del radio interior 1, 5, y 10nm (líneas continuas).



En la Figura 19 se observa un conjunto de intersecciones de las curvas en la región de separación del electrón y el hueco entre 10nm y 15nm donde las curvas correspondientes a los anillos cuánticos con radio interior 10nm tienen un máximo secundario adicional relacionado con el tunelamiento de las partículas hacia la región del núcleo.

## 2.4 DOS ELECTRONES EN UN ANILLO CUÁNTICO MUY DELGADO [38,39]

Los anillos cuánticos fabricados a través de la técnica Stanski-Krastanov en la mayoría de los casos tienen un radio exterior entre 30 y 70nm, un radio interior alrededor de 10-20nm y una altura entre 2 y 4nm [11, 12, 13]. El espectro de estos sistemas está determinado por la competición entre las fuerzas de enlace debidas al confinamiento y a las fuerzas de repulsión entre los electrones. Para analizar el resultado de esta competencia se han desarrollado diferentes métodos

y aproximaciones [23, 48, 49, 50,41]. Por ejemplo, en el artículo de la Referencia [41] se considera un modelo unidimensional exactamente soluble, en el cual los movimientos en dirección radial y en dirección  $z$  son ignorados y solamente se tiene en cuenta la rotación de los electrones. Se considera que este modelo se justifica solamente para potencial de barrera infinita pero si el ancho y la altura tienden a cero los niveles de energía suben drásticamente y por consiguiente el modelo que debe considerarse en este límite es el modelo de barrera finita. A pesar de esta contradicción, se cree que este modelo puede ser usado

aproximadamente como punto de partida para analizar el espectro electrónico de modelos más realistas de anillos cuánticos.

En este párrafo, usando la aproximación adiabática, se demuestra que para el modelo del anillo cuántico con ancho y espesor esencialmente menores que el radio se puede encontrar una ecuación de onda uní-dimensional que describa los niveles de energía más bajos.

Para analizar el espectro electrónico de dos electrones en un anillo, consideremos la heteroestructura de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  para la cual el salto de potencial (“offset”) es  $V_{\text{off}} = 258\text{meV}$ , la constante dieléctrica es  $\varepsilon = 12,71$  y la masa efectiva es  $m^* = 0.076m_0$  [18]. Los parámetros geométricos del anillo cuántico se denotan por  $d$  la altura, por  $R_i$  y  $R_e$  los radios interior y exterior respectivamente y se considera la situación típica cuando  $d/R_e \ll 1$ . Esta última condición permite aplicar la aproximación adiabática y por ende separar los movimientos en la dirección  $z$  y en la dirección transversal.

Como fue demostrado en la Referencia [52] el problema tridimensional de dos electrones puede reducirse, en este caso, a un problema bidimensional en el que la altura de la barrera de potencial puede ser renormalizada como  $V_0 = V_{\text{off}} - k_z^2(d, V_{\text{off}})$  donde  $k_z^2(d, V_{\text{off}})$  es la energía del nivel más bajo en un pozo cuántico de forma rectangular con ancho  $d$  y altura de la barrera  $V_{\text{off}}$ . En consecuencia, el sistema de dos electrones puede describirse por el Hamiltoniano bidimensional en coordenadas polares, el cual está dado por:

$$H = H_0(\mathbf{p}_1) + H_0(\mathbf{p}_2) + \frac{2}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}; \quad H_0(\mathbf{p}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\rho) \quad (2.4.1)$$

donde  $V(\rho) = 0$  para  $R_i < \rho < R_e$  y  $V(\rho) = V_0$  para  $\rho < R_i$  y  $\rho > R_e$ . En el Hamiltoniano adimensional (2.4.1) se utilizaron los parámetros del material  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ , el Rydberg efectivo es  $Ry^* = 6.40\text{meV}$  como la unidad de energía y el radio de Bohr efectivo es  $a_0^* = 8.86\text{nm}$  como la unidad de longitud.

La ecuación de Schrödinger para el problema de un electrón se separa en coordenadas cilíndricas,

$$H_0(\mathbf{p}) f_{n,m}(\mathbf{p}) = E_0(n, m) f_{n,m}(\mathbf{p}); \quad f_{n,m}(\mathbf{p}) = e^{im\varphi} R_{n,m}(\rho) \quad (2.4.2)$$

La solución exacta de esta ecuación que describe los estados uní-particulares depende de dos números cuánticos, radial  $n$  y orbital,  $m$ . Las partes radiales de estas soluciones  $R_{n,m}(\rho)$ , son las funciones de onda correspondientes al problema de campo central bidimensional con el potencial  $V(\rho)$  seccionalmente constante, las cuales se pueden encontrar en forma analítica como una combinación de dos diferentes tipos de funciones de Bessel. El término de la interacción electrón-electrón en el Hamiltoniano (2.4.1) produce una mezcla de los estados uní-electrónicos en tal forma que la mezcla de los diferentes grupos de sub-niveles es despreciable en comparación con la mezcla de los sub-niveles dentro de los grupos. Por consiguiente, los niveles más bajos son formados por la mezcla de los sub-niveles con número cuántico radial  $n=1$ . De otro lado, se puede ver que las partes radiales de las funciones de onda uní-electrónicas  $R_{1,m}(\rho)$ , correspondiente a un pozo de potencial de un anillo muy angosto, para diferentes números cuánticos  $m$  son similares y por consiguiente todas ellas, en el cálculo variacional para dos electrones en un anillo cuántico, pueden aproximarse a la misma parte radial de la función de onda  $R_{1,0}(\rho)$ . Esta es la razón por la que se propone la siguiente función de onda para los estados más bajos:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = R_{1,0}(\rho_1)R_{1,0}(\rho_2)\Phi(\varphi_1, \varphi_2) \quad (2.4.3)$$

donde la función variacional  $\Phi(\varphi_1, \varphi_2)$  describe el movimiento angular del sistema de dos electrones correspondiente a diferente momentum angular. Para derivar una ecuación diferencial para una función desconocida  $\Phi(\varphi_1, \varphi_2)$  se usa el principio variacional de Schrödinger el cual dice que las funciones propias del Hamiltoniano  $H$  deben minimizar el funcional  $F[\Phi] = \langle \psi | H - E | \psi \rangle$ . Sustituyendo (2.4.3) y (2.4.1) en este funcional y tomando la derivada del funcional con respecto a la función  $\Phi$ , después de un proceso algebraico se obtiene la siguiente ecuación para esta función:

$$-\frac{1}{I} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi_2^2} \right) + V(\varphi_1 - \varphi_2) \Phi = (E - 2E_0(1,0)) \Phi; \quad \frac{1}{I} = 2\pi \int_0^\infty \frac{R_{1,0}^2(\rho)}{\rho} d\rho; \quad (2.4.4a)$$

$$V(\varphi) = 8\pi^2 \int_0^\infty \rho_1 R_{1,0}^2(\rho_1) d\rho_1 \int_0^\infty \frac{\rho_2 R_{1,0}^2(\rho_2)}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos \varphi}} d\rho_2 \quad (2.4.4b)$$

La ecuación (2.4.4a) se puede separar usando las coordenadas del centro de masa  $\vartheta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$  y la del movimiento relativo  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ , en las que la solución exacta de la ecuación de onda puede escribirse como:

$$\Phi(\vartheta, \varphi) = e^{iM\vartheta} u(\varphi); \quad u''(\varphi) + \left\{ I \left[ \frac{E}{2} - E_0(1,0) - \frac{V(\varphi)}{2} \right] - \frac{M^2}{4} \right\} u(\varphi) = 0; \quad (2.4.5)$$

$$-2\pi < \varphi < 2\pi; \quad 0 < \vartheta < 2\pi$$

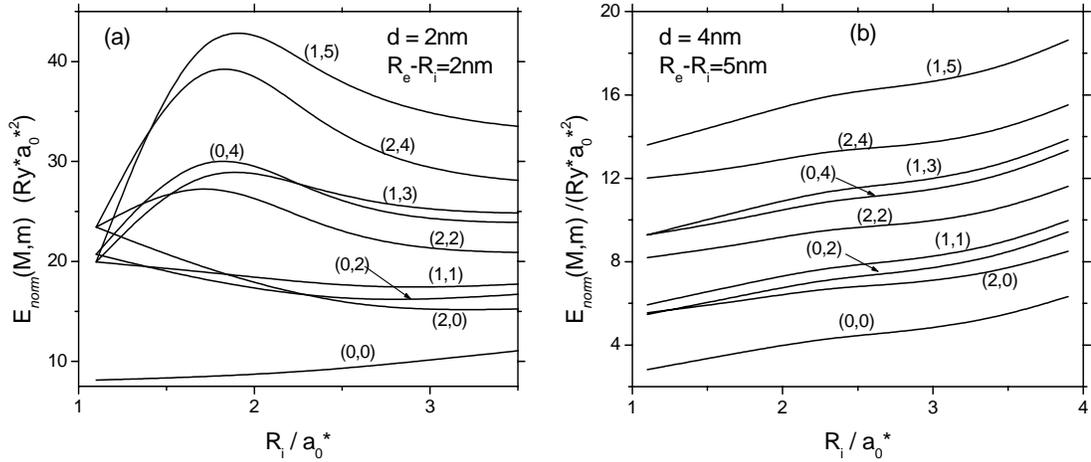
Como el potencial efectivo (2.4.4b) es par, existen dos grupos diferentes de soluciones, las soluciones pares para las cuales  $u(-\varphi) = u(\varphi)$ , correspondientes a los estados singlete y las soluciones impares para las cuales  $u(-\varphi) = -u(\varphi)$ , correspondientes a los estados triplete. Para los estados singlete, se puede agregar la siguiente condición periódica  $u(\varphi \pm 2\pi) = (-1)^M u(\varphi)$ , la cual permite considerar el problema de valores propios (2.4.5) solamente dentro de la región  $0 < \varphi < 2\pi$  con las condiciones de frontera  $u'(0) = u'(2\pi) = 0$ . Soluciones de este problema, son las funciones de onda  $u(\varphi) = u_{M,m}(\varphi)$  y las energías,  $E = E(M, m)$  que dependen de dos números cuánticos, el momento angular del centro de masa  $M$  y el momento angular relativo  $m$ . Para resolver este problema en los cálculos realizados se ha usado el método de barrido trigonométrico.

En la Figura 20 se presentan los resultados del cálculo de la energía de algunos de los niveles más bajos para los estados singlete de dos electrones  $E(M, m)$  en función del radio interno del anillo  $R_i$  para dos alturas diferentes  $d$  y dos anchos diferentes  $R_e - R_i$ . Teniendo en cuenta que para pequeños valores del radio del anillo la energía de dos electrones se incrementa bruscamente, para evitar en los gráficos los saltos en la Figura 20 se ha utilizado la energía normalizada definida como  $E_{norm}(M, m) = [E(M, m) - 2E_0(1,0)] \cdot R_0^2$ , donde  $R_0 = (R_i + R_e)/2$  es el radio promedio del anillo. En la Figura 20 se presentan las energías normalizadas de algunos estados más bajos como una función del radio interior  $R_i$  cuando se fijan la altura  $d$  y el ancho  $R_e - R_i$  de los anillos cuánticos, en el primer caso (Figura 20(a)) ambos son iguales a 2nm y en el segundo caso presentado en la Figura 20(b) a 4nm y 5nm respectivamente. En ambos casos el nivel del estado base siempre está separado de los otros niveles más bajos independientemente del radio de los anillos cuánticos y para los otros niveles más bajos se observan cruces de las curvas que están relacionados con la fuerte interacción electrón-electrón.

Los cruces y el ordenamiento de los niveles se hacen más notables cuando se disminuyen la altura y el ancho de los anillos cuánticos. En la Figura 20(a) se puede observar que para pequeños radios de los anillos cuánticos los niveles con

el mismo valor de  $M$  y diferentes valores de  $m$  son degenerados porque la rotación relativa, en este caso, no da ninguna contribución a la energía del sistema de dos electrones. Por el contrario, para radios grandes, la contribución de la rotación del centro de masa no es significativa y por consiguiente los niveles con diferentes valores de  $M$  y los mismos valores de  $m$  tienden a los mismos valores de la energía total.

Figura 20. Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón como una función del radio interior del anillo cuántico  $R_i$ , para algunos estados singlete más bajos en anillos cuánticos con altura  $d$  y dos diferentes valores del ancho  $R_e - R_i$ . La notación  $(M, m)$  es usada para los niveles de energía  $E(M, m)$ .

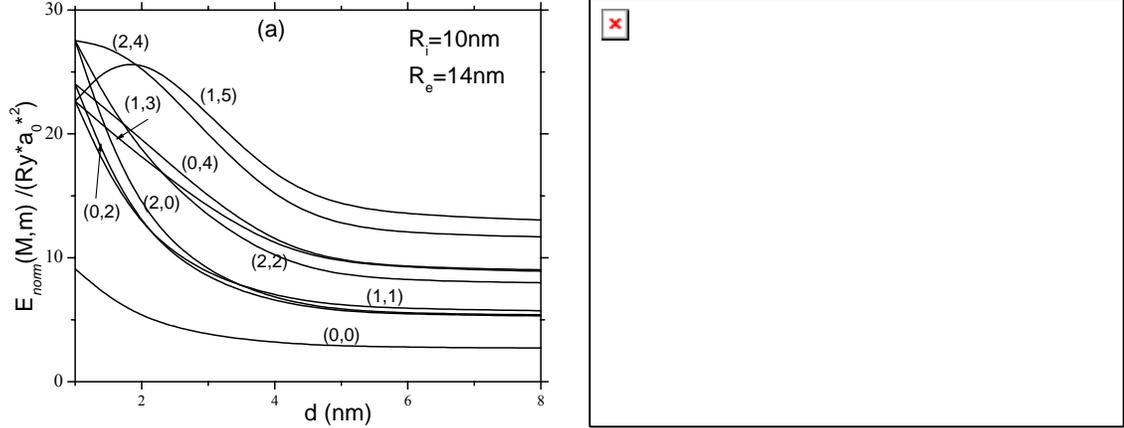


En la Figura 20(a) las curvas pueden dividirse en dos grupos, las inferiores que tienen un mínimo y las superiores que tienen un máximo. La mínima posición se atribuye a los efectos de desbordamiento de la función de onda en la región del núcleo repulsivo mientras que la máxima posición puede atribuirse al desbordamiento en la región exterior.

Cuando el espesor y el ancho del anillo tienden a cero la función de onda se desborda dentro del núcleo central positivo y en la región de la barrera se produce esencialmente un cambio adicional en el orden de los niveles y en los cruces de las curvas de las energías de los dos electrones como una función del radio, ancho y espesor.

Figura 21. Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón como una función de la altura del anillo cuántico para algunos estados bajos para dos

valores diferentes de anchos y radios de un anillo cuántico. La notación  $(M, m)$  se usa para los niveles de energía  $E(M, m)$ .



En la Figura 21 se muestran las curvas de las energías de dos electrones en un anillo cuántico como función de la altura  $d$ . Una disminución de  $d$  produce un aumento de los niveles de un electrón y un aumento de la probabilidad de tunelamiento en el núcleo repulsivo central disminuyendo el valor medio de la separación de los electrones. Además se ve que las curvas con  $M + m = 6$  tienen un máximo que se atribuye al desbordamiento de la función de onda en dirección lateral dentro de la región exterior a la barrera.

## 2.5 DOS ELECTRONES EN ANILLOS CUÁNTICOS ACOPLADOS [40,49]

En esta sección se considera un modelo de dos anillos unidimensionales idénticos, coaxiales y paralelos inmersos en un campo magnético homogéneo externo  $\mathbf{B} = B\hat{z}$ , aplicado a lo largo del eje de los anillos. Teniendo en cuenta que  $R$  es el radio de los anillos y  $d$  la separación espacial entre los anillos a lo largo de la dirección  $z$ , se introduce el parámetro adimensional  $\beta = d/R$ . Para comparar los resultados obtenidos con los usados en la Referencia [18], se utilizan las mismas unidades de longitud, energía e intensidad de campo magnético, es decir, el radio efectivo de Bohr  $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ , el Rydberg efectivo  $R_y^* = m^* e^2 / 2\hbar^2 \epsilon^2$  y el primer nivel de energía de Landau  $\gamma = eB\hbar / 2m^* cR_y^*$  para el caso límite cuando  $\beta \rightarrow 0$  los dos anillos se fusionan en uno solo.

Para resolver exactamente el problema de dos electrones separados espacialmente en dos anillos cuánticos unidimensionales acoplados verticalmente se usa el

método de barrido trigonométrico. En el estudio de este sistema se encuentran y se discuten los cruces de los niveles de energía en el espectro del sistema, producidos por la variación del radio de los anillos, la separación entre ellos y la intensidad del campo magnético aplicado en dirección del eje.

El Hamiltoniano adimensional normalizado  $\hat{H}^0 = HR^2$  en la presencia del campo magnético homogéneo está dado por

$$\hat{H}^0 = \sum_{i=1}^2 \left[ -\frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} - i\gamma R^2 \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \right] + \frac{\gamma^2 R^4}{2} + U(\varphi_1 - \varphi_2); \quad U(\varphi_1 - \varphi_2) = 2R \sqrt{4s \sin^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) + \beta^2} \quad (2.5.1)$$

En el Hamiltoniano (2.5.1), los valores propios correspondientes a las energías normalizadas de dos electrones,  $\tilde{E}$  (energías  $E$  multiplicadas por el cuadrado del radio del anillo,  $\tilde{E} = ER^2$ ), se pueden encontrar exactamente usando la coordenada del centro de masa  $\theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$  y la coordenada relativa  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ . En estas coordenadas el Hamiltoniano (2.5.1) se puede separar en dos partes independientes  $\tilde{H}_c$  y  $\tilde{H}_r$ :

$$\hat{H}^0 = \hat{H}_c^0 + \hat{H}_r^0 + \gamma^2 R^4 / 2; \quad \hat{H}_c^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\theta^2} - i\gamma R^2 \frac{d}{d\theta}; \quad \hat{H}_r^0 = -2 \frac{d^2}{d\varphi^2} + U(\varphi) \quad (2.5.2)$$

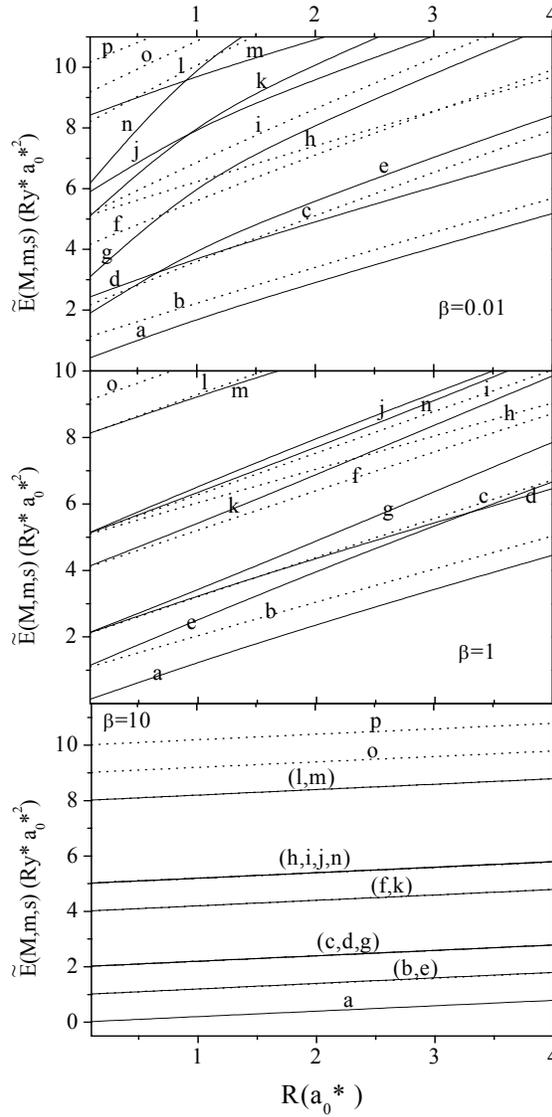
Esta separación del Hamiltoniano (2.5.2) permite escribir la energía normalizada en la forma  $\tilde{E}^0 = \tilde{E}_c^0 + \tilde{E}_r^0 + \gamma^2 R^4 / 2$ , donde  $\tilde{E}_c^0$  y  $\tilde{E}_r^0$  son las energías normalizadas del centro de masa y de las rotaciones relativas, que son valores propios de los operadores  $\tilde{H}_c$  y  $\tilde{H}_r$ , respectivamente.

Los valores propios del operador  $\tilde{H}_c$  están dados por:  $\tilde{E}_c(M) = 0.5 M^2 + \gamma MR^2$  siendo  $M = 0, \pm 1, \pm 2, K$  el momento angular del centro de masa y los valores propios del operador  $\tilde{H}_r$  solamente se pueden encontrar resolviendo numéricamente la ecuación de onda unidimensional

$$-2 \frac{d^2 f_{ms}(\varphi)}{d\varphi^2} + U(\varphi) f_{ms}(\varphi) = \tilde{E}_r^0(m, s) f_{ms}(\varphi) \quad (2.5.3)$$

en la región de  $[-2\pi, 2\pi]$ , con condiciones de frontera periódicas  $f_{ms}(0) = (-1)^m f_{ms}(2\pi)$ . Los números cuánticos  $m = 0, \pm 1, \pm 2, K$  definen el momento angular relativo de los dos electrones y  $s = \pm$  la paridad de la solución de la ecuación (2.5.3).

Figura 22. Energías totales normalizadas  $\tilde{E}(M,m,s)$  de dos electrones contra el radio  $R$  en anillos cuánticos verticalmente acoplados para diferentes razones  $\beta$  entre la distancia y el radio de los anillos 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete.



Las soluciones pares ( $s = +$ ) corresponden a los estados singlete y las soluciones impares ( $s = -$ ) corresponden a los estados triplete. El espectro electrónico del sistema de dos electrones está compuesto por el conjunto de estados  $\tilde{E}(M,m,s)$  dados por tres números cuánticos  $M,m,s$ . En el trabajo numérico realizado se usó el método de barrido trigonométrico a fin de solucionar el problema de valores propios con condiciones de frontera periódicas.

En la Figura 22 se puede observar una notable evolución de las energías dependientes del radio del anillo con el aumento de la separación entre los anillos, cuando la razón  $\beta$  varía desde el valor más pequeño 0,001 (curvas superiores) a un mayor valor 10 (curvas inferiores).

Cuando el radio de los anillos es muy pequeño o la distancia entre los anillos es muy grande la contribución de la energía de Coulomb llega a ser despreciable y los valores propios exactos del Hamiltoniano (2.5.1) corresponden a las energías normalizadas, de dos rotores rígidos desacoplados, dadas por la fórmula

$$\tilde{E}(M, m, s) = 0.5(M^2 + m^2) \quad (2.5.4)$$

La correspondencia completa entre la notación corta y el conjunto de números cuánticos  $(M, m, s)$  está dada en la Tabla 5.

En la misma tabla se comparan los resultados para la razón  $\beta = 0.001$  pequeña, con los obtenidos previamente en la Referencia [18] para dos electrones en un solo anillo unidimensional. Se puede observar una excelente concordancia entre los dos conjuntos de resultados para dos radios diferentes de los anillos.

En la Figura 22 se puede apreciar que las energías satisfacen esta relación para  $R \rightarrow 0$  y para todos los valores de  $\beta$  tanto para los estados singlete como para los estados triplete. Cuando los radios de los anillos aumentan la contribución de la energía de Coulomb crece y no se pueden observar las intersecciones de los niveles más altos con el mismo o diferente espín inducido por la interacción electrón- electrón.

El número de intersecciones decrece sustancialmente con el aumento de la razón  $\beta$  y cuando el valor de  $\beta$  es muy grande las curvas de las energías dependientes del radio del anillo llegan a ser casi horizontales y degeneradas con respecto a la orientación del espín.

La dependencia de las energías de dos electrones con respecto a la distancia entre los anillos unidimensionales verticalmente acoplados se presentan en la Figura 23 para anillos de radios  $1a_0^*$  y  $5a_0^*$ . Se puede observar que el espectro del sistema se transforma sustancialmente en uno típico para un par de rotores rígidos desacoplados descritos por la relación 2.5.4.

En la Figura 24 se muestra la dependencia de algunas energías normalizadas  $\tilde{E}(\pm M, m, s)$  con  $|M| \leq 2$  respecto de la intensidad del campo magnético para un radio de los anillos  $R = 1a_0^*$  y separación entre los anillos  $d = 0.1a_0^*$ . Se puede ver que la presencia del campo magnético proporciona una separación de los niveles de energía cuyo momento angular M tiene signos diferentes.

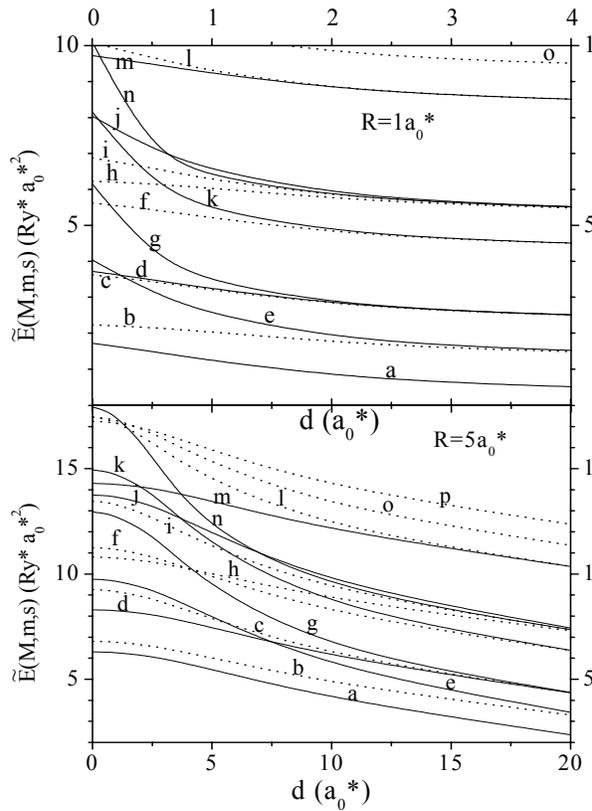
Tabla 5. Energía exacta de los niveles  $\tilde{E}(M, m, s)$  de dos electrones para anillos acoplados verticalmente  $\beta = 0.001$  (resultados obtenidos) y para un solo anillo (según Referencia 18).

		$R = 1a_0^*$		$R = 4a_0^*$	
		Resultados obtenidos	Referencia [18]	Resultados obtenidos	Referencia [18]
a	$\tilde{E}(0,0,0)$	1.72	1.73	5.18	5.18
b	$\tilde{E}(1,1,1)$	2.23	2.23	5.68	5.68
c	$\tilde{E}(0,2,1)$	3.61	3.62	7.92	7.92
d	$\tilde{E}(2,0,0)$	3.72	3.73	7.18	7.18
e	$\tilde{E}(1,1,0)$	4.06	4.12	8.41	8.42
f	$\tilde{E}(2,2,1)$	5.62	5.62	9.92	9.92
g	$\tilde{E}(0,2,0)$	6.22	6.23	11.40	11.40
h	$\tilde{E}(3,1,1)$	6.33	6.38	9.68	9.68
i	$\tilde{E}(1,3,1)$	6.88	6.88	11.90	11.90
j	$\tilde{E}(3,1,0)$	8.06	8.11	12.41	12.41
k	$\tilde{E}(2,2,0)$	8.22	8.38	13.40	13.40
l	$\tilde{E}(0,4,1)$	10.08	10.08	15.71	15.71
m	$\tilde{E}(4,0,0)$	9.72	9.73	13.18	13.18
n	$\tilde{E}(1,3,0)$	10.24	10.57	16.19	16.21
o	$\tilde{E}(3,3,1)$	10.88	10.88	15.90	15.90
p	$\tilde{E}(4,2,1)$	11.62	11.62	15.92	15.92

Para intensidades de campos magnéticos grandes, la separación inducida por el término paramagnético en el Hamiltoniano (2.5.2) es más significativa. Generalmente, el comportamiento de las curvas está definido por una fuerte competencia entre las contribuciones a la energía total dada por los términos diamagnético y paramagnético en el Hamiltoniano (2.5.2).

La transformación del espectro de energía de un sistema típico con interacción fuerte de Coulomb (cuando la distancia entre los anillos es pequeña) a otro sistema típico para dos rotores rígidos independientes (cuando la distancia entre los anillos es grande) produce las intersecciones entre las diferentes curvas observadas en la Figura 23.

Figura 23. Energía total normalizada  $\tilde{E}(M,m,s)$  de dos electrones contra la distancia  $d$  entre anillos acoplados verticalmente con dos radios diferentes  $R=1a_0^*$  (curvas superiores) y  $R=5a_0^*$  (curvas inferiores).



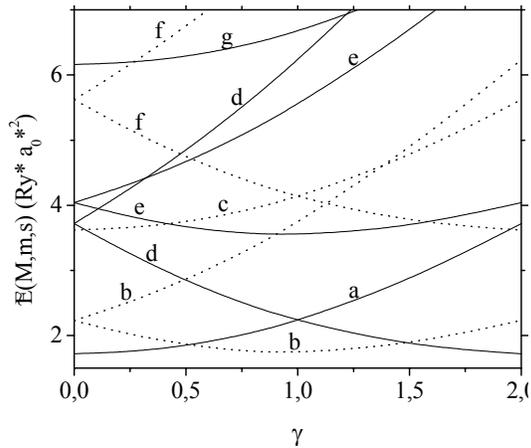
La contribución del término paramagnético depende linealmente de la intensidad del campo magnético mientras que la dependencia del término diamagnético depende del cuadrado del campo magnético. Por consiguiente, cuando la intensidad del campo magnético es pequeña la contribución del término paramagnético es predominante y para intensidades de campos magnéticos grandes el término diamagnético llega a ser más importante.

Por esta razón, las curvas comienzan casi lineales con pendiente positiva ( $M \geq 0$ ) o pendiente negativa ( $M < 0$ ) transformándose en parabólica para grandes campos magnéticos. Además, se puede notar que la dependencia del campo magnético del

nivel de energía más bajo muestra un comportamiento oscilatorio con período  $\gamma = 1.0$ .

Para intensidades de campo magnético menores que 0.5 la energía del estado base corresponde al nivel singlete  $\tilde{E}(0,0,0)$ . Cuando la intensidad del campo magnético se hace mayor que 0.5 el estado base se transforma en el nivel triplete  $\tilde{E}(-1,1,1)$ . Dentro del intervalo de campo magnético ( $1 < \gamma < 1.5$ ) este nivel permanece como el estado base. Además, cuando el campo magnético excede el valor de 1.5 el estado base se transforma en el nivel singlete  $\tilde{E}(-2,0,0)$ , etc. Este comportamiento oscilatorio se mantiene para diferentes valores del radio de los anillos y de la separación entre ellos. Es evidente que el número cuántico  $M$  del nivel del estado base aumenta con el incremento de la intensidad del campo magnético y las posiciones de los mínimos en las curvas del nivel del estado base aumenta con el incremento de la intensidad del campo magnético y las posiciones de los mínimos en las curvas de la oscilación magnética corresponden a  $\gamma = M/R^2$  y el período de oscilación es igual a  $1/R^2$ .

Figura 24. Energías normalizadas  $\tilde{E}(\pm M, m, s)$  contra la intensidad del campo magnético  $\gamma$  para dos electrones en anillos verticalmente acoplados de radios  $R = 1a_0^*$  y separación entre ellos  $d = 0.1a_0^*$ .



Las oscilaciones magnéticas no sufren ningún cambio cuando los radios de los anillos son modificados. Esto es debido a la interacción de Coulomb entre dos electrones en anillos unidimensionales la cual es responsable de los efectos cuánticos de tamaño.

### 3. ESTADOS LIGADOS DE UNO Y DOS ELECTRONES EN PRESENCIA DE CARGAS POSITIVAS

---

---

Los portadores de carga atrapados en puntos cuánticos comúnmente pueden tener uno de dos posibles orígenes, o son formados como resultado de la ionización de una impureza (donadora en el caso de electrón y aceptadora en el caso de hueco) o como resultado de la transición de un electrón desde la banda de valencia hacia la banda de conducción (termalización o fotoefecto). En ambos casos en el proceso de formación de los portadores de carga simultáneamente aparece otra carga de signo opuesto, con una sola diferencia, en el primer caso la carga con signo contrario tiene una posición fija, y en el segundo ambas cargas son movibles. En la etapa inicial de la formación de los portadores de carga estas dos cargas de signos opuestos pueden formar temporalmente unos estados ligados muy similares a los que tiene el átomo de hidrogeno. A diferencia del átomo de hidrogeno estos estados ligados son muy poco profundos (tienen una energía de enlace centenares de veces menor que el átomo de hidrogeno) debido a la pequeña masa efectiva de los portadores de carga y al muy fuerte apantallamiento de la atracción Coulombiana. Existen diferentes maneras para ligar los portadores de carga con cargas opuestas formando unos complejos en los cuales participan una partícula (donadoras y aceptadoras neutras), dos partículas (exciton, donadora cargada negativamente), tres partículas (triones), cuatro (biexcitones), etc. En este capítulo se analizan los diferentes tipos de estados ligados que pueden formar los portadores de carga con unas cargas eléctricas de signo opuesto dentro de puntos cuánticos auto-ensamblados, aplicando las mismas técnicas que en el capítulo anterior (la aproximación adiabática y el método de dimensión fractal),

Para ilustrar la eficiencia de nuestra técnica consideremos tres tipos de complejos: una donadora neutra  $D^0$ , formada por un electrón y un ión positivamente cargado (en los párrafos 3.2 y 3.5), una donadora cargada negativamente  $D^-$ , formada por un ión y dos electrones (en los párrafos 3.3 y 3.5) y un trión, formado por un hueco y dos electrones (en el párrafo 3.4). Los resultados de la investigación presentados en este capítulo fueron publicados en los artículos [44, 45, 46, 47, 48].

La técnica de dimensión fractal por primera vez fue utilizada para analizar las donadoras confinadas en las heterojunturas semiconductoras en las publicaciones [64, 117] y para excitones en el artículo [36]. Se inicia con una explicación del esquema general del método.

### 3.1 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL IMPUREZAS PARA DONADORAS CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

Este esquema se explica considerando un ejemplo de una donadora  $D^-$  confinada en una heterojuntura semiconductor con un potencial de confinamiento  $V(\mathbf{r})$ . Se puede imaginar que esta donadora se formó como resultado de la captura de un segundo electrón que de manera “vagabunda” se acercó a esta donadora y por eso el  $D^-$  es un ión con la carga  $+e$  que logra mantener simultáneamente a dos electrones con las cargas  $-e$ . El Hamiltoniano adimensional de este sistema está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1, Z=1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2, Z=1) + \frac{2}{r_{12}} \quad (3.1.1)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_i, Z) = -\nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i) - \frac{2Z}{|\mathbf{r}_i - \zeta|}; \quad i=1,2 \quad (3.1.2)$$

El Hamiltoniano uní-particular (3.1.2) describe al electrón libre cuando el parámetro  $Z$  es igual a cero y para la donadora neutra  $D^0$ , cuando el parámetro  $Z$  es igual a uno. En las fórmulas (3.1.1) y (3.1.2) se utilizaron las siguientes notaciones:  $\zeta$  y  $\mathbf{r}_i = (\mathbf{p}_i, z_i)$ , ( $i=1,2$ ) designan los vectores 3D para el ión y para las posiciones de los electrones 1 y 2 respectivamente.

La interacción de los dos electrones está dada por el término  $2/r_{12}$ , donde  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  es la separación entre los dos electrones. Denotando por  $f_0(\mathbf{r})$  la función de onda del estado base para un electrón libre, por  $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$  la función de onda de una donadora neutra y por  $\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  la función de onda de la donadora cargada negativamente, las ecuaciones de Schrödinger para el electrón, la donadora neutra y la donadora cargada negativamente, se pueden expresar mediante:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}, Z=0)f_0(\mathbf{r}) = E_0 f_0(\mathbf{r}) \quad (3.1.3)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}, Z=1)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E(D^0)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) \quad (3.1.4)$$

$$\hat{H}\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(D^-)\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.1.5)$$

Aquí y en adelante se asume que la energía del estado base del electrón libre  $E_0$  y la función de onda  $f_0(\mathbf{r})$  correspondiente son conocidas. El objetivo del método de dimensión fractal consiste en encontrar las energías de los estados base de la donadora neutra,  $E(D^0)$  y de la donadora cargada negativamente  $E(D^-)$ .

Cuando una heteroestructura tiene una simetría particular, por ejemplo, axial como en los QWs y QWWs cilíndricos o QDs esféricos, el Hamiltoniano  $\hat{H}_0(\mathbf{r},0)$  es completamente separable y el problema tri-dimensional (3.1.3) se puede reducir a un problema unidimensional de valores propios, el cual posteriormente, se puede resolver exactamente usando uno de los procedimientos numéricos bien conocidos o analíticamente. Por el contrario las ecuaciones (3.1.4) y (3.1.5) no son completamente separables y debe usarse algún método de aproximación para resolverlos.

Para resolver el problema de valores propios (3.1.4) se busca la función de onda para los estados S de la donadora  $D^0$  en la siguiente forma:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r})\Phi_{D^0}(|\mathbf{r}-\zeta|) \quad (3.1.6)$$

donde la función envolvente  $\Phi_{D^0}$  que describe la modificación de la distribución de la probabilidad electrónica producida por la atracción de Coulomb, tiene simetría esférica y solamente depende de la distancia ión-electrón  $|\mathbf{r}-\zeta|$ . Usando el principio variacional en la forma:

$$F[\Phi] = \langle f_0\Phi_{D^0} | \hat{H}_0 - E | f_0\Phi_{D^0} \rangle \rightarrow \min \quad (3.1.7)$$

y transfiriendo el origen de coordenadas a la posición del ión, la ecuación de Schrödinger (3.1.4) se escribe como un problema variacional para el siguiente funcional:

$$F[\Phi_{D^0}] = \int_0^\infty J(r) \left\{ \left[ \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right]^2 - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}^2(r) + (E_0 - E) \Phi_{D^0}^2(r) \right\} dr \rightarrow \min; \quad \frac{\delta F[\Phi_{D^0}]}{\delta \Phi_{D^0}} = 0 \quad (3.1.8)$$

En (3.1.8)  $\delta/\delta\Phi$  denota la derivada funcional y  $J(r)$  en el caso general está dado por:

$$J(r) = 4\pi r^2 P(r); \quad P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \int f_0^2(\mathbf{r} + \boldsymbol{\zeta}) \delta(|\mathbf{r}| - r) \quad (3.1.9)$$

Si se asume, por ejemplo, que la función de onda  $f_0(\mathbf{r})$  y el vector posición del ión  $\boldsymbol{\zeta}$  están dados en coordenadas cartesianas  $f_0(\mathbf{r}) = f_0(x, y, z)$  y  $\boldsymbol{\zeta} = \{\zeta_x, \zeta_y, \zeta_z\}$  entonces la expresión explícita para esta función es:

$$P(r) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta f_0^2(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) \quad (3.1.10)$$

De la ecuación (3.1.9) se ve que  $J(r)$  está relacionado con la densidad de carga para el estado base del electrón libre  $P(r)$ , promediada sobre la esfera, de radio  $r$ , centrada en el lugar del ión. Al calcular la derivada funcional propuesta en la ecuación (3.1.8), se obtiene la siguiente ecuación unidimensional de Euler-Lagrange para la función  $\Phi_{D^0}(r)$ :

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d}{dr} \Phi_{D^0}(r) \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = \left[ E(D^0) - E_0 \right] \Phi_{D^0}(r) \quad (3.1.11)$$

La ecuación de onda renormalizada (3.1.11) describe un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo donde el Jacobiano  $J(r)$  es la parte radial del elemento de volumen. Tal interpretación para esta ecuación surge de la propiedad de ortogonalidad de las funciones propias  $\Phi_{D^0}^{(n)}(r)$  de la ecuación autoconjugada (3.1.11) para los diferentes estados S:

$$\int_0^\infty \Phi_{D^0}^{(n)}(r) \Phi_{D^0}^{(m)}(r) J(r) dr = \int \Phi_{D^0}^{(n)}(r) \Phi_{D^0}^{(m)}(r) dV = \delta_{n,m} \quad (3.1.12)$$

Aquí,  $dV = J(r) dr$  representa el elemento de volumen infinitesimal del espacio efectivo y por consiguiente  $J(r)$  se puede considerar como el área de la superficie de la frontera de una corteza esférica de radios  $r$  y  $r + dr$ . Por ejemplo, para espacios homogéneos en una, dos y tres dimensiones, la función  $J(r)$  es igual a 1,  $2\pi r$  y  $4\pi r^2$ , respectivamente. Si la dependencia de  $J(r)$  sobre  $r$  fuera una ley de potencia, por ejemplo,  $J(r) = Cr^{D-1}$ , entonces la ecuación (3.1.11) coincidirá con

la ecuación de Schrödinger para los estados S de un átomo hidrogenoide en el espacio efectivo de  $D$ -dimensiones, siendo  $D$  un número entero o un fraccionario.

En las heteroestructuras la función  $J(r)$  no depende de la ley de potencia sobre la separación electrón-ión  $r$  porque la presencia del factor  $P(r)$ , y la ecuación (3.1.11) puede considerarse como una ecuación de onda para un átomo hidrogenoide en un espacio isotrópico y no homogéneo con dimensión fraccional variable que depende de la distancia electrón-ión  $r$  (esto se denomina dimensión fractal).

El esquema de aplicación del método (llamado en esta tesis Dimensión Fractal) es muy simple y consiste en tres pasos. En el primer paso se resuelve la ecuación de onda para el electrón confinado en la heteroestructura (3.1.3), usando el método de separación de variables, como en los casos de QW, QWW, SQD, SL, etc. ó la aproximación adiabática en el caso de puntos cuánticos auto-ensamblados aplicada en esta tesis. En el segundo paso se calculan los valores de la función (3.1.9) sobre una malla y se definen sus valores en otros puntos a través de la interpolación con splines cúbicos. Y finalmente, empleando cualquier procedimiento numérico (el utilizado fue el MBT), se resuelve la ecuación de onda unidimensional (3.1.11) y se encuentra función de onda de la donadora definida por medio de la relación (3.1.6).

El método anterior se puede extender para analizar el estado base de una donadora cargada negativamente escogiendo la función de prueba en la siguiente forma:

$$\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_0(\mathbf{r}_1) f_0(\mathbf{r}_2) \Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1 - \zeta|, |\mathbf{r}_2 - \zeta|, r_{12}), \quad (3.1.13)$$

donde la función envolvente  $\Phi_{D^-}$  toma en cuenta el efecto de correlación entre los electrones dentro de la heteroestructura, producido por la interacción de Coulomb. Para derivar la ecuación diferencial para esta función se usa el principio variacional en la forma:

$$\frac{\delta F[\Phi_{D^-}]}{\delta \Phi_{D^-}} = 0; \quad F[\Phi_{D^-}] = \langle f_0(1) f_0(2) \Phi_{D^-} | \hat{H} - E(D^-) | f_0(1) f_0(2) \Phi_{D^-} \rangle \quad (3.1.14)$$

con el Hamiltoniano definido por la relación (3.1.1). Para obtener la expresión explícita para el funcional anterior se puede tener en cuenta que solamente los dos primeros factores del miembro de la derecha de la ecuación (3.1.13) son

función de los ángulos para los estados S de la donadora y por tanto se puede integrar sobre ellos inmediatamente.

Usando un procedimiento similar al descrito anteriormente par el  $D^0$  y designando por  $r_1$ ,  $r_2$  las separaciones ión-electrones y por  $r_{12}$  la distancia entre los dos electrones se obtiene la siguiente ecuación de Euler-Lagrange para  $\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12})$  en el marco de referencia con el origen situado en la posición del ión  $\zeta$ :

$$-\sum_{i=1,2} \frac{1}{P(r_i)} \nabla_i [P(r_i) \nabla_i \Phi_{D^-}] + \left( -\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{2}{r_{12}} \right) \Phi_{D^-} = [E(D^-) - 2E_0] \Phi_{D^-} \quad (3.1.15)$$

Esta ecuación describe el ión  $H^-$  en un espacio isotrópico efectivo con dimension fractal definida la cual se puede resolver usando un método exacto elaborado previamente para el problema de dos partículas en un campo central. Para estimar la energía del estado base  $D^-$  se usa como función de prueba triparamétrica de Hylleraas [3]:

$$\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\alpha s} (1 + \beta t^2 + \eta u), \quad (3.1.16)$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\eta$  son parámetros variacionales y  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_1 - r_2$ ,  $u = r_{12}$  son las coordenadas de Hylleraas.

Usando el procedimiento bien conocido de cálculo de integrales múltiples en coordenadas de Hylleraas [3] se obtiene la siguiente expresión explícita para la variación de energía como una función de los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\eta$ :

$$E(D^-, \alpha, \beta, \eta) = 2E_0 + 2\alpha^2 + \frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \zeta\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \zeta\right) R_1(s, t) dt}{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \zeta\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \zeta\right) R_0(s, t) dt} \quad (3.1.17)$$

donde

$$\begin{aligned}
 R_1(s,t) &= 2(s-t)\left[(s^2-t^2)(1+\beta t^2)^2 + 4\beta\eta s^2 t^2 + 2\alpha\eta s t^2(1+\beta t^2)\right] + \\
 &(s^2-t^2)\left\{2s\alpha\eta^2 t^2 - 4s(1+\beta t^2)^2 + (s^2-t^2)\left[4\beta^2 t^2 + 2\eta(1+\beta t^2) + \eta^2\right]\right\} - \\
 &\frac{2\eta}{3}(s^3-t^3)\left[4\beta t^2 + 2s(4+\alpha)(1+\beta t^2) - \eta(s^2-t^2)\right] - \eta^2 s(s^4-t^4)(\alpha+2) \quad (3.1.18) \\
 R_0(s,t) &= (s^2-t^2)\left[\frac{1}{2}(s^2-t^2)(1+\beta t^2)^2 + \frac{2\eta}{3}(s^3-t^3)(1+\beta t^2) + \frac{\eta^2}{4}(s^4-t^4)\right]
 \end{aligned}$$

La energía variacional  $E(D^-)$  del estado base del  $D^-$  se puede encontrar minimizando la expresión (3.1.17) con respecto a los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\eta$ :

$$E(D^-) = \min_{\alpha, \beta, \eta \in (0,1)} E(D^-, \alpha, \beta, \eta) \quad (3.1.19)$$

### 3.2 DONADORA NEUTRA EN UN PUNTO CUÁNTICO CON SIMETRÍA AXIAL [46, 47]

Las energía de enlace de la donadora neutra  $E_b(D^0)$  dentro de un punto cuántico con simetría axial tal como disco, anillo, lente y cono, se define como:

$$E_b(D^0) = E(e^-) - E(D^0); \quad (3.2.1)$$

En la Figura 25 se muestran las energías de enlace del estado base del  $D^0$  localizado en medio del eje a la mitad de la altura ( $\xi_\rho = 0$ ,  $\xi_z = 0.5d_0$ ) dependientes del radio de la base de discos, lentes y pirámides cuánticas con alturas  $d_0$  de 2nm y 4nm.

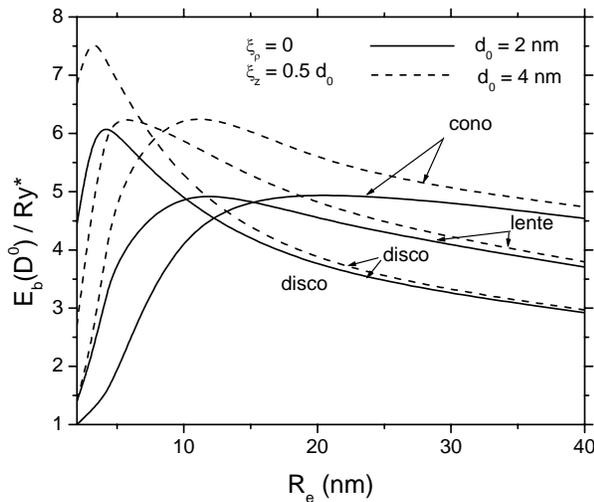
Las energías de enlace presentadas en esta figura se pueden comparar con los correspondientes valores de la energía de enlace del  $D^0$  en un bloque 3D, 1Ry\* y en un bloque 2D, 4Ry\* [65].

Cuando el radio del punto cuántico es muy grande las estructuras se pueden considerar como sistemas casi bidimensionales con un confinamiento fuerte pero incompleto en la dirección  $z$  debido a los valores finitos del espesor y de la altura de la barrera. Esta es la razón por la que todas las curvas para la energía de enlace en la Figura 25 tienden a un valor constante, un poco por debajo de 4Ry\*.

Comparando las curvas de la energía de enlace para diferentes estructuras se puede ver que en la región donde los radios de la base son grandes, la energía máxima de enlace se presenta en el cono y la energía de enlace más pequeña se presenta en el disco.

Esto es debido al hecho que el mayor confinamiento en la dirección radial se produce en el cono, seguido de la lente y del disco, en el cual se produce el menor confinamiento.

*Figura 25. Energía de enlace del estado base de una donadora localizada en medio del eje de un disco, una lente y un cono en función de la base del radio  $R_e$ . Las líneas continuas corresponden a estructuras con altura máxima del punto cuántico de 2nm y las líneas a trazos con altura máxima del punto cuántico de 4nm.*



Cuando los radios de los puntos cuánticos decrecen, las energías de enlace de las donadoras inicialmente crecen, hasta el momento en que la función de onda del electrón empieza a desbordar dentro de la región de la barrera (con mayor probabilidad hacia arriba y hacia abajo), produciéndose un aumento en la separación entre el electrón y la donadora y una disminución de la energía de enlace.

En el límite cuando el radio del punto cuántico tiende a cero las donadoras restauran completamente su carácter tridimensional y la energía de enlace de la donadora neutra  $D^0$  para todas las curvas tiende a su correspondiente valor en un bloque tridimensional,  $1Ry^*$ . Además, se puede comparar el valor de la máxima energía de enlace en la Figura 25 para puntos cuánticos de diferentes formas con el valor máximo de la energía de enlace encontrado anteriormente para una donadora centrada en un punto cuántico esférico,  $8.13Ry^*$  [69].

Se ve que este valor en las estructuras casi-bidimensionales, en general, es menor que en un punto cuántico esférico, y solo en un disco con grosor de 4nm la energía de enlace en el pico se acerca al valor correspondiente en el punto cuántico esférico.

Comparando las curvas para las diferentes estructuras se puede ver en esta región que el efecto de desbordamiento de las funciones de onda en la región de la barrera debido al decrecimiento del radio del punto cuántico, ocurre primero en el cono, seguido de la lente y después en el disco. Como resultado, los cruces y la inversión del orden de las energías de enlace con el decrecimiento del radio de la base se pueden observar en las Figura 25.

A fin de estudiar el efecto de la posición de la donadora sobre la energía de enlace del estado base calculamos las energías de enlace del centro  $D^0$  localizado en diferentes lugares de los puntos cuánticos con seis formas geométricas diferentes. Los resultados del cálculo se muestran en forma de curvas en las Figuras 26 y 27 y en forma de líneas de niveles en la Figura 28.

Primero, se realiza el cálculo numérico de las energías de enlace de las donadoras ubicadas en los puntos con diferentes distancias  $\xi_\rho$  desde el eje y diferentes distancias  $\xi_z$  desde la base de la heteroestructura. En la Figura 26 se presentan los resultados del cálculo de las energías de enlace de las donadoras ubicadas sobre el plano de la base en función de la distancia desde su punto de ubicación hasta el eje para los puntos cuánticos de diferentes formas y con parámetros geométricos similares.

Como se puede ver, las energías de enlace en el cono, la lente y el disco decrecen cuando la donadora se desplaza desde el eje. Esto se debe al hecho que en estas estructuras el movimiento del electrón esta restringido principalmente cerca del eje independientemente de la posición de la donadora y por eso la separación electrón-donadora se incrementa cuando la donadora se desplaza desde el eje.

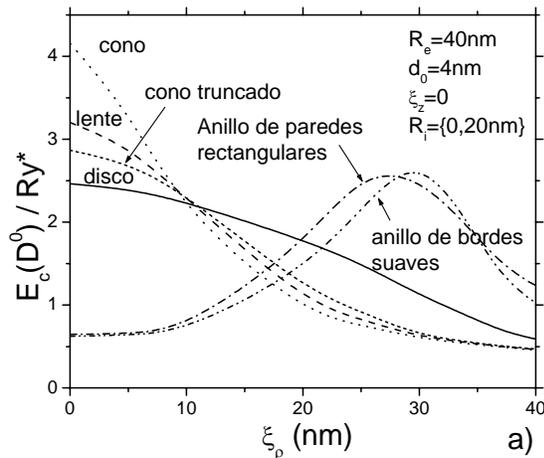
Es interesante anotar que la mayor energía de enlace para la posición de la donadora en las proximidades del eje ( $\xi_\rho \rightarrow 0$ ) corresponde al cono, seguido de la lente, el cono truncado y el disco, mientras que para la posición de la donadora lejos del eje este orden se invierte.

A fin de entender el cruce de las curvas se puede tener en cuenta que el mayor confinamiento se da para el cono seguido de la lente, el cono truncado y el disco. Por consiguiente, la separación entre la donadora y el electrón es más pequeña en

el cono, cuando la donadora se localiza próxima al eje e inversamente esta separación es más grande en el cono cuando en esta estructura la donadora se localiza lejos del eje.

También se puede ver que todas las curvas tienen el cruce en el mismo punto cuando la distancia de la donadora al eje es aproximadamente igual al radio de Bohr efectivo  $\approx 10 \text{ nm}$ . Esto significa que la separación promedio electrón-donadora para esta posición particular es similar en todas las estructuras y depende muy débilmente de la geometría del punto cuántico.

Figura 26. Energías de enlace del  $D^0$ , localizado sobre la base de los puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes formas como una función de la distancia desde su eje.



Además de la Figura 26 se puede ver que el comportamiento de las curvas para los anillos es diferente al de otras estructuras. Cuando la donadora está localizada cerca del eje la energía de enlace es muy pequeña debido a la gran separación entre la donadora y el electrón, el cual se sitúa principalmente dentro del anillo cerca del centro del pozo.

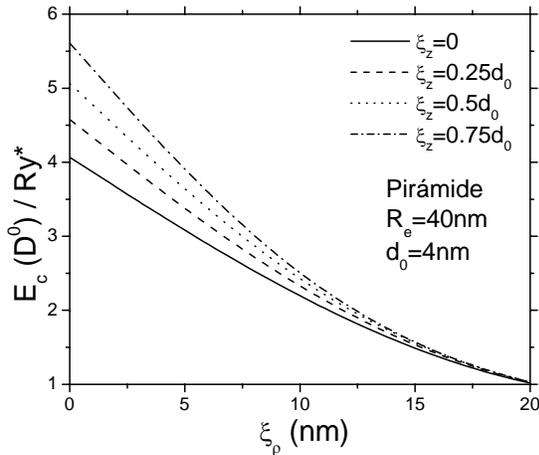
Cuando la donadora sigue desplazándose más adelante en la dirección de la barrera exterior la energía de enlace empieza a caer bastante rápido ya que la separación entre electrón y la donadora vuelve a crecer.

En Figura 27 se muestran las energías de enlace de las donadoras con diferentes distancias  $\xi_z$  desde la base de una pirámide cónica en función de la distancia  $\xi_\rho$ . De estas figuras se ve que las energías de enlace del centro  $D^0$  aumentan cuando la donadora se aparta de la base pero estas disminuyen a medida que

empieza a crecer la distancia entre la posición de la donadora y el eje  $\xi_\rho$ . Esto es debido al hecho que el confinamiento en la parte superior del cono, cerca del eje, es más fuerte que en la región cercana a la base y por consiguiente cuando la donadora se mueve hacia la parte superior del cono la separación entre los electrones y la donadora decrece.

Por otro lado, cuando la donadora  $D^0$  se desplaza desde el eje, la separación entre el electrón y el ión aumenta y la energía de enlace para grandes valores de  $\xi_\rho$ , independientemente de la distancia  $\xi_z$  desde la base, llega a ser aproximadamente igual a  $2/\xi_\rho$  (en unidades de  $Ry^*$ ), que corresponde a la energía de Coulomb de dos cargas puntuales con separación  $\xi_\rho$ . Esta es la razón por la que todas las curvas, para grandes valores de  $\xi_\rho$  y diferente  $\xi_z$  coinciden (Figura 27).

Figura 27. Energías de enlace del  $D^0$  en un cono como una función de la distancia desde el eje para diferentes valores de  $\xi_z$ .



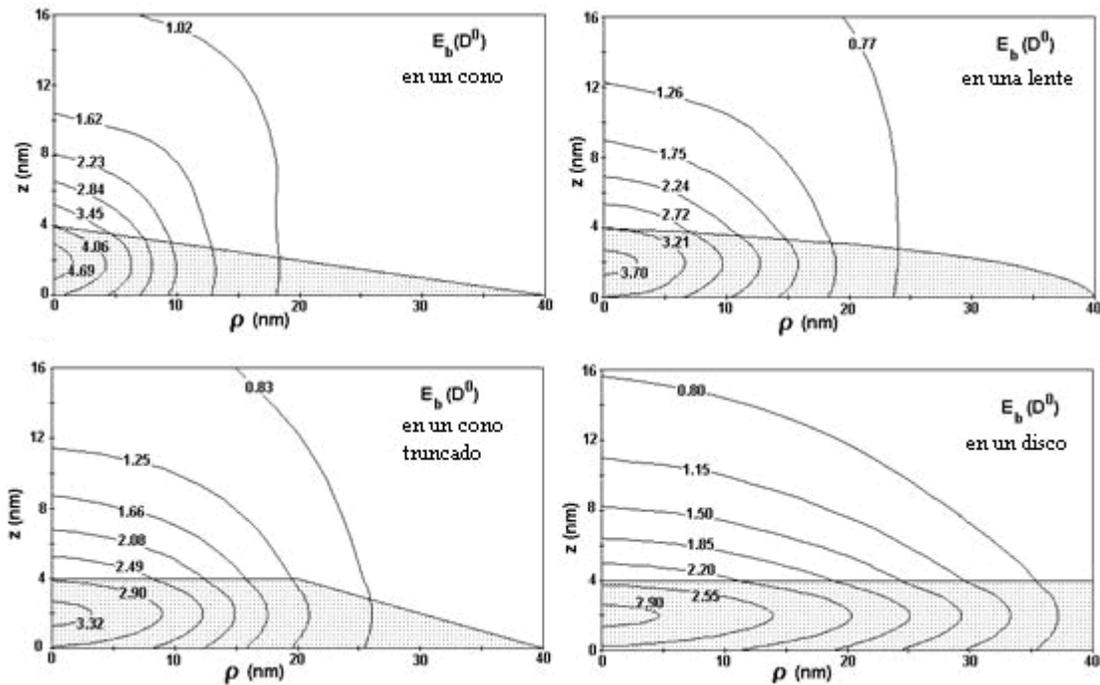
Para facilitar la interpretación de los resultados del cálculo para el centro  $D^0$  descentrado, en la Figura 28 se muestran los gráficos de contorno, los cuales corresponden a las líneas de nivel de las energías de enlace del centro  $D^0$ , con diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal en el centro del cono, lente y disco, perpendiculares a la dirección  $y$ .

Las partes sombreadas de las figuras indican la sección transversal de las estructuras correspondientes. Se ve la evolución que sufren las líneas de nivel

cuando varía la forma del punto cuántico de cono a disco (desde el gráfico del contorno superior al inferior).

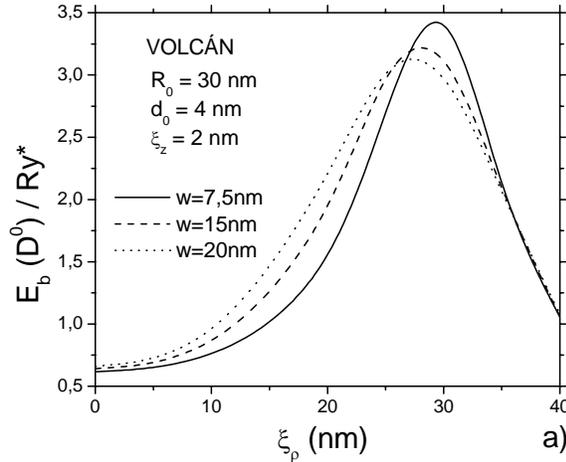
A lo largo de la dirección  $\rho$ , las líneas de nivel se vuelven más extendidas, debido al decrecimiento del confinamiento cuando la forma de los puntos cuánticos se cambia de cono a disco.

Figura 28. Gráficas de contorno de las energías de enlace de la donadora neutra correspondiente a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de simetría de los puntos cuánticos con diferentes perfiles.



En la Figura 29 se muestran las energías del estado base de la donadora neutra, en puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$ , en función de la distancia de la posición de la donadora desde el eje, las cuales son similares a las energías de enlace de la donadora neutra en los anillos. Inicialmente crecen, cuando las donadoras se mueven desde el eje al centro del pozo y alcanzan su máximo valor para la posición cerca del centro del pozo y después, cuando la donadora se desplaza hacia el exterior de la barrera, las energías de enlace comienzan a caer.

Figura 29. Energías del estado base de la donadora neutra  $D^0$  como una función de la distancia desde la posición de la donadora al eje en puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$ .



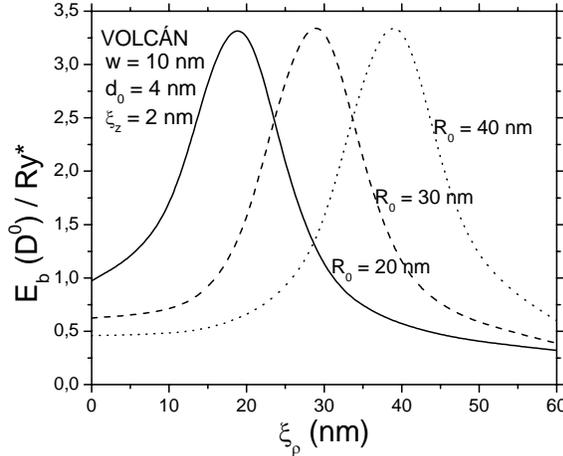
En las Figuras 29 y 30 se muestran las energías de enlace de los centros  $D^0$  con respecto a las distancias desde sus ejes cuando la donadora se localiza a 2nm sobre la base de los puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$  y valores fijos del radio  $R_0 = 30 \text{ nm}$  y del espesor  $d_0 = 4 \text{ nm}$ .

Como se ve en la Figura 29 el aumento del ancho de los volcanes produce una disminución de los picos y de sus desplazamientos hacia el eje.

El descenso de los picos se atribuye al decrecimiento del confinamiento con el aumento del ancho del volcán mientras que el desplazamiento del pico está relacionado con el aumento del tunelamiento del electrón hacia el eje en los volcanes más anchos.

En la Figura 30 se presentan la energía de enlace de una donadora neutra  $D^0$  en función de la distancia de su posición hasta el eje en un punto cuántico de forma de volcán con el mismo ancho, 10nm y diferentes radios  $R_0$ , 20, 30 y 40 nm. Cuando la donadora se mueve desde el eje ( $\xi_\rho = 0$ ) hasta la posición situada a una distancia  $\xi_\rho = 60 \text{ nm}$  desde el eje, se ve que las energías iniciales de enlace suben hasta alcanzar un máximo cuando  $\xi_\rho \approx R_0$ , Cuando se aumenta  $\xi_\rho$ , las energías de enlace empiezan a caer en picada.

Figura 30. Energía del estado base de una donadora neutra  $D^0$  en función de la distancia desde su posición hasta el eje en un punto cuántico de forma de volcán con diferentes radios  $R_0$ .



El aumento de  $R_0$  produce un desplazamiento del pico hacia la derecha. La posición del pico en todas las curvas, el cual corresponde a la menor separación entre la donadora y el electrón, se desplaza ligeramente de la parte superior del volcán hacia el eje. Esto es debido al hecho que la distribución de carga dentro del volcán es asimétrica y la probabilidad de tunelamiento en la región interior es mayor que en la barrera exterior.

### 3.3 ENERGÍA DE ENLACE DE UNA DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE EN UN PUNTO CUÁNTICO CON SIMETRÍA AXIAL [46, 47]

Las energías de enlace de la donadora cargada negativamente  $E_b(D^-)$  se define como:

$$E_b(D^-) = E(D^0) + E(e^-) - E(D^-) \quad (3.3.1)$$

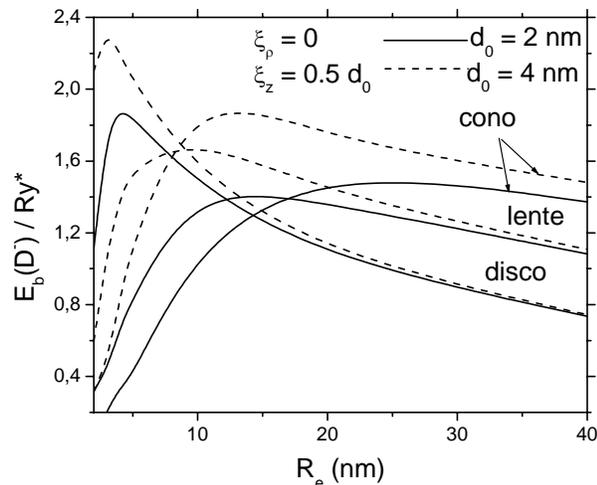
donde la energías del electrón,  $E(e^-)$  y de la donadora  $E(D^0)$  se calculan en el marco de la aproximación adiabática y de la dimensión fractal descritos en el párrafo 3.1. La energía de la donadora  $D^-$ , se encuentra utilizando la función de prueba de Hylleraas con tres parámetros y las fórmulas (3.1.17-3.1.19).

En la Figura 31 se muestra la energía de enlace del estado base del  $D^-$  localizado sobre el eje a la mitad de la altura ( $\xi_\rho = 0$ ,  $\xi_z = 0.5d_0$ ) de discos, lentes y pirámides cuánticas con alturas  $d_0$  de 2nm y 4nm, dependientes del radio de la base  $R_e$ . Las energías de enlace presentadas en esta figura se pueden comparar con los correspondientes valores de la energía de enlace del  $D^-$  en un bloque 3D,  $0.055Ry^*$  y en un bloque 2D,  $0.511Ry^*$  [65].

Cuando el radio del punto cuántico es muy grande las estructuras se pueden considerar como sistemas casi bidimensionales con un fuerte pero incompleto confinamiento en la dirección  $z$  debido a que el ancho del espesor no es exactamente igual a cero y la altura de la barrera no es infinita.

De todas maneras, se puede ver en todas las estructuras para radios grandes de los puntos cuánticos, que la energía de enlace del  $D^-$  tiende a un valor cercano a  $0.5Ry^*$  cuando el radio se hace muy grande. En el otro límite, cuando el radio del punto cuántico tiende a cero, los electrones se desbordan en la barrera y la configuración geométrica del  $D^-$  vuelve ser similar al átomo hidrogenoide tridimensional y la energía de enlace cae bruscamente hasta un valor muy pequeño igual a un valor alrededor de  $0.05Ry^*$  según los cálculos realizados.

Figura 31. Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente localizada en medio del eje de un disco, una lente y un cono en función del radio de la base  $R_e$ . Las líneas continuas corresponden a estructuras con espesor de 2nm y las líneas a trazos a un espesor de 4nm.



Comparando las curvas de la energía de enlace para las diferentes estructuras se puede ver que en la región donde los radios de la base son grandes, la energía

máxima de enlace se presenta en el cono y la energía de enlace más pequeña se presenta en el disco. Esto es debido al hecho que el mayor confinamiento en la dirección radial se produce en el cono, seguido de la lente y del disco, en el cual se produce el menor confinamiento.

Cuando los radios de los puntos cuánticos decrecen, las energías de enlace de las donadoras inicialmente crecen, hasta el momento en que la función de onda del electrón empieza a desbordar dentro de la región de la barrera, produciéndose un aumento en la separación del electrón y la donadora y una disminución de las energías de enlace.

En el límite cuando el radio del punto cuántico tiende a cero las donadoras restauran completamente su carácter tridimensional y las energías de enlace de la donadora cargada negativamente  $D^-$  tienden a sus correspondientes valores en un bloque tridimensional.

Comparando las curvas para diferentes estructuras se puede ver que el efecto de desbordamiento de las funciones de onda en la región de la barrera debido al decrecimiento del radio del punto cuántico, ocurre primero en el cono, seguido de la lente y después del disco. Como resultado, los cruces y la inversión del orden de las energías de enlace con el decrecimiento del radio de la base se pueden observar en las Figura 31 cuando los radios de los puntos cuánticos son del orden de un radio de Bohr efectivo.

Como se puede ver en las Figuras 25 y 31, el comportamiento de las curvas de la energía de enlace dependientes del radio de base es muy similar para ambos tipos de donadoras. Para los radios pequeños las curvas empiezan desde el valor correspondiente a la energía de una donadora tridimensional, después empieza a crecer llegando a un valor máximo y si el radio sigue aumentando, el valor de la energía vuelve a caer lentamente acercándose a un valor típico de la energía para una donadora bidimensional.

Se puede esperar que el valor máximo de las energías de enlace en estas curvas sirva como una característica para cada geometría. Por ejemplo, como fue encontrado que en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub> As este valor es igual a 8.13 Ry\* para la donadora neutra  $D^0$  y 2.4Ry\* para la donadora cargada negativamente  $D^-$  [53, 58].

El punto cuántico esférico es una estructura casi-cero-dimensional mientras que el punto cuántico auto-ensamblado es una estructura casi-bidimensional y es natural esperar que los valores máximos de las energías de enlace en las estructuras casi-bidimensionales sean más bajas. Esto se puede ver con claridad

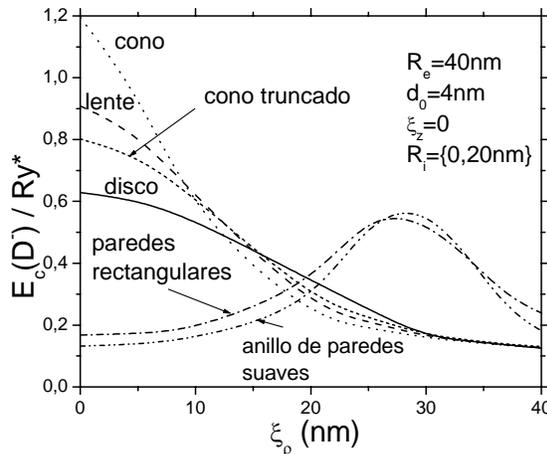
en las Figuras 25 y 31 donde solamente en el disco con espesor de 4nm, los picos de las energías de enlace de la donadora neutra  $D^0$  y de la donadora cargada negativamente  $D^-$  se aproximan a los valores del punto cuántico esférico.

Con el objeto de estudiar el efecto de la posición de la donadora sobre la energía de enlace del estado base, se calcularon las energías de enlace del centro  $D^-$  localizado en diferentes lugares de los puntos cuánticos con seis formas geométricas diferentes. Los resultados del cálculo se muestran en las Figuras 32 y 33 y en los gráficos de contorno de la Figura 34. Primero, se realizó el cálculo numérico de las energías de enlace de las donadoras ubicadas en los puntos con diferentes distancias  $\xi_\rho$  desde el eje y diferentes distancias  $\xi_z$  desde la base de la heteroestructura.

En Figura 32 se presentan los resultados del cálculo de las energías de enlace de las donadoras ubicadas sobre el plano de la base en función de la distancia desde su punto de ubicación hasta el eje, para los puntos cuánticos de diferentes formas y con parámetros geométricos similares.

Como se puede ver, las energías de enlace en un cono, una lente y un disco decrecen cuando la donadora se desplaza desde el eje. Esto se debe al hecho que en estas estructuras el movimiento del electrón está principalmente restringido cerca del eje, independientemente de la posición de la donadora y por eso la separación electrón-donadora se incrementa cuando la donadora se desplaza desde el eje.

Figura 32. Energías de enlace de un  $D^-$  localizado sobre la base de los puntos cuánticos auto-ensamblados de diferentes formas en función de la distancia desde el eje.



En Figura 32 se muestran las energías de enlace de las donadoras con diferentes distancias  $\xi_z$  desde la base de un cono en función de la distancia  $\xi_\rho$ .

Es interesante anotar que la mayor energía de enlace para la posición de la donadora en las proximidades del eje ( $\xi_\rho \rightarrow 0$ ) corresponde al cono, seguido de la lente, el cono truncado y el disco, mientras que para la posición de la donadora lejos del eje este orden se invierte.

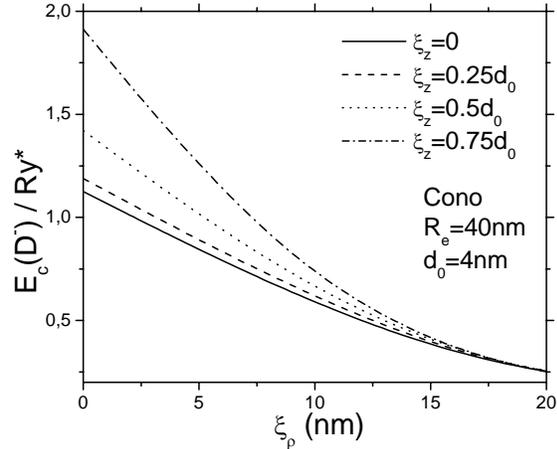
A fin de entender el cruce de las curvas se puede tener en cuenta que el mayor confinamiento se da para el cono seguido de la lente, el cono truncado y el disco. Por consiguiente, cuando la separación entre la donadora y el electrón es pequeña la donadora se localiza en el cono, próxima al eje e inversamente cuando esta separación es grande, en esta estructura, la donadora se localiza lejos del eje.

También se puede ver que todas las curvas tienen el cruce en el mismo punto cuando la distancia de la donadora al eje es aproximadamente igual al radio de Bohr efectivo  $\approx 10nm$ . Esto significa que la separación promedio electrón-donadora para esta posición particular es similar en todas las estructuras y depende muy débilmente de la geometría del punto cuántico.

De estas figuras se ve que las energías de enlace del centro  $D^-$  aumentan cuando la donadora se aparta de la base pero disminuyen a medida que empieza a crecer la distancia entre la posición de la donadora y el eje. Esto es debido a que el confinamiento en la parte superior del cono, cerca del eje, es más fuerte que en la región cercana a la base y por consiguiente, cuando la donadora se mueve hacia la parte superior del cono la separación entre los electrones y la donadora decrece.

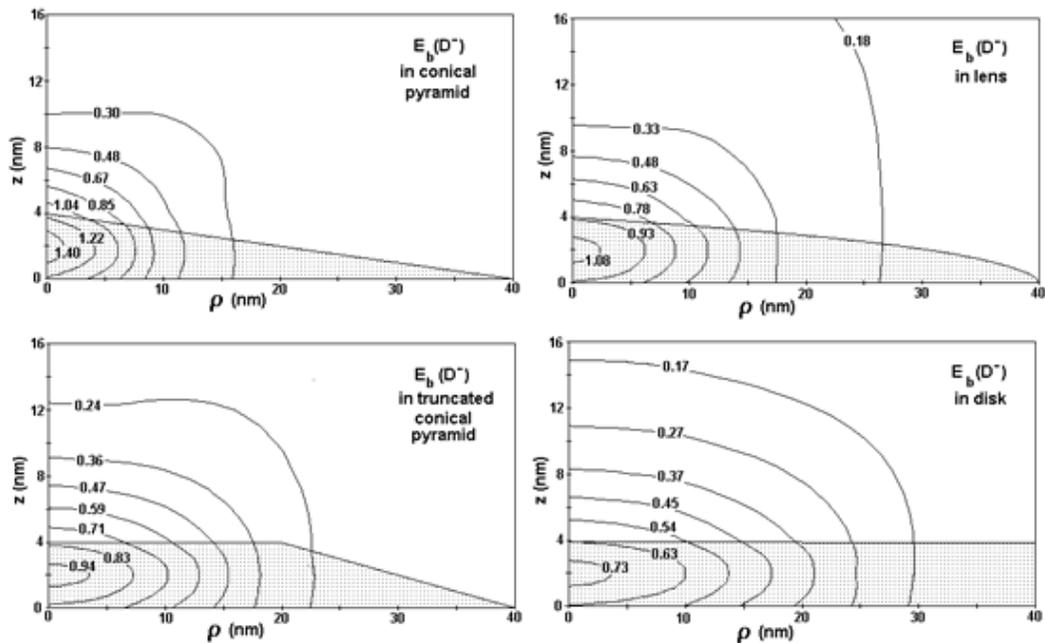
Cuando la donadora  $D^-$  se mueve desde el eje, la separación entre el electrón y el ión aumenta y la energía de enlace para grandes valores de  $\xi_\rho$ , independientemente de la distancia desde la base  $\xi_z$ , llega a ser aproximadamente igual a  $2/\xi_\rho$  (en unidades de  $Ry^*$ ), que corresponde a la energía de Coulomb de dos cargas puntuales con separación  $\xi_\rho$ . Esta es la razón por la que todas las curvas, para grandes valores de  $\xi_\rho$  y diferente  $\xi_z$  coinciden (Figura 33).

Figura 33. Energías de enlace del  $D^-$  en un cono en función de la distancia desde el eje para diferentes valores de  $\xi_z$ .



Para facilitar la interpretación de los resultados del cálculo para el centro  $D^-$  descentrado, en la Figura 34 se muestran los gráficos de contorno, los cuales corresponden a las líneas de nivel de las energías de enlace del centro  $D^-$ , con diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal en el centro del cono, lente y disco, perpendiculares a la dirección  $y$ .

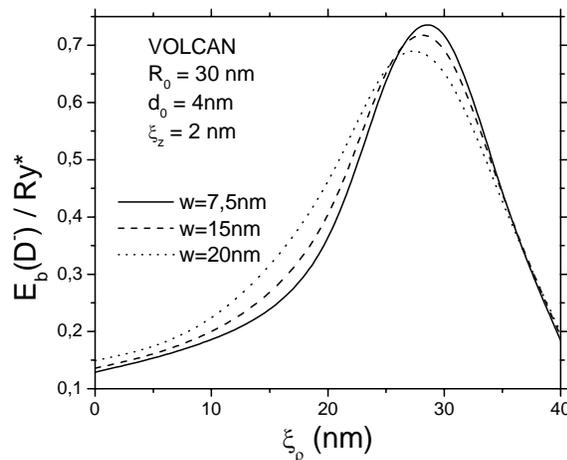
Figura 34. Gráficas de contorno de las energías de enlace de la donadora cargada negativamente correspondiente a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de simetría de los puntos cuánticos con diferentes perfiles.



Las partes sombreadas de las figuras indican la sección transversal de las estructuras correspondientes. Se ve la evolución que sufren las líneas de nivel cuando varía la forma del punto cuántico de cono a disco (desde el gráfico del contorno superior al inferior). A lo largo de la dirección  $\rho$ , las líneas de nivel se vuelven más extendidas, debido al decrecimiento del confinamiento cuando la forma de los puntos cuánticos de cambia de cono a disco.

Las Figuras 35 y 36 muestran las curvas de las energías de enlace del centro  $D^-$  con respecto a las distancias desde sus ejes cuando la donadora se localiza a 2nm sobre la base de los puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$  y valores fijos del radio  $R_0 = 30\text{ nm}$  y del espesor  $d_0 = 4\text{ nm}$ . Las curvas de la energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente  $D^-$  en función de la distancia de la posición de la donadora al eje de los puntos cuánticos en forma de volcán, mostradas en la Figura 35 son similares a las curvas de las energías de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente en un punto cuántico en forma de anillo, las energías de enlace inicialmente crecen cuando las donadoras se mueven desde el eje al centro del pozo, alcanzando su máximo valor para la posición cerca del centro del pozo y después, cuando la donadora se desplaza hacia el exterior de la barrera, las energías de enlace comienzan a caer.

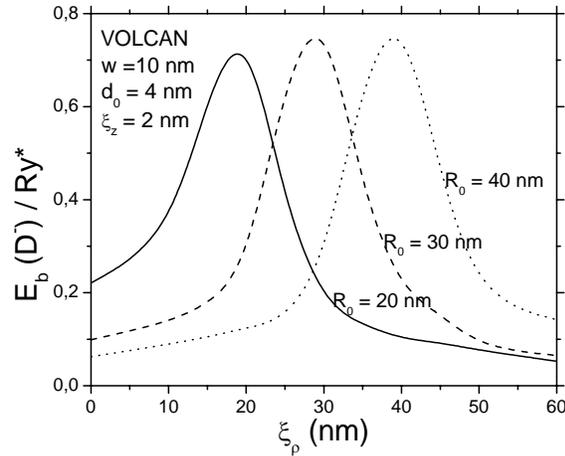
Figura 35. Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente  $D^-$  como una función de la distancia desde la posición de la donadora al eje en puntos cuánticos en forma de volcán con diferentes anchos  $w$ .



Como se ve en la Figura 35 el aumento del ancho de los volcanes produce una disminución de los picos y de sus desplazamientos hacia el eje. El descenso de los picos se atribuye al decrecimiento del confinamiento con el aumento del ancho del volcán mientras que el desplazamiento del pico está relacionado con el aumento del tunelamiento hacia el eje en los volcanes más anchos.

En la Figura 36, se presenta una dependencia similar de las energías de enlace entre los volcanes con 10nm de ancho, y diferentes radios  $R_0$ , 20, 30 y 40 nm.

Figura 36. Energía de enlace del estado base de una donadora cargada negativamente  $D^-$  como una función de la distancia desde el eje en puntos cuánticos de forma de volcán con diferentes radios  $R_0$ .

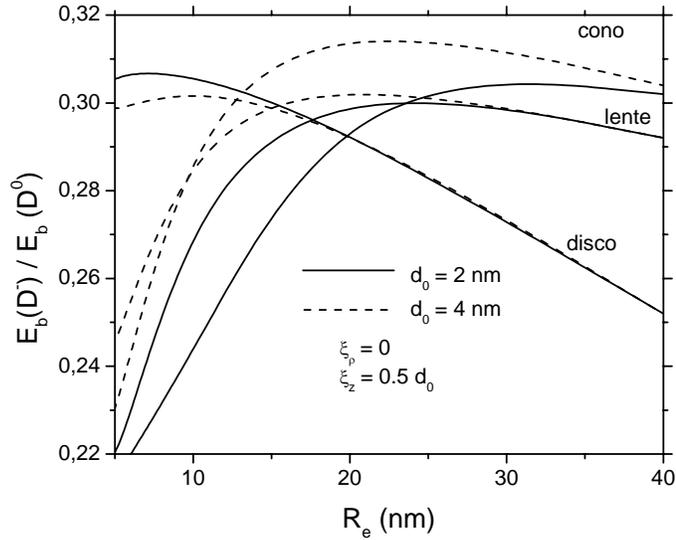


Cuando la donadora se mueve desde el eje ( $\xi_\rho = 0$ ) hasta la posición situada a una distancia  $\xi_\rho = 60$  nm desde el eje, se ve que las energías iniciales de enlace suben hasta alcanzar un máximo cuando  $\xi_\rho \approx R_0$ . Cuando se aumenta  $\xi_\rho$ , las energías de enlace empiezan a caer en picada. El aumento de  $R_0$  produce un desplazamiento del pico hacia la derecha.

La posición del pico en todas las curvas, el cual corresponde a la menor separación entre la donadora y el electrón, se desplaza ligeramente de la parte superior del volcán hacia el eje. Esto es debido al hecho que la distribución de carga dentro del volcán es asimétrica y la probabilidad de tunelamiento en la región interior es mayor que en la barrera exterior.

Con el fin de lograr un mayor entendimiento de las características dimensionales y el efecto de la forma sobre las energías de enlace de los centros  $D^0$  y  $D^-$  en los puntos cuánticos, en la Figura 37 se presenta el cociente de las energías de enlace  $\sigma = E_b(D^-) / E_b(D^0)$  del  $D^-$  a la del  $D^0$  como una función del radio de la base para el cono, la lente y el disco con dos diferentes espesores 2nm y 4nm.

Figura 37. Cociente  $\sigma = E_b(D^-)/E_b(D^0)$  como una función del radio de la base en un cono, una lente y un disco con dos diferentes espesores de 2nm (líneas continuas) y 4nm (líneas a trazos)



Para entender mejor el comportamiento de estas curvas se pueden comparar los datos en estas curvas con los valores obtenidos previamente mediante los métodos variacional y Monte Carlo, mostrados en la Tabla 6.

Tabla 6. Energías de enlace de la donadora neutra  $D^0$  y la donadora cargada negativamente  $D^-$  y los cocientes  $\sigma = E_b(D^-) / E_b(D^0)$  en tres dimensiones 3D, dos dimensiones 2D y en casi-una-dimensión Q1D (modeladas para donadoras en campos magnético muy fuertes) correspondiente a los máximos valores en bloque, en pozos cuánticos QW, en hilos cuánticos cilíndricos QWW y en puntos cuánticos esféricos SQD, con altura de barrera de  $40Ry^*$ .

Energía donadora	En bloque			Heteroestructuras con una altura de la barrera de $40 Ry^*$		
	3D	2D	Q1D	QW	QWW Cilíndrico	QD Esférico
$E_b(D^0)$	1 Ry*	4 Ry*	7.5 Ry* [57]	2.5 Ry* [53]	5.8 Ry* [53]	8.1 Ry* [58]
$E_b(D^-)$	0.055Ry*	0.51 Ry* [66]	1.5 Ry* [66]	0.32 Ry* [53]	1.2 Ry* [53]	2.4 Ry* [58]
$\sigma$	0.055	0.13	0.2	0.13	0.2	0.3

Para casos no confinados en 3D y 2D,  $\sigma$  es igual a 0.055 y 0.13 respectivamente de acuerdo al trabajo de Louie and Pang [56] (usando el método de Monte Carlo). En la tercera columna de la tabla (bajo el rótulo Q1D) se presentan los resultados para las energías de enlace y  $\sigma$  obtenidos a través de simulación del espacio casi-uni-dimensional aplicando un campo magnético extremadamente fuerte [57]. El Hamiltoniano para el estado base de una donadora en un fuerte campo magnético tiene la misma forma que para una donadora en un hilo cilíndrico con confinamiento parabólico. Por consiguiente, los resultados presentados en la tercera columna de la tabla se pueden interpretar como típicos para sistemas quasi-unidimensionales (Q1D).

Además en la Tabla 6 en las tres últimas columnas se presentan los valores de  $E_b(D^-)$ ,  $E_b(D^0)$  y  $\sigma$  para un pozo cuántico QW, un hilo cuántico cilíndrico QWW y un punto cuántico esférico SQD, con una barrera de alrededor de  $40Ry^*$  de altura y con los radios correspondientes al mayor confinamiento posible en estas estructuras, es decir, a los picos en las curvas de las energías de enlace en función del radio. En el artículo [58] se demostró y esto se puede ver en la Tabla 6 que los valores de  $\sigma$  dependen débilmente del cambio de la forma del potencial y los valores de  $\sigma$ , 0.3, 0.2, 0.13 y 0.05 pueden considerarse como típicos para las heteroestructuras 0D, 1D, 2D y 3D, respectivamente. De la Figura 37 se puede ver que el valor límite de  $\sigma$ , alrededor de 0.3 para la estructura 0D, también es válido para todos los puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs), independientemente de su forma geométrica. La razón  $\sigma$ , para todas las estructuras, cae abruptamente desde su valor máximo hasta el límite alrededor de 0.05, para el caso 3D de no confinamiento, cuando el radio de la base tiende a cero. En el otro límite, cuando el radio se hace grande,  $\sigma$  decrece en una forma monótona y tiende al límite del bloque 2D.

Otra pregunta muy interesante es ¿Cómo se cambia la dimensionalidad con el desplazamiento de la donadora desde el centro del punto cuántico hacia la región periférica? Se pudiera responder a esta pregunta comparando las líneas de niveles para las energías de enlace del  $D^0$  y  $D^-$  en las diferentes posiciones presentadas en las Figuras 28 y 34. Se puede ver que en la misma heteroestructura con el desplazamiento de la donadora hacia la región periférica se disminuyen no solo los valores de  $E_b(D^-)$  y de  $E_b(D^0)$  sino también su cociente  $\sigma$ .

Para asegurarse que durante este desplazamiento el valor  $\sigma$  decrece de su valor típico para estructuras 0D alrededor de 0.3 para donadoras centradas hasta un valor cercano a 0.2 típico para estructuras 1D cuando la localización de la donadora se aleja desde el eje. Esto se debe al hecho que el movimiento de los electrones está mayormente restringido cerca al eje de simetría, independientemente de la posición de la donadora y la configuración de la orbita

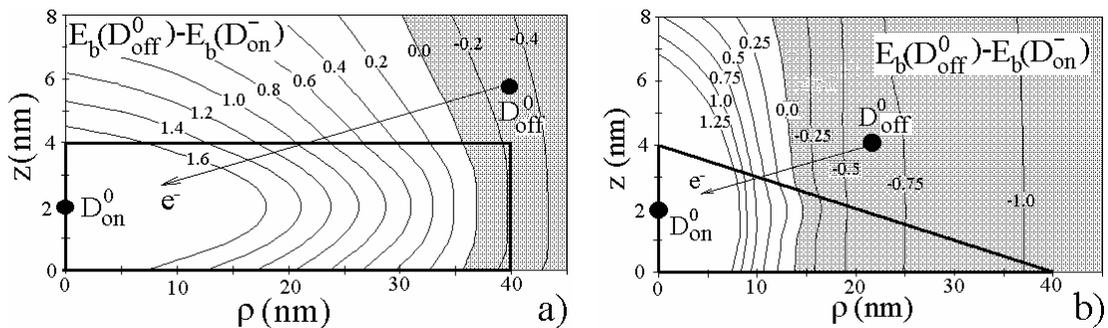
de los electrones llega a ser más y más alargada mientras la donadora se aleja del eje.

También se puede ver que en todas las estructuras las energías de enlace de los centros  $D_{on}^-$  sobre el eje, son mayores que los valores correspondientes a las energías de los centros  $D_{off}^0$  localizados en regiones periféricas.

Esto significa que el  $D_{on}^-$  sobre el eje está ligado más fuertemente que el  $D_{on}^0$  en la periferia y por consiguiente las donadoras neutras  $D_{on}^0$  localizadas cerca del eje pueden convertirse, con una probabilidad alta, en un ión  $D_{on}^-$  de acuerdo a la reacción  $D_{on}^0 + D_{off}^0 \rightarrow D_{on}^- + D_{off}^+$ . Esta reacción para dos donadoras en un pozo cuántico, una localizada en el pozo y otra en la barrera fue analizada en detalle por Larsen [59]. La energía necesaria para transferir el electrón entre donadoras centradas y descentradas separadas por la distancia  $r$  es igual a  $E_b(D_{off}^0) - E_b(D_{on}^-) - 2/r$  [Ry\*].

El último término en esta ecuación es la energía de interacción electrostática del ión positivo de la periferia y el ión negativo sobre el eje  $D_{on}^-$  formados en esta reacción. Entre más pequeña sea la diferencia  $E_b(D_{off}^0) - E_b(D_{on}^-)$ , más grande es la probabilidad para convertir una donadora neutra sobre el eje en un  $D_{on}^-$ .

Figura 38. Gráficas de contorno de la diferencia de las energías de enlace de las donadoras neutras descentradas con diferentes posiciones y las energías de enlace de las donadoras cargadas negativamente centradas en un plano a través del eje de simetría de a) el disco y b) el cono. Las partes sombreadas de las figuras indican las posiciones cuando las donadoras neutras son inestables con respecto a la transferencia del electrón a la donadora centrada.



En la Figura 38 se presentan las gráficas de contorno para estas diferencias, correspondientes a diferentes posiciones de la donadora descentrada (a) en el disco y (b) en el cono, cuando la donadora centrada está localizada en la mitad del eje de la heteroestructura.

Las partes sombreadas de las figuras indican las regiones donde la diferencia es negativa y la reacción correspondiente al electrón es exotérmica.

Comparando las figuras (a) y (b) se puede ver que la frontera de esta región en el cono está situada considerablemente más cerca al eje que en el disco. Esto se debe al hecho que el cono proporciona un confinamiento más fuerte y el valor de  $E_b(D_{off}^0)$  en el cono decrece más rápido cuando la donadora se mueve sobre el eje.

### 3.4 ESTADO BASE DE UN TRIÓN $X^-$ EN UN DISCO CUÁNTICO [45]

Para determinar el estado base de un trión  $X^-$  confinado en un disco cuántico de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  de altura  $d$  y radio  $R$ , para el caso típico en el que  $d/R \ll 1$ , se usó el método de aproximación adiabática, el cual permite separar los movimientos en las direcciones perpendicular y transversal del punto cuántico. Además se tuvo en cuenta que la masa efectiva del hueco en el material de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$  es esencialmente mayor que la masa efectiva del electrón, circunstancia esta que resulta más relevante en condiciones de confinamiento fuerte.

La primera consideración que se hace para el  $X^-$ , dentro del marco de la aproximación adiabática es que el vector posición del hueco  $\mathbf{p}_h$  está fijo y por consiguiente esta estructura se puede considerar como un  $D^-$  descentrado con un vector posición del ión dado por  $\mathbf{p}_h$  y cuyo Hamiltoniano  $H_{D^-}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h)$  se puede expresar en términos del Hamiltoniano de la donadora neutra descentrada  $H_{D0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h)$  y los Hamiltonianos uni-particulares del electrón y del hueco,  $H_{0e}(\mathbf{p}_e)$  y  $H_{0h}(\mathbf{p}_h)$ , como sigue:

$$\begin{aligned}
 H_{D^-}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) &= H_{D0}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_h) + H_{D0}(\mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) + 2/|\mathbf{p}_{e1} - \mathbf{p}_h|; \\
 H_{D0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) &= H_{0e}(\mathbf{p}_e) - 2/|\mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h|; \quad H_{0i}(\mathbf{p}_i) = -\eta_i \Delta_{\mathbf{p}_i} + \tilde{V}_i(\rho_i); \\
 \eta_i &= \mu / m_i^*; \quad \tilde{V}_i(\rho_i) = \tilde{V}_i \mathcal{G}(R - \rho_i); \quad i = e, h
 \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

donde  $\mathbf{p}_{e1}$ ,  $\mathbf{p}_{e2}$  son los vectores de posición de los electrones y  $\mathcal{G}(x)$  es la función de Heaviside.

Los Hamiltonianos del  $X^-$  y del  $X$  se pueden escribir en términos del Hamiltoniano del  $D^-$  y del  $D^0$  como sigue:

$$H_{X^-}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) = -\eta_h \Delta_{\rho_h} + \tilde{V}_h(\rho_h) + H_{D^-}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) \quad (3.4.2)$$

Análogamente el Hamiltoniano para el excitón  $X$  se puede expresar como:

$$H_X(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) = -\eta_h \Delta_{\rho_h} + \tilde{V}_h(\rho_h) + H_{D^0}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) \quad (3.4.3)$$

Las funciones propias de estos Hamiltonianos se buscan en la forma:

$$\psi_{X^-}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = \psi_{D^-}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) \phi_{X^-}(\rho_h) \quad (3.4.4)$$

$$\psi_X(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = \psi_{D^0}(\mathbf{p}_{e1}, \mathbf{p}_{e2}, \mathbf{p}_h) \phi_X(\rho_h) \quad (3.4.5)$$

Donde  $\phi_{X^-}(\rho_h)$  y  $\phi_X(\rho_h)$  son las soluciones de los problemas de campo central:

$$-\eta_h \Delta_{\rho_h} \phi_{X^-}(\rho_h) + [\tilde{V}_h(\rho_h) + E_{D^-}(\rho_h)] \phi_{X^-}(\rho_h) = E_{X^-} \phi_{X^-}(\rho_h) \quad (3.4.6)$$

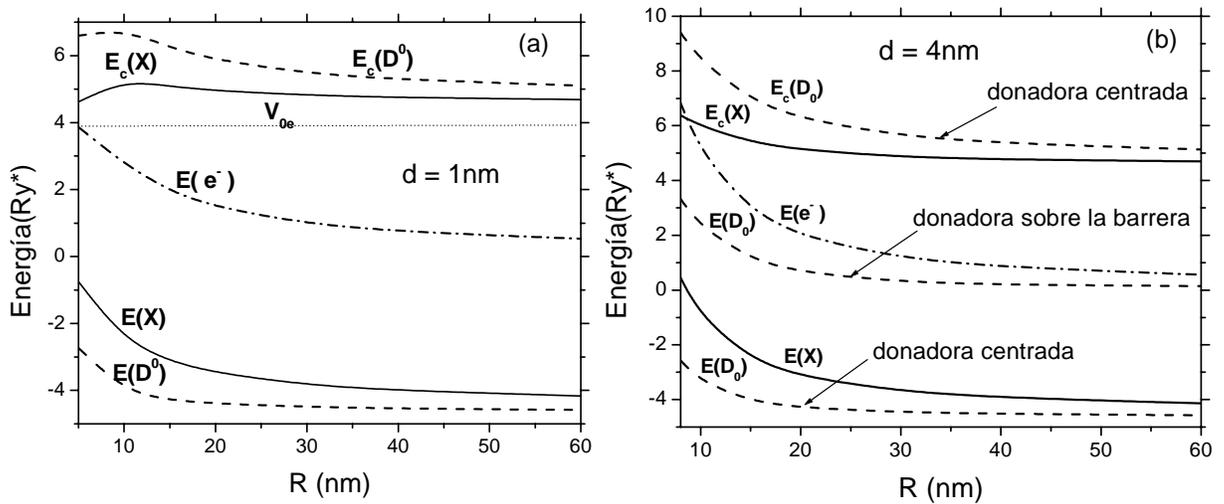
$$-\eta_h \Delta_{\rho_h} \phi_X(\rho_h) + [\tilde{V}_h(\rho_h) + E_{D^0}(\rho_h)] \phi_X(\rho_h) = E_X \phi_X(\rho_h) \quad (3.4.7)$$

donde  $E_{X^-}$  y  $E_X$  son las energías del estado base del trión y del exciton, las cuales se encuentra resolviendo las ecuaciones (3.4.6) y (3.4.7) mediante el método de barrido trigonométrico.

En la Figura 39 se presentan las energías de un electrón desacoplado,  $E(e^-)$  (líneas de puntos y rayas) una donadora neutra centrada y sobre la barrera  $E(D^0)$  (líneas a trazos) y un exciton neutro  $E(X)$  (líneas continuas) dependientes del radio para dos diferentes alturas del disco.

Las energías de correlación definidas como  $E_c(D^0) = E(e^-) - E(D^0)$  para la donadora neutra centrada y  $E_c(X) = E(e^-) - E(X)$  para el excitón neutro se muestran en la Figura 39.

Figura 39. Energías del electrón libre  $E(e^-)$  (líneas con puntos y rayas), de las donadoras en el centro y sobre la barrera  $E(D^0)$  (líneas a trazos), del hueco  $E(X)$  (línea continuas) y las energías de correlación correspondientes  $E_c(D^0)$  y  $E_c(X)$  como funciones del radio del disco cuántico para dos alturas diferentes del disco, a)  $d = 1\text{nm}$ , y b)  $d = 4\text{nm}$ .



Las energías de correlación del excitón  $E_c(X)$  presentadas en la Figura 39 son siempre menores que los correspondientes valores  $E_c(D^0)$  y ellas tienen una asíntota correcta para radios grandes del disco tendiendo a  $4\text{Ry}^*$  que es el valor de la energía de enlace para los excitones libres en 2D.

Las energías de las donadoras neutras con diferentes posiciones dentro del disco cuántico forman una banda llena de estados entre dos líneas a trazos correspondientes a la donadora en el centro y sobre la barrera (Figura 39(b)). Como se ve en la Figura 39(b) el nivel de energía más bajo del excitón siempre se localiza dentro de esta banda.

Generalmente cuando el radio del disco tiende a cero las energías de enlace de los estados ligados crecen debido al decrecimiento de la separación interparticular. Sin embargo para el disco con una altura de  $1\text{nm}$  (Figura 39(a)) cuando el radio del disco llega a ser menor que  $10\text{nm}$ , las energías de correlación de ambos del  $D^0$

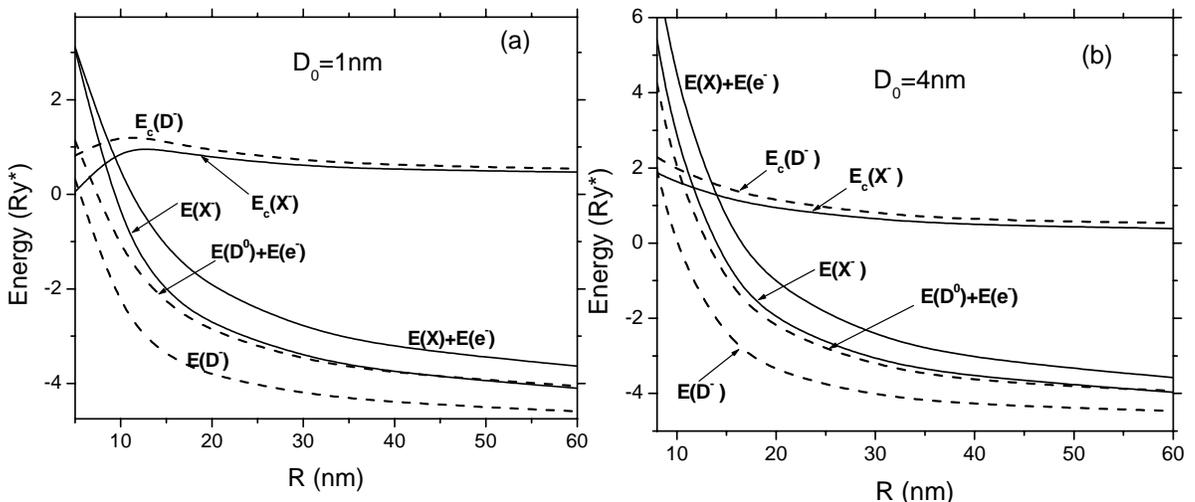
y del excitón X empiezan a caer como resultado del desbordamiento de la función de onda en la dirección lateral dentro de las regiones de la barrera.

Cuando el radio del disco decrece, las funciones de onda del excitón restauran el carácter bidimensional y la energía de correlación empieza a decrecer tendiendo otra vez al límite bidimensional, 4 Ry.

En la Figura 40 se muestran las energías de una donadora centrada cargada negativamente  $E(D^-)$  (líneas a trazos), el trión  $E(X^-)$  (líneas continuas), la donadora neutra centrada con el electrón desacoplado  $E(D^0)+E(e^-)$  (líneas a trazos) y el excitón neutro con el electrón desacoplado  $E(X)+E(e^-)$  (líneas continuas) dependientes del radio del disco cuántico. Adicionalmente se muestran las energías de correlación de los estados acoplados  $E_c(D^-) = E(D^0) + E(e^-) - E(D^-)$  de una donadora centrada cargada negativamente y la energía de correlación de un trión  $E_c(X^-) = E(X) + E(e^-) - E(X^-)$ .

Estos valores se pueden asociar con las energías de enlace de los correspondientes sistemas cuando el radio del disco cuántico tiende a infinito. Las energías de correlación del  $D^-$  presentadas en la Figura 40 tienen un asintota correcta para discos de radios grandes y tienden a  $0.48Ry^*$ , correspondiendo al valor bien conocido del ión negativo del hidrógeno 2D [66]. Se puede ver que el comportamiento de las curvas de las energías de correlación en discos cuánticos con alturas 1nm (Figura 40(a)) y 4nm (Figura 40(b)) en la región de pequeños radios del disco es diferente.

Figura 40. Energías de la donadora cargada negativamente  $D^-$  y del trión  $X^-$  como una función del radio del disco cuántico comparadas con las respectivas energías de la donadora neutra  $D^0$  y del excitón X con el electrón libre para dos alturas diferentes del punto cuántico: a) 1nm y b) 4nm.



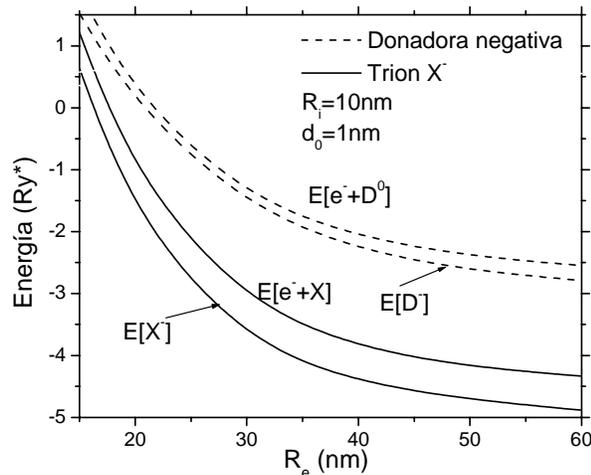
En el primer caso (Figura 40(a)) las curvas de las energías de correlación tienen un máximo debido al desbordamiento de la función de onda en la región de la barrera cuando ambos la donadora cargada negativamente y el trión restauran su carácter 2D. Cuando el radio del disco tiende a cero la energía de correlación del  $D^-$  decrece desde su máximo valor  $\approx 1.25 Ry^*$  a  $0.48 Ry^*$ , mientras que la energía de correlación del trión decrece desde  $1 Ry^*$  hasta casi cero siendo siempre menor que la energía de enlace del  $D^-$ .

### 3.5 ESTADO BASE DE UN TRIÓN $X^-$ EN UN ANILLO CUÁNTICO [45]

La misma técnica que se utilizó en el párrafo anterior se puede aplicar para analizar el estado base de un trión confinado en un anillo. La diferencia consiste solo en la forma del potencial de confinamiento.

En la Figura 41 se muestran las curvas obtenidas para las energías de la donadora cargada negativamente  $E(D^-)$  (línea a trazos), del trión  $E[X^-]$  (línea continua), de la donadora neutra en el centro con el electrón desacoplado  $E[D^0 + e^-]$  (línea a trazos) y el excitón neutro con electrón desacoplado  $E[X + e^-]$  (línea continua) dependientes del radio exterior del anillo cuántico.

Figura 41. Energías laterales del  $D^-$  y del  $X^-$  como funciones del radio exterior del anillo cuántico de  $In_{0.55}Ga_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$  comparadas con las respectivas energías del  $D^0$  y del  $X$  con un electrón desacoplado. La altura y el radio interior del anillo son iguales a  $1nm$  y  $10nm$ , respectivamente.



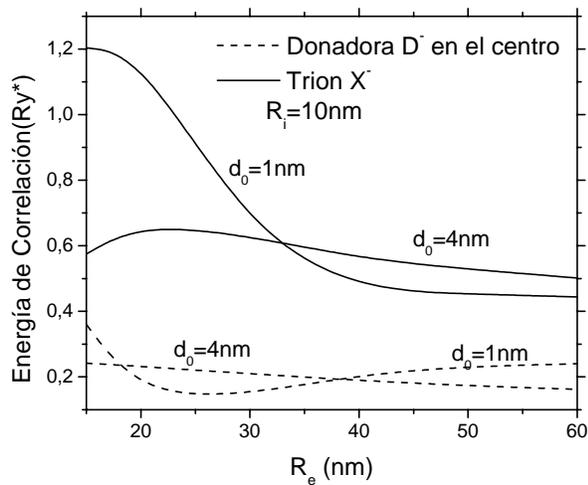
Se ve que las energías de la donadora cargada negativamente y del excitón cargado negativamente decrecen suavemente con el incremento del radio exterior siendo siempre menores que las energías de los sistemas no ligados.

El cálculo de las energías de correlación de los estados acoplados definidos como  $E_c(D^-) = E(e^-) + E(D^0) - E(D^-)$  para la donadora cargada negativamente y como  $E_c(X^-) = E(e^-) + E(X) - E(X^-)$  para el trión.

Las energías de correlación definidas en tal forma se pueden asociar a las energías de enlace de los sistemas correspondientes cuando el radio del anillo cuántico exterior tiende a infinito y el radio interior tiende a cero. Los resultados del cálculo para la energía de correlación en anillos cuánticos con radio interior 10nm y espesores 1nm y 4nm se presentan en la Figura 42.

En la Figura 42 se ve que la energía de correlación del  $X^-$  tiene una asíntota correcta para grandes valores del radio del anillo y tiende a  $0.48Ry^*$ , que corresponde al valor de la energía del átomo hidrogenoide 2D. También se puede apreciar que la energía de correlación del  $D^-$  siempre es menor que el valor correspondiente al  $X^-$  debido al hecho que la carga positiva esta localizada dentro de la región del núcleo repulsivo solamente accesible por los electrones cuando el potencial de confinamiento es muy fuerte.

Figura 42. Energías de correlación del  $D^-$  y el  $X^-$  como funciones del radio exterior del anillo cuántico de  $In_{0.55}Ga_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ .



El diferente comportamiento de las curvas correspondientes a los anillos con espesores de 1nm y 4nm es debido a la interrelación de los efectos de

tunelamiento en la región central, el confinamiento y las interacciones electrostáticas.

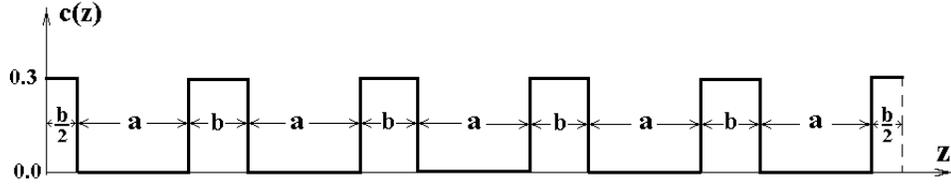
### **3.6 DONADORA EN SUPERREDES CILÍNDRICAS [48]**

Las superredes nanométricas sintetizadas a partir de los elementos de los grupos III y V constituyen un nuevo tipo de heteroestructura. Las mediciones de fotoluminiscencia y de electroluminiscencia muestran que las propiedades fotónicas y electrónicas de estas superredes sugieren un amplio rango de aplicaciones potenciales que incluyen los LEDs polarizados de nanoescala. Variando la composición y los parámetros geométricos de estas estructuras es posible modificar sus propiedades, definidas por la interacción entre el confinamiento de las partículas dentro del mismo pozo, el tunelamiento a través de la barrera entre los pozos vecinos y la interacción entre las partículas. Estas propiedades pueden cambiarse en forma controlada desde la típica para estructuras cuasi-unidimensionales realizadas en nanosuperredes angostas con barreras bajas a las típicas para un conjunto de puntos cuánticos autoensamblados acoplados verticalmente, cuando el radio de la superred es grande y las barreras son altas. Una de estas características que puede ser cambiada en forma controlada es la distribución de carga dentro de la superred con uno, dos o más portadores de carga capturados. Se puede esperar que la distribución de carga podría repetir la modulación de la composición siendo mayor en el centro de los pozos y menor dentro de las barreras, cuando el confinamiento es predominante y tiende a ser más homogénea cuando el tunelamiento o la repulsión de las partículas prevalece. El efecto del confinamiento sobre el espectro de energía y la distribución de carga en la nanosuperred con un solo electrón fué estudiada recientemente usando diferentes métodos [77].

Los problemas similares, más complicados, para dos electrones en una nanosuperred, para donadoras neutras  $D^0$  y negativamente cargadas  $D^-$  en una superred, hasta ahora no se han considerado. Sin embargo, se podría esperar que el espectro de energía y la distribución de carga de los sistemas de pocas partículas dentro de una nanosuperred, definida por la interacción de la reducción de la dimensión física, del tunelamiento entre los pozos, de la atracción de Coulomb y de la correlación interparticular, puedan ser esencialmente modificados y enriquecidos. Los resultados del cálculo de la energía del estado base de la nanosuperred con una sola donadora neutra o cargada negativamente, han sido obtenidos mediante el uso del método de dimensión fractal, elaborado previamente para resolver esos tipos de problemas en una heteroestructura [64] y se han aplicado recientemente para el análisis del estado base de las donadoras en puntos cuánticos autoensamblados.

El modelo que hemos considerado consiste en una nanosuperred con sección transversal cilíndrica de radio  $R$ , con una concentración variable de Al,  $c(z)$  a lo largo de la dirección de crecimiento  $z$ , la cual es cero dentro de  $n$  pozos idénticos con ancho  $a$  y  $x$  en las  $n+1$  barreras. El ancho de las  $n-1$  barreras entre los pozos es igual a  $b$  y el ancho de las barreras en los extremos de la nanosuperred es  $b/2$ . La concentración de Al a lo largo del eje  $z$  es como se muestra en la heteroestructura de la Figura 43. El potencial de confinamiento debido a la discontinuidad de la banda de conducción en las uniones está dado por una función seccionalmente constante  $V(\rho, z)$ , igual en las barreras a  $V_0 = 0.6(1.36x + 0.22x^2)$  eV [118], a cero en los pozos y a infinito fuera de la nanosuperred.

Figura 43. Concentración de la distribución de Al a lo largo del eje  $z$  de la nanosuperred.



La ecuación de Schrödinger de una partícula para tal potencial es completamente separable y la función de onda del estado base  $f_0(\mathbf{r})$  y la energía  $E_0$  están dadas por:

$$f_0(\mathbf{r}) = f_z(z)f_\rho(\rho); \quad E_0 = E_z + E_\rho \quad (3.6.1)$$

donde  $E_z$  y  $f_z(z)$  son la energía del nivel más bajo y la función de onda correspondiente al potencial periódico unidimensional en la dirección de crecimiento, que se encuentran usando el método de la matriz de transferencia [9].

La energía  $E_\rho = 2.405/R^2$  y la función de onda  $f_\rho(\rho) = J_0(2.405\rho/R)$  corresponden a la bien conocida solución de la ecuación de Schrödinger para el estado base del electrón dentro de un pozo cuántico bidimensional de barrera infinita, donde  $J_0(x)$  es la función de Bessel.

Para encontrar las funciones de onda del estado base  $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$ , para la donadora neutra y para la donadora cargada negativamente en una nanosuperred, correspondientes a las energías más bajas  $E(D^0)$  y  $E(D^-)$ , se usaron las funciones de prueba tipo Bastard [133] y tipo Hylleraas [132] respectivamente:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r})\Phi_{D^0}(|\mathbf{r}-\xi|), \quad \Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_0(\mathbf{r}_1)f_0(\mathbf{r}_2)\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|, |\mathbf{r}_2-\xi|, r_{12}) \quad (3.6.2)$$

donde  $\xi$  y  $\mathbf{r}_i$  ( $i=1,2$ ) son los vectores de posición del ión y de los electrones, respectivamente.

Como se demostró en [64], las funciones de prueba (3.6.2) satisfacen el principio variacional de Schrödinger, si las funciones envolventes  $\Phi_{D^0}$  y  $\Phi_{D^-}$  son soluciones de la ecuación de onda modificada para el átomo de H y del ión cargado negativamente  $H^-$ , respectivamente, en un espacio homogéneo en el que la parte radial  $r^2$  del Jacobiano tridimensional debido al confinamiento es reemplazado por la expresión:

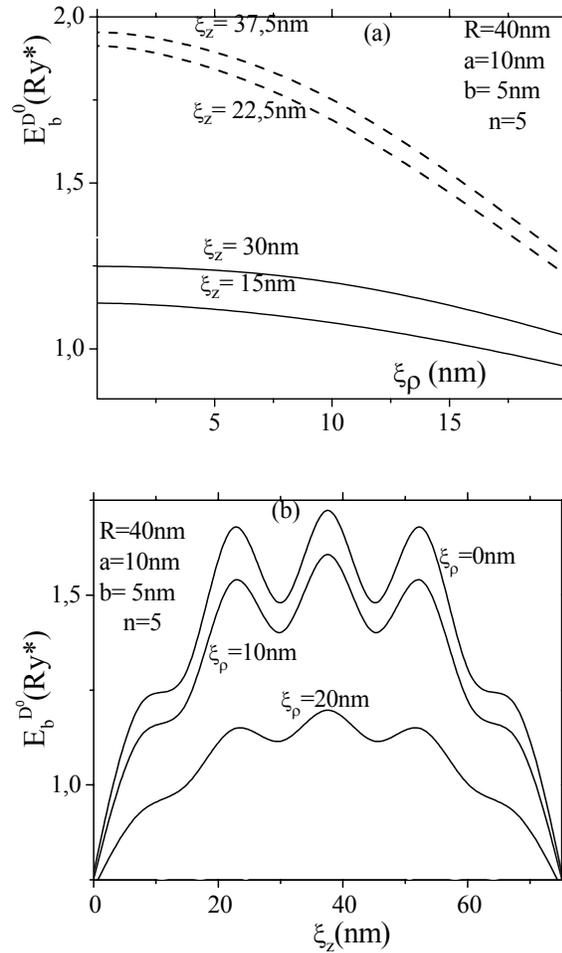
$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi f_\rho^2 \left( \sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \xi_\rho^2 + 2r\xi_\rho \sin \theta \cos \varphi} \right) f_z^2 (r \cos \theta - \xi_z) \sin \theta d\theta \quad (3.6.3)$$

Aquí  $\xi_\rho$  y  $\xi_z$  son las distancias desde la posición de la donadora al eje y a la base, respectivamente. Una vez se define la función de onda del electrón libre (3.6.1), la dependencia del Jacobiano sobre  $r$  se puede encontrar directamente mediante el cálculo numérico de esta integral y después se pueden obtener las energías del estado base del  $D^0$  y del  $D^-$ , siguiendo el procedimiento numérico descrito en la Referencia [64]. En los cálculos realizados se encuentra la función envolvente  $\Phi_{D^0}$  y la correspondiente energía del estado base para una donadora neutra  $E(D^0)$ , usando el procedimiento de barrido trigonométrico [46] y se escoge como función de prueba  $\Phi_{D^-}$  una función variacional de tres parámetros de Hylleraas, a fin de estimar la energía del estado base de una donadora cargada negativamente  $E(D^-)$ .

Se consideró una nanorred de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As que tiene un radio  $R = 40nm$  y que consiste de  $n = 5$  pozos idénticos de ancho  $a = 10nm$  separados barreras de ancho  $b = 5nm$ . Las energías de enlace del  $D^0$ ,  $E_b(D^0)$  y del  $D^-$ ,  $E_b(D^-)$  localizadas en diferentes partes de la nanorred, se definen como  $E_b(D^0) = E(e^-) - E(D^0)$ ;  $E_b(D^-) = E(D^0) + E(e^-) - E(D^-)$ . Los resultados de los cálculos se presentan en las Figuras 44 y 46, donde las energías de enlace son medidas en unidades de Rydberg efectivo, donde  $1 Ry^*$  es igual a  $5.83 meV$  para el material de GaAs.

Primero se realiza el cálculo numérico para las donadoras neutras localizadas en diferentes posiciones dentro de la nanorred. Algunos resultados de este cálculo se muestran en la Figura 44.

Figura 44. Energías del estado base de la donadora  $D^0$  en función de la distancia desde (a) El eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje  $z$  y (b) La base de la NWSL para diferentes distancias desde el eje.



En la Figura 44(a) se presentan las energías de enlace dependientes de la distancia desde la posición de la donadora al eje de la nanorred  $\xi_\rho$ , para donadoras localizadas en cuatro secciones transversales diferentes, perpendiculares al eje y espaciadas la distancia  $\xi_z$  desde el plano de la base de la superred.

Las líneas sólidas en la Figura 44(a) corresponden a las secciones transversales en el centro de la barrera y las punteadas al centro del pozo. El decrecimiento de las energías de enlace, cuando la donadora es desplazada desde el eje a la distancia media entre los electrones y el ión, aumenta mientras que la energía de enlace decrece.

También se puede ver que las energías de enlace de las donadoras localizadas dentro del pozo son mayores que los correspondientes valores para las donadoras localizadas en las barreras. Además, entre más cerca está la barrera o el pozo a la mitad de la nanorred mayor es la energía de enlace de la donadora situada dentro de ella.

En la Figura 44(b) se presentan las curvas obtenidas de las energías de enlace de las donadoras centradas sobre el eje ( $\xi_p = 0$ ) y descentradas sobre el eje ( $\xi_p = 10nm$  y  $\xi_p = 20nm$ ) en función de la distancia  $\xi_z$  desde la base de la nanosuperred.

Cuando la donadora es desplazada desde de la mitad hacia uno de los extremos de la nanosuperred la energía de la donadora en promedio decrece, pero su decrecimiento es muy suave. Tal comportamiento de la energía de enlace está relacionado con la densidad de probabilidad de encontrar el electrón en diferentes partes de la nanosuperred.

Entre mayor sea la probabilidad de encontrar un electrón en el lugar en que se localiza una donadora, más fuerte es la atracción entre el electrón y el ión y mayor es la energía de enlace. La mayor probabilidad de encontrar el electrón es en la mitad del pozo central y por consiguiente en este punto la energía de enlace es máxima.

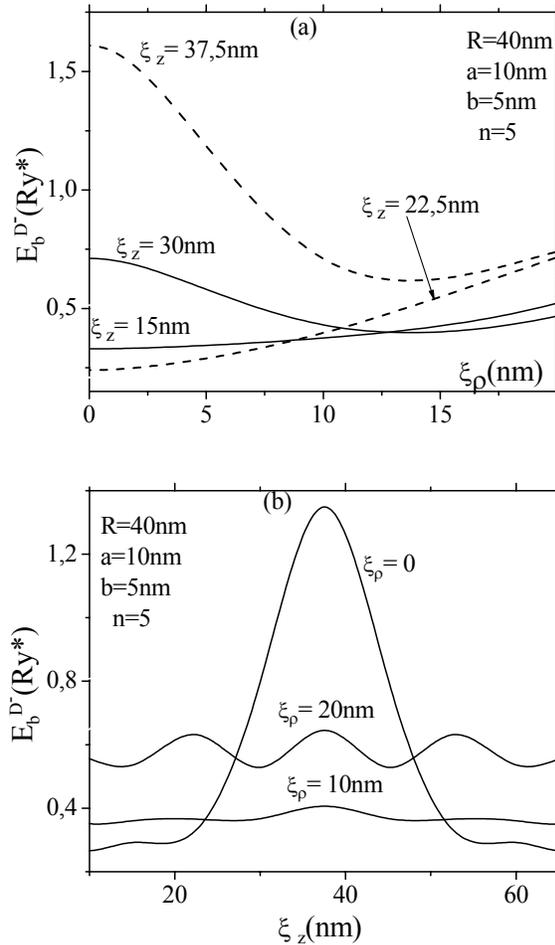
Cuando la donadora es desplazada hacia un extremo de la nanosuperred, la energía de enlace de la donadora,  $E_b^{D0}$  cae debido al incremento de la separación promedio entre el electrón y el ión, mientras  $E_b^{D0}$  alcanza un mínimo situado en el centro de las dos primeras barreras adyacentes, donde la probabilidad de encontrar el electrón es esencialmente más pequeña que en el pozo.

Cuando la donadora es desplazada hacia la nanosuperred y además entre los pozos vecinos la energía de enlace aumenta hasta que la donadora alcanza el centro de este pozo.

Cuando la densidad en los pozos vecinos es más pequeña que en el pozo central el nuevo máximo local es menor que el pico principal.

Finalmente, cuando la donadora alcanza el extremo de la nanosuperred la separación promedio entre el electrón y el ión se hace máxima y la energía de enlace llega a ser significativamente más pequeña que para una donadora localizada en la mitad de la nanosuperred.

Figura 45. Energías del estado base del  $D^-$  en función de la distancia desde (a) el eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje  $z$ , y (b) la base de la NWSL para diferentes distancias desde el eje.



Curvas similares de la energía de enlace de una donadora cargada negativamente  $E_b^{D^-}$ , se muestran en las Figuras 45(a, b).

Se puede ver que la forma de las curvas de la energía de enlace de la donadora cargada negativamente  $E_b^{D^-}$ , difiere esencialmente de la forma de las curvas de la energía de enlace de la donadora neutra  $E_b^{D^0}$ . Por ejemplo la energía de enlace  $E_b^{D^-}$  dependiente de la distancia al eje  $\xi_\rho$ , para donadoras situadas próximas a la mitad de la nanosuperred no es una función monótona decreciente como ocurre para  $E_b^{D^0}$ , pero tiene un mínimo cuando la distancia desde el eje alcanza un valor que excede el radio efectivo de Bohr ( $\approx 10nm$ ).

También se puede ver que la forma de las curvas de la energía de enlace de la donadora cargada negativamente  $E_b^{D^-}$  en función de la distancia desde el extremo de la nanosuperred  $\xi_z$ , tiene un carácter suave y no tan pronunciado como ocurre para la función de la energía de la donadora neutra  $E_b^{D^0}$ . Esto es debido al efecto de correlación que tiende a separar los electrones proporcionando varias opciones de minimizar la energía de dos electrones localizados dentro de diferentes pozos.

Para facilitar la interpretación del cálculo de los resultados para los centros  $D^0$  y  $D^-$  en la Figura 46 se muestran las gráficas de contorno, correspondientes a las líneas de nivel del  $D^0$  y del  $D^-$  para diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal a través del eje de simetría de la nanosuperred.

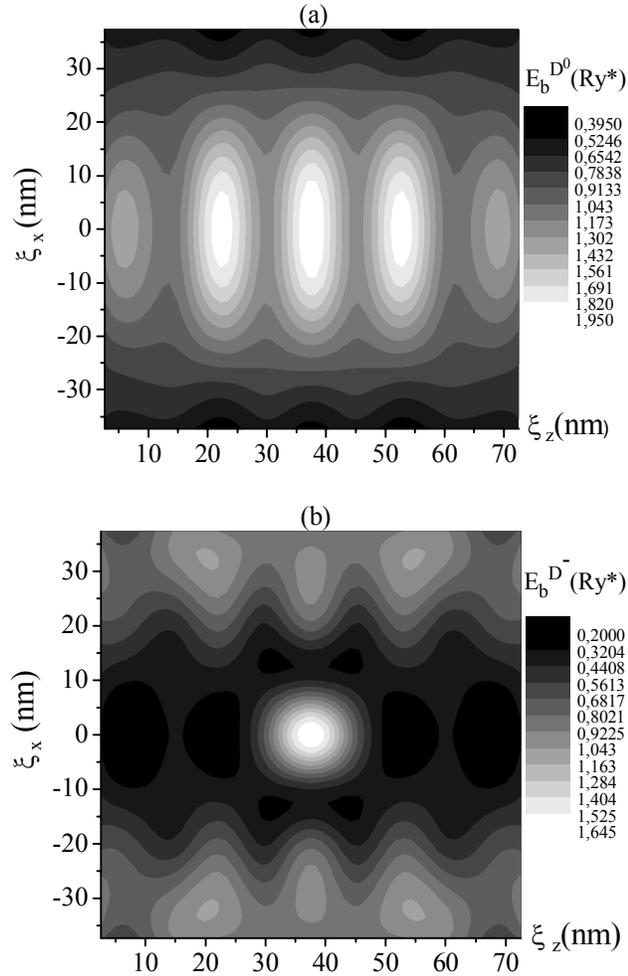
En la Figura 46, un mayor brillo indica una mayor energía de enlace y viceversa. Como se ve de la Figura 46(a) el mayor brillo lo tienen las líneas dentro del pozo y este aumenta desde el extremo del pozo al centro del pozo.

También, las líneas oscuras aumentan a ambos lados de los pozos y de las barreras disminuyendo desde el eje.

El comportamiento de las líneas de nivel para el centro  $D^-$  presentadas en la Figura 46(b) es diferente del  $D^0$  presentado en la Figura 46(a).

En la Figura 46(b) hay dos conjuntos desconectados de líneas de nivel brillantes, correspondientes a las mayores energías de enlace, una próxima al centro de simetría y otra próxima al área lateral del cilindro.

Figura 46. Gráficas de contorno de las energía de enlace de las donadoras neutra y cargada negativamente correspondientes a sus diferentes posiciones en el plano a través del eje de la superred cilíndrica de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As de 40nm de radio y con  $n = 5$  pozos de 10nm de ancho separados por barreras de 5nm de ancho.



Una posible aplicación de tal dependencia inusual de la energía de enlace del  $D^-$  es que hay dos diferentes formas para enlazar el segundo electrón, por medio del aumento de la atracción hacia el ión o por medio del decrecimiento de la repulsión entre los electrones. Se cree que la competencia entre el confinamiento y el tunelamiento proveen una mejor condición en el centro de la nanosuperred por un incremento de la atracción y una mejor condición para el decrecimiento de la repulsión entre los electrones cuando el ión está localizado en el área lateral de la nanosuperred.

Comparando las gráficas de contorno para los centros  $D^0$  y  $D^-$  presentados en la Figura 46(a) y 46(b) se puede ver que las energías de enlace del  $D^-$  localizado

cerca del centro de la nanosuperred son mayores que las energías de enlace de los  $D^0$  periféricos (localizados próximos al área lateral), por ejemplo los  $D^0$  periféricos están más débilmente enlazados que los iones  $D^-$  localizados próximos al centro. En consecuencia, una población significativa de iones  $D^-$  próximos al centro puede aparecer en equilibrio puesto que la transferencia del electrón del  $D^0$  periférico al  $D^0$  localizado próximo al centro es generalmente favorable. La probabilidad que una donadora neutra centrada,  $D_{on}^0$  pudiera convertirse en un ión cargado negativamente  $D_{on}^-$ , atrapando el electrón liberado desde la donadora descentrada en la periferia  $D_{off}^0$ , de acuerdo a la reacción de intercambio de carga:  $D_{on}^0 + D_{off}^0 \rightarrow D_{on}^+ + D_{off}^-$ , es significativa solamente si la energía  $\Delta E$ , requerida para desplazar el electrón desde la donadora descentrada al lugar sobre la donadora centrada para formar un centro  $D^-$ , es negativa, y por tanto esta reacción es exotérmica.

## 4. ESTADOS LIGADOS DE UN PAR ELECTRÓN-HUECO

---

---

Un par electrón-hueco en su estado ligado llamado excitón, atrapado en un punto cuántico, tiene una serie de propiedades específicas que merecen un estudio especial debido a que la separación electrón-hueco y las relacionadas con esta separación, como la energía de enlace y la distribución de carga dentro y alrededor del punto cuántico, son muy sensibles a la forma de la heteroestructura, al espesor de la capa húmeda y a la variación de la intensidad del campo magnético. Tal sensibilidad de las propiedades electrónicas está relacionada con dos factores importantes:

- El primero de ellos, es la disminución de la altura de la barrera para el movimiento de las partículas en el plano de la película debido a la presencia de la capa húmeda cuyo grosor es comparable con el del punto. Esta disminución refuerza considerablemente la probabilidad del tunelamiento de las partículas en su movimiento en el plano de la película hacia la capa húmeda tanto en la región exterior como en la región central de la barrera, como ocurre en el caso del anillo.
- El segundo factor es la diferencia notable entre las masas efectivas del electrón y del hueco que hace más probable el tunelamiento del electrón que del hueco tanto hacia la capa húmeda como hacia la matriz de GaAs en la que está sumergida la película de InAs. El hecho que los grosores del punto y de la capa húmeda son del orden de solo varios nanómetros hace que la probabilidad de penetración de las partículas en la región de la matriz sea bastante alta, siendo significativamente mayor para el electrón que para el hueco. Como resultado, las regiones de encima y debajo de la película, se cargan negativamente mientras que la región central de la película se carga positivamente.

De esta manera, se puede esperar que el electrón y el hueco atrapados en puntos cuánticos auto-ensamblados sufran una separación adicional formando momentos eléctricos cuadrupolares y momentos eléctricos dipolares, dependiendo de la geometría de la heteroestructura.

El estudio de la posibilidad de la formación de estos tipos de la distribución de carga en los puntos cuánticos auto-ensamblados y la influencia de este efecto sobre la energía de enlace de un exciton atrapado en un punto cuántico se realiza en este capítulo aplicando las mismas técnicas que se usaron en los capítulos

anteriores. A diferencia de otras investigaciones dedicadas al estudio de los excitones en puntos cuánticos auto-ensamblados, se ha incluido en el modelo la capa húmeda para analizar el efecto de penetración de las partículas, no solo en la matriz de GaAs sino también dentro la capa húmeda en el plano de la película. Los resultados de este estudio se publicaron en los artículos correspondientes a las siguientes Referencias (49, 50, 52).

#### **4.1 EXCITÓN EN UNA PIRÁMIDE CUÁNTICA [49]**

Inicialmente, consideremos un modelo un poco más sencillo de un punto cuántico en la forma de una pirámide sin presencia de capa húmeda con el objetivo de ilustrar el funcionamiento del método de dimensión fractal.

El espectro de energía del excitón en puntos cuánticos se ha estudiado usando el método variacional, el de diagonalización, el de elementos finitos y otros procedimientos numéricos [72, 74, 75, 108, 110]. Previamente se han considerado diferentes modelos de confinamiento, el exponencial, el Gaussiano, el parabólico y el de paredes rectangulares para altura finita [72, 74, 75, 108]. En la mayoría de estas investigaciones se han usado modelos bidimensionales que no tienen en cuenta los efectos relacionados con el espesor de los puntos cuánticos.

Para analizar el espectro electrónico en puntos cuánticos de forma de pirámides truncadas de altura  $d_0$ , de radios superior y de la base  $R_u$  y  $R_b$ , respectivamente ( $R_u \leq R_b$ ), se considera un modelo con saltos de las posiciones del piso de la banda de conducción y del techo de la banda de valencia, iguales a  $V_c = 258meV$  y  $V_h = 172meV$ , respectivamente [104] y con los mismos parámetros de constante dieléctrica y de masas efectivas del electrón y del hueco en el pozo y en la barrera correspondientes a la estructura de  $In_{0.55}Ga_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ .

En la fabricación de los puntos cuánticos auto-ensamblados de InGaAs/GaAlAs, se requiere la situación típica que la altura  $d_0$  sea mucho menor que el radio de base  $R_b$  ( $d_0/R_b \ll 1$ ). Esta condición sugiere el uso de la aproximación adiabática para separar el movimiento rápido de las partículas en la dirección  $z$  de sus movimientos lentos en la dirección radial sobre el plano [58].

Como se demuestra en la Referencia [104], el problema 3D en este caso puede ser aproximado con una buena precisión a un problema 2D en el que el potencial de confinamiento lateral bidimensional puede renormalizarse y tomarse como

$V_i^0(\rho) = V_i$  para  $\rho > R_b$  y  $V_i^0(\rho) = E_z(\rho, V_i)$  para  $\rho < R_b$ , donde  $E_z(\rho, V_i)$  es la energía del nivel más bajo en un pozo cuántico con altura de la barrera  $V_i$  y ancho igual al espesor de la pirámide  $d(\rho)$  en un corte circular con el radio  $\rho$ .

Es claro que entre más pequeño sea el espesor de la pirámide, la altura de la barrera renormalizada es más baja tanto para el electrón como para el hueco y más sensible es la forma del potencial lateral  $\tilde{V}_i(\rho)$  a una variación del perfil del cono y de su espesor. Estrictamente hablando, este modelo no es bidimensional puesto que toma en cuenta parcialmente el efecto del espesor transversal y el perfil de los puntos cuánticos casi planos.

Para analizar el espectro energético de un excitón atrapado en una pirámide de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  se utiliza la aproximación adiabática para separar los movimientos del electrón y del hueco teniendo en cuenta que la masa efectiva del electrón,  $m_e^* = 0.076 m_0$  es mucho menor que la masa efectiva del hueco  $m_h^* = 0,45 m_0$ . Esto permite calcular la energía del excitón en dos pasos, en forma similar como se hizo con el cálculo para un trion negativamente cargado en el capítulo anterior.

En el primer paso se calcula la energía relacionada con el movimiento de un solo electrón alrededor del hueco, considerando el hueco fijo en un punto, con el vector de la posición del hueco en el plano de la película  $\mathbf{p}_h$ . Este problema, en realidad, coincide con el problema de una donadora neutra  $D^0$ . La energía de la donadora dependiente de  $\mathbf{p}_h$  encontrada en este paso, se utiliza posteriormente como el potencial de campo central, para encontrar después en el segundo paso la energía del movimiento del hueco. Para realizar estos dos pasos se requiere encontrar previamente las funciones de onda uní-particulares y las energías correspondientes del electrón y del hueco.

En adelante, se utilizarán las unidades adimensionales definidas como: el radio de Bohr efectivo  $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / \mu e^2 \approx 10.4 \text{ nm}$  como la unidad de longitud y el Rydberg efectivo  $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon \approx 5.2 \text{ meV}$  como la unidad de la energía, siendo  $\epsilon = 12.71$  la constante dieléctrica y  $\mu = m_{ew} m_h / (m_{ew} + m_h) \approx 0.065 m_0$  la masa reducida.

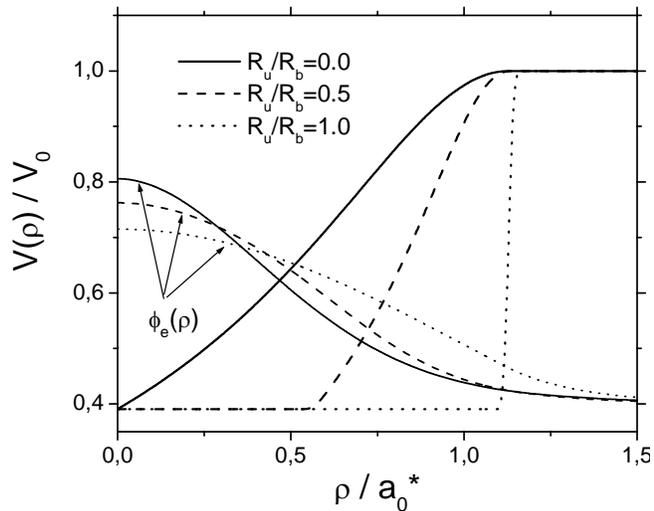
Las funciones de onda del estado base del electrón y el hueco libres  $\phi_i(\mathbf{p}_i)$ ,  $i = e, h$  en una pirámide cuántica son soluciones de la ecuación de onda unidimensional:

$$H_{0i}(\rho_i)\phi_i(\rho_i) = E_i\phi_i(\rho_i); \quad H_{0i}(\rho_i) = -\frac{\eta_i}{\rho_i} \frac{d}{d\rho_i} \rho_i \frac{d}{d\rho_i} + \tilde{V}_i(\rho_i); \quad i=e,h; \quad (4.1.1)$$

donde  $\eta_i = \mu/m_i^*$ . La solución de la ecuación (4.1.1) se encuentra usando el método de barrido trigonométrico.

En la Figura 47 se presentan unos ejemplos de los resultados del cálculo de las curvas del potencial de confinamiento lateral y de las funciones de onda correspondientes al electrón libre en pirámides con diferentes razones  $R_u/R_b$  para los casos cuando los radios de la base son  $R_b = 10nm$  y  $d_0 = 4nm$ .

Figura 47. Formas del potencial de confinamiento y sus correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral del electrón.



Se puede ver que la altura de la barrera para el electrón decrece en un 40% debido al confinamiento en la dirección  $z$ . También se observa que la forma del potencial de confinamiento varía desde casi triangular hasta casi rectangular cuando la geometría del punto cuántico cambia de pirámide a disco pasando por la forma de pirámide truncada. Además, la función del electrón libre se hace más extendida a medida que empieza a aumentar la razón  $R_u/R_b$ .

Como fue anunciado en párrafos anteriores el primer paso de la aproximación adiabática que se aplica para separar los movimientos del electrón y el hueco consiste en el congelamiento del movimiento del hueco despreciando el término de la energía cinética del hueco. Bajo esta consideración el problema del excitó se reduce al de una donadora  $D^0$  descentrada.

Usando la notación  $\mathbf{\rho}_h$  para el vector de posición del ión en el plano de la película y  $\mathbf{\rho}_e$  para el vector de posición del electrón, el Hamiltoniano adimensional de una donadora  $D^0$  descentrada en un cono cuántico y la ecuación de onda correspondiente se pueden escribir como:

$$H_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h) = H_{0e}(\mathbf{\rho}_e) - 2/|\mathbf{\rho}_e - \mathbf{\rho}_h|; \quad H_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h)\psi_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h) = E_{D^0}(\mathbf{\rho}_h)\psi_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h) \quad (4.1.2)$$

La función de prueba para resolver la ecuación de onda (4.1.2) se escoge en la forma estándar en el marco del método de dimensión fractal como el producto de la función uní-particular con una función envolvente desconocida que depende solo de la distancia hasta el centro de atracción:

$$\psi_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h) = \phi_e(\mathbf{\rho}_e)\Phi(|\mathbf{\rho}_e - \mathbf{\rho}_h|) \quad (4.1.3)$$

Usando el método de dimensión fractal se obtiene la siguiente ecuación diferencial para la función  $\Phi(\rho)$ :

$$-\frac{\eta_e}{J_0(\rho, \rho_h)} \frac{d}{d\rho} J_0(\rho, \rho_h) \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} - \frac{2}{\rho} \Phi(\rho) = [E_{D^0}(\rho_h) - E_e] \Phi(\rho) \quad (4.1.4a)$$

donde  $\rho_h$  es la distancia de la posición del ión desde el eje de la pirámide y  $J_0(\rho, \rho_h)$  es el Jacobiano definido como:

$$J_0(\rho, \rho_h) = \rho \int_0^{2\pi} \phi_e^2 \left( \sqrt{\rho_h^2 + \rho^2 + 2\rho\rho_h \cos \varphi} \right) d\varphi \quad (4.1.4b)$$

Con el fin de encontrar la dependencia de la energía de la donadora  $E_{D^0}(\rho_h)$  con respecto a la distancia desde la posición del hueco hasta el eje, la cual se usa posteriormente en el segundo paso para calcular la energía del exciton, se resuelve numéricamente la ecuación (4.1.4.a) usando el método de barrido trigonométrico [62].

El segundo paso consiste en encontrar los valores propios del Hamiltoniano:

$$H_X = H_{D^0}(\mathbf{\rho}_e, \mathbf{\rho}_h) + H_{0h} = -\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} \rho_h \frac{\partial}{\partial \rho_h} + V_h^0(\rho_h) + H_{D^0}(\mathbf{\rho}_h) \quad (4.1.5)$$

donde las funciones propias del Hamiltoniano (4.1.5) se pueden escribir en la forma:

$$\psi_X(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) = \psi_{D0}(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_h) \phi_X(\rho_h) \quad (4.1.6)$$

donde  $\phi_X(\rho_h)$  es solución de la ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \rho_h \frac{d\phi_X(\rho_h)}{d\rho_h} + [\tilde{V}_h(\rho_h) + E_{D0}(\rho_h)] \phi_X(\rho_h) = E_X \phi_X(\rho_h) \quad (4.1.7)$$

Para resolver el problema de valores propios (4.1.7) y encontrar la energía del exciton  $E_X$  se utiliza el método de barrido trigonométrico.

En las Figuras 48 y 49 se muestran los resultados de los cálculos para la energía de correlación  $E_c(X)$ , en función del radio de la base de la pirámide cuántica de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  para diferentes razones  $R_u/R_b$  y diferentes alturas, definida como la diferencia entre las energías de los estados del par electrón-hueco libre y acoplado  $E_c(X) = E_e + E_h - E(X)$ .

En la Figura 48 se puede apreciar que las energías de correlación en las pirámides con diferentes razones  $R_u/R_b$  decrecen cuando la base del radio aumenta y tiende exactamente al valor 2D de la energía de enlace del exciton libre,  $4Ry^*$ . También se puede notar que la energía de correlación del excitón depende fuertemente de la morfología del punto cuántico.

Generalmente, entre menor sea la razón  $R_u/R_b$  más fuerte es el confinamiento en el punto cuántico y mayor es la energía de correlación. Por consiguiente, el aumento de la razón  $R_u/R_b$  produce una rápida convergencia al límite 2D de la energía de correlación.

El cruce de las curvas de las energías de correlación correspondientes a la pirámide truncada con razones 0.25 y 0.5 cuando el radio tiende a cero es debido al efecto de desbordamiento de las funciones de onda en la región de la barrera de la pirámide, producido por un aumento de la separación electrón-hueco.

*Figura 48. Energía de correlación del excitón como una función del radio de la base del cono para diferentes razones  $R_u/R_b$ .*

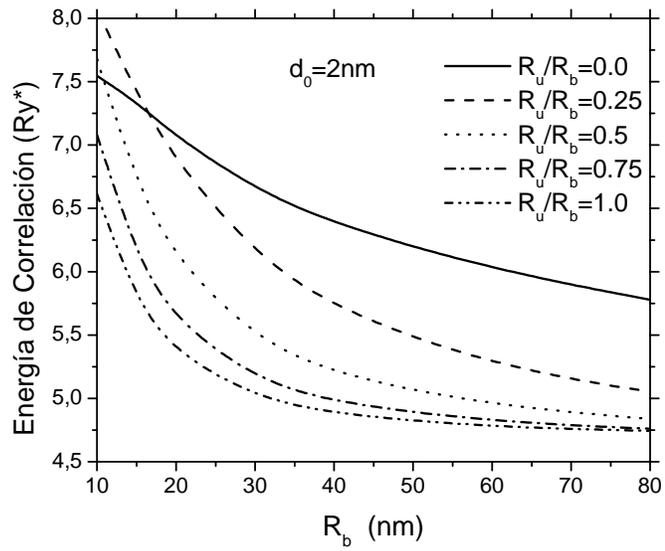
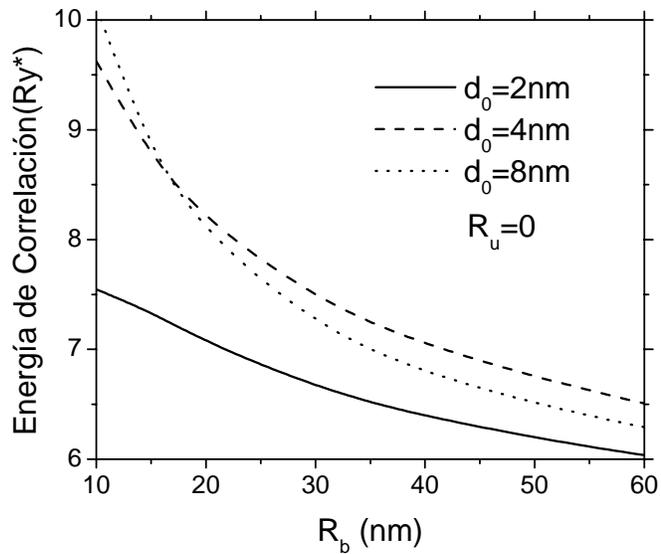


Figura 49. Energía del excitón en un punto cuántico cónico (pirámide cuántica) como una función del radio del núcleo cuántico para tres diferentes alturas  $d_0=2\text{nm}$ ,  $d_0=4\text{nm}$  y  $d_0=8\text{nm}$ .

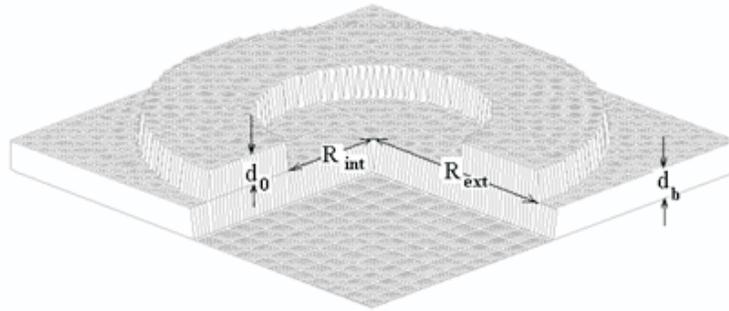


En la Figura 49 se comparan las energías de correlación del excitón como funciones del radio de la base para diferentes alturas.

## 4.2 EFECTO DE CAPA HÚMEDA SOBRE EL ESTADO BASE DE UN EXCITÓN EN UN ANILLO CUÁNTICO [50]

Para describir el modelo geométrico de un anillo cuántico (QR) se usa la función constante a trazos  $d(\rho)$ , que define la dependencia del espesor  $d$  de la capa de In(Al) As, embebida en la matriz de Ga(Al) As, sobre la distancia desde el eje de simetría  $\rho$ . Se asume que el espesor  $d(\rho)$  es igual al espesor del anillo cuántico  $d_0$  dentro del QR ( $R_{int} < \rho < R_{ext}$ ), y este es igual al espesor  $d_b$  de la capa húmeda (WL) (pocas capas atómicas) [10] fuera del QR (Figura 50). Aquí y en lo que sigue  $R_{int}$  y  $R_{ext}$  son los radios interior y exterior del QR.

Figura 50. Imagen 3D de un anillo cuántico.



Para calcular la energía, la distribución espacial de carga y la función de correlación correspondiente al estado base de un excitón en un anillo cuántico, teniendo en cuenta los efectos relacionados con el tunelamiento de las partículas en la capa húmeda (WL), se aplica el método aproximado de dimensión fractal. Se demuestra que la función de correlación del par electrón-hueco se puede expresar en términos de la parte radial de la función de onda del átomo hidrogenoide en el espacio de dimensión fraccionaria. Los resultados para la energía del estado base del excitón en discos cuánticos de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  y  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}/\text{GaAs}$ , en el caso límite cuando el espesor de la WL tiende a cero, están en concordancia con los obtenidos previamente por otros métodos. Se demuestra que la distribución espacial de carga dentro y alrededor del anillo, relacionada con la diferencia de las masas efectiva del electrón y del hueco es muy sensible a la variación del radio exterior e interior, al espesor de la WL y a la intensidad del campo magnético.

Tomando como  $\mathbf{r}_e$  y  $\mathbf{r}_h$  los vectores de posición del electrón y del hueco, la ecuación adimensional de Schrödinger para el par electrón-hueco en un punto

cuántico de simetría axial en presencia de un campo magnético orientado a lo largo del eje  $z$  se puede escribir en coordenadas cilíndricas ( $\mathbf{r}_p = \{\rho_p, \vartheta_p, z_p\}$ ,  $p = e, h$ ) como:

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau)\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) = E(\tau)\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau); \quad H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau) = H_e(\mathbf{r}_e) + H_h(\mathbf{r}_h) - 2\tau/r_{eh}; \quad (4.2.1)$$

$$H_p(\mathbf{r}_p) = -\nabla_p \eta_p \nabla_p + \gamma^2 \rho_p^2 / 4 + V_p(\rho_p, z_p); \quad \eta_p = \mu / m_p; \quad p = e, h; \quad \tau = 0, 1$$

donde para el caso de la partículas neutras ( $\tau = 0$ ) y para el caso del pare electrón-hueco ( $\tau = 1$ );  $r_{eh}$  denota la separación electrón-hueco  $r_{eh} = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ . El potencial de confinamiento  $V_p(\rho_p, z_p)$  es igual a cero dentro del anillo cuántico y en la WL y es igual a  $V_{op}$ ,  $p = e, h$  fuera de ellas. El parámetro  $\eta_p$  es igual a  $\eta_{ew} = 0.86$  para el electrón en el pozo y a  $\eta_{eb} \approx 0.67$  en la barrera y para el hueco  $\eta_{hw} = \eta_{hb} \approx 0.14$ .

Para las partículas neutras ( $\tau = 0$ ) el Hamiltoniano (4.2.1) se puede separar y las energías  $E_{m,m'}$  y las funciones de onda  $\Psi_{m,m'} = \Psi_{m,m'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0)$  de las dos partículas con momento angular  $m, m' = 0, \pm 1, \pm 3, K$  se pueden encontrar resolviendo dos problemas uni-particulares independientes:

$$H_p f_p^{(m)}(\mathbf{r}_p) = E_p^{(m)} f_p^{(m)}(\mathbf{r}_p); \quad p = e, h \quad (4.2.2)$$

$$\Psi_{m,m'}^{(0)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) = f_e^{(m)}(\mathbf{r}_e) f_h^{(m')}(\mathbf{r}_h); \quad E_{m,m'}^{(0)} = E_e^{(m)} + E_h^{(m')} \quad (4.2.3)$$

Con el fin de encontrar las soluciones de las ecuaciones de onda uni-particulares (4.2.3) se usa la aproximación adiabática [120-123], en la cual el movimiento rápido a lo largo de la dirección  $z$  se puede separar del movimiento lento en dirección radial y la función de onda uniparticular en el punto cuántico delgado se puede escribir como:

$$f_p(\mathbf{r}_p) = f_{z_p}(z_p, \rho_p) f_{\rho_p}(\rho_p); \quad p = e, h \quad (4.2.4)$$

Aquí  $f_{z_p}(z_p, \rho_p)$  es la función de onda del estado base para el movimiento unidimensional a lo largo del eje  $z$  en un pozo cuántico con altura de la barrera  $V_{0p}$  y ancho del pozo igual al espesor  $d(\rho_p)$  de la capa de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ . La energía

correspondiente al estado base  $E_{z\rho}(\rho_p)$  para el movimiento a lo largo de la dirección del eje  $z$  depende sobre la distancia desde el eje y es igual a  $E_{zp}^{(w)}$  dentro del anillo cuántico ( $R_{\text{int}} < \rho_p < R_{\text{ext}}$ ) y a  $E_{zp}^{(b)}$  fuera del anillo cuántico ( $\rho_p < R_{\text{int}}$  o  $\rho_p > R_{\text{ext}}$ ) siendo  $E_{zp}^{(w)}$  y  $E_{zp}^{(b)}$  las energías del nivel más bajo en un pozo cuántico con altura de la barrera  $V_{0p}$ , y anchos del pozo  $d_0$  y  $d_b$ , respectivamente. La parte radial de la función de onda uni-particular es solución del siguiente problema de campo central:

$$-\frac{1}{\rho_p} \frac{\partial}{\partial \rho_p} \left[ \eta_p \rho_p \frac{\partial f_{\rho p}(\rho_p)}{\partial \rho_p} \right] + V_p^{\%}(\rho_p) f_{\rho p}(\rho_p) = E_p f_{\rho p}(\rho_p); \quad (4.2.5)$$

$$V_p^{\%}(\rho_p) = E_{z\rho}(\rho_p) + \frac{\eta_p \gamma^2 \rho_p^2}{4}$$

Para encontrar la energía del estado base  $E_p$  y la parte radial de función de onda uni-particular  $f_{\rho p}(\rho_p)$  se resuelve numéricamente la ecuación (4.2.5) usando el método de barrido trigonométrico [62].

El problema de dos partículas (4.2.1) para un excitón no es posible resolverlo exactamente y por consiguiente para encontrar la función de onda del estado base  $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1)$  del par electrón-hueco, se debe emplear un principio variacional usando para este propósito una función de prueba tipo Bastard en la forma de un producto de la función de onda de las partículas neutras correspondiente a la energía más baja,  $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0)$  con una función envolvente desconocida  $\Phi(r_{eh})$ , que tiene en cuenta la correlación de las partículas causada por la interacción electrón-hueco, dependiente solamente de la separación electrón-hueco.

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1) = \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) \Phi(r_{eh}) = f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \quad (4.2.6)$$

La energía del estado base del exciton  $E$  se encuentra minimizando la razón:

$$E[\Phi] = \frac{\int d\mathbf{r}_e \int f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 1) f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) d\mathbf{r}_h}{\int d\mathbf{r}_e \int f_e^2(\mathbf{r}_e) f_h^2(\mathbf{r}_h) \Phi^2(r_{eh}) d\mathbf{r}_h} \quad (4.2.7)$$

Tomando la derivada funcional con respecto a  $\Phi(r)$  da una ecuación de onda de la forma:

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_1(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = (E - E_e - E_h) \Phi(r) \quad (4.2.8)$$

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

$$P_0(r) = \int d\mathbf{r}_e \int \Psi^2(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau=0) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h = \int f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int f_h^2(\mathbf{r}_h) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \quad (4.2.9)$$

$$P_1(r) = \int f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int (\eta_e(\mathbf{r}_h) + \eta_h(\mathbf{r}_h)) f_h^2(\mathbf{r}_h) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \quad (4.2.10)$$

Cuando el tunelamiento de las partículas en la región de la matriz es pequeño la diferencia entre las funciones  $P_0(r)$  y  $P_1(r)$  se pueden despreciar una vez que sea satisfecha la identidad  $\eta_e(\mathbf{r}_e) + \eta_h(\mathbf{r}_h) = 1$  dentro de la región del anillo cuántico y de la WL. En este caso  $P_1(r) \approx P_0(r)$  y la ecuación (4.2.8) adquiere la forma de la ecuación del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo con la parte radial del Jacobiano  $P_0(r)$ :

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_0(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = (E - E_e - E_h) \Phi(r) \quad (4.2.11)$$

Las barras de error proporcionadas por la sustitución de (4.2.8) por la ecuación aproximada (4.2.11) son estimadas en las simulaciones realizadas en un 5%.

El Jacobiano  $P_0(r)$  y la función envolvente  $\Phi(r)$  están íntimamente relacionadas con la función espacial de correlación del par (SPCF)  $P(r, \tau)$ , la cual da la densidad de probabilidad de encontrar el electrón y el hueco separados por la distancia  $r$ :

$$P(r, \tau) = \langle \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) \rangle = \int d\mathbf{r}_e \int \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) |\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau)|^2 d\mathbf{r}_h \quad (4.2.12)$$

Comparando la ecuación (4.2.8) y la ecuación (4.2.11) se ve que el Jacobiano es igual a la SPCF para dos partículas neutras ( $\tau=0$ ) confinadas en una nanoestructura  $P_0(r) = P(r, \tau=0)$ . Para el excitón ( $\tau=1$ ) la SPCF,  $P(r) = P(r, \tau=1)$  se puede representar como:

$$P(r) = \int f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) f_h^2(\mathbf{r}_h) \Phi^2(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) d\mathbf{r}_h = P_0(r) \Phi^2(r) = \chi^2(r) \quad (4.2.13)$$

La función  $\chi(r) = \sqrt{P(r)} = \Phi(r) \sqrt{P_0(r)}$  se puede considerar como la función de onda uni-particular asociada a la coordenada generalizada correspondiente a la separación entre dos partículas, cuyo valor al cuadrado coincide con la SPCF.

De tal manera que la función  $P_0(r)$  es una medida de la probabilidad de encontrar el electrón y el hueco separados una distancia  $r$  en su movimiento libre en el punto cuántico QD donde el valor al cuadrado de la función  $\Phi(r)$  da la razón de las SPCF's,  $\Phi^2(r) = P(r, \tau = 1) / P(r, \tau = 0)$  en sus estados acoplados y libres, respectivamente. Sustituyendo la relación entre  $\Phi(r)$  y  $\chi(r)$  en la ecuación (4.2.11) se puede obtener la siguiente ecuación para la SPCF de dos partículas:

$$-\chi''(r, \tau) + V_{eff}(r, \tau) \chi(r, \tau) = (E - E_e - E_h) \chi(r, \tau); \quad P(r) = \chi^2(r, \tau = 1) \quad (4.2.14)$$

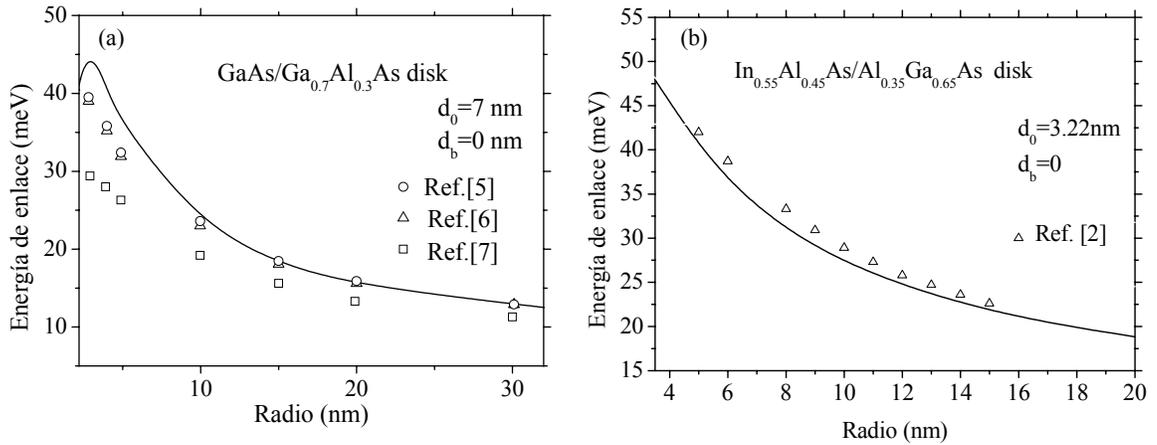
$$V_{eff}(r, \tau) = -\frac{2\tau}{r} + \frac{(\sqrt{P_0(r)})''}{\sqrt{P_0(r)}} \quad (4.2.15)$$

Una vez que las funciones de onda uni-particulares del electrón,  $f_e(\mathbf{r}_e)$  y del hueco  $f_h(\mathbf{r}_h)$ , son encontradas, entonces el potencial efectivo  $V_{eff}(r, \tau)$  (4.2.15) se puede calcular usando la relación (4.2.10) y la ecuación de onda unidimensional (4.2.14) para la SPCF se puede resolver usando el método estándar. Se puede verificar que para el caso del electrón y el hueco libres, cuando  $\tau = 0$  y  $E = E_e + E_h$  la solución de la ecuación (4.2.14) es  $\chi(r, \tau = 0) = \sqrt{P_0(r)}$  y  $P(r, \tau = 0) = P_0(r)$ .

Para encontrar la energía del excitón  $E$ , y la SPCF  $P(r)$ , de las relaciones (4.2.14) y (4.2.15) se hace uso del método de barrido trigonométrico [62]. Para chequear la exactitud de este procedimiento numérico, hemos calculado primero la energía del estado base del exciton en cilindros de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  y discos de  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  ( $R_{mt} = 0$ ,  $d_b = 0$ ) y estos resultados se comparan con los obtenidos previamente en las Referencias [112, 118, 119] usando el método variacional (Figura 4.2(a)) y con los resultados del tratamiento 3D completo realizado en las Referencias [11, 104, 113, 126] (Figura 51(b)).

Para poder hacer una comparación válida, siguiendo las referencias anteriores se define la energía de enlace del excitón  $E_b$ , como una diferencia entre las energías del par electrón-hueco desligado y ligado:  $E_b = E(\tau = 0) - E(\tau = 1) = E_e + E_h - E$ .

Figura 51. Energía de enlace del estado base del excitón como una función del radio del disco cuántico en discos de (a) GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As y (b) In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As. Los parámetros del disco son mostrados en las figuras. Los resultados obtenidos (líneas continuas) son comparados con (a) cálculo variacional (símbolos diferentes) y (b) tratamiento completamente 3D (triángulos).



En la Figura 51(a), se presenta la energía de enlace de un excitón en función del radio del disco de GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As con espesor  $d_0 = 7 \text{ nm}$  y se comparan con los resultados obtenidos (líneas continuas) con los cálculos variacionales obtenidos previamente usando diferentes tipos de funciones de prueba: un parámetro, hidrogenoide (triángulos, [112]), dos parámetros (circunferencias, [126]) y separable (rectángulos, [127]).

Como los cálculos variacionales dan una menor estimación de las energías de enlace, la comparación de los resultados en la Figura 51(a) muestran que para radios pequeños del disco los resultados obtenidos son mejores que los otros cálculos mientras que para radios grandes del disco nuestras energías son similares a las obtenidas usando funciones de prueba hidrogenoides y de dos parámetros. Esto es debido al hecho que nuestra función que no usa parámetros es más flexible y toma en cuenta el cambio de la simetría del sistema cuando el radio del disco se hace menor que el radio de Bohr.

De otro lado, la comparación de los resultados obtenidos con los de un tratamiento completamente 3D presentados en la Figura 51(b) muestran que las

energías de enlace obtenidas usando el procedimiento desarrollado son ligeramente menores que las obtenidas en la Referencia [104], sin embargo, la concordancia entre los dos conjuntos de energías es excelente, considerando la simplicidad de el procedimiento desarrollado.

A continuación se presentan los cálculos para nanoestructuras de  $\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ . Las características relevantes del exciton en un QR son la separación entre el electrón y el hueco y los momenta multipolares debidos al fuerte confinamiento del hueco en el QD. Estas características se pueden expresar en términos de las densidades de probabilidad bi-dimensionales para encontrar el electrón  $\Pi_e(\rho, z)$  y el hueco  $\Pi_h(\rho, z)$  en un punto con coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$  que de acuerdo a las relaciones (4.2.2c) y (4.2.3) se pueden calcular como sigue:

$$\Pi_e(\rho, z) = \rho f_{\rho e}^2(\rho) f_{z e}^2(z, \rho) C_h(z, \rho); \quad \Pi_h(\rho, z) = \rho f_{\rho h}^2(\rho) f_{z h}^2(z, \rho) C_e(z, \rho); \quad (4.2.16)$$

$$C_p(z, \rho) = \int_0^{\infty} f_{\rho p}^2(\rho_p) d\rho_p \int_{-\infty}^{+\infty} f_{z p}^2(z_p, \rho_p) dz_p \int_0^{2\pi} \Phi^2 \left( \sqrt{\rho^2 + \rho_p^2 - 2\rho\rho_p \cos \vartheta + (z - z_p)^2} \right) d\vartheta \quad (4.2.17)$$

En la Figura 52 se presentan las curvas de la densidad de probabilidad de encontrar el electrón  $\Pi_e(\rho, z)$  (líneas continuas) y el hueco  $\Pi_h(\rho, z)$  (líneas punteadas) dadas por la relación (4.2.16) en los puntos localizados sobre el plano de simetría ( $z = d_0/2$ ) como funciones de la distancia  $\rho$  desde las posiciones de las partículas al eje de dos QRs de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  QRs con diferente radio. Se puede ver que en ambos casos la carga positiva predomina en la mayor parte dentro del QR, mientras la carga negativa predomina fuera del QR en las regiones periféricas próximas a las uniones del QR. Esto es debido al hecho que la masa efectiva del electrón es más pequeña que la del hueco y por consiguiente el tunelamiento del electrón hacia ambas regiones de las barreras (interior y exterior) es mayor que el tunelamiento del hueco.

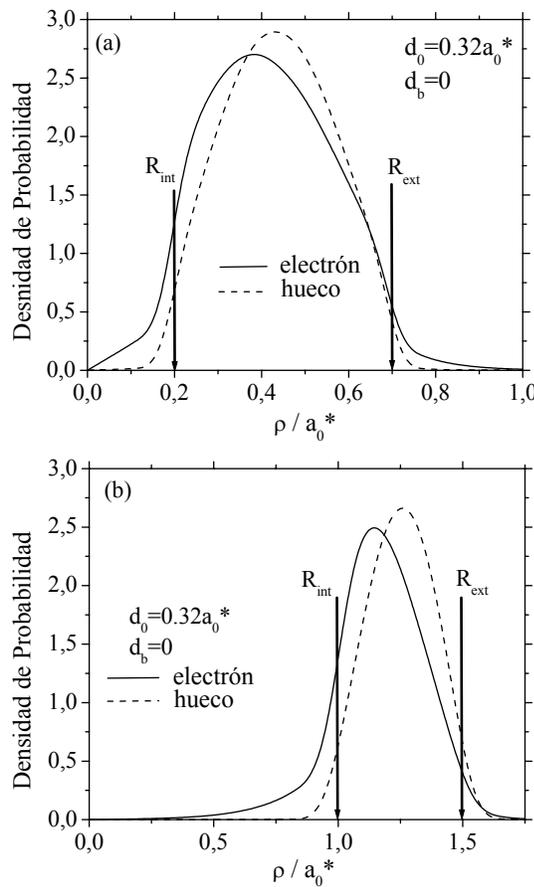
También se puede observar que el tunelamiento del electrón en el interior de la región de la barrera llega a ser más significativa que en la región exterior, cuando el radio del QR aumenta.

La diferencia entre las distribuciones del electrón y el hueco dentro y fuera del anillo conducen a una predominancia de la carga positiva dentro del anillo cuántico QR y de la carga negativa en las regiones de la barrera próximas a las uniones.

La correspondiente distribución de densidad de carga de un excitón  $Q(\rho, z)$  se puede calcular como:

$$Q(\rho, z) = \Pi_h(\rho, z) - \Pi_e(\rho, z) \quad (4.2.18)$$

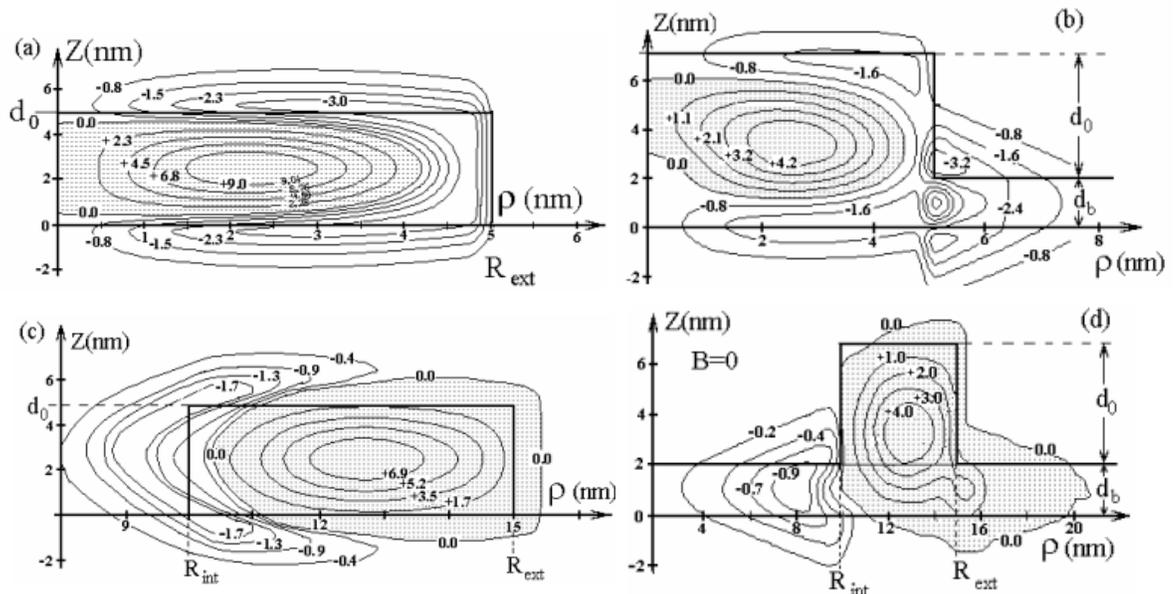
Figura 52. Densidades de probabilidad de encontrar el electrón (líneas continuas) y el hueco (líneas punteadas) sobre el plano de simetría como una función de la distancia desde la posición de la partícula al eje de los QRs con radios exteriores (a)  $0.7a_0^*$  y (b)  $1.5a_0^*$ . El ancho de los QRs en ambos casos es igual a  $0.5a_0^*$ . Las líneas continuas verticales muestran las correspondientes uniones de los anillos.



En la Figura 53 presentamos las gráficas de contorno, que corresponden a las líneas de nivel de la densidad de carga del excitón de la distribución radial a lo largo de la sección transversal en el centro del disco cuántico (a, b) y de los anillos (c, d) calculada en la dirección perpendicular a  $y$  usando las relaciones (4.2.16) y (4.2.17) para las estructuras sin WL (a, c) y con WL (b, d). Las partes sombreadas de las figuras indican la sección transversal de las partes correspondientes de las estructuras que llegan a ser cargadas positivamente debido a la presencia del excitón.

Como se muestra en las Figuras 53(a, c) la densidad de la distribución de carga radial en la región central del disco es positiva y en la región periférica del disco es negativa mientras que en el anillo cuántico la distribución de carga radial es opuesta. Debido a la simetría axial de la estructura el momento dipolar para ambas distribuciones en las Figuras 53(a, c) es igual a cero y la distribución de carga está caracterizada por el momento cuadrupolar que para el disco cuántico en la Figura 53(a) es positivo y para el QR en la Figura 53(c) es negativo. Cuando el espesor del punto disminuye y este se hace comparable con el de la WL el electrón tunela y el valor absoluto del momento cuadrupolar aumenta. Es interesante analizar la relación entre el momento cuadrupolar con las transformaciones de la morfología del punto cuántico.

Figura 53. Gráficas de contorno de la distribución de densidad de carga radial en un plano a través del eje de simetría del disco cuántico (a y b) de radio 5nm y espesor 5nm y QR (c y d) con radio interior y exterior de 10 y 15nm y espesor 5nm sin capa húmeda (a y c) y con capa húmeda (b y d).



De la Figura 53(a,c) se ve que la distribución de la densidad de carga radial en la región central del disco es positiva y en la región periférica es negativa mientras que en el QR la distribución de carga radial es opuesta. Debido a la simetría axial de la estructura el momento dipolar para ambas distribuciones en las Figuras 53(a, c) es igual a cero y la distribución de carga está caracterizada por el momento cuadrupolar que para el disco cuántico en la Figura 53(a) es positiva y en el QR en la Figura 53(c) es negativa.

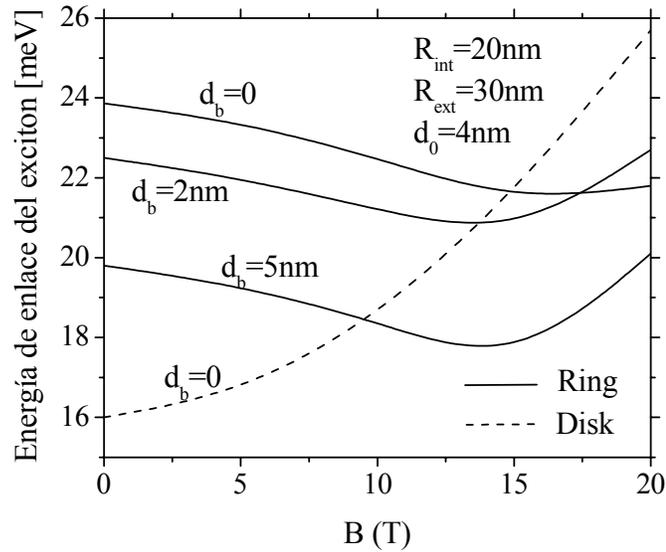
Cuando el espesor del punto disminuye y este se hace comparable con el de la WL el electrón tunela y el valor absoluto del momento cuadrupolar aumenta. Es interesante analizar la relación del momento cuadrupolar con las transformaciones de la morfología del QD. Experimentalmente se estableció [11] que la morfología de los puntos cuánticos autoensamblados de InAs sufren un cambio durante el proceso de crecimiento, por ejemplo, de lente (de alrededor de 20nm de diámetro, 7nm de altura) a volcán, con un incremento del tamaño lateral (entre 60 y 140nm en el diámetro exterior), una altura reducida (alrededor de 2nm) y un centro bien definido del hueco de alrededor de 20nm de diámetro. En concordancia con los resultados presentados en la Figura 53 el momento cuadrupolar tiene invertida su dirección mientras que una lente es transformada a volcán y su valor absoluto podría incrementarse significativamente debido a la reducción drástica del espesor del punto y el incremento de su radio exterior.

En las Figuras 53(b, d) se muestran las distribuciones de carga en un disco cuántico y en un QR cuyas alturas son 5nm depositados sobre la WL de 2nm de espesor. La existencia de una WL gruesa produce una disminución significativa en la altura de la barrera en las uniones laterales aumentando la probabilidad de tunelamiento desde el punto cuántico hacia la WL. Por consiguiente el tunelamiento del electrón dentro de las regiones de las barreras, que se pueden observar en la Figura 53(a, c) para heteroestructuras sin la WL, se transforma en el desbordamiento del electrón dentro del exterior de la WL en el disco cuántico en las Figuras 53(b) y dentro del interior de la WL del anillo cuántico en la Figura 53(d). Como consecuencia, en la presencia de una WL gruesa aparece una fuerte separación entre el electrón y el hueco no solamente en dirección radial sino también en dirección z, la cual está caracterizada por el momento dipolar orientado a lo largo del eje z.

Una separación entre las partículas debido al fuerte tunelamiento dentro del interior de la WL del QR puede ser reforzada o debilitada por la aplicación de un campo magnético en la dirección del crecimiento del cristal. De otro lado, el campo magnético produce un confinamiento adicional desplazando ambas cargas hacia el eje de simetría dentro del anillo haciendo que ellas se aproximen una hacia otra. De otro lado, los niveles de energía suben, incrementándose la probabilidad de tunelamiento hacia el interior de la WL, inicialmente solo para el electrón liviano cuando el campo magnético es relativamente débil y después para el hueco pesado cuando el campo magnético se hace más fuerte. En el primer caso la separación entre las partículas aumenta mientras que en el segundo caso esta decrece. Por consiguiente, la energía de enlace del excitón puede aumentar o disminuir variando la separación electrón-hueco, por medio del campo magnético débil.

En la Figura 54 se muestra la energía de enlace del exciton dependiente de la intensidad del campo magnético en el disco (línea a trazos) con 5nm de espesor y 30nm de radio, y varios anillos cuánticos con diferentes espesores  $d_b$  de la WL, (líneas continuas).

Figura 54. Energía de enlace del exciton como una función de la intensidad del campo magnético en un disco de  $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  (línea punteada) y varios anillos de  $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  con diferentes espesores de la capa húmeda (líneas continuas).



En todos los casos el espesor, el radio interior y el radio exterior de los anillos cuánticos son iguales a 5nm, 20nm y 30nm, respectivamente. De la Figura 54 es evidente la existencia de una fuerte correlación entre la morfología y el campo magnético dependiente de la energía de enlace del excitón. Se puede ver que la energía de enlace del excitón en el disco crece no monotonamente con el incremento del campo magnético que empuja a las dos partículas hacia el eje del disco haciendo que ellas se aproximen una a otra. La morfología del anillo está caracterizada por la presencia del hueco central en la estructura y por la existencia de dos uniones laterales, exterior e interior. Esta es la razón por la cual las curvas en la Figura 54 para anillos cuánticos son absolutamente diferentes.

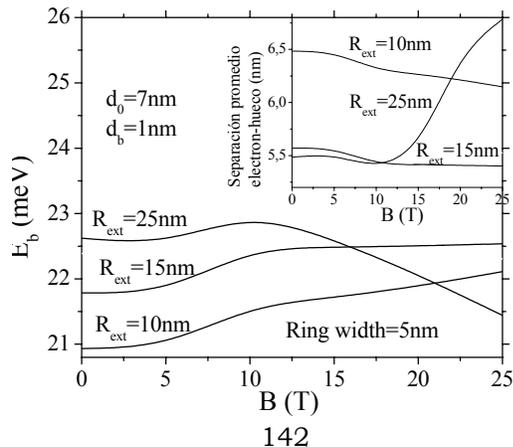
En el anillo, cuando el campo magnético aumenta, la energía de enlace primero cae hasta alcanzar un mínimo. Esto es debido al hecho que bajo un campo magnético relativamente débil el comportamiento de la partícula continúa con el anillo mientras que el más liviano empieza a penetrar en el centro de la región del

hueco y este resulta en un aumento del promedio de la separación electrón-hueco.

Cuando el campo magnético adicionalmente se aumenta, el hueco empieza a penetrar dentro de la región central y la separación electrón-hueco vuelve a decrecer mientras la energía de enlace empieza a crecer. De la Figura 54 se ve que la posición del mínimo en las curvas para el anillo cuántico depende del espesor de la WL. Entre mayor sea el grosor de la WL menor es la intensidad del campo magnético correspondiente a la posición del mínimo. Tal dependencia de la posición del mínimo está relacionada al decrecimiento de la altura de la barrera en las junturas laterales cuando crece el grosor de la WL. Podría subrayarse que el campo magnético depende esencialmente de los cambios de la energía de enlace para anillos cuánticos de espesor mayor que  $d_0$  y de espesor menor que el de la capa húmeda  $d_b$ , donde hay una diferencia significativa de las probabilidades de tunelamiento del electrón y del hueco en la región central de la barrera como una consecuencia de una elevación de la altura de la barrera lateral efectiva. En la Figura 55 se presentan los resultados para los anillos cuánticos con espesor de 7nm, altura de la capa húmeda 1nm, ancho reducido de 5nm y diferentes radios exteriores, 10,15 y 25nm. Las alturas de la barrera lateral en estas estructuras son significativamente más elevadas que en el caso considerado arriba, así que la penetración de las partículas dentro de la región central llega a ser posible solamente bajo un campo magnético demasiado fuerte.

Para facilitar la interpretación de estos resultados en la figura interior de la Figura 55 se presenta la dependencia del promedio de la separación electrón-hueco sobre la intensidad del campo magnético calculada mediante el uso de la SPCF dada por la relación (4.2.13).

Figura 55. Energía de enlace del excitón como una función de la intensidad del campo magnético en anillos disco de  $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  con diferente radio exterior 10, 15 y 25 nm. En el recuadro interior esta graficada la dependencia con el campo magnético de la separación promedio del electrón hueco.



Comparando las curvas de la figura principal y la interior se puede observar una similitud especular de estas curvas, a menor energía de enlace mayor es la separación electrón-hueco. Es interesante anotar que la separación promedio electrón-hueco en estados ligados en 2D y en los casos de bloque 3D, en un material de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ , es igual a la mitad ( $\approx 5.2\text{nm}$ ) y a un ( $\approx 10.4\text{nm}$ ) radio de Bohr efectivo, respectivamente.

Por consiguiente los resultados del cálculo se pueden interpretar para las separaciones promedio electrón-hueco presentadas en la figura interior como si ellas se hubieran obtenido para un excitón embebido en un espacio isotrópico efectivo cuya dimensión es fraccionaria y está comprendida entre dos y tres. Esto es debido al confinamiento incompleto en la dirección  $z$  en cualquier estructura de espesor finito. También es claro que el incremento del radio del anillo hace la estructura del excitón más lineal disminuyendo adicionalmente la dimensión del espacio efectivo. Esta es la razón por la que la separación electrón-hueco en los anillos con radios exteriores 15 y 25nm es apreciablemente menor que en un anillo con radio 10nm.

La curvatura de la estructura en el último caso es mayor y la configuración del excitón es más bi-dimensional que uni-dimensional. La altura de la barrera lateral interior efectiva disminuye en la presencia del campo magnético proporcionalmente al valor  $\gamma^2 R_{\text{int}}^2$ .

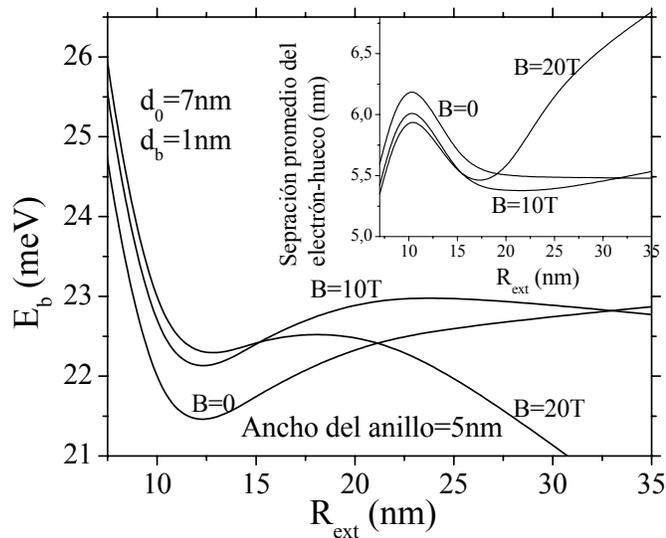
Para las estructuras consideradas, este descenso es insuficiente para un incremento significativo de la probabilidad de tunelamiento del hueco en la región central, pero esta probabilidad se hace suficientemente significativa para el electrón en un QR con  $R_{\text{int}} = 20\text{nm}$  cuando la intensidad del campo magnético llega a ser mayor que 10T. Como resultado, se puede observar en la gráfica interior de la Figura 55 que en estas condiciones la separación promedio del electrón-hueco se incrementa bruscamente mientras que la energía de enlace en la figura principal consigue caer. Tal efecto de un drástico incremento de la separación electrón-hueco y el correspondiente decrecimiento de la energía de enlace del exciton se puede conseguir aplicando un campo magnético suficientemente débil en un anillo cuántico con mayor radio interior que abre algunas posibilidades adicionales para manejar el espectro del excitón.

Cuando la altura de la barrera interior en presencia del campo magnético externo (proporcional al valor  $\gamma^2 R_{\text{int}}^2$ ) depende también del radio del QR se puede esperar que la separación electrón-hueco y la energía de enlace del excitón pudieran ser muy sensibles a la variación del tamaño lateral del anillo cuántico. A mayor radio interior del anillo cuántico y más ligera la partícula, mayor es la probabilidad para el tunelamiento de la partícula en la región central de la barrera. Así que

hay otra posibilidad para aumentar drásticamente la separación electrón-hueco se consigue variando el radio del anillo cuántico.

En la Figura 56 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace del exciton como una función del radio exterior de los anillos cuánticos de  $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  con ancho fijo 5nm para tres diferentes valores de las intensidades del campo magnético, 0, 10 y 20T. En la gráfica interior se muestra la variación correspondiente del promedio de la separación electrón-hueco.

Figura 56. Energía de enlace del exciton como una función del radio exterior de los anillos cuánticos de  $In_{0.55}Al_{0.45}As/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$  QRs con anchos fijos para diferentes valores de las intensidades del campo magnético externo. En la gráfica interior, se grafica la separación promedio del electrón-hueco dependiendo del radio exterior. Las mismas curvas convencionales son usadas en la figura principal.



De la Figura 56 puede verse que cuando el radio exterior  $R_{ext}$  aumenta desde 7.5nm (bajo la condición que el ancho del anillo sea fijo) el electrón y el hueco primero llegan a ser comprimidos en los lados opuestos del anillo y la separación electrón-hueco sube hasta alcanzar un máximo cuando  $R_{ext}$  se hace aproximadamente igual al radio de Bohr efectivo (alrededor de 10nm).

Cuando se incrementa un poco más el  $R_{ext}$ , el electrón y el hueco saltan sobre el mismo lado del anillo y la separación electrón-hueco cae más rápidamente. En la presencia de un campo magnético débil o intermedio la altura de la barrera interior decrece suavemente cuando el radio interior crece haciendo posible el

tunelamiento del electrón a la región central de la barrera. Como resultado, la separación electrón-hueco vuelve otra vez a incrementarse. En la figura interior se puede observar que tal incremento se presenta desde  $R_{ext} \approx 17$  nm cuando  $B=10$ T y desde  $R_{ext} \approx 22$  nm cuando  $B=20$ T. También se puede observar una completa concordancia entre las curvas de la figura interior y las de la figura principal. A mayor separación del electrón-hueco menor es la energía de enlace del excitón y viceversa.

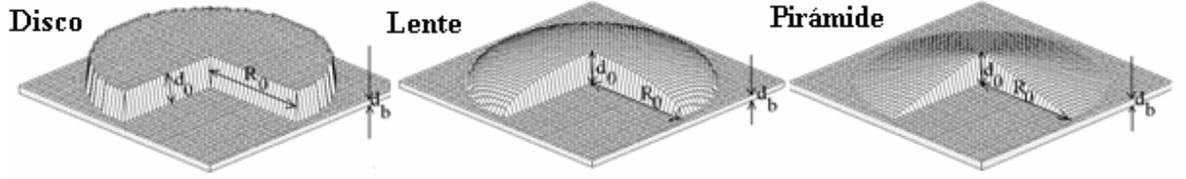
### 4.3 DISTRIBUCIÓN DE CARGA EN PUNTOS CUÁNTICOS CON UN EXCITON ATRAPADO [52]

En este párrafo se calcula la función de onda del estado base del par electrón-hueco confinado en discos cuánticos, lentes y pirámides de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$  depositados sobre una capa húmeda y embebidos en una matriz hecha del material  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  y se demuestra que el incremento del espesor de la capa húmeda conduce a una disminución de la altura de la barrera efectiva para ambas partículas reforzando significativamente el tunelamiento del electrón dentro de la capa húmeda. En consecuencia, la región central del punto con el exciton capturado se carga positivamente mientras la capa húmeda alrededor del punto cuántico se carga negativamente.

Aquí consideramos los QDs con simetría axial cuyas imágenes 3D se presentan en la Figura 57 y las cuales están caracterizadas por la base del radio  $R_0$ , el espesor de la capa húmeda  $d_b$ , la máxima altura sobre esta capa  $d_0$ , por la dependencia de la altura de la heteroestructura  $d$  y por la distancia  $\rho$  desde el eje  $\mathcal{G}(x)$  es la función de paso de Heaviside y el parámetro  $n$  es igual a 1, 2 o tiende a infinito para formas como disco, lente y pirámides, respectivamente.

$$d(\rho) = d_b + d_0 \left[ 1 - (\rho/R_0)^n \right]^{1/n} \mathcal{G}(R_0 - \rho) \quad (4.3.1)$$

Figura 57. Imágenes tridimensionales de puntos cuánticos.



Para hacer una comparación válida entre el método desarrollado y el tratamiento completamente 3D realizado en la Referencia [104] para discos cuánticos, se considerarán cuatro simulaciones de las estructuras de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ . Siguiendo el procedimiento propuesto en [123] la función de onda en el QD se puede expresar como:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = f_e(\mathbf{r}_e) f_h(\mathbf{r}_h) \Phi(r_{eh}) \quad (4.3.2)$$

siendo  $\mathbf{r}_e$  y  $\mathbf{r}_h$  los vectores de posición del electrón y el hueco,  $r_{eh}$  la distancia entre las partículas,  $f_e(\mathbf{r}_e)$ ,  $f_h(\mathbf{r}_h)$  las funciones de onda del estado base del electrón y del hueco y  $\Phi(r_{eh})$  una función variacional desconocida que toma en cuenta la correlación de las partículas causada por la atracción electrón-hueco.

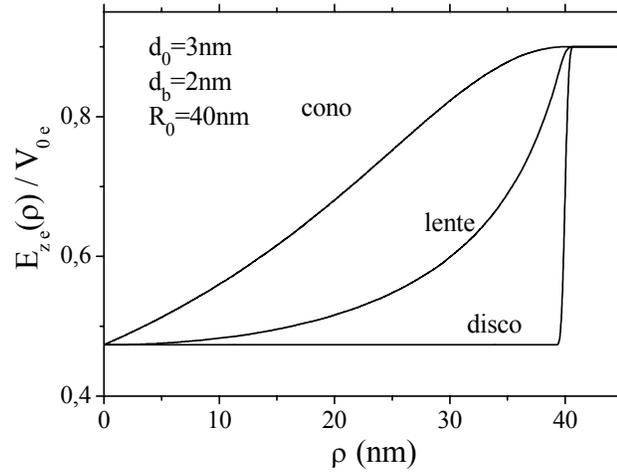
La función variacional depende solamente de la separación electrón-hueco. A fin de encontrar las funciones de onda uni-particulares  $f_p(\mathbf{r}_p)$ ,  $p = e, h$  y las correspondientes energías del estado base  $E_e$  y  $E_h$  se usa la aproximación adiabática [104, 119], en la que el movimiento rápido a lo largo de la dirección  $z$  es separada del movimiento lento en dirección radial y las funciones de onda en el punto cuántico delgado se pueden escribir como:

$$f_p(\mathbf{r}_p) = f_{z_p}(z_p, \rho_p) f_{\rho_p}(\rho_p); \quad p = e, h \quad (4.3.3)$$

Aquí  $f_{z_p}(z_p, \rho_p)$  es la función de onda del estado base para el movimiento unidimensional a lo largo del eje  $z$  en un pozo cuántico con la altura de la barrera  $V_{0p}$  y ancho del pozo igual al espesor  $d(\rho)$  de la capa de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ . Las correspondientes energías del estado base para el movimiento libre a lo largo de la dirección  $z$ ,  $E_{ze}(\rho)$  y  $E_{zh}(\rho)$  dependen de la distancia  $\rho$  desde el eje y estas son usadas como las curvas de potencial para los problemas de campo central bidimensional para el electrón y el hueco cuya solución numérica permite encontrar las funciones del estado base  $f_{\rho_p}(\rho_p)$ ;  $p = e, h$ , que describen su movimiento en la dirección radial y las energías uni-particulares del estado base  $E_e$  y  $E_h$ .

Un ejemplo del cálculo de las curvas de potencial para el movimiento del electrón en la dirección radial en un disco, una lente y un cono con radio de la base de 40nm, espesor de la capa húmeda 2nm y altura sobre la capa húmeda 3nm se presentan en la Figura 58.

Figura 58. Curvas de potencial efectivo para el movimiento del electrón en el plano en puntos cuánticos con diferentes perfiles.



Se puede ver que el más fuerte confinamiento en el plano se produce para el punto cuántico en forma de cono, seguido por la lente y el menor confinamiento lo tiene el punto cuántico con forma de disco.

La energía del estado base del excitón  $E$  se determina usando el principio variacional de Schrödinger que dice que la mayor aproximación [104] a la función de onda del estado base corresponde a la función para la cual el funcional  $E[\Phi]$  tiene un valor estacionario, es decir, la derivada funcional con respecto a  $\Phi(r)$  es igual a cero.

Esto da una ecuación de onda [75]:

$$-\frac{1}{P_0(r)} \frac{d}{dr} P_1(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{2}{r} \Phi(r) = (E - E_e - E_h) \Phi(r) \quad (4.3.4)$$

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

$$\begin{aligned}
 P_0(r) &= \int d\mathbf{r}_e \int \Psi^2(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, \tau = 0) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \\
 &= \int f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int f_h^2(\mathbf{r}_h) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h
 \end{aligned} \tag{4.3.5}$$

$$P_1(r) = \int (\eta_e(\mathbf{r}_e) + \mu/m_h) f_e^2(\mathbf{r}_e) d\mathbf{r}_e \int f_h^2(\mathbf{r}_h) \delta(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| - r) d\mathbf{r}_h \tag{4.3.6}$$

Aquí la función  $\eta_e(\mathbf{r}_e)$  se define como  $\eta_e(\mathbf{r}_e) = \mu/m_{ew}$  dentro del punto cuántico y  $\eta_e(\mathbf{r}_e) = \mu/m_{eb}$  fuera del punto cuántico. La ecuación (4.3.4) nos permite encontrar directamente la energía de enlace del excitón  $E_b$  definida como:

$$E_b = E_e + E_h - E \tag{4.3.7}$$

Para encontrar la energía del exciton  $E$ , en el proceso numérico se usa el método de barrido trigonométrico [62] tres veces; dos veces para encontrar las funciones de onda  $f_{\rho_e}(\rho)$  y  $f_{\rho_h}(\rho)$  correspondientes a los movimientos del electrón y del hueco en el campo central con potenciales  $E_{ze}(\rho)$  y  $E_{zh}(\rho)$  respectivamente, y la tercera vez, para resolver la ecuación de onda (4.3.2) para la función variacional  $\Phi(r)$ . Este procedimiento numérico es similar a uno usado anteriormente en la Referencia [123] donde se demuestra que este método permite obtener resultados que son consistentes con las energías del estado base del excitón en disco cilíndricos de GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As encontrados previamente en la Referencias [126] usando el método variacional y con un tratamiento 3D completo para el disco cuántico de In<sub>0.55</sub>Al<sub>0.45</sub>As/Ga<sub>0.65</sub>Al<sub>0.35</sub>As realizado en la Referencia [104].

Teniendo en cuenta una apreciable reducción de la altura efectiva de la barrera debido a una elevación significativa de la altura de los niveles de las partículas confinadas en la dirección de crecimiento dentro de la capa húmeda y el SAQD, se puede esperar un notable tunelamiento de las partículas hacia el medio ambiente del GaAs y una considerable separación espacial anisotrópica, del electrón ligero y el hueco pesado atrapados en el SAQD.

Para estimar las dimensiones del SAQD y de la WL, cuando tales efectos pueden apreciarse, se debe usar primero la relación de incertidumbre. Cuando el espesor  $d$  de la capa de InAs decrece la energía cinética de la partícula, la cual puede ser estimada mediante la relación de incertidumbre como  $\approx \eta^2 / (2m_{pw} d^2)$ ,  $p = e, h$ , crece.

El tunelamiento a través de la barrera se hace significativo cuando la energía cinética se aproxima al valor de la altura de la barrera  $V_p$ . Esto sucede cuando el espesor de la capa  $d$  satisface la condición  $d \leq a_0^* \sqrt{3\mu \cdot Ry^* / m_{pw} V_p}$ . Así se puede estimar que el considerable tunelamiento en la dirección de crecimiento del electrón sucede cuando el espesor de la capa de InAs es del orden de 3nm mientras que el tunelamiento del hueco es apreciable solamente cuando este valor es alrededor de 1nm.

Por consiguiente, se puede esperar cambios anisotrópicos de la distribución de la carga dentro y alrededor de un SAQD, cuyo espesor de la capa de InAs comúnmente es del orden de 2-4nm, cuando éste atrapa un exciton.

Características espaciales relevantes del excitón en un QD son la separación entre el electrón y el hueco y el momento dipolar. Estas características pueden expresarse en términos de las densidades de probabilidad bi-dimensionales de encontrar el electrón  $\Pi_e(\rho, z)$ , y el hueco  $\Pi_h(\rho, z)$ , en el punto con coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$  que en concordancia con las relaciones (4.3.2) y (4.3.3) se pueden calcular como sigue:

$$\Pi_e(\rho, z) = \rho f_{\rho e}^2(\rho) f_{z e}^2(z, \rho) C_e(z, \rho); \quad \Pi_h(\rho, z) = \rho f_{\rho h}^2(\rho) f_{z h}^2(z, \rho) C_e(z, \rho); \quad (4.3.8)$$

$$C_e(z, \rho) = \int_0^{\infty} f_{\rho p}^2(\rho_p) d\rho_p \int_{-\infty}^{+\infty} f_{z p}^2(z_p, \rho_p) dz_p \int_0^{2\pi} \Phi^2 \left( \sqrt{\rho^2 + \rho_p^2 - 2\rho\rho_p \cos \vartheta + (z - z_p)^2} \right) d\vartheta \quad (4.3.9)$$

La distribución de la densidad de carga  $Q(\rho, z)$  en un SAQD con un exciton atrapado es igual a la diferencia entre las densidades de probabilidad entre el electrón y el hueco:

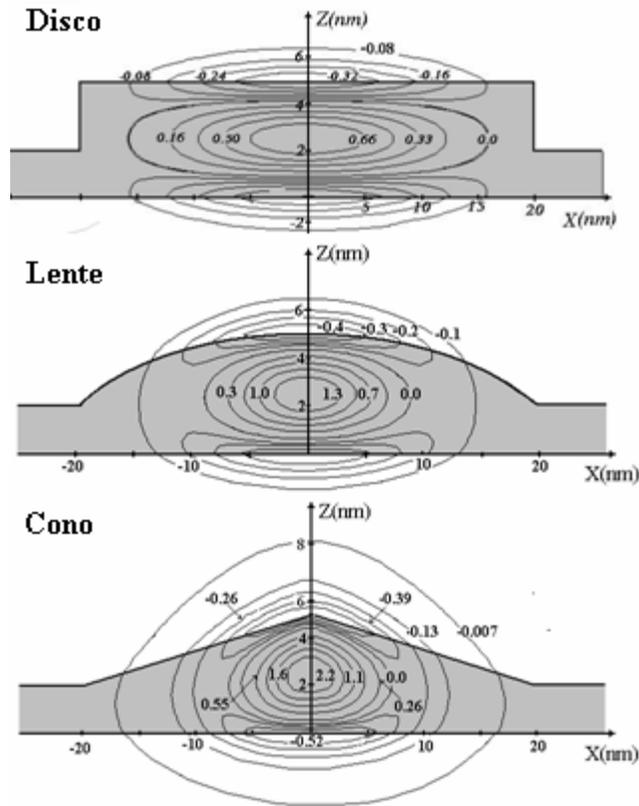
$$Q(\rho, z) = \Pi_h(\rho, z) - \Pi_e(\rho, z) \quad (4.3.10)$$

En la Figura 59 se presentan las gráficas de contorno, que corresponden a las líneas de nivel de la distribución de la densidad de carga a lo largo de la sección transversal de (a) un disco cuántico, (b) una lente y (c) un cono de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  debido a un excitón atrapado.

Las partes sombreadas de las figuras indican las regiones cargadas positivamente del material de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}_1$ . Como se ve la distribución de la densidad radial de carga dentro de los QDs próxima al eje es positiva mientras que en las regiones periféricas próximas a las uniones es negativa.

La masa efectiva del electrón es más pequeña que la del hueco y por consiguiente el tunelamiento del electrón es más significativo cuando la altura del QD es alrededor de 3-5nm mientras que el movimiento del hueco permanece fuertemente restringido dentro del QD. Esta es la razón por la que la región central de los SAQDs en presencia del exciton es cargada positivamente mientras que las regiones periféricas arriba y abajo de los discos próximos a las uniones son cargadas negativamente.

Figura 59. Gráficas de contorno de la distribución de densidad radial de carga en un plano a través del eje de simetría del disco cuántico, lente y cono de radios 20nm con alturas de 3 nm sobre la capa húmeda y 2nm de espesor de la WL.



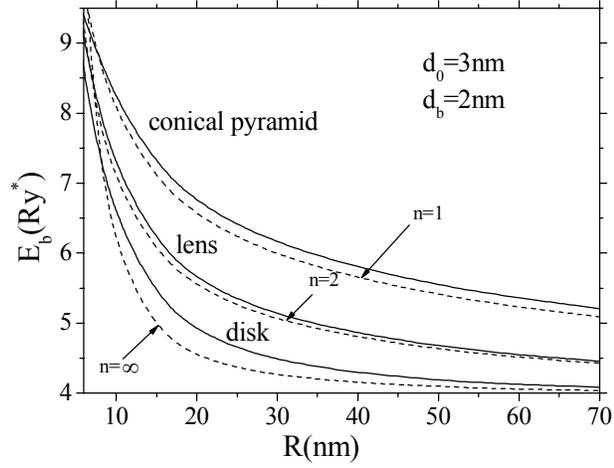
Comparando las distribuciones de carga en los diferentes tipos de SAQDs se puede ver que el tunelamiento del electrón es reforzado en todas las direcciones cuando la morfología del QD cambia a un perfil más angulado. El momento bipolar para todas las distribuciones en la Figura 59 es igual a cero porque la simetría axial de las estructuras y de la distribución es caracterizada por el momento cudrupolar el cual para todas las estructuras es positivo. Cuando el espesor del punto disminuye hasta llegar a ser comparable con el de la WL el

tunelamiento del electrón se refuerza y el momento cuadrupolar aumenta. Debe ser interesante analizar la relación del momento cuadrupolar y la alteración de la morfología del QD. De la Figura 59 se puede ver que el momento cuadrupolar aumenta cuando la forma del punto cuántico llega a tener un ángulo más agudo y las componentes del momento cuadrupolar correspondientes a la dirección lateral llegan a ser más significantes cuando la morfología cambia de una especie de disco a una especie de lente y después a una especie de pirámide. Es evidente que el momento cuadrupolar de los puntos cuánticos con el exciton atrapado es una característica importante relacionada a su morfología y a las componentes del momento cuadrupolar que sufre un extraordinario cambio cuando se modifica la forma del punto cuántico.

En la Figura 60 se muestra la energía de enlace del exciton dependiente del radio de la base del disco, de la lente y del cono con 3nm de altura sobre una WL de 2nm de espesor. Entre menor sea el parámetro entero  $n$  generador de forma en la ecuación (4.3.1) mayor es la energía de enlace del excitón. Cuando el radio de la base aumenta el confinamiento se hace más débil y la energía de todo los puntos cuánticos caen tendiendo en todos los casos al límite de la energía del excitón 2D igual a  $4Ry^*$ .

Para explicar esta tendencia y encontrar la dependencia de la energía del exciton sobre el parámetro generador de forma  $n$ , se consideran los potenciales aproximados para el movimiento de las partículas en el plano dados por la expresión  $V_p(\rho_p) = E_{layer}^{(p)} + 0.4 \cdot V_{0p} (\rho_p/R_0)^n$ ;  $0 < \rho_p < R_0$ ;  $p = e, h$ , consistente con el cálculo numérico presentado en la Figura 57.

*Figura 60. Energías de enlace del excitón (líneas continuas) como funciones del radio de la base en QDs con diferentes perfiles. Las líneas a trazos son las energías de enlace del exciton estimadas mediante el uso de la relación de incertidumbre (ver los detalles en el texto).*



Aquí  $E_{layer}^{(p)}$ ,  $p = e, h$  son las energías de las partículas en la capa de InAs cuyo espesor es igual a  $d_0 + d_b$ . Debido al confinamiento lateral dado por este potencial, los niveles de energía uni-particulares  $E_e$  y  $E_h$  son mayores que los niveles de energía  $E_{layer}^{(p)}$ ,  $p = e, h$  correspondientes a la capa homogénea de InAs. Cuando el radio de la base crece, las energías uni-particulares caen y tienden a cero pero su convergencia a cero es diferente en puntos cuánticos con diferentes formas. Usando la relación de incertidumbre se pueden estimar las energías uni-particulares por encima de los niveles  $E_{layer}^{(p)}$ ,  $p = e, h$  como:

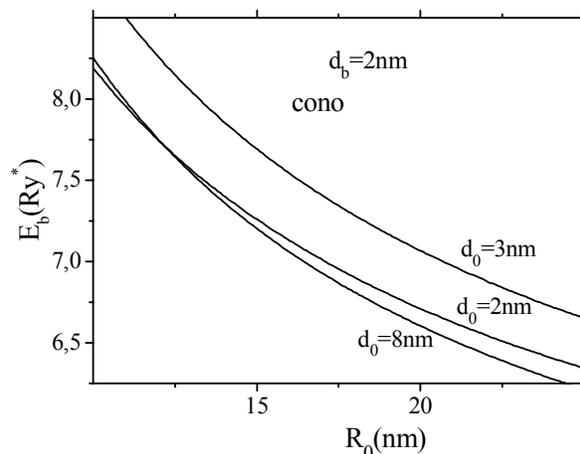
$$E_p \approx Ry^* \left( 0.4 \cdot V_{0p} / Ry^* \right)^{2/(n+2)} \left( \mu / 4m_{pw} \right)^{n/(n+2)} \left( a_0^* / R_0 \right)^{2n/(n+2)}; \quad p = e, h.$$

Asumiendo que el movimiento del excitón en el plano en los QDs con radio mayor que 10nm (el radio de Bohr efectivo es alrededor de 10nm) puede considerarse casi dentro de la capa de InAs, la energía estimada del estado base del excitón casi-bi-dimensional debería ser alrededor de  $-4Ry^*$ .

Finalmente, de acuerdo a la definición (4.3.7) se obtuvo la siguiente semi-empírica expresión para las energías de enlace en los SAQDs cuyos potenciales laterales de confinamiento son presentados en la Figura 57  $E_b \approx \left[ 4 + (2 + 2/n) \left( a_0^* / R_0 \right)^{2n/(n+2)} \right] \cdot Ry^*$ ;  $n = 1, 2, \infty$ . Los resultados correspondientes para las energías de enlace estimadas mediante el uso de estas relaciones son mostradas en la Figura 60 (líneas a trazos). La concordancia de los cálculos vaiacionales realizados es aceptable considerando la simplicidad del procedimiento.

Para analizar los efectos de la variación de la altura del QD sobre las propiedades del exciton se ha calculado la energía de enlace del excitón dependiente del radio de la base de un cono con tres diferentes alturas  $d_0$  sobre la WL cuyo espesor es igual a  $d_b = 2nm$ . Algunos de estos resultados se muestran en la Figura 61. A primera vista, el decrecimiento de la altura del QD podría siempre producir una reducción de la separación entre el electrón y el hueco y como consecuencia una elevación en la energía de enlace del excitón. De hecho, tal comportamiento se observa cuando el radio de la base del cono decrece sucesivamente hasta 3nm como se ve en la Figura 61 donde la energía de enlace del excitón en el cono cuya altura es igual a 8nm es menor que la del cono con altura 3nm para todos los valores del radio de la base. Pero cuando la altura del QD decrece más lejos y llega a ser menor que 3nm, la energía de enlace del excitón empieza a caer.

En la Figura 61 se puede ver que las energías de enlace del exciton en QDs con altura de 2nm son menores que en los QDs con alturas de 3nm. La razón para tal comportamiento inusual de la energía de enlace del excitón consiste en el hecho que cuando se reduce la altura del QD de 3nm a 2nm la incertidumbre de la posición del electrón en la dirección z se hace muy pequeña, el nivel de energía más bajo del electrón es empujado hacia arriba y el desbordamiento de la función de onda del electrón en las regiones de la barrera en la dirección z se hace tan significativo que la separación promedio entre el electrón y el hueco aumenta hasta llegar a un tamaño tal como el de un punto cuántico de altura 8nm. Como se demostró arriba usando la relación de incertidumbre el valor umbral para el ancho del pozo es alrededor de  $a_0 * \sqrt{3\mu \cdot Ry^* / m_{pw} V_p}$ . Para la estructura considerada el valor umbral da alrededor de 2.5nm. Este resultado explica el comportamiento inusual de la energía de enlace del excitón cuando la altura del punto cuántico se hace menor que 3nm.



## 5. CONCLUSIONES

---

---

En este trabajo de investigación se ha desarrollado un nuevo y simple método para analizar el espectro energético de un sistema de dos partículas confinadas en puntos cuánticos auto-ensamblados. Este método se usa para calcular las energías y la distribución de carga en un punto cuántico con dos partículas atrapadas:

- a) En el capítulo dos, para dos electrones sin ligaduras.
- b) En el capítulo tres, para dos electrones ligados a un ión (donadora negativamente cargada  $D^-$ ) o a un hueco (trión cargado negativamente  $X^-$ ) y
- c) En el capítulo cuatro, para un par electrón-hueco (exciton  $X$ ).

El método está basado en la utilización de la aproximación adiabática para analizar el espectro uní-particular (correspondiente al modelo aproximado cuando la interacción entre las partículas se desprecia) y el método de dimensión fractal para analizar los efectos de correlación relacionados con la interacción entre ellas. La precisión de este procedimiento se verificó comparando los resultados obtenidos con unos similares conseguidos con la utilización de métodos diferentes como el método variacional, diferencias y elementos finitos y otros.

La aproximación adiabática permite aprovechar una particularidad específica de los puntos cuánticos auto-ensamblados relacionada con su morfología: éstos siempre tienen una forma de una película delgada con una pequeña razón del grosor de la película a su dimensión lateral y se pueden considerar independientemente dos movimientos de las partículas, el movimiento rápido en la dirección transversal a la película y el lento en el plano de la película, en el marco de un procedimiento matemáticamente riguroso.

El método de dimensión fractal permite reducir el problema de dos partículas (que sugiere en forma general resolver una ecuación de onda en un espacio de seis dimensiones) a una ecuación de onda uní-dimensional que describe la variación de una sola característica muy importante para sistemas de dos partículas, la separación entre las ellas. La ecuación obtenida corresponde al movimiento de una partícula efectiva en un campo central bidimensional con un potencial efectivo que comprende toda la información sobre la geometría del punto cuántico, los potenciales de confinamiento y las interacciones electrostáticas.

Se demostró que en los casos de los estados ligados formados por las partículas, por ejemplo, donadoras, excitones, triones, etc. esta ecuación tiene las soluciones

que corresponden al espectro de un átomo hidrogenoide sometido en un espacio efectivo con la dimensión fraccionaria, la cual se disminuye de tres a cero con el aumento del confinamiento, es decir, disminuye a la dimensión del punto cuántico auto-ensamblado. En el caso cuando las partículas no forman estados ligados con ninguna otra carga esta ecuación tiene un potencial de confinamiento efectivo que varía paulatinamente desde un potencial repulsivo de carácter Coulombiano para pequeños separaciones entre dos partículas hasta un potencial atractivo que se transforma en una barrera cuando la separación supera el tamaño lateral de la película.

En el caso de dos electrones se analizaron los niveles más bajos correspondientes a los estados base 1S y los dos primeros excitados  $2^1P$  y  $2^3P$ , utilizando el método elaborado en esta tesis y la función de prueba de tipo Chandrasekhar. Utilizando la función de prueba de tipo Chandrasekhar se compararon las estructuras electrónicas para estados excitados tanto con las capas cerradas como con las capas abiertas. Se encontró que el estado base de la estructura electrónica sufre una transición desde la capa abierta a la capa cerrada cuando el radio de punto cuántico de GaAs/Ga(Al)As disminuye hasta llegar a ser menor que un radio de Bohr efectivo.

Se presentaron curvas novedosas de las energías de los estados 1S,  $2^1P$  y  $2^3P$  del punto cuántico esférico de GaAs/Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As con diferentes formas de potencial y los resultados del análisis del efecto de la forma del potencial de confinamiento y de la presencia del núcleo repulsivo sobre la función de correlación para la separación entre dos partículas en los estados 1S,  $2^1P$  y  $2^3P$ . Se demostró que cuando el radio de; punto cuántico se hace mayor de uno-dos radios de Bohr la energía potencial (de repulsión) se hace mucho mayor que la energía cinética y la estructura electrónica sufre una transición de tipo Wigner, cuando los electrones casi se congelan en los extremos opuestos de la esfera.

Se demostró que la ecuación de onda uní-dimensional derivada en esta tesis para dos partículas en realidad esta ligada íntimamente con la función espacial de correlación del par que describe las propiedades probabilísticas de la separación entre partículas. Utilizando esta característica se presentó el análisis de la función espacial de correlación del par para puntos cuánticos de diferentes formas en los casos de repulsión (dos electrones) y atracción (electrón-hueco) entre partículas. Además, se analizó el efecto de la interacción Coulombiana sobre la correlación de las partículas, en anillos cuánticos con los potenciales de confinamiento de forma rectangular y parabólica.

Utilizando la solución exacta obtenida recientemente para el modelo de dos electrones en un anillo unidimensional y la aproximación adiabática se pudo resolver el problema similar para un anillo con un grosor pequeño pero finito. A este modelo se le analizó el espectro electrónico de un sistema de dos electrones

cuando la sección transversal del anillo es de forma rectangular. Se analizaron los cambios del espectro al variar el radio del anillo y el espesor. Se analizaron las posibilidades de desbordamiento de la función de onda electrónica en las regiones de la barrera con la disminución del espesor y se demostró que el desbordamiento ocurre primero en la región del hueco central.

Estos resultados fueron extendidos para analizar el espectro energético de dos electrones localizados en dos anillos separados y acoplados verticalmente. Para este modelo, se analizaron además, los cambios del espectro con la variación de la separación entre los anillos y de la intensidad de campo magnético aplicado a lo largo del eje de simetría. Se demostró que en el caso cuando la separación entre los anillos tiende a cero los resultados obtenidos convergen a los valores correspondientes al modelo con solución exacta.

Se calcularon las energías del estado base de las donadoras neutras y negativamente cargadas en los puntos cuánticos con simetría axial con diferentes formas geométricas: disco, lente, cono y anillo. Los resultados del cálculo se han presentado en la forma de las correspondientes energías dependientes del radio de la base y de la altura del punto cuántico y de la posición de la donadora. Además se realizaron los gráficos de contorno a lo largo de la sección a través del eje de simetría, que corresponden a las líneas de niveles de las energías de las donadoras con diferentes ubicaciones.

Se encontró que el mayor incremento de las energías de enlace entre todas las formas de puntos cuánticos se presenta en las donadoras cargadas negativamente y las donadoras neutras ubicadas en los puntos cuánticos con la forma de cono y se demostró que este aumento está acompañado con el incremento del cociente entre estas dos energías. Este incremento es tan grande que se hace posible la transferencia de carga desde una donadora neutra localizada en una región periférica hacia otra donadora neutra ubicada cerca del eje, formando de esta manera una nueva donadora cargada negativamente. Además se encontró que el cociente decrece desde un valor típico para una estructura cero-dimensional 0.3 hasta otro valor 0.2 típico para una estructura unidimensional cuando la donadora se desplaza desde el eje hacia la barrera.

Los resultados obtenidos para una donadora cargada negativamente fueron extendidos para analizar las características similares de un trion cargado negativamente, formado por dos electrones y un hueco con masa efectiva mucho mayor que el valor correspondiente del electrón. Con este fin se utilizó otra vez la aproximación adiabática para separar el movimiento rápido de los electrones ligeros del movimiento lento del hueco pesado. Se presentaron los resultados del análisis de las energías de enlace de los triones en los discos y anillos cuánticos y sus variaciones con los cambios de los parámetros geométricos.

Se presentaron los resultados de aplicación del método desarrollado para analizar las propiedades de un exciton atrapado en los puntos cuánticos autoensamblados en forma de una pirámide, disco o un anillo.

Los resultados numéricos obtenidos demuestran que la energía de enlace del excitón, la separación promedio entre el electrón y el hueco, y la distribución de carga relacionada con esta separación dentro y fuera del punto cuántico, son muy sensibles a la morfología de la heteroestructura, al espesor de la capa húmeda y a la variación de la intensidad del campo magnético. Tal sensibilidad de las propiedades electrónicas está relacionada con dos factores importantes. El primero de ellos es el descenso de la altura de la barrera debido a la presencia de la capa húmeda y al campo magnético externo. El descenso refuerza considerablemente el tunelamiento de las partículas dentro de la región central de la barrera. El segundo factor se refiere a la diferencia entre las masas efectivas entre el electrón y el hueco que contribuye a la separación de las partículas, haciendo más probable el tunelamiento del electrón que el del hueco.

Se presentaron los resultados del cálculo de la distribución de carga en una heteroestructura con geometría similar a la de un anillo respecto a la presencia de un excitón.

Se encontró que la región periférica del punto cuántico se carga negativamente y que la distribución de carga está caracterizada por un momento cuadrupolar negativo cuando el radio de la región central de la barrera es pequeño. La distribución de carga se hace positiva cuando el radio de la región central de la barrera se hace suficientemente grande. En este caso predomina el tunelamiento del electrón dentro de esta región, la carga negativa se localiza mayormente cerca de la unión interior, y el signo del momento cuadrupolar se hace positivo. La situación cambia notablemente en las heteroestructuras con el incremento del espesor de la capa húmeda. El formalismo desarrollado aplicado al modelo simplificado de un disco cuántico, que ignora los efectos de la capa húmeda, da resultados que están en concordancia con los obtenidos previamente por otros autores.

El estudio del efecto de la morfología sobre la distribución de carga en los puntos cuánticos autoensamblados con un exciton atrapado, permitió calcular las funciones de onda del estado base y la energía del excitón en discos, lentes y conos cuánticos planos de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  con diferentes radios de la base, alturas y espesores de la capa húmeda. Se encontró una diferencia significativa entre las distribuciones del electrón y del hueco en la dirección de crecimiento del cristal debido a la diferencia entre sus masas. En estas condiciones, cuando la altura del punto cuántico es del orden de 2-3nm el tunelamiento del electrón ligero hacia la región de la barrera en la dirección de crecimiento del cristal es considerablemente mayor que el tunelamiento del

hueco. Como resultado la función de onda del electrón desborda en las regiones de la barrera encima y debajo de los puntos cuánticos mientras que el hueco permanece confinado mayormente en las proximidades del centro del punto cuántico proporcionando una separación considerable de las cargas positiva y negativa en dirección del crecimiento del cristal. La comparación de los resultados obtenidos para puntos cuánticos con diferente geometría muestra que la separación de las cargas en esta dirección es mayor en puntos cuánticos de forma angulada como el cono, seguido por la lente y luego por el disco.

La separación electrón-hueco en el plano esta definida por la atracción entre ellos y por el confinamiento. Se encontró que el confinamiento en el plano es más fuerte en puntos cuánticos cuyo perfil sea más angulado y por consiguiente, la energía de enlace del exciton, que depende más fuertemente de la separación entre ellos en el plano que de la separación a lo largo de la dirección de crecimiento, es mayor en el cono que en la lente y en la lente es mayor que en el disco. Usando la relación de incertidumbre se derivó una fórmula para estimar las energías de enlace del excitón en puntos con forma similar a discos, lentes y conos, que están en concordancia con los cálculos numéricos realizados cuando el radio de la base es mayor que 20nm.

Este compendio constituye la base para futuras investigaciones que tengan que ver con el análisis de puntos cuánticos de diversa morfología acoplados vertical y lateralmente, los cuales son muy promisorios en el ámbito de las telecomunicaciones y de la computación cuántica.

En conclusión, se utilizó un procedimiento variacional para tratar el problema de pocas partículas confinadas en un punto cuántico autoensamblado el cual se pudo reducir a un problema similar en un espacio efectivo con dimensión fraccionaria variable. De esta manera este método puede ser aplicado para analizar las propiedades de cualquier sistema ligado (donadoras neutras y cargadas negativamente, aceptoras, excitones, triones, etc.), en diferentes tipos de heteroestructuras tales como, SLs, QWs, QWWs, QDs, y QRs.

## BIBLIOGRAFÍA

---

---

- [1]. I. Vurgaftman, J. R. Meyer G and L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, *J. Appl. Phys.* **89**, No. 11, 5815-5862 (2001).
- [2]. J. S. Cheng, W. Sheng, P. Hawrylak, S. Raymond, S. Studenikin, A. Sachrajda, Z. Wasilewski, A. Babinskib, M. Potemski and G. Ortnerc, M. Bayer. Electron-hole complexes in self-assembled quantum dots in strong magnetic fields *Phys. E* **21**, 201 (2004).
- [3]. F. J. Manjon, A. R. Goñi, K. Syassen, F. Heinrichsdorff, and C. Thomsen, Pressure dependence of photoluminescence spectra *Phys. Stat. Solid (b)* **235**, 497 (2003).
- [4]. S. Lia, K. Koikeb, M. Yanob, and Y. Jin, Electronic structure of vertically stacked InAs self-assembled quantum dots by deep level transient spectroscopy *Phys. B* **235**, 41-2 (2003).
- [5]. Li. Serra, A. Puente, E. Lipparini, Moment of iniertia in elliptical quantum dots, *Phys. E* **14**, 391 (2002).
- [6]. S. M. Reimann and Matti Manninen, Electronic structure of quantum dots, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1284-1336 (2002).
- [7]. T. Ando, A. B. Fowler and Frank Stern, Electronic properties of two dimensional systems, *Rev. Mod. Phys.* **54**, No.2, 438-621 (1982).
- [8]. J. H. Davis, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors:an Introduction*, Cambridge University Press, ISBN 0-521-48148-1(hardback), ISBN 0-521-48491-X (paperback), 438 (1998).
- [9]. P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, John Wiley & sons, Ltd., ISBN 10 0 470 01079-7(HB) 0-470-01080-8 (2005).
- [10]. L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*, Springer-Verlag, ISBN 3-540-63653-6, Germany, 176 (1998).
- [11]. A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. García and P. M. Petroff, Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings, *Phys. Rev. Lett.* **84**, No. 10, 2223-2226 (2000).

- [12]. H. Pettersson, R. J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. García, P. M. Petroff, Excitons in self-assembled quantum ring-like structures, *Physica E* **6**, 510-513 (2000).
- [13]. A. Lorke, R. J. Luyken, J. M. García and P. M. Petroff, Grow and electronic properties of Self-Organized Quantum Rings, *The Jap. Soc. Appl. Phys.* **40**, Part. 1, No. 3B, 1857-1859 (2001).
- [14]. T. Raz, D. Rittler and G. Bahir, Formation on InAs self-assembled quantum rings on InP, *Appl. Phys. Lett.* **82**, No. 11, 1706-1708 (2003).
- [15]. D. Granados and J. M. García, In(Ga)As self assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401-2403 (2003).
- [16]. T. Chakraborty and P. Pietiläinen, Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring, *Phys. Rev. B* **50**, No. 12, 8460 (1994).
- [17]. F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Two-electron quantum disks, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [18]. J. L. Zhu and Z. Dai, Two electrons in one-dimensional nanorings: Exact solutions and interaction energies, *Phys. Rev. B* **68**, 045324 (2003).
- [19]. A. Puente and Ll. Serra, Ground state and far-infrared absorption of the two electron rings in a magnetic field, *Phys. Rev. B* **63**, 125334 (2001).
- [20]. M. El-Said, Energy States of Two Electrons in a Parabolic Quantum Dot in a Magnetic Field, *J. Physique France* **5**, 1027-1036 (1995).
- [21]. M. El-Said, Spectroscopic structure of two interacting electrons in a quantum dot by the shifted  $1/N$  expansion method, *Phys. Rev. B* **61**, 13026 (2000).
- [22]. B. A. McKinney and D. K. Watson, Semiclassical perturbation theory for two electrons in a D-dimensional quantum dot, *Phys. Rev. B* **61**, 4058 (2000).
- [23]. B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Electron-electron correlation in quantum dots, *Physica E* **5**, 185 (2000).
- [24]. J. Adamowski, M. Sobkowiez, B. Szafran, and S. Bednarek, Electron pair in a Gaussian confining potential, *Phys. Rev. B* **62**, 4234-4237 (2000).
- [25]. M. El-Said, Energy States of Two Electrons in a Parabolic Quantum Dot in a Magnetic Field, *J. Phys. 1 France* **5**, 1027 (1996).

- [26]. M. El-Said, Spectroscopic structure of two interacting electrons in a quantum dot by the shifted  $1/N$  expansion method, *Phys. Rev. B* **61**, 13026 (2000).
- [27]. D. Bielinska-Waz, J. Karwowski and G. H. F. Diercksen, Spectra of confined two-electron atoms, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34**, 1987 (2001).
- [28]. R. Pino and V. M. Villalba, Calculation of the energy spectrum of a two-electron spherical quantum dot, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, 11651 (2001).
- [29]. M. K. El-Said, The Effects of Dimensionality on the Spectral Properties of a Two-Electron Quantum Dot, *Chinese J. Phys.* **40**, No. 3, 315 (2002).
- [30]. M. Dineykhani and R. G. Nazmitdinov, Two-electron quantum dot in a magnetic field: Analytical results, *Phys. Rev. B* **55**, No. 20, 13707-13714 (1997).
- [31]. J-L. Zhu, Z-Q. Li, J-Z. Yu, K. Ohno, and Y. Kawazoe, Size and shape effects of quantum dots on two-electron spectra, *Phys. Rev. B* **55**, No. 23, 15819 (1997).
- [32]. T. Garm, Exciton states in spherical parabolic GaAs quantum dots, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5725-5735 (1996).
- [33]. M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, S. Bednarek, Modelling of confinement potentials in quantum dots, *Physica E* **15**, 261 (2002).
- [34]. K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Magnetic Field Dependence of the Properties of Excitons Confined in a Quantum Disk, *Phys. Stat. Sol. (b)* **224**, No. 3, 763 (2001).
- [35]. B. Gerlach and F. Luczak, Ground-state energy of an exciton-(LO)-phonon systems in two dimensions, *Phys. Rev. B* **57**, 1814 (1998).
- [36]. R. A. Escorcia, J. Sierra, I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, Exciton fractional dimension in semiconductor heterostructures arising from variational principle, *Physica B* **355**, 255 (2005).
- [37]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, and L. F. García, Two-electron Ground State Instabilities, *Phys. Stat. Sol. (b)* **224**, No. 3, 757-761 (2001).
- [38]. F. García, H. Paredes Gutiérrez and I. D. Mikhailov, Two-electron quasi-one-dimensional nanoring, *Revista Colombiana de Física*, vol. 37, No. 1, 158-162 (2005).

- [39]. F. García, J. H. Marín, H. Paredes, and I. D. Mikhailov, Low-lying states of two-electron quasi-one-dimensional ring, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, No. 10, 3630–3633 (2005).
- [40]. J. H. Marín, F. García, and I. D. Mikhailov, Two Electrons in Vertically Coupled One-Dimensional Rings, *Brazilian J. Phys.* **36**, No. 38, 940 (2006).
- [41]. L. F. García, Spatial correlation of two particles in semiconductor quantum ring, *Physica B* **390**, 340-347 (2007).
- [42]. L. F. García, I. D. Mikhailov, and J. H. Marín, Spectrum of two spatially separated particles in coaxial nanorings, *Revista Colombiana de Física*, Vol. **38**, No. 3, 1078 (2006).
- [43]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and J. H. Marín, Two-electron quantum dot with soft-edge barrier, *Physica E* (2007) (sometido a publicación).
- [44]. W. Gutiérrez, J. H. Marín, F. García and I. D. Mikhailov, Negatively charged donor and trion in quantum ring, *Revista Colombiana de Física* , Vol. **39**, No.1, 150-153 (2005).
- [45]. F. García, F. J. Betancur, W. Gutiérrez, R. Robayo, and J. H. Marín, Negatively charged donor and trion in quantum disks, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, No. 10, 3626–3629 (2005).
- [46]. I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and F. García, Off-axis donors in quasi-two-dimensional quantum dots with cylindrical symmetry, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, No.8, 1636–1649 (2005).
- [47]. L. F. García, J. H. Marín, and I. D. Mikhailov, Negatively Charged Donors in Flat Quantum Dots, *Brazilian J. Phys.* **36**, No. 38, 878 (2006).
- [48]. L. F. García, J. Silva-Valencia, I. D. Mikhailov, and J. E. Galván-Moya, y Charged Donors Binding Energies Of Neutral And Negatively Charged Donors In Nanowire Superlattices, (2007, sometido a publicación).
- [49]. J. H. Marín, F. García and F. J. Betancur, Electron-Hole pair in a Quantum Pyramid, *Rev. Col. Fis*, **37**, No. 1, 94-97 (2005).
- [50]. I. D. Mikhailov, L. F. García, and J. H. Marín, Effect of wetting layer on electron-hole correlation in quantum disks and rings, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 9403 (2006).
- [51]. M. Rontani, F. Rossi, F. Manghi, and E. Molinari, Coulomb correlation effects in semiconductor quantum diots: The role of dimensionality, *Phys. Rev. B* **58**, No. 15, 10165 (1999).

- [52]. J. H. Marín, I. D. Mikhailov, and L. F. García, Charge distribution in quantum dot with trapped exciton, *J. Phys.:Condens. Matter*, (2007, sometido a publicación).
- [53]. L. F. García, J. H. Marín, and I. D. Mikhailov, Exactly solvable model for positively charged exciton in an axially symmetrical one-dimensional structure, *Revista Colombiana de Física*, (2007, sometido a publicación).
- [54]. Arkadiusz Wojs, Pawel Hawrylak and Simon Fafard, Lucjan Jacak, Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots, *Physical Review B* **54**, No. 8 (1996).
- [55]. B. C. Lee, O. Voskoboynikov, C.P. Lee, III-V Semiconductor nano-rings, *Phys. E* **24**, 87, (2004).
- [56]. B. S. Monozon and P. Schmelcher, Impurity center in a semiconductor quantum ring in the presence of crossed magnetic and electric fields, *Phys. Rev.* **67**, 045203 (2003).
- [57]. I D. Vasileska, C. Prasad, H. H. Wieder, and D. K. Ferry, Green's function approach for transport calculation in a In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.52</sub>Al<sub>0.48</sub>As modulation-doped heterostructure, *Phys. Stat. Sol. (b)* **239**, No. 1, 103-109 (2003).
- [58]. A. Matulis and F. M. Peeters, Renormalized perturbation series for quantum dots, *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 7751 (1994).
- [59]. M. Rontani, F. Rossi, F. Manghi, and E. Molinari, Coulomb correlation effects in semiconductor quantum dots: The role of dimensionality, *Phys. Rev. B* **59**, No. 15, 10165-10175 (1999).
- [60]. J-L. Zhu, J-Z. Yu, Z.-Qiang and Y. Kawazoe, Exact solutions of two electrons in a quantum dot, *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 7857 (1996).
- [61]. I. D. Mikhailov and R. J. Betancur, Energy Spectra of Two Particles in a Parabolic Quantum Dot: Numerical Sweep Method. *Physica status solidi (b)* **213**; 325 (1999).
- [62]. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, Shallow donor states in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots with different potential shapes, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391 (1998).
- [63]. C. Riva, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, Off-center  $D^-$  centers in a quantum well in the presence of a perpendicular magnetic field: Angular momentum transitions and magnetic evaporation, *Phys. Rev. B* **57**, 16392 (1998).

- [64]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcia and J. Sierra-Ortega, Off-Center Neutral and Negatively Charged Donor Impurities in Semiconductor Heterostructures: Fractal Dimension Method, *Phys. Stat. Sol. (b)* **234**, 590–610 (2002).
- [65]. D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Screening effects on the  $D^-$  systems in semiconductors, *Phys. Rev., B* **26**, 912 (1982).
- [66]. D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Ground state energy of a  $D^-$  ion in two-dimensional semiconductors, *Phys. Rev., B* **27**, 4883 (1983).
- [67]. T. Pang and S. G. Louie, Negative-Donors Centers in Semiconductors and Quantum Wells, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990).
- [68]. S. Huant, S. P. Najda, and B. Etienne, Two-Dimensional  $D^-$  centers, *Phys. Rev. Lett.* **12**, 1486, (1990).
- [69]. J. L. Zhu, J. H. Zhao, W. H. Duan and B. L. Gu,  $D^-$  centers in spherical quantum dots, *Phys Rev B* **46**, 7546 (1992).
- [70]. D. M. Larsen, Explanation of the formation of  $D^-$  ions in quantum wells, *Phys. Rev. B* **47**, 16333, (1993).
- [71]. X. F. He, Fractional dimensionality and fractional derivative spectra of interband optical transitions, *Phys. Rev. B* **42**, 11751 (1990); Excitons in anisotropic solids: The model of fractional-dimensional space, *Phys. Rev. B* **43**, 2063 (1991).
- [72]. B. S. Zafran, B. Stébé, J. Adamowski, and S. Bednarek, Excitonic trions in single and double quantum dots, *Phys. Rev. B* **66**, 165331 (2002).
- [73]. W. Xie, Spectra of excitons in quantum dots under a magnetic field, *Physica B* **315**, 240 (2002).
- [74]. J. Song and S.E. Ulloa, Magnetic field effects on quantum rings excitons, *Phys. Rev. B* **63**, 1125302 (2001).
- [75]. R. Escorcia, R. Robayo, and I. D. Mikhailov, Renormalized Schrödinger Equation for excitons in Graded Quantum Dot, *Phys. Stat. Sol. (b)* **230**, 431 (2002).
- [76]. M. S. Gudiksen et. al, Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics, *Nature* **415**, 617 (2002).
- [77]. C. Galeriu, L. C. Lew Yan Voon, R. Melnik, and M. Villatzen, Modelling a nanowire superlattice using the finite difference method in cylindrical polar coordinates, *Computer Physics Communications* **157**, 147 (2004).

- [78]. M. Willatzen, R. V. N. Melnik, C. Galeriu, and L. C. Lew Yan Voon, Quantum confinement phenomena in nanowire superlattice structures, *Mathematics and computers in simulation* **65**, 385 (2004).
- [79]. M. P. Persson and H. Q. Xu, Electronic structure of free-standing GaAs/AlGaAs nanowire superlattices. *Phys. Rev.* **B 73**, 35328 (2006).
- [80]. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one- and two-Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin (1957).
- [81]. F. Bolton, Monte-Carlo calculations of few-electron systems in quantum dots, *Solid State Electron*, **37**, 1159 (1994).
- [82]. D. Pfannkuche, V Gudmundsson and P. Maksym, Comparison of a Hartree, a Hartree-Fock, and an exact treatment of quantum-dot helium, *Phys. Rev.* **B 47**, 2244 (1993).
- [83]. J.-J. S. De Groote, J. E. M. Hornos and A. V. Chaplik, Thermodynamic properties of quantum dots in a magnetic field, *Phys. Rev. B* **46**, 12773 (1992).
- [84]. H.-M. Möller and S.E. Koonin, Phase transitions in quantum dots, *Phys. Rev. B* **54**, 14532 (1996).
- [85]. N. F. Johnson, Dimensional instabilities of an electron gas in a quantum dot, *J. Phys.: Condens. Matter.* **4**, L555 (1992).
- [86]. B. Partoens, V. A. Schweigert and F. M. Peeters, Classical Double-Layer Atoms: Artificial Molecules, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3990 (1997).
- [87]. B. R. Bennett, R. Magno, and B. V. Shanabrook, Molecular beam epitaxial growth of InSb, GaSb, and AlSb nanometer-scale dots on GaAs, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 505 (1996).
- [88]. X. Q. Li, Y. W. Wu, D. Steel, D. Gammon, T. H. Stievater, D. S. Katzer, D. Park, D. Pirmarocchi, and I. J. Sham, An all optical quantum gate in a semiconductor quantum dot, *Science* 301, 809 (2003).
- [89]. D. J. Mowbray and M. S. Skolnick, New physics and devices based on self-assembled semiconductor quantum dots, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38**, 2059 (2005).
- [90]. P. A. M. Maksym and T. Chakraborty, Quantum Dots in Magnetic Field: Role of Electron Interactions, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 108 (1990).
- [91]. S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej, and J. Adamowski, Effective interaction for charge carriers confined in quasi-one-dimensional nanostructures, *Phys. Rev. B* **68**, 045328 (2003).

- [92]. B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, and J. Adamowski, In-plane magnetic-field-induced Wigner crystallization in a two-electron quantum dot, *Phys. Rev. B* **70**, 235335 (2004).
- [93]. D. Xu and J-L. Zhu, Two electron spectra and the spin transition in ellipsoidal quantum dots, *Phys. Rev. B* **72**, 075326 (2005).
- [94]. X. Wen-Fang, Ground State of a Two-Electron Quantum Dot with a Gaussian Confining Potential, *Chinese Phys. Lett.* **23**, 193 (2006).
- [95]. S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Parity symmetry and energy spectrum of excitons in coupled self-assembled quantum dots, *Phys. Rev. B* **64**, 125301 (2001).
- [96]. S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Effect of the repulsive core on the exciton spectrum in a quantum ring, *J. Phys.: Condens Matter.* **14**, 73 (2002).
- [97]. H. Mathieu, P. Lefebvre, and P. Christol, Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells, *Phys. Rev.* **46**, 4092 (1992).
- [98]. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, Shallow donor states in GaAs-(Ga, Al)As quantum dots with different potential shapes, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391 (1998).
- [99]. H. Hu, J.L. Zhu, and J. J. Xiong, Energy levels and far-infrared spectroscopy for two electrons in a nanoscopic semiconductor ring, *Phys. Rev. B* **62**, 16 777 (2000).
- [100]. L. Wendler, V.M. Fomin, A.V. Chaplik, and A.O. Govorov, Optical properties of two interacting electrons in quantum rings: Optical absorption and inelastic light scattering, *Phys. Rev. B* **54**, 4794 (1996).
- [101]. L. Jack, P. Hawrylack, A. Wójs, In *Quantum Dots*, Springer, Berlin (1997).
- [102]. P. W. Fry, M. S. Skolnick, D. J. Mowbray, I. E. Itskevich, J. J. Finley, L. R. Wilson, K. L. Schumacher, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, M. Al-Khafaji, et. al., Electronic properties of InAs/GaAs self-assembled quantum dots studied by photocurrent spectroscopy, *Physica E (Amsterdam)* **9**, 106 (2001).
- [103]. A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, and A. Lorke, Far-infrared spectroscopy of nanoscopic InAs rings, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- [104]. K. Janssens, F.M. Peeters, and V.A Schweigert, Magnetic-field dependence of the exciton energy in a quantum disk, *Phys. Rev B* **63**, 205311(2001).

- [105]. D. Xu and J.-L. Zhu, Two-electron spectra and the spin transition in ellipsoidal quantum dots, *Phys. Rev. B* **72**, 075326 (2005).
- [106]. G. H. Coccoletzi and S. E. Ulloa, Excitons confined by split-gate potentials, *Phys. Rev. B* **49**, 7573 (1994).
- [107]. A. A. Bruno and A. Latgé, Semiconductor quantum rings: Shallow-donor levels, *Phys. Rev. B* **61**, 15887 (2000).
- [108]. Z. Barticevic, M. Pacheco, and A. Latgé, Quantum rings under magnetic fields: Electronic and optical properties, *Phys. Rev. B* **62**, 6963 (2001).
- [109]. H. H. Hu, J.-L. Zhu and J.-J. Xiong, Aharonov-Bohm effect of excitons in nanorings, *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001).
- [110]. P. Lefebvre, P. Christol, and H. Mathieu, Unified formulation of excitonic absorption spectra of semiconductor quantum wells, superlattices, and quantum wires, *Phys. Rev. B* **46**, 17308 (1993).
- [111]. S. E. Koonin, *Computational Physics*, Addison Wesley Publishing Company, Inc, California, U.S.A, (1986).
- [112]. S. Le Goff and B. Stébé, Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors, *Phys. Rev. B* **47**, 1383 (1993).
- [113]. S. Glutsch, F. Bechstedt, W. Wegscheider and F. Schedelbeck, Excitons in T-shaped quantum wires, *Phys. Rev. B* **56**, 4108 (1997).
- [114]. J. M. Ferreyra and C. R. Proetto, Excitons in inhomogeneous quantum dots, *Phys. Rev. B* **57**, 9061 (1998).
- [115]. P. G. Bolcatto and C. R. Proetto, Shape and dielectric mismatch effects in semiconductor quantum dots, *Phys. Rev. B* **59**, 12487 (1999).
- [116]. J. Song and S. E. Ulloa, Geometrical-confinement effects on excitons in quantum disks, *Phys. Rev. B* **52**, 9015 (1995).
- [117]. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra-Ortega, Shallow donors in semiconductor heterostructures: Fractal dimension approach and the variational principle, *Phys. Rev. B* **67**, 115317 (2003).
- [118]. W. Xie, C. Chen, Excitonic trion  $X^-$  in GaAs quantum dots, *Physica E* **8**, 77 (2000).
- [119]. J. Palacios and P. Hawrylak, Spin blockade in single and double quantum dots in magnetic fields: A correlation effect, *Phys. B* **51**, 1769 (1995).

- [120]. B. Partoens, A. Matulis, and F. M. Peeters, Two-electron artificial molecule, *Phys. Rev.* **59**, 1617 (1999).
- [121]. G. S. Solomon G S, J. A. Trezza, A. F. Marshall, and J. S. Harris, Vertically Aligned and Electronically Coupled Growth Induced InAs Islands in GaAs, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 952 (1996).
- [122]. M. Korkusinski and P. Hawrylak, Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks, *Phys. Rev. B* **63**, 195311 (2001).
- [123]. J. H. Marín, I. D. Mikhailov, and F. J. Betancur, Effect of the magnetic field on the  $D^-$  ions formation, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1005 (2006).
- [124]. D. M. Larsen, Explanation of the formation of  $D^-$  ions in quantum wells, *Phys. Rev.* **47**, 16333 (1993).
- [125]. Y. Kayanuma, Wannier excitons in low-dimensional microstructures: Shape dependence of the quantum size effect, *Phys. Rev. B* **44**, 13085 (1991).
- [126]. T. S. Koh, Y. P. Feng, X. Xu, and H. N. Spector, Excitons in semiconductor quantum discs, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 1485 (2001).
- [127]. N. Susa, Quantum-Confined Stark Effects in Semiconductor Quantum Disks, *IEEE J. Quantum Electron* 32, 1760 (1996).
- [128]. J. Sierra-Ortega, F. J. Betancur, and I. D. Mikhailov, Negative-donor in graded quantum well-wire: fractal dimension approach, *Phys. Stat. Sol. (b)* **230**, 469 (2002).
- [129]. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, Electronic structure of donor-impurity complexes in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 7283 (1998).
- [130]. F. J. Betancur, F. García R., and R. A. Escorcía, Exciton binding energy in symmetrical step quantum well, *Rev. Col. Física*, Vol **33**, No. 2 (2001).
- [131]. F. J. Betancur, E. A. Orozco, J. D. González, and I. D. Mikhailov, Density of electronic states in impurity-doped quantum well wires, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, No. 9, 1833 (2005)
- [132]. J. Cen and K. K. Bajaj, Binding energies of excitons and donors in a double quantum well in a magnetic field, *Phys. Rev. B* **46**, 15280 (1992).
- [133]. G. Bastard, Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981).

## ANEXO A. MÉTODO DE CÁLCULO DEL JACOBIANO PARA UN SISTEMA DE DOS PARTÍCULAS

---



---

Partiendo de la definición de Jacobiano, dada por la ecuación (2.3.19) y teniendo en cuenta que la función de onda axial es simétrica, se encuentra que:

$$J(r) = 4 \int_0^{\infty} R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^{\infty} R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2 \int_0^{\infty} Z_1^2(z_1) dz_1 \int_0^{\infty} Z_2^2(z_2) dz_2 * \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta\left(r - \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + (z_1 - z_2)^2}\right) \quad (1)$$

Luego de hacer el siguiente cambio de variable

$$\nu = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}; \quad \varphi = \varphi_1 - \varphi_2 \quad (2)$$

y utilizando la siguiente propiedad de la función delta de Dirac.

$$\int_0^{2\pi} \delta(f(\varphi) - r) d\varphi = \frac{1}{|f'(\varphi_0)|} \Big|_{f(\varphi_0) \approx r} \quad (3)$$

se encuentra que:

$$J(r) = 8\pi r \int_0^{\infty} R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^{\infty} R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2 \int_0^{\infty} Z_1^2(z_1) dz_1 * \int_0^{\infty} \frac{Z_2^2(z_2)}{\sqrt{4\rho_1^2\rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - r^2 + (z_1 - z_2)^2)^2}} dz_2 \Theta \left[ 1 - \left[ \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - r^2 + (z_1 - z_2)^2}{2\rho_1\rho_2} \right] \right] \quad (4)$$

donde  $\Theta$  es la función de Heaviside.

La singularidad que se presenta en el denominador de la última integral no causa problema en la ecuación (4), debido a la función de Heaviside. Sin embargo, para

evitar dicha singularidad se realiza un tratamiento matemático formal, para poder solucionar numéricamente este Jacobiano.

Con tal propósito se hace el siguiente cambio de variable:

$$w = \frac{z_1 + z_2}{2}; \quad z = z_1 - z_2 \quad (5)$$

y el Jacobiano toma la forma:

$$J(r) = 8\pi r \int_0^\infty R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2 * \int_{-\infty}^\infty \frac{I(z) dz}{\sqrt{4\rho_1^2 \rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - r^2 + z^2)^2}} \Theta \left[ 1 - \left[ \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - (r^2 - z^2)}{2\rho_1 \rho_2} \right] \right] \quad (6)$$

donde:

$$I(z) = \int_0^\infty Z_1^2 \left( w + \frac{z}{2} \right) Z_2^2 \left( w - \frac{z}{2} \right) dw \quad (7)$$

Luego de hacer la siguiente sustitución:

$$y = \sqrt{r^2 - z^2} \quad (8)$$

se encuentra que:

$$J(r) = 8\pi r \int_{-r}^r \frac{\left[ I(\sqrt{r^2 - y^2}) + I(-\sqrt{r^2 - y^2}) \right]}{\sqrt{r^2 - y^2}} G(y) y dy \quad (9)$$

donde:

$$G(y) = \int R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty \frac{R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 \rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - y^2)^2}} \theta \left[ 1 - \left| \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - y^2}{2\rho_1 \rho_2} \right| \right] \quad (10)$$

La ecuación (9) presenta una singularidad debida al límite superior de la integral, pero este inconveniente se soluciona haciendo el cambio de variable  $y = r \sin(\theta)$ , con el cual la ecuación (9) se transforma en:

$$J(r) = 16\pi r^2 \int_0^{\pi/2} [I(r \cos \theta) + I(-r \cos \theta)] \operatorname{sen} \theta * G(r \operatorname{sen} \theta) d\theta \quad (11)$$

Utilizando el hecho que en la ecuación (10) las variables  $\rho_1, \rho_2$  y  $y$  son conmutables y teniendo en cuenta la condición impuesta por la función de Heaviside, la ecuación (10) se convierte en:

$$G(y) = \int_0^{\infty} R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_{|\rho_1-y|}^{|\rho_1+y|} \frac{R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}} \quad (12)$$

Como puede verse la ecuación (12) posee un par de singularidades en los límites de la última integral, la cual se denotará por  $Q(\rho_1)$ . Cambiando adecuadamente los límites de integración ésta se puede descomponer en otras dos  $Q_1(\rho_1)$  y  $Q_2(\rho_2)$ , así:

$$Q_1(\rho_1) = \int_{|\rho_1-y|}^{\sqrt{\rho_1^2+y^2}} \frac{R_2^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}} \quad (13)$$

$$Q_2(\rho_1) = \int_{\sqrt{\rho_1^2+y^2}}^{\rho_1+y} \frac{R_2^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}}$$

Para resolver la integral  $Q_1(\rho_1)$  se hace la siguiente sustitución:

$$\rho_2^2 - (\rho_1 - y)^2 = 2\rho_1 y z \quad (14)$$

De manera similar, para resolver la integral  $Q_2(\rho_2)$  se hace la siguiente sustitución:

$$\rho_2^2 - (\rho_1 + y)^2 = -2\rho_1 y z \quad (15)$$

Por lo tanto, la función  $Q(\rho_1)$  se convierte en:

$$Q(\rho_1) = \int_0^1 \frac{R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(z-1)}) + R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(1-z)})}{2\sqrt{z(2-z)}} dz \quad (16)$$

la cual presenta singularidad cuando  $z = x$ . Sin embargo, esta singularidad es evitable, haciendo el cambio de variable  $z = x^2$ , que permite obtener:

$$Q(\rho_1) = \int_0^1 \frac{R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(x^2 - 1)}) + R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(1 - x^2)})}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (17)$$

donde se puede apreciar que la singularidad ha desaparecido por completo y por lo tanto no existe ningún problema para desarrollar esta integral. Así que la ecuación (12) se convierte en:

$$G(y) = \int_0^\infty R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^1 \frac{R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(x^2 - 1)}) + R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(1 - x^2)})}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (18)$$

Finalmente, se encuentra la siguiente expresión para el Jacobiano:

$$J(r) = 16\pi r^2 \int_0^{\pi/2} [I(r \cos \theta) + I(-r \cos \theta)] \text{sen} \theta d\theta \int_0^\infty R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^1 \frac{F_{R_+} + F_{R_-}}{\sqrt{2 - x^2}} dx \quad (19)$$

donde:

$$F_{R_\pm} = R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + (r \text{sen} \theta)^2 \pm 2\rho_1(x^2 - 1)r \text{sen} \theta}) \quad (20)$$

Como se puede ver, ahora no existe ningún problema de singularidad ni de comportamiento indefinido del Jacobiano.

## ANEXO B. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER MEDIANTE EL MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

---

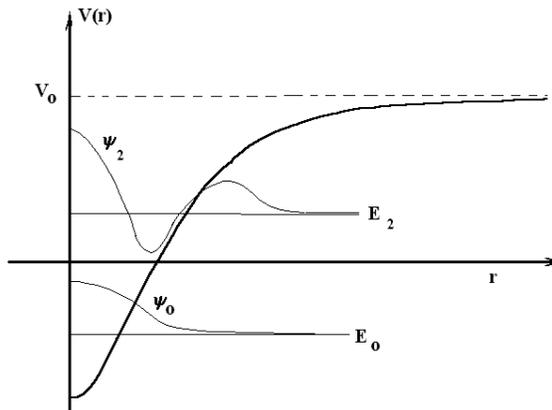


---

Consideremos, por ejemplo, la parte radial de la ecuación de Schrödinger en un espacio con Jacobiano  $J(r)$ , dada por:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \right] + V(r) \psi(r) = E \psi(r); \quad 0 < r < \infty; \quad \psi(0) < \infty; \quad \psi(\infty) = 0 \quad (1)$$

Figura B1. Potencial de confinamiento



donde el potencial  $V(r)$  puede tener una forma arbitraria como la presentada en la Figura B1, el cual solo debe cumplir la única condición que debe existir un límite finito de este potencial para grandes valores de  $r$ :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = V_0. \quad (2)$$

El Jacobiano  $J(r)$  en la ecuación (1) debe cumplir dos condiciones:

$$J(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^\alpha \quad (3)$$

$$h(r) = J'(r)/J(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 < \infty \quad (4)$$

El problema de Sturm-Liouville (1) se puede escribir en la forma:

$$\begin{aligned} \psi''(r) + h(r)\psi'(r) + q(r)\psi(r) = 0; \quad h(r) = J'(r)/J(r); \quad q(r) = E - V(r); \\ 0 < r < \infty; \quad \psi(0) < \infty; \quad \psi(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

La función  $h(r)$  en la ecuación (4) según las propiedades (3) y (4) cumple las condiciones:

$$h(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{\alpha}{r}; \quad h(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 < \infty \quad (6)$$

La ecuación (5) tiene 2 problemas para los cálculos numéricos:

1. La primera condición de frontera  $\psi(0) < \infty$  es difícil de utilizar en los cálculos numéricos.
2. En el punto  $r = 0$ , se presenta una singularidad en el segundo término de la ecuación (2.5.5), es decir,  $h(0) = \infty$ , la cual se puede cancelar con el tercer término si  $q(0) = \infty$  ó con la condición adicional  $\psi'(0) = 0$ . En ambos casos en los cálculos aparecen dificultades debido a la necesidad que cerca del punto  $r = 0$  se deben restar los números grandes en el primer caso y en el segundo caso se debe multiplicar un número grande por un número muy pequeño y los errores por redondeo se hacen muy grandes.

Para evitar esta dificultad hacemos el siguiente cambio de variable:

$$\psi(r) = \chi(r)/r^p; \quad p = \alpha/2;$$

Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} \psi'(r) &= \chi'(r)/r^p - p\chi(r)/r^{p+1}; \\ \psi''(r) &= \chi''(r)/r^p - 2p\chi'(r)/r^{p+1} + p(p+1)\chi(r)/r^{p+2} \end{aligned} \quad (2.1)$$

la ecuación (2.1) se reduce a la siguiente:

$$\begin{aligned} \chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) = 0; \\ w(r) = h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r; \end{aligned} \quad (2.2)$$

con las condiciones de frontera:

$$\chi(0)=0; \quad \chi(\infty)=0 \quad (2.3)$$

Nótese que la ecuación diferencial (2.2) tiene una ventaja esencial comparándola con la ecuación inicial (2.5.5), puesto que el coeficiente del segundo término en (2.2)  $w(r) \rightarrow \alpha/r - 2p/r \rightarrow 0$  cuando  $r \rightarrow 0$  mientras que el coeficiente del segundo término en (2.5.5)  $h(r) \rightarrow \alpha/r \rightarrow \infty$  cuando  $r \rightarrow 0$ .

Como en el cálculo numérico no existe un punto en el infinito, tenemos que sustituir la segunda condición de frontera por otra en un punto suficientemente lejano el cual lo denotamos  $R_{max}$ . Entonces el problema de contorno (2.2) -(2.3) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) &= 0; \quad 0 < r < R_{max}; \quad \chi(0)=0; \quad \chi(R_{max})=0; \\ \psi(r) &= \chi(r)/r^p \quad w(r) = h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r; \\ h(r) &= J'(r)/J(r) \end{aligned} \quad (2.4)$$

La segunda condición de frontera se puede aproximar de manera diferente. Para grandes valores de  $r$ , ( $r \rightarrow \infty$ ), la ecuación (2.4) se puede resolver en una forma analítica, ya que según (2.5.6),  $w(r) \rightarrow C_1$  y como  $V(r) \rightarrow E - V_0$ , la ecuación (2.4) adquiere la forma:

$$\chi''(r) + C_1\chi'(r) + (E - V_0)\chi(r) = 0$$

La solución de esta ecuación que se anula para  $r \rightarrow \infty$  es:

$$\chi(r) \propto A \exp(-gr); \quad g = \sqrt{V_0 - E + (C_1/2)^2} - C_1/2$$

De aquí se puede concluir que cuando  $r \rightarrow \infty$  se cumple la siguiente igualdad:

$$\chi'(r)/\chi(r) \rightarrow -g; \quad r \rightarrow \infty; \quad g = \sqrt{V_0 - E + (C_1/2)^2} - C_1/2 \quad (2.5)$$

Este resultado se puede utilizar en lugar de la segunda condición de frontera en (2.4) y se puede formular el problema de contorno (2.4) en una forma diferente:

$$\begin{aligned}
\chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) &= 0; \quad 0 < r < R_{\max}; \quad \chi(0) = 0; \\
\chi'(R_{\max})/\chi(R_{\max}) &= -g; \quad \psi(r) = \chi(r)/r^p \\
w(r) &= h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r; \\
h(r) &= J'(r)/J(r); \quad g = \sqrt{V_0 - E + (C_1/2)^2} - C_1/2
\end{aligned} \tag{2.4a}$$

Los problemas de contorno son similares, difieren sólo en las segundas condiciones de frontera. Por eso los algoritmos de solución de estos dos problemas también son similares. Para resolver los problemas de contorno (2.4) o (2.4a) utilizaremos coordenadas polares de Poincaré:

$$\chi(r) = A(r)\cos \mathcal{G}(r); \quad \chi'(r) = A(r)\sin \mathcal{G}(r) \tag{2.6}$$

Derivando la primera relación y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada  $\chi'(r)$  en la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(r) = A(r) \frac{\sin \mathcal{G}(r)}{\cos \mathcal{G}(r)} [\mathcal{G}'(r) + 1] \tag{2.7}$$

Por otro lado sustituyendo las expresiones (2.6) en la ecuación (2.4) y utilizando la relación (2.7) entre  $A'(r)$  y  $A(r)$  se obtiene la ecuación diferencial para la función  $\mathcal{G}(r)$ :

$$\mathcal{G}'(r) = -[\sin^2 \mathcal{G}(r) + u(r)\cos^2 \mathcal{G}(r) + w(r)\sin \mathcal{G} \cos \mathcal{G}] \tag{2.8}$$

Para encontrar la función  $A(r)$  hay que sustituir la expresión para la derivada (2.7) en (2.6) y realizar la integración:

$$A(r) = \exp \left\{ \int_0^r [[1 - u(r)] \sin \mathcal{G}(r) \cos \mathcal{G}(r) - w(r) \sin^2 \mathcal{G}(r)] dr \right\}; \quad A(0) = 1 \tag{2.9}$$

Las condiciones de frontera para los problemas (2.4) y (.2.4a) pueden escribirse como:

$$\mathcal{G}(0) = \pi/2; \quad \mathcal{G}(R_{\max}) = \pi/2 - \pi n, \quad n = 1, 2, 3, K \tag{2.10}$$

para el problema (2.4) y como

$$\mathcal{G}(0) = -a \tan(g); \quad \mathcal{G}(R_{\max}) = -a \tan(g) - \pi n, \quad n = 1, 2, 3, K \quad (2.11)$$

para el problema (2.4a). Aquí  $n$  es el número del nivel, el estado base corresponde a  $n = 1$ , y el valor  $n - 1$  da el número de los nodos de la parte radial de la función de onda.

La ecuación diferencial (2.8) junto con la primera condición de las relaciones (2.10) y (2.11) definen un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden, el cual puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro  $E \equiv E_n$  (la energía del nivel número  $n$  buscada) dado y esta solución puede considerarse como una función de dos variables  $\mathcal{G} = \mathcal{G}(r, E_n)$  y entonces la segunda condición de frontera en las relaciones (2.10) y (2.11) lleva a la ecuación trascendente para la energía  $E$ :

$$\mathcal{G}(R_{\max}, E_n) = \pi/2 - \pi n \quad (2.12)$$

para el problema de contorno (2.4) y

$$\mathcal{G}(R_{\max}, E_n) = -a \tan(g) - \pi n \quad (2.13)$$

para el problema de contorno (2.4a).

Con base en las fórmulas (2.8) - (2.12) se puede formular el siguiente algoritmo para encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger (2.5.1):

1. Se construye la función  $\mathcal{G}(r, E)$  como solución del problema de Cauchy (2.8)-(2.10), utilizando uno de los esquemas de Runge-Kutta.
2. Se resuelve ecuación trascendente (2.12) y se encuentra la energía del estado con nivel  $n$ ,  $E_n$ .
3. Se calcula la función  $\mathcal{G}(r)$  como solución del problema de Cauchy (2.8)-(2.10), para el valor  $E_n$  encontrado.
4. Se encuentra la función  $A(r)$  utilizando la fórmula (2.9).
5. Se calcula la función  $\psi(x)$  y su derivada  $\psi'(x)$  utilizando las siguientes relaciones:

$$\psi(r) = \frac{A(r)}{r} \cos \mathcal{G}(r); \quad \psi'(r) = \frac{A(r)}{r} \sin \mathcal{G}(r).$$