

**ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS**

WILLIAN GUTIERREZ NIÑO

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FISICA
BUCARAMANGA
2011**

**ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS**

Trabajo de investigación presentado como requisito parcial para optar al título de
Doctor en Ciencias Naturales-Física

WILLIAN GUTIERREZ NIÑO

Director

Ph. D. ILIA MIKHAILOV

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FISICA

BUCARAMANGA

2011

*A mis queridos padres y hermanos,
a Katherine mi amada esposa...
porque cuando se quiso instalar la oscuridad...tu cielo me iluminó con sus estrellas
y a nuestro hijo Juan Pablo...
porque con tu pequeñez llenas todo mi universo.*

Agradecimientos

Porque como bien expresó Goethe: el arte y la ciencia, como todos los sublimes bienes del espíritu, pertenecen al mundo entero, y sólo pueden prosperar con el libre influjo mutuo de todos los contemporáneos, respetando siempre todo aquello que el pasado nos legó; quiero expresar aquí mis agradecimientos más profundos:

A Dios, por sostener cada fibra de mi ser durante esta etapa, y por elevar mi humilde inteligencia para poder comprender y disfrutar la bella música que subyace en el fondo de la naturaleza.

A mi director, el profesor Ilia Mikhailov, verdadero maestro, por su entera colaboración y paciencia en todo momento, especialmente durante los tropiezos y debilidades, que son los más, por su entrega incondicional, su inestimable aprecio y su ejemplar sabiduría, le estaré eternamente agradecido.

Al pueblo colombiano por sostener mi educación a través de sus contribuciones.

Al Centro de Excelencia de Nuevos Materiales –CENM, quien financió gran parte de este doctorado.

A la universidad Industrial de Santander (UIS), quien financió parte de este doctorado, y quien a través de la Vicerrectoría de Investigaciones (DIEF Ciencias) hizo posible mi participación como ponente en diferentes eventos nacionales e internacionales.

A Eduardo Galván, a mi padrino Jairo Marín y a Fredy Rodríguez, compañeros y amigos incansables a la hora de colaborar, por su sincera amistad, su contagioso entusiasmo y todo su apoyo.

A los Profesores Harold Paredes, Francisco García y Carlos Beltrán, por su valiosa colaboración durante la realización de este trabajo.

A todos ellos, y los muchos amigos que de alguna u otra forma, me alentaron en la tarea de estos últimos cuatro años.

Dios los bendiga y los acompañe siempre.

TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	18
1. FUNDAMENTOS TEORICOS GENERALES	25
1.1. Nanoestructuras semiconductoras.....	25
1.1.1. Puntos y anillos cuánticos autoensamblados.....	28
1.1.2. Superredes en nanohilos.....	31
1.2. Sistemas fermiónicos de pocas partículas confinados en nanoestructuras semiconductoras.....	32
1.3. Aproximación de masa efectiva en heteroestructuras semiconductoras.....	37
1.4. Aproximación Adiabática.....	40
2. CONSIDERACIONES DE SIMETRÍA EN NANOESTRUCTURAS	43
2.1. Clasificación de los estados electrónicos de donadoras en nanoestructuras axialmente simétricas.....	43
2.2. Simetría en nanoestructuras según interacciones de corto y largo alcance.....	44
3. ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN NANOHILOS CON PERIODICIDAD ESTRUCTURAL	47
3.1. Modelo del confinamiento estructural.....	48
3.2. Un electrón en una NWSL.....	50
3.3. Una impureza D^0 en una NWSL con confinamiento radial infinito.....	53
3.4. Una impureza D^0 en una NWSL con confinamiento radial finito.....	62
3.5. Una impureza D^0 en un QWW con sección transversal periódicamente variable.....	66
3.6. Un excitón X en una NWSL.....	71
4. ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN ANILLOS CUANTICOS	77
4.1. Modelo del confinamiento estructural.....	77
4.2. Un electrón en un QR unidimensional atravesado por un campo magnético.....	79
4.3. Una impureza D^0 en un QR delgado.....	81
4.4. Complejo D_2^+ en un QR delgado.....	92
4.5. Una impureza D^- en un QR delgado.....	99
4.6. Un excitón X en un QR de forma irregular.....	106

5. CONCLUSIONES	111
6. REFERENCIAS	115
7. APENDICE A. MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO	120

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1. Relación entre la brecha de energía prohibida y la constante de red para algunos materiales semiconductores.....	26
Fig. 2. Densidad de estados para un electrón confinado en diferentes sistemas de dimensionalidad reducida.....	27
Fig. 3. Imágenes de AFM de 250 nm x 250 nm de QDs autoensamblados de In As/GaAs. (a) QDs crecidos a 540 °C, (b) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, (c) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C, y (d) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C y a una presión diferente al caso (c). D. Granados <i>et al.</i> [22].....	29
Fig. 4. Imagen de AFM 3D de QRs autoensamblados de InAs. A Aierken <i>et al</i> [27].....	30
Fig. 5. Imágen de AFM de QRs autoensamblados de SiGe. J. H. He <i>et al</i> [32]	30
Fig. 6. (a) Imagen tomada por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución de una superred de GaN/AlN en un nanohilo, (b) Este detalle muestra que no ocurre interdifusión significativa entre el GaN y el AlN, (c) Perfil del parámetro de red a lo largo de la dirección de crecimiento. O. Landré <i>et al.</i> [40]	32
Fig. 7 Modelo de una NWSL composicional.....	48
Fig. 8 Distribución de la concentración de aluminio a lo largo del eje z de la NWSL.....	49
Fig. 9 Modelo de una NWSL estructural.....	49
Fig. 10 Potencial efectivo para el electrón en dirección del eje principal de la NWSL.....	51
Fig. 11 Distribución de probabilidad del electrón en una NWSL de GaAs/Ga _{0,9} Al _{0,1} As embebida en una matriz de Ga _{0,6} Al _{0,4} As	51
Fig. 12 Altura de barrera efectiva para el movimiento del electrón a lo largo del eje en función del radio de la NWSL, para diferentes concentraciones de Aluminio en las barreras <i>x</i> y en la matriz <i>y</i> , para una NWSL con 5 pozos y 4 barreras de anchos 10nm y 5nm	52
Fig. 13 Comparación de los resultados obtenidos por diferentes métodos para la energía de enlace del estado base de una donadora centrada en un QW de GaAs/Ga _{0,7} Al _{0,3} As en función del ancho del pozo.....	56
Fig. 14 Energías de enlace de una donadora centrada para algunos estados excitados tipo <i>s</i> en función del ancho del pozo, para un QW de GaAs/Ga _{0,3} Al _{0,7} As.	57
Fig. 15 Comparación con el método de diferencias finitas. Energía del estado base de una D ⁰ en un MQW de GaAs/Ga _{0,67} Al _{0,33} As con cinco pozos de ancho 15 nm (a) en función de la posición de la impureza, medida desde el centro del pozo del extremo izquierdo (b) en función del ancho de las barreras entre los pozos para la impureza localizada en el centro del pozo central.	57
Fig. 16 Comparación de los resultados del cálculo de la energía de enlace de una D ⁰ en un triple QW en función de (a) la posición de la impureza para diferentes valores de campo magnético y (b) de la intensidad de campo eléctrico para tres posiciones de la impureza.....	58

- Fig. 17** Energía del estado base de una donadora centrada en la heteroestructura con 11 celdas unidad de dimensiones ($a=10nm, b=5nm$) en función de la posición de la impureza y para diferentes valores de campo eléctrico en (a) una SL y en una NWSL de radios (b) $R_0 = 40nm$ y (c) $R_0 = 10nm$59
- Fig. 18** Energía del estado base para una donadora localizada en la mitad del pozo central de una (a) SL y una NWSL de radio (b) $R = 40nm$ y (c) $R = 10nm$, para diferente número de pozos y en función del campo eléctrico.60
- Fig. 19** Energía del estado base para una donadora localizada en el centro del primer pozo de una (a) SL y una NWSL de radio (b) $R = 40nm$ y (c) $R = 10nm$, para diferente número de pozos y en función del campo eléctrico.61
- Fig. 20** Energía de enlace de una D^0 ubicada sobre el eje del nanohilo y en el centro del pozo central, en función del radio de una NWSL de 5 pozos, para diferentes concentraciones de Aluminio x en las barreras y en la matriz y64
- Fig. 21** Energía de enlace de una D^0 en una NWSL de GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As de radio $5nm$, embebida en una matriz de Ga_{0.6}Al_{0.4}As, como función de la posición de la impureza: a) a lo largo del eje z , ξ_z , medida desde el extremo izquierdo de la estructura y para varias posiciones radiales ξ_ρ medidas desde el eje principal de la NWSL; b) en dirección radial ξ_ρ , para diferentes posiciones en z65
- Fig. 22** Distribución de la energía de enlace de una D^0 en una NWSL de GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As embebida en una matriz de Ga_{0.6}Al_{0.4}As para diferentes posiciones del ión.....66
- Fig. 23** Modelos de nanohilos con sección transversal (a) homogénea, y variable periódicamente, con perfil (b) rectangular y (c) triangular.....67
- Fig. 24** Potencial efectivo en dirección axial para un nanohilo de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con $R_{min} = 5nm$ y $R_{max} = 8nm$, con perfil periódico (a) rectangular y (b) triangular.....67
- Fig. 25** Altura de la barrera efectiva que confina a las partículas dentro del nanohilo de perfil lateral periódico en función de la diferencia entre los radios $\Delta R = R_{max} - R_{min}$, para diferentes valores de R_{max} 68
- Fig. 26** Efecto de la variación del perfil de un QWW de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As sobre la energía de enlace de una D^0 . Las gráficas muestran la energía de enlace en función de la posición de la impureza a lo largo del eje del QWW, ξ_z considerando diferentes posiciones radiales ξ_ρ de la impureza e intensidades de campo eléctrico a lo largo del eje z69
- Fig. 27** Distribución electrónica y la distribución de la energía de enlace de una D^0 para diferentes intensidades de campo eléctrico: (a,b) $F=0kv/cm$, (c,d) $F=10kv/cm$ y (e,f) $F=50kv/cm$, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico rectangular de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As70
- Fig. 28** Distribución electrónica y la distribución de la energía de enlace de una D^0 para diferentes intensidades de campo eléctrico: (a,b) $F=0kv/cm$, (c,d) $F=10kv/cm$ y (e,f)

$F=50\text{kv/cm}$, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico triangular de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$	71
Fig. 29 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del radio (a) y el ancho del pozo (b) para varios valores del campo magnético aplicado en una NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$	73
Fig. 30 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del ancho del pozo (a) y de la barrera (b) para varios valores del campo eléctrico en dirección del eje z de una NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$	75
Fig. 31 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función: del radio de la NWSL para varios números de pozos (a) y del número de pozos internos de la NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$	75
Fig. 32 Densidad de probabilidad condicional del electrón; (a) libre en la NWSL, (b-f) para diferentes posiciones del hueco sobre el eje de la NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$ embebida en una matriz de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$, con 5 pozos de 10nm y 4 barreras de 5nm y de Radio 5nm. Las posiciones del hueco están señaladas con círculos cruzados.	76
Fig. 33 Esquema de un QR con sección transversal semi-elíptica.....	78
Fig. 34 Espectro energético de un electrón en un QR unidimensional en función de la intensidad de un campo magnético uniforme aplicado en dirección transversal al plano del anillo.	81
Fig. 35 Esquema de una D^0 en un QR toroidal de sección transversal semi-elíptica.....	82
Fig. 36 Niveles energéticos más bajos en función de γ para una donadora centrada en QRs de sección transversal semi-elíptica con diferentes anchos.	87
Fig. 37 Curvas del potencial efectivo para la interacción Coulombiana $V_c(\varphi)$ considerando diferentes posiciones de la impureza.....	88
Fig. 38 Energías electrónicas como función de la distancia de la impureza al eje del QR (a) sin y (b) con campo magnético aplicado en dirección z.....	89
Fig. 39. Densidad de probabilidad electrónica en el plano x-y para los tres estados más bajos y para dos posiciones diferentes de la impureza, para un QR con $R_c = 10.0a_0^*$ y $w = 4.0a_0^*$	89
Fig. 40 Niveles energéticos más bajos en función de la intensidad del campo magnético en para una donadora descentrada en un QR con $R_c = 10.0a_0^*$ y $w = 2.0a_0^*$, para las posiciones (a) $\beta = 0.5$ y para (b) $\beta = 1.0$	90
Fig. 41 Espectro infrarrojo lejano (FIR) para una donadora neutra en un QR con posición (a) $\beta = 0.0$, (b) $\beta = 0.5$ y (c) $\beta = 1.0$. (En cada gráfico, γ se incrementa desde cero en pasos de 0.001, y se ha considerado luz polarizada circularmente a la izquierda)	91
Fig. 42 Esquema de un complejo D_2^+ en un QR toroidal de sección transversal rectangular....	93

Fig. 43 Curvas del potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal para diferentes índices de posición β_i para donadoras con posiciones diametralmente opuestas (a) caso simétrico y (b) caso asimétrico.....	94
Fig. 44 Curvas del potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal para diferentes ángulos entre los vectores posición de las donadoras $\Delta\varphi$ considerando (a) caso simétrico y (b) caso asimétrico.	94
Fig. 45 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función del índice de posición β para dos valores diferentes del ángulo $\Delta\varphi$	96
Fig. 46 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función del ángulo $\Delta\varphi$ para dos valores diferentes del índice de posición β	97
Fig. 47 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función de la intensidad del campo magnético aplicado, considerando valores diferentes del índice de posición β y del ángulo $\Delta\varphi$	98
Fig. 48 Espectro infrarrojo lejano (FIR) para un complejo D_2^+ en un QR con ángulo $\Delta\varphi = \pi$ e índices de posición (a) $\beta = 0.0$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 0.5$ y (d) $\beta = 0.7$. (En cada gráfico, γ se incrementa desde cero en pasos de 0.001, y se ha considerado luz polarizada circularmente a la izquierda)	99
Fig. 49 Esquema de una D^- confinada en un anillo cuántico de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ de forma toroidal.	100
Fig. 50 Esquema del anillo en las nuevas coordenadas polares	101
Fig. 51 Energías normalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un anillo casi-unidimensional. Las líneas sólidas son nuestros resultados, y los rectángulos negros son puntos tomados de la referencia [67].....	104
Fig. 52 Energías para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_l = 0.5a_0^*$. La línea punteada muestra la energía de dos electrones congelados en los lados diametralmente opuestos del anillo.....	104
Fig. 53 Energías para los cinco estados más bajos de una D^- centrada en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_l = 0.5a_0^*$	105
Fig. 54 Energías para los cinco estados más bajos de una D^- centrada en función de la distancia al plano del anillo, para un QR con $R_l = 0.5a_0^*$	106
Fig. 55 Representación esquemática de los modelos I y II para QRs planos con ancho variable.	109
Fig. 56 Niveles de energía del excitón como función del campo magnético en un QR circular (a) con ancho uniforme de $0.5a_0^*$ y (b) con ancho variable linealmente desde $0.5a_0^*$ hasta $0.505a_0^*$. El radio de la línea central es de $5.0a_0^*$	109

Fig. 57 Niveles de energía del excitón como función del campo magnético en un QR circular (a) con ancho uniforme de $0.5a_0^*$ y (b) con ancho variable elípticamente desde $1.0a_0^*$ hasta $1.05a_0^*$. El radio de la línea central es de $10.0a_0^*$ 110

Fig. 58 Potencial de confinamiento y primeros dos estados pares para dicho potencial.....120

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Comparación de la energía de enlace del estado base de una D0 centrada en un QW con los resultados obtenidos mediante el método Monte Carlo Ref. [112].....	56
---	----

ACRÓNIMOS Y SÍMBOLOS

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

MBE	Técnica de haces moleculares
CVD	Deposición de vapor químico
SL	Superred
QW	Pozo cuántico
QWW	Hilo cuántico
QD	Punto cuántico
NWSL	Superred en nanohilo
SAQD	Punto cuántico auto ensamblado
SQD	Punto cuántico esférico
QR	Anillo cuántico
WL	Capa húmeda
AA	Aproximación adiabática
AB	Aharanov-Bohm
SBD	Sistema de baja dimensionalidad
FIR	Espectro Infrarrojo lejano
K_B	Constante de Boltzman
K	Grado Kelvin
T	Temperatura
E_k	Energía cinética
U	Energía potencial
A	Potencial vectorial
B	Campo magnético
V_0	Potencial de confinamiento
e	Electrón
h	Hueco
m_e^*	Masa efectiva del electrón
m_h^*	Masa efectiva del hueco
γ	Factor de Landau
ϵ	Constante dieléctrica
β	Índice para la posición de impurezas
a_0^*	Radio de Bohr efectivo
R_y^*	Rydberg efectivo
D^0	Donadora neutra
D^-	Donadora cargada negativamente
D_2^+	Complejo ionizado de dos donadoras neutras
X	Excitón
X^-	Trión negativo
X^+	Trión positivo

RESUMEN

TITULO: ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS *

AUTOR: WILLIAN GUTIERREZ NIÑO**

PALABRAS CLAVES: Heteroestructuras semiconductoras, Hilos cuánticos, Anillos cuánticos, Sistemas de pocas partículas, Impurezas donadoras, Excitones, Espectro energético, Aproximación adiabática.

Se analizan algunas propiedades eléctricas y ópticas de sistemas de pocas partículas confinados en heteroestructuras semiconductoras. Específicamente se estudian los estados acoplados de algunos complejos móviles e inmóviles de portadores de carga, tales como: impurezas donadoras neutras, impurezas cargadas negativamente, donadoras acopladas y excitones neutros, en heteroestructuras en forma de anillo y de hilo. Las características geométricas de tales estructuras permiten hacer una separación de variables artificial en la ecuación de Schrödinger mediante la aproximación adiabática. Este procedimiento nos lleva a derivar una ecuación de onda unidimensional que describe los niveles más bajos de los diferentes sistemas de pocas partículas confinados, los cuales corresponden al movimiento lento de los portadores de carga a lo largo del hilo o en dirección acimutal para el caso del anillo. A diferencia de un gran número de estudios similares realizados anteriormente, donde solo se calcula el estado fundamental, los sistemas en consideración nos permiten analizar el espectro energético completo en el marco de métodos analíticos o numéricos, y calcular una más amplia variedad de parámetros físicos relacionados con las propiedades eléctricas y ópticas de sistemas de pocas partículas en heteroestructuras, como es el caso de los espectros de absorción y fotoluminiscencia, entre otros. Por otro lado, se ha propuesto una metodología novedosa que permite analizar la presencia de campos magnéticos y eléctricos externos, y de desorden en tales sistemas. Dicho desorden puede estar representado por medio de impurezas o por variaciones en la composición o morfología de la estructura. Con este fin se han elaborado nuevos algoritmos y programas computacionales sobre la base de modelos exactos, diagonalización matricial y la aproximación adiabática.

* Proyecto de Investigación de Doctorado en Ciencias Naturales (Física).

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Ilia D. Mikhailov.

ABSTRACT

TITLE: BOUND STATES OF CHARGE CARRIERS IN SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES*.

AUTHOR: WILLIAN GUTIERREZ NIÑO**

KEYWORDS: Semiconductor heterostructures, quantum wires, quantum rings, few-particulate systems, donor impurities, excitons, energy spectrum, adiabatic approximation.

It was analyzed some electrical and optical properties of few-particle systems confined in semiconductor heterostructures. Specifically we study the coupled states of some mobile and immobile charge carriers complexes, such as neutral donor impurities, negatively charged impurities, coupled donors and neutral excitons in heterostructures in a ring-shaped and wire-shaped. The geometric features of these structures allow an artificial separation of variables in the Schrödinger equation using the adiabatic approximation. This procedure leads us to derive a one-dimensional wave equation which describes the low-lying levels of the different few-particles systems confined, which correspond to the slow motion of charge carriers along the wire or azimuthal motion in the case of a ring. Unlike many previous similar studies, where only the ground state is calculated, the systems in question allow us to analyze the entire energy spectrum in the context of analytical or numerical methods and calculate a wider range of physical parameters related to electrical and optical properties of few particle systems in heterostructures, as is the case of absorption and photoluminescence spectra, among others. On the other hand, it has been proposed a novel methodology to analyze the presence of external electric and magnetic fields, and disorder in such systems. This disorder can be represented by impurities or variations in the composition or morphology of the structure. To this end, we have developed new algorithms and computer programs based on exactly solved models, matrix diagonalization and the adiabatic approximation.

* Proyecto de Investigación de Doctorado en Ciencias (Física).

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Iliá D. Mikhailov

INTRODUCCIÓN

Es en los confines atómicos del mundo donde se hallan los caracteres con los cuales ha sido escrito el discurso que la naturaleza nos manifiesta en su multiplicidad de fenómenos. Esta es la escala donde los componentes básicos de la materia están establecidos, donde las propiedades fundamentales están definidas y por lo tanto, donde pueden ser ajustadas. La comprensión de los complejos mecanismos que gobiernan en esta escala estuvo vedada hasta la aparición de la mecánica cuántica; la cual, desde sus albores, ha sido la piedra roseta que ha permitido descifrar el enigmático lenguaje que impera en el laberinto de los átomos y las moléculas. El cúmulo de conocimientos adquiridos desde entonces, sumado a la reciente capacidad para manipular directamente los componentes básicos de la materia, está dando la posibilidad de crear un universo con caracteres completamente nuevos, lo cual ha llevado a las últimas cuatro décadas a ser testigos del florecimiento de una eminente revolución científica conocida como nanociencia [1]. En este sentido, el horizonte de la física de semiconductores se ha ampliado a proporciones realmente sorprendentes. La sofisticación de las técnicas de fabricación de heterojunturas ha llegado a tal punto, que ahora es posible fabricar materiales semiconductores estructurados a escala nanométrica tanto en su composición, como en su forma. Dichos sistemas nanométricos se conocen como nanoestructuras semiconductoras [2] y actualmente constituyen el paradigma de los sistemas de baja dimensionalidad (SBD) [3].

Estas pequeñas estructuras, por presentar un tamaño intermedio entre los átomos y los objetos macroscópicos, pertenecen a los llamados sistemas mesoscópicos, los cuales se caracterizan por presentar propiedades espectrales y de transporte altamente sensibles a variaciones en su tamaño, su forma y la presencia de desorden. Esta sensibilidad es precisamente lo que ha hecho que las nanoestructuras sean actualmente uno de los focos de más intensa investigación en física de nuevos materiales, pues

ofrecen todo un cromatismo de posibilidades para la exploración y el estudio de nuevos fenómenos físicos, ya que permiten el diseño de condiciones únicas que no se encuentran en los sistemas naturales. Algunas muestras de esto son: el modelado de espectros energéticos con estructuras singulares, el régimen de alta correlación electrónica presente entre los portadores de carga [4], la exhibición de cristalizaciones de Wigner [5], la aparición de corrientes persistentes [6], la constatación experimental del denominado efecto Aharonov-Bohm [7], entre otras.

Si bien, actualmente las nanoestructuras semiconductoras constituyen uno de los escenarios de mayor popularidad en física de semiconductores, tenemos que los diferentes complejos de sistemas de pocas partículas son los actores principales dentro de dichos escenarios. Algunos de estos sistemas fermiónicos son las impurezas donadoras o aceptoras, ya sean neutras o cargadas negativamente, los excitones, los triones, los biexcitones, entre otros. El papel protagónico que han alcanzado estos sistemas fermiónicos se debe esencialmente a que el confinamiento, brindado por la nanoestructura, favorece la posibilidad de que posean estados ligados más estables con respecto al sistema en bloque, y además, líneas espectrales de absorción mucho más estructuradas y definidas. Dicho confinamiento estructural permite por lo tanto que tales sistemas puedan observarse en los espectros de absorción y emisión, no solo a bajas temperaturas, sino incluso a temperatura ambiente. De aquí que el estudio teórico de sus propiedades cuánticas, tales como: el incremento de la energía de enlace, los espectros de absorción y de emisión, la fuerza de oscilador, etc., constituyen actualmente temas de intensa investigación en sistemas de baja dimensionalidad. Desde este punto de vista las nanoestructuras podrían considerarse como mini-laboratorios, en los cuales se pueden estudiar nuevos fenómenos físicos asociados con sistemas de pocas partículas confinados en espacios de dimensionalidad reducida.

Además de la gran importancia que tiene el estudio de sistemas de pocas partículas confinados en nanoestructuras para la construcción de nuevo conocimiento científico, se tiene por otro lado que el considerable cambio en las propiedades físicas, ocasionado por la posibilidad de tener estados ligados más estables, resulta de gran importancia desde el punto de vista de las aplicaciones, en especial para el diseño de los dispositivos opto-electrónicos fabricados con base en nanoestructuras. En este sentido se puede apreciar cómo, la variación cuidadosa en la composición, el tamaño y la forma

de estas estructuras, así como el control del número y tipo de portadores de carga confinados dentro de ellas, dan la posibilidad de fabricar dispositivos con propiedades opto-electrónicas novedosas, y a su vez, con niveles de miniaturización de orden nanométrico. Entre las múltiples aplicaciones que pueden tener estos sistemas, hay que mencionar los interruptores ópticos de alta velocidad, transistores de un sólo electrón, foto-detectores, láseres semiconductores, diodos emisores de luz de cualquier color y posibles sistemas de computación cuántica [8,9].

No resulta difícil imaginar que deben existir notables diferencias entre los sistemas de pocas partículas naturales, como los átomos y las moléculas, y sus análogos artificiales confinados en nanoestructuras. Por ejemplo, para el caso de un par de electrones empaquetados en un punto cuántico (QD), tendremos que el potencial de confinamiento será más débil que en los átomos naturales, lo que lleva a tener distancias inter-electrónicas muy grandes, haciendo que los efectos de correlación sean predominantes. Además, en estos sistemas artificiales, los efectos asociados con la anisotropía del medio llegan a ser un factor importante. Estas marcadas diferencias hacen que los modelos y métodos desarrollados en la física atómica para estudiar el espectro energético de átomos y moléculas, no sean del todo aplicables al estudio de los sistemas de pocas partículas en SBD. Si a lo anterior se le suma el hecho de que el espectro energético y las distribuciones de densidad de los electrones y huecos son muy sensibles a la variación de morfología y tamaño de la nanoestructura, así como a la presencia de defectos y campos externos, entonces se hace absolutamente indispensable desarrollar nuevos modelos y métodos teóricos que sean confiables y versátiles, a fin de tener en cuenta los rasgos específicos más importantes. Esta es justamente una de las razones que motivaron el desarrollo de este trabajo de investigación, ya que aún existen cuestiones importantes por estudiar acerca del comportamiento de los sistemas de pocas partículas bajo condiciones de fuerte confinamiento en SBD con diferentes simetrías.

La principal intención de esta investigación fue plantear modelos matemáticos versátiles, con los cuales se pudiera cubrir el estudio teórico de ciertos sistemas de portadores de carga confinados en algunas de las nanoestructuras que actualmente gozan de mayor interés, como son las superredes en nanohilos (NWSLs) y los anillos cuánticos (QRs). Este planteamiento llevó a que se apostará por conferirles a dichos modelos ciertas características de simetría que permitieran una mayor analiticidad, sin

perder de vista las características dominantes de cada sistema considerado, esto con el fin de minimizar la complejidad de los métodos numéricos empleados en la resolución de las ecuaciones y además exigir unos recursos de computación moderados en su ejecución. Esta metodología permitió estudiar el efecto que tiene la inclusión de variaciones en el confinamiento estructural, el confinamiento eléctrico y/o magnético, y la presencia de impurezas sobre la energía de enlace, el espectro energético y otras propiedades de algunos sistemas de pocas partículas confinados en NWSLs y en QRs. Aunque ya se ha reportado un amplio número de trabajos sobre sistemas de pocas partículas en QRs, en esta Tesis se presentan algunos aportes nuevos al cúmulo de conocimientos existentes. En lo que respecta al estudio de NWSLs, hasta donde tenemos conocimiento, la mayoría de trabajos reportados hasta el momento han sido para el caso de un electrón, dejándonos la oportunidad de ser quizás los primeros en analizar sistemas más complejos como impurezas donadoras y excitones en dichas estructuras.

La presente memoria de Tesis Doctoral se estructura de la siguiente manera:

En el capítulo 1 se plantean de forma sucinta los conceptos básicos en que se asienta este trabajo de investigación, el panorama general del estado del arte y las principales aproximaciones que se utilizaron para lograr establecer un modelo relativamente sencillo de los sistemas estudiados.

En el capítulo 2 se propone una clasificación de los estados electrónicos en nanoestructuras axialmente simétricas basados en la conservación de la proyección del momento angular sobre el eje de simetría.

En el capítulo 3 se ha abordado el estudio de algunos complejos de portadores de carga en nanohilos con periodicidad estructural. Se realiza inicialmente el estudio de un electrón en una NWSL. En segunda instancia se considera una impureza D^0 en una NWSL bajo condiciones de confinamiento radial infinito y finito, y además una D^0 en un QWW con sección transversal periódicamente variable. Por último se deja el estudio de un excitón neutro en una NWSL.

El capítulo 4 está dedicado al estudio de los estados ligados de algunos sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos delgados bajo la influencia de un campo magnético. Se plantea un formalismo general para la obtención del espectro energético y el espectro de absorción infrarrojo lejano de un electrón y cualquier complejo inmóvil que posea un único electrón, analizándose como casos particulares una impureza D^0 y un complejo D_2^+ confinados en QRs delgados. Se realiza también el estudio de una impureza cargada negativamente D^- centrada en un QR. Por último se extiende esta metodología al análisis de un excitón neutro X en un QR de forma irregular, el cual puede presentar variaciones en el espesor de su sección transversal y variaciones en su forma que lo alejan de ser un anillo circular.

Los frutos más fecundos y maduros que ha dado esta investigación de Tesis Doctoral, pueden verse representados por los artículos publicados, o próximos a serlo, en revistas científicas internacionales y nacionales, así como por las ponencias que fueron presentadas en diversos congresos internacionales y nacionales. A continuación se ofrece un listado de estos logros:

Lista de publicaciones

1. C. A. Gómez , L. F. García, W. Gutiérrez, J. H. Marín, “ Ion-molecular D_2^+ complex in a quantum ring ”, *Microelectronics Journal* **39**, 1279 (2008)
2. W. Gutiérrez, J. E. Galván-Moya, L. F. García, I. D. Mikhailov, “ Electric-field effect on shallow impurity ground state in nanowire superlattice”, *Physica B* **404**,180 (2009)
3. W. Gutiérrez, L. F. García, and I. D. Mikhailov, “ Impurity effect on spectrum of nanoring ”, *Journal of Physics: Conference Series* **167**, 012067, (2009)
4. C. A. Gómez, J. H. Marín, W. Gutiérrez and L. F. García, “ D^- energy spectrum in toroidal quantum ring ”, *Journal of Physics: Conference Series* **167**, 012032 (2009)

5. W. Gutiérrez, L. F. García, I. D. Mikhailov, “Localized donor states in axially symmetrical heterostructures”, *Superlattices and Microstructures* **48**, 288 (2010)
6. W. Gutiérrez, J. E. Galván-Moya, and I. D. Mikhailov, “ Energy spectrum of excitons in single and double narrow wells in a magnetic field”, *Journal of Physics: Conference Series* **210**, 012053 (2010)
7. J. E. Galván-Moya, W. Gutiérrez and C. Moscoso, “Binding energy of exciton in a nanowire superlattice in magnetic and electric fields”, *Journal of Physics: Conference Series* **210**, 012039 (2010)
8. J. H. Marín, W. Gutiérrez and I. D. Mikhailov, “An exciton trapped by an arbitrary shaped nanoring in a magnetic field”, *Journal of Physics: Conference Series* **210**, 12045, (2010)
9. W. Gutiérrez, L. F. García, and I. D. Mikhailov, “ Coupled donors in quantum ring in a threading magnetic field ”, *Physica E* **43**, 559 (2010)
10. W. Gutiérrez, J. E. Galván-Moya, I. D. Mikhailov, J. Silva-Valencia, R. Franco, “ Charge redistribution induced by donors in nanowires with variable composition and thickness”, *Superlattices and Microstructures* (doi:10.1016/j.spmi.2010.12.007)

Lista de ponencias presentadas

1. “Effect of electric field on confined donor states in nanowire superlattice”, 6th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices, San Andres-Colombia, abril 15-20 de 2007.
2. “Optimized trial function for hydrogenic donor in semiconductor heterostructure”, XIII Latin American Congress on Surface Science and its Applications, Santa Marta-Colombia, 3-7 de diciembre de 2007.

3. “Impurity effects on far-infrared absorption spectra of toroidal-shaped nanorings”, XIX Latin American Symposium on Solid Stated Physics, Puerto Iguazu-Argentina, 5-10 de octubre de 2008.
4. “An exciton trapped by an arbitrary shaped nanoring in a magnetic field”, 11th International Conference on Optics of Excitons in Confined Systems, Madrid-España, 7-11 de Septiembre de 2009.
5. “Localized states of weakly confined donors in multiple quantum wells”, XXIII Congreso Nacional de Física, Santa Marta-Colombia, 5-9 Octubre de 2009.

1. FUNDAMENTOS TEORICOS GENERALES

En las secciones que conforman el presente Capítulo se pretende dar una visión general del contexto en el cual está enmarcado este trabajo de investigación. Por una parte, se quiere hacer una pequeña introducción a las nanoestructuras semiconductoras, haciendo especial énfasis en los puntos cuánticos autoensamblados en forma de anillo y las superredes en nanohilos, por ser los sistemas de mayor interés en esta investigación. Por otra parte, también queremos presentar, en términos generales, el marco teórico que emplearemos en el estudio de estos sistemas. En esta segunda parte incluiremos la descripción algunos sistemas de pocas partículas que pueden confinarse en nanoestructuras semiconductoras, las diferentes aproximaciones empleadas en el desarrollo de los modelos teóricos y formalizaremos la notación que será empleada a lo largo de todo el trabajo.

1.1. NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

Es ampliamente conocido que las propiedades físicas de los materiales semiconductores están determinadas básicamente por algunos parámetros macroscópicos, tales como: el tipo y contenido de compuestos, la constante de red, la constante dieléctrica, la brecha entre la banda de conducción y de valencia, entre otros. Cuando estos parámetros permanecen invariables dentro de todo el material tenemos un semiconductor en bloque. Por otro lado, si estos parámetros o alguno de ellos permanecen constantes solo dentro de regiones de tamaño nanométrico, entonces estamos hablando de nanoestructuras semiconductoras. Estas pequeñas regiones, donde se tiene homogeneidad en los parámetros macroscópicos, pueden presentar las más diversas morfologías dependiendo de la técnica y las condiciones de crecimiento que se empleen, en este sentido, las nanoestructuras ofrecen una posibilidad única de controlar las propiedades físicas, no solo desde el punto de vista composicional, sino además por variación de su tamaño y su forma. En relación con esto, es interesante resaltar el hecho de que las dimensiones de estas estructuras son comparables con la longitud de onda de De Broglie asociada a los portadores de carga, por lo tanto estos últimos exhiben un comportamiento cuántico completamente diferente al que presentan en el bloque [10]. Quizá, uno de los rasgos más sobresalientes de este comportamiento cuántico es la cuantización de la energía de los portadores de carga en la dirección que se halle el confinamiento estructural.

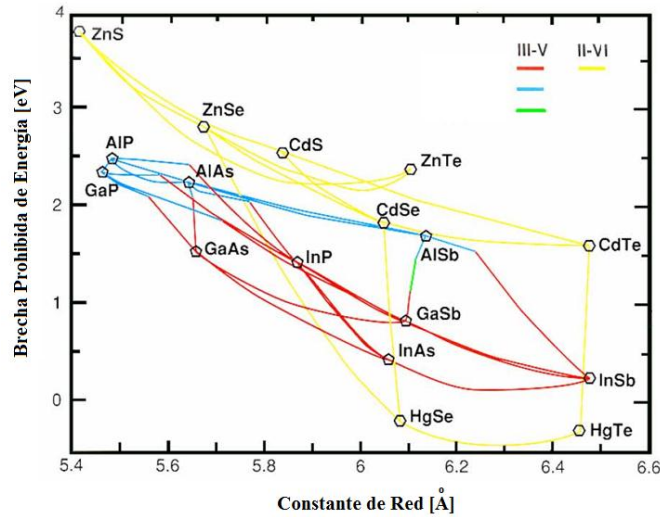


Fig. 1. Relación entre la brecha de energía prohibida y la constante de red para algunos materiales semiconductores

Como se mencionó en la introducción, las nanoestructuras semiconductoras actualmente constituyen el paradigma de los sistemas de baja dimensionalidad (SBD). Dichos sistemas se caracterizan por restringir el movimiento de los portadores de carga en una, dos o incluso las tres dimensiones espaciales. El interés científico en los SBD surgió en el año 1964, cuando W. A. Little [11] y V. L. Ginzburg [12] formularon la posibilidad de realizar superconductividad de alta temperatura sobre la base mecanismos excitónicos casi-unidimensionales y casi-bidimensionales, respectivamente. En su modelo, Little consideró una cadena lineal de un polímero con grupos de moléculas laterales de alta polarizabilidad, mientras el modelo de Ginzburg consistía en una película metálica muy delgada sumergida entre dos películas dieléctricas o semiconductoras, las cuales deberían ser fuertemente polarizables para garantizar la formación de los excitones de transferencia de carga. La gran cantidad de intentos que se realizaron con el ánimo de implementar experimentalmente estos modelos no llevaron a la fabricación de superconductores de alta temperatura. Sin embargo, estos trabajos no fueron vanos, pues dieron origen a diferentes técnicas de fabricación de películas delgadas de espesor nanométrico, con las cuales hoy en día se fabrican heterojunturas semiconductoras a escala nanométrica con interfaces casi perfectas en las juntas. Dentro de las principales técnicas que hoy se utilizan con este fin, podemos mencionar: la epitaxia de haces moleculares, la deposición de vapor metal-orgánico, la litografía basada en rayos moleculares y la epitaxia en fase-líquida [13]. En general, para fabricar estas nanoestructuras se utilizan materiales semiconductores compuestos, binarios o ternarios, lo que permite formar las heterojunturas por un cambio brusco de la concentración de uno de los componentes del compuesto. Los materiales más ampliamente usados para este propósito son: GaAs-AsIn, GaInAs-GaAlAs, In-GaInAs, InP-GaAs, GaSb-GaAs, InAs-Si, InSb-CdTe, etc. Dichos materiales se eligen esencialmente por presentar dos aspectos de gran importancia para el diseño de nanoestructuras: diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy parecidos. El primer aspecto está relacionado con la localización de los portadores de carga al interior de la nanoestructura gracias al potencial de confinamiento que se crea debido a la diferencia que existe entre los anchos de las brechas prohibidas de los dos materiales. El segundo aspecto tiene como fin reducir al mínimo la tensión en las juntas y por lo tanto las deformaciones en las interfaces. En la figura 1 puede apreciarse la relación entre el ancho de banda prohibida y el parámetro de red para algunos materiales semiconductores simples y compuestos.

La primera nanoestructura que se fabricó fue una estructura de tipo composicional o heteroestructura, conocida como superred (SL-Super Lattice), la cual estaba constituida por una serie de capas de dos semiconductores alternados con periodicidad nanométrica. Este nuevo material fue previsto en el año 1970 por los investigadores de la IBM, Leo Esaki y Ray Tsu [14], y unos años después fue obtenido en su laboratorio. Paralelamente a las superredes fue desarrollándose la fabricación y el estudio de otras estructuras conocidas como pozos cuánticos (QW-Quantum Well) [2,15], en las cuales la región que presenta homogeneidad de parámetros es una capa de espesor nanométrico. En este caso se logra confinar el movimiento de los portadores de carga en una región plana muy estrecha, de modo que su movimiento se restringe básicamente a dos dimensiones. A partir de los 80s han sido desarrolladas nuevas técnicas para fabricar sistemas con uno y dos grados de confinamiento adicional: los hilos cuánticos (QWW-Quantum Well Wire), sistemas cuasi-unidimensionales [2,16] y la situación extrema, estructuras cuasi cero dimensionales, denominadas puntos cuánticos (QD-Quantum Dot) [2,17].


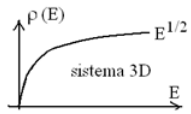
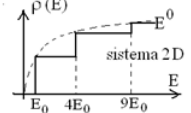

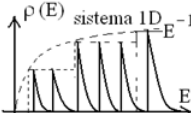

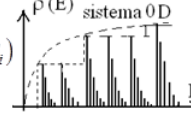
Sistema	Energía	Densidad de Estados
	$E(3D) = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*}$	$\rho(E) \propto E^{1/2}$ 
	$E(2D) = E_0 n^2 + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*}; n = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto E^0$ 
	$E(1D) = E_0(n^2 + m^2) + \frac{p_y^2}{2m^*}; n, m = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto E^{-1/2}$ 
	$E(0D) = E_0(n^2 + m^2 + l^2); n, m, l = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto \sum \delta(E - E_i)$ 

Fig. 2. Densidad de estados para un electrón confinado en diferentes sistemas de dimensionalidad reducida

Con el ánimo de mostrar la importancia que tiene la reducción de la dimensionalidad de una nanoestructura sobre sus propiedades físicas, a continuación se expondrá someramente el notable cambio que sufre la densidad de estados al reducirse la dimensionalidad del sistema para diferentes SBD idealizados. Para el caso de electrones se tiene que una relación entre la densidad de estados $g(E)$ y la dimensionalidad del sistema D , puede resumirse en la expresión: $\rho(E) \sim E^{D/2-1}$. Debe tenerse en cuenta que esta expresión no incluye los sistemas cero-dimensionales, ya que para este caso el espectro que aparece es completamente discreto y la densidad de estados será una superposición de funciones delta de Dirac. Lo anterior es mostrado en la Figura 2, donde se presenta la densidad de estados de un sistema tridimensional o semiconductor en bloque ($\rho_{3D}(E) \sim E^{1/2}$), un sistema bidimensional o pozo cuántico ($\rho_{2D}(E) \sim E^0$), un sistema unidimensional o hilo cuántico ($\rho_{1D}(E) \sim E^{-1/2}$) y un sistema cero-dimensional o punto cuántico ($\rho_{0D}(E) \sim \sum \delta(E - E_i)$). En esta figura se observa claramente como al irse reduciendo la dimensionalidad del espacio, la curva de la densidad de estados

exhibe una marcada evolución. Puede apreciarse como al reducir una de las dimensiones del sistema, las curvas de densidad de estados que surgen para este nuevo sistema se van haciendo sucesivamente más y más estructuradas, y van manteniendo solo en forma de envolvente el comportamiento de la curva del sistema anterior. Lo anterior lleva a entender cualitativamente como la reducción de la dimensionalidad del sistema producirá cambios importantes en las diferentes propiedades ópticas, como es el caso de las tasas de absorción o emisión, y también en la distribución de los portadores de carga dentro de la nanoestructura. Es interesante resaltar para el caso de un sistema cero dimensional, que el hecho de que exhiba una densidad de estados en forma de picos discretos es sinónimo de que todos los niveles energéticos se encuentran cuantizados por efecto del confinamiento en las tres direcciones. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que para puntos cuánticos reales las líneas de la densidad de estados deben presentar algún ancho debido al principio de incertidumbre y a la interacción de los portadores de carga confinados con las vibraciones de la red cristalina.

1.1.1. Puntos y Anillos Cuánticos Autoensamblados

Entre los diversos tipos de nanoestructuras, se tiene que los QDs son los que han generado mayores expectativas en torno a su versatilidad para modelar sus propiedades optoelectrónicas y a la aparición de una gran variedad de fenómenos cuánticos. Estos sistemas se pueden considerar básicamente como pequeñas islas semiconductoras que confinan en su interior sistemas fermiónicos de pocas partículas que interactúan mutuamente a solo algunos nanómetros de distancia, por lo que su estructura electrónica resulta ser similar a la de un átomo. Esta característica, de suma importancia para su estudio, les ha significado ser catalogados como “*átomos artificiales*”. Por supuesto, en paralelo al estudio de las propiedades físicas que emergen de estos sistemas cuasi-cerodimensionales se vislumbra un amplio horizonte para aplicaciones potenciales. Un ejemplo es el de servir como dispositivos emisores de luz de cualquier color, ya que el color de la luz emitida depende del tamaño del punto, tendremos por tanto que un incremento en sus dimensiones llevará a emitir más hacia el rojo y una reducción de estas llevará a que la luz sea más azul. Otras posibles aplicaciones podrían ser: el diseño de materiales para hacer compuertas lógicas ultra rápidas e interruptores ópticos, diodos laser, transistores de un solo electrón y en un futuro cercano lograr implementar la criptografía cuántica y la computación cuántica [8, 9].

De la amplia variedad de QDs que actualmente hay bajo investigación, los denominados puntos cuánticos autoensamblados (SAQD-Self-Assembled Quantum Dots), son tal vez los que gozan de mayor atención. Estas pequeñas estructuras que en principio podrían considerarse como defectos presentes en una capa de material semiconductor, son crecidas curiosamente mediante la técnica epitaxial, la cual se desarrolló en sus inicios con el objeto de obtener cristales semiconductores sin defectos en sus interfaces, como fue el caso de la obtención de pozos cuánticos con propiedades ópticas de excepcional calidad. La técnica epitaxial puede ofrecer algunas variantes que se conocen como modos de crecimiento y cada modo de crecimiento viene determinado, principalmente, por las condiciones en las que dicho crecimiento se realiza (temperatura del sustrato, velocidad de deposición de los materiales, etc.), y las propiedades de los materiales (constantes de red, constantes elásticas, etc.) Tal vez el factor más importante que condiciona el crecimiento de puntos cuánticos es el desajuste de las constantes de red entre el material depositado y el sustrato. Cuando éste es pequeño, alrededor de un 1%, el material depositado se acomoda a la periodicidad de la red del sustrato, de forma

que la nueva capa no presenta deformaciones. Si por el contrario, el desajuste entre las constantes de red es notable, como es el caso de InAs depositado sobre un sustrato de GaAs, donde la diferencia entre los parámetros de red llega a ser del 7% (ver figura 1), tenemos que únicamente las primeras capas llegan a cristalizar en forma epitaxial, pero al llegar a un espesor crítico las últimas monocapas experimentan una tensión que comprime los átomos que las conforman, llevando así a un incremento de la energía elástica de deformación. De esta manera, puede llegar un momento en que este proceso de crecimiento resulte inestable y se produzca una relajación del sistema a través de una deformación plástica, creándose entonces dislocaciones. En la medida en que la compresión lateral aumenta tiene lugar una reorganización del material depositado, lo cual lleva a la formación de unas islas de dimensiones nanométricas. Estas pequeñas islas han sido denominadas como puntos cuánticos autoensamblados debido al carácter espontáneo que presenta su crecimiento, y su modo particular de crecimiento recibe el nombre de Stranski-Krastanov [18].

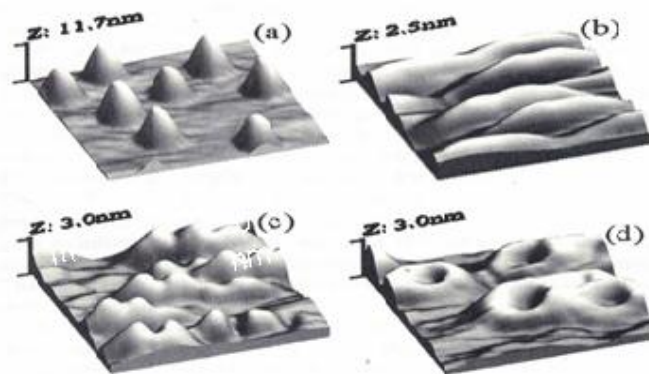


Fig. 3. Imágenes de AFM de 250 nm x 250 nm de QDs autoensamblados de InAs/GaAs. (a) QDs crecidos a 540 °C, (b) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, (c) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C, y (d) QDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C y a una presión diferente al caso (c). D. Granados *et al.* [22]

Uno de los principales atractivos de este tipo de QDs radica en la diversidad de morfologías que pueden presentar, ya que el tamaño y la forma de los SAQDs pueden modificarse ampliamente por medio de varios factores, tales como: el desajuste en las constantes de red, la temperatura y velocidad de crecimiento, etc. Usando diferentes técnicas de medición como: Microscopía de fuerza atómica (AFM - atomic force microscopy), barrido y tunelamiento, microscopía electrónica de transmisión, entre otras, se ha logrado establecer que los SAQDs pueden presentar formas que se aproximan a figuras geométricas como: lentes [19], pirámides [20], pirámides truncadas [21], entre otras; donde todas presentan una característica particular: las alturas (2-8nm) son generalmente mucho menores que los radios de sus bases (20-70nm). Trabajos recientes han mostrado que si durante el proceso de crecimiento de SAQDs de InAs sobre GaAs, estos se recubren con una capa delgada (2nm) de GaAs, entonces tiene lugar una redistribución anisotrópica del material del punto, lo cual alterará dramáticamente su morfología dependiendo de la temperatura, la presión del haz y la velocidad de deposición a la cual se haga dicho recubrimiento. En la figura 3 se muestran algunas imágenes de AFM, obtenidas por D. Granados y J. M. García [22], de QDs autoensamblados de InAs/GaAs los cuales presentan morfologías completamente diferentes al variar sus condiciones de recubrimiento. Puede apreciarse como los QDs de forma cónica (imagen 3a), después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, se transforman en unas estructuras alargadas (imagen 3b), mientras que en la imagen 3c se observan unas estructuras en

forma de jorobas de camello después de realizar el recubrimiento con las mismas condiciones anteriores pero bajando la temperatura a 500 °C. En la imagen 3d puede apreciarse sorprendentemente como, al variar la presión de deposición respecto al caso anterior, se obtiene como resultado que el QD (20 nm de diámetro, 8 nm de altura) se transforme en una estructura en forma de anillo (QR- Quantum Ring) con un tamaño lateral mayor (diámetro externo entre 60 y 140 nm), una altura reducida (2-4 nm) y un hueco central bien definido (20 a 30 nm de diámetro).

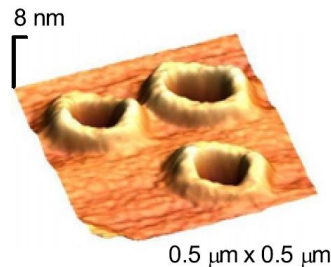


Fig. 4. Imágen de AFM 3D de QRs autoensamblados de InAs. A Aierken *et al* [27]

La formación de nanoestructuras en forma de anillo fue reportada por primera vez para islas de GaAs recubiertas con InAs mediante la técnica de crecimiento por epitaxia de haces moleculares en el modo de Stranski-Krastanov [23-27]. En la figura 4 se muestra una imagen de AFM 3D de algunos QRs de InAs crecidos mediante epitaxia en fase vapor metalorganico [27]. Otro tipo de anillos cuánticos se han obtenido al recubrir arreglos de QDs de InAs con capas muy delgadas de InP [28]. Otro importante logro ha sido la fabricación de QRs de GaSb cubiertos de GaAs [29-31], los cuales se caracterizan por tener una forma toroidal, con una abertura central bien definida y además por presentar un alineamiento tipo II entre las bandas de conducción y de valencia. Este último rasgo hace que para un sistema electrón-hueco, el hueco se localice fuera del anillo, mientras el electrón se moverá dentro de la estructura anular y su movimiento estará gobernado por una combinación de la atracción Coulombiana y el potencial de confinamiento. Finalmente vale la pena mencionar que ha sido reportado el crecimiento de QRs de SiGe mediado por nanopartículas de oro [32], lo cual constituiría el primer ejemplo de anillos autoensamblados que no están hechos de semiconductores III-V. En la figura 5 se muestra una imagen de AFM tridimensional de un arreglo de QRs de SiGe crecidos sobre un sustrato de Si al hacer un recubrimiento con películas muy delgadas de oro.

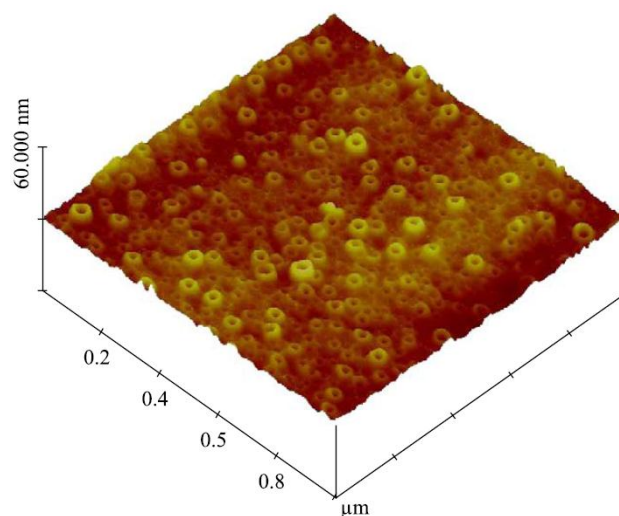


Fig. 5. Imágen de AFM de QRs autoensamblados de SiGe. J. H. He *et al* [32]

Los QRs poseen una topología muy diferente respecto a las demás nanoestructuras, pues son los únicos que no presentan una geometría simplemente conexas. Esta singular característica favorece la aparición de corrientes persistentes en presencia de campo magnético, además ofrecen la excitante oportunidad de observar las fases en las funciones de onda electrónicas en experimentos magneto-ópticos, ya que la variación de la intensidad del campo magnético externo en estas estructuras cuasi-unidimensionales con condiciones de frontera periódicas producirá cambios en las fases de las funciones de onda electrónicas. Esto lleva a oscilaciones en las propiedades energéticas electrónicas, conocidas como oscilaciones Aharonov-Bohm y a oscilaciones en cualquier otra propiedad física del anillo, tal como la magnetización. Otras importantes características que ofrecen estos sistemas son: ofrecen mayor posibilidad de ajustar sus estados electrónicos; permiten realizar variaciones topológicas que van desde un sistema bidimensional, como es el caso del disco cuántico, el cual se obtiene cuando el radio interno tiende a cero, hasta la situación casi unidimensional correspondiente al caso límite en el cual el espesor del anillo es muy pequeño. De acuerdo con la situación física real, los QRs autoensamblado presentan radios mayores que el ancho de sus secciones transversales, por lo tanto se pueden considerar como anillos delgados, lo cual facilita la realización de estudios teóricos.

1.1.2. Superredes en Nanohilos

Hemos visto como, la posibilidad de fabricar materiales semiconductores nanoestructurados, ha puesto al descubierto un horizonte de posibilidades que parece no tener fronteras. Desde la aparición de las primeras superredes, hasta la creación de los puntos y anillos cuánticos, es notable el progreso que han adquirido las técnicas de crecimiento en cuanto al control sobre la forma y la composición de las heteroestructuras semiconductoras. Este desarrollo ha llegado a tal punto, que hoy es un hecho la posibilidad de introducir variaciones bien definidas en la composición, no solo en el semiconductor en bloque, sino incluso dentro de la misma nanoestructura. En este sentido, recientemente han sido fabricados unos nuevos sistemas unidimensionales nanoestructurados los cuales han sido denominados: superredes en nanohilos (NWSL -Nanowires Superlattice). Dichos sistemas se pueden considerar básicamente como una variedad exótica de hilos cuánticos, ya que no tienen la acostumbrada composición homogénea, sino que presentan una composición alternante entre dos materiales diferentes, A y B, intercalados periódicamente en la dirección de crecimiento, por lo que se les puede considerar como un cristal unidimensional. Estas novedosas nanoestructuras han sido diseñadas con el propósito de aprovechar las extraordinarias propiedades que ofrecen los sistemas cuasi-cerodimensionales, y a la vez tener algún medio de escala nanométrica que permita el transporte de portadores de carga.

Estos hilos se sintetizan a través del proceso de vapores químicos (chemical vapor process) y la periodicidad estructural presente a lo largo del eje de crecimiento del hilo se debe a la composición modulada del material [33] o a variaciones en la geometría [34]. Gudixsen y colaboradores fueron los primeros en reportar la fabricación de superredes de nanohilos composicionalmente moduladas, las cuales consistían de 2-21 capas alternantes de GaAs y GaP [35]. Más tarde fueron sintetizadas NWSL con otras composiciones Si/SiGe [36,37], InAs/InP [38], ZnSe/CdSe [39]. Recientemente, ha sido reportado el crecimiento de NWSL de GaN/AlN por medio de epitaxia de haces moleculares [40]. Una imagen de este último tipo de NWSL

tomada por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución se muestra en la figura 6, donde el detalle (6b) y el perfil del parámetro de red a lo largo de la dirección de crecimiento (6c) muestran que no ocurre interdifusión significativa en las juntas de las capas de GaN y AlN, lo cual es una característica importante a la hora de modelar los perfiles del potencial de confinamiento.

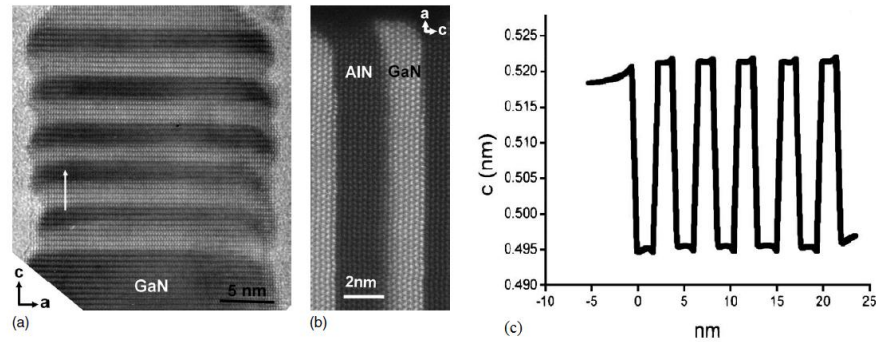


Fig. 6. (a) Imagen tomada por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución de una superred de GaN/AlN en un nanohilo, (b) Este detalle muestra que no ocurre interdifusión significativa entre el GaN y el AlN, (c) Perfil del parámetro de red a lo largo de la dirección de crecimiento. O. Landré *et al.* [40]

Las dimensiones típicas de estas estructuras son: los radios 20-40nm y los anchos de las capas en superredes desde 1,5nm hasta 100nm [41]. Esta estructura de superred de QDs puede presentar características de QD, QWW y SL. Cuando la diferencia entre los anchos de las bandas de los diferentes materiales es tal que los portadores quedan confinados en uno de los QDs, los estados electrónicos tendrán las características cero-dimensionales de un QD. Sin embargo por tunelamiento entre QDs adyacentes, los portadores pueden viajar a lo largo del eje del hilo, entonces una estructura electrónica de minibandas correspondiente a una SL tendrá lugar. Por otra parte, debido al fuerte confinamiento lateral, el movimiento de los portadores en el plano perpendicular al eje del hilo puede confinarse tanto, que el sistema adquiere las características de una estructura unidimensional. El análisis de los resultados de medición de la fotoluminiscencia, del transporte eléctrico y de la electroluminiscencia muestran unas propiedades fónicas y electrónicas particulares de las NWSLs que abren un amplio campo para sus aplicaciones desde los códigos de barras nanométricos, hasta los nanodiodos de emisión de luz [37,39].

1.2. SISTEMAS FERMIÓNICOS DE POCAS PARTÍCULAS CONFINADOS EN NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

El estudio de los sistemas de pocas partículas en semiconductores en bloque se inició a partir de 1958, cuando M. A. Lampert [42] estableció las bases teóricas para la formación de complejos con portadores de carga de diferente tipo, los cuales él clasificó en dos grupos: móviles e inmóviles. En el caso de los complejos móviles tenemos sistemas compuestos por electrones y huecos, los cuales están ligados entre sí por la interacción Coulombiana y se propagan a través del cristal como si fuesen un solo ente. El sistema más simple de este tipo es un ente neutro de vida muy corta, conocido como *Excitón* (X). En forma breve podríamos

decir que un excitón es un cuanto de excitación electrónica en el cristal que se genera con la absorción de un fotón. Cuando un cristal semiconductor absorbe un fotón, promueve a uno de los electrones desde una banda de valencia llena hasta una banda de conducción vacía, esto deja un estado vacío en la banda de valencia al cual se denomina hueco. Un hueco puede considerarse como una región de carga positiva neta que puede propagarse a través de la red cristalina como si se tratara de una partícula real. Una vez que se han creado en sus respectivas bandas, tanto el electrón como el hueco evolucionan rápidamente hasta alcanzar su estado de mínima energía. El electrón excitado cae hasta el fondo de la banda de conducción, en tanto que el hueco asciende hasta la parte superior de la banda de valencia. El ascenso del hueco obedece a que los electrones restantes de la banda de valencia lo van desplazando a medida que van cayendo hacia los estados disponibles de menor energía. Finalmente en aproximadamente un nanosegundo, el electrón y el hueco pueden reducir más su energía total enlazándose para formar un excitón. En cierto modo, los excitones se asemejan a un átomo de hidrogeno con una carga positiva que tiene una masa mil veces menor que la masa del protón y con una energía de enlace que suele ser de cien a mil veces menor. La debilidad de dicho enlace supone que la distancia media entre el electrón y el hueco debe ser uno o dos órdenes de magnitud mayores que el diámetro del átomo de hidrogeno. A temperaturas ordinarias, las vibraciones térmicas de la red resultan ser lo suficientemente violentas como para romper el débil enlace excitónico. En general, para producir una cantidad significativa de excitones en un semiconductor en bloque es necesario enfriar el semiconductor hasta temperaturas de solo algunas decenas de grados por encima del cero absoluto. Se tiene conocimiento de que un excitón puede ligar un electrón o un hueco adicional para formar triones negativos (X^-) o positivos (X^+). También puede darse la combinación de dos excitones para formar un complejo conocido como biexcitón (XX).

El segundo grupo está formado por centros localizados en la vecindad de algún tipo de defecto, en particular, impurezas donadoras o aceptadoras. Si en una red cristalina, por ejemplo de GaAs, se introduce un átomo del grupo IV de tal manera que reemplace a un átomo de Ga, uno de los electrones de este átomo introducido no participa en el enlace químico y queda casi libre en la banda de conducción. Este electrón se encuentra débilmente ligado en una "órbita" de radio muy grande en torno al ión monovalente y por lo tanto puede ser fácilmente removido por excitaciones térmicas o eléctricas. Tales sistemas son conocidos como donadoras neutras (D^0). El espectro energético de una impureza donadora en un bloque de GaAs tiene una estructura tipo hidrogenoide, sin embargo la energía de ionización de una donadora en el GaAs es mucho menor que la del átomo de hidrogeno; esto se debe a que la atracción de Coulomb del ión se encuentra, en gran parte, apantallada por la naturaleza dieléctrica del cristal. Como resultado de la interacción Coulombiana, estos centros pueden atrapar electrones, huecos o excitones. Algunos ejemplos de estos sistemas son la D^- , sistema formado por una donadora neutra D^0 que ha atrapado un electrón, el D_2^0 , que se forma a partir de dos donadoras neutras, este último al ser excitado puede perder un electrón para formar un D_2^+ , entre otros. La existencia experimental de algunos de estos complejos en silicio dopado con elementos del grupo III y V fue demostrada años más tarde por Haynes [43]. Sus estudios también mostraron que en la mayoría de los casos, la observación de estos complejos en el bloque era muy complicada, debido a que dichos sistemas se forman bajo condiciones metaestables para temperaturas por encima de los 5°K, es decir que están tan débilmente ligados que la energía térmica $K_B T$ supera la energía de ionización del sistema, lo que lleva a que tengan tiempos de vida muy cortos ($\tau \approx 10^{-9} s$). Esta dificultad se pudo superar con la creación de las heteroestructuras

semiconductoras, como fue demostrado por primera vez en 1990, en un trabajo realizado por Huan y colaboradores [44], donde se observó excitones en QWs de GaAs-GaAlAs. Posteriormente un sinnúmero trabajos [45] ayudarían a reafirmar lo anterior. Este aumento en la estabilidad se debió al hecho de que el confinamiento conlleva al incremento de la energía de enlace del excitón en un orden de magnitud y por lo tanto a una mayor estabilidad del estado base de los complejos [46]. Adicionalmente, se pudo establecer que el espectro energético de estos sistemas es extremadamente sensible frente a cambios en la geometría, la posición de los complejos en el caso de centros localizados y a la presencia de campos externos [47]. La existencia de excitones en QDs fue confirmada experimentalmente en 1997 por Petroff y sus coinvestigadores [48], donde se demuestra que los excitones en QDs son mucho más estables que en otras heterojunturas debido al mayor confinamiento, haciendo posible su observación incluso a temperatura ambiente.

Basados en lo anterior, no es de extrañar que actualmente exista un gran interés en el estudio de sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras semiconductoras. No obstante, si bien es cierto que las condiciones impuestas por el potencial de confinamiento enriquecen notablemente las propiedades optoelectrónicas, también debe tenerse en cuenta que la descripción teórica de estos sistemas fermiónicos confinados artificialmente resulta ser una tarea realmente difícil, esto debido a que la ecuación de autovalores debe resolverse en un espacio no homogéneo, anisotrópico y multidimensional. Para analizar las propiedades de sistemas de pocas partículas en un semiconductor en bloque, Kohn y Luttinger [49,50] desarrollaron una teoría rigurosa que permite eliminar en la ecuación de Schrödinger, para perturbaciones suaves, la parte del potencial cristalino periódico, utilizando la aproximación de masa efectiva (AME). El pionero en la aplicación de este método, en el estudio de espectros de impurezas donadoras y excitones confinados en pozos cuánticos, fue Bastard [51,52] quien asumió que la AME se podía utilizar en heterojunturas semiconductoras, a pesar de que el potencial de confinamiento varía en forma abrupta en la interfaz de la nanoestructura. Los primeros trabajos de Bastard originaron una gran cantidad de publicaciones donde el estudio de los efectos de confinamiento sobre el estado base de donadoras D^0 y excitones X en QWs se realizaron con detalle. Posteriormente, se extendieron los estudios a estados excitados, no solo para estos dos complejos, sino también a sistemas como: aceptadoras, donadoras cargadas, excitones cargados, biexcitones, dos y tres electrones, entre otros.

Para calcular las energías de enlace en estos sistemas se han utilizado diferentes métodos aproximados, siendo quizás los más sencillos el variacional [53,55] y el de diagonalización matricial [56,57]. Ambos métodos requieren de un considerable volumen de cómputo, el cual crece exponencialmente con el aumento del número de partículas, y además presentan importantes limitaciones en cuanto al alcance de su aplicación. El método variacional sólo permite hacer un estimativo de la energía del estado base, mientras que el método de diagonalización es poco aplicable para potenciales diferentes del parabólico. Otros métodos también usados para analizar el espectro de sistemas de pocas partículas en heteroestructuras son el de expansión por series [58], dimensión fraccionaria [59], teoría de perturbaciones [60] y diferentes técnicas numéricas tales como: Elementos y diferencias finitas [61,62], barrido trigonométrico (ver apéndice A) [63], y otras soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales [64]. Todas estas técnicas resultan ser bastante complicadas para el análisis del espectro energético cuando el número de partículas crece. Una de las maneras de obviar esta dificultad es sacando provecho de las características morfológicas de las heteroestructuras, como es el caso de los SAQDs, para los cuales se sabe que la altura es mucho menor que las dimensiones de su

base, lo que permite hacer uso de la aproximación adiabática (AA) [65-69]. Esta aproximación permite reducir problemas tridimensionales a problemas similares en espacios de una o dos dimensiones con Hamiltonianos renormalizados [65].

Como se ha mencionado antes, los QRs son los sistemas que han resultado ser más interesantes de estudiar debido a la estructura topológica tan singular que presentan, pues al no ser simplemente conexas permite la aparición de efectos completamente nuevos, como es el caso de las corrientes persistentes y las oscilaciones Aharonov-Bohm (AB) en presencia de un campo magnético. Por otro lado, por tener el menor volumen de todas las nanoestructuras, los QRs han resultado ser los mejores candidatos para observar y manipular sistemas de pocas partículas, que pueden ir desde un único electrón hasta complejos excitónicos. Lo anterior ha producido una gran demanda de trabajos teóricos que intentan ampliar la comprensión del rol que juegan los efectos del confinamiento estructural, la presencia de defectos, la correlación entre partículas y la presencia de campos externos, sobre el comportamiento de algunos sistemas fermiónicos al ser confinados en QRs. Büttiker, Imry y Landauer en 1983 [70] fueron los primeros en realizar un análisis teórico de un electrón en un anillo mesoscópico unidimensional traspasado por un campo magnético. Ellos predijeron que debido a la modificación en las condiciones de frontera por efecto del flujo, la función de onda electrónica y por lo tanto cualquier propiedad física del sistema sería una función periódica del flujo magnético, con periodo fundamental $\phi_0 = h/e$, este resultado es conocido actualmente como *oscilaciones Aharonov-Bohm* (AB). Posterior a este trabajo pionero, y luego de la fabricación de los primeros QRs, ha sido inusitado el volumen de trabajos que se han realizado sobre sistemas de pocas partículas en QRs; los cuales consideran desde modelos unidimensionales hasta modelos tridimensionales que incluyen defectos en su forma. Para el caso de un electrón en QR, existe un gran número de trabajos, en los cuales se estudian diversos aspectos como por ejemplo: efectos de polarización inducida por excentricidad y campos eléctricos externos sobre las propiedades opto-electrónicas [71], la degeneración del espectro energético con un campo magnético y en presencia de interacciones espín-orbita [72], los efectos que puedan inducir defectos estructurales, como la forma y el ancho del anillo, sobre el espectro electrónico de QRs, cuando se tiene la presencia de un campo magnético uniforme [73,74]. Parte de los últimos esfuerzos que se han realizado en el estudio de una partícula en un QR, se ha dirigido hacia la solución de modelos que se asemejen cada vez más a la forma que presentan los QRs reales, esto con el ánimo de poder dar una interpretación satisfactoria a los resultados obtenidos experimentalmente. Una muestra de esto son los trabajos de Filikhin [75] y Fomin [76], quienes implementaron modelos de QRs tridimensionales con parámetros geométricos tomados de medidas experimentales, y determinaron el espectro energético incluyendo el efecto de campo magnético. También han sido halladas algunas soluciones analíticas exactas al problema de un electrón confinado en un QR tridimensional [77] y para un QR bidimensional [78]. Por otro lado, para analizar los efectos de correlación electrón-electrón, se han realizado algunos estudios sobre dos electrones confinados en un QR [67,79,80], y confinados en un sistema de dos anillos verticalmente acoplados, con un electrón atrapado en cada uno [81,82]. La evidencia experimental del crecimiento de QRs concéntricos ha motivado el estudio de un electrón [83] y varios electrones [84] confinados en dos anillos concéntricos, bajo la influencia de campo magnético.

Uno de los complejos móviles que resulta más interesante de estudiar en estas estructuras de forma anular, bajo la influencia de un campo magnético, es el excitón. Al ser un ente neutro, no se esperaba que presentara sensibilidad alguna al flujo magnético, ya que como es bien sabido el origen físico de la sensibilidad al flujo magnético que experimenta un electrón

en un QR se debe a su carga, la cual se acopla al potencial vectorial. Por lo tanto, un excitón, siendo un estado ligado de un electrón y un hueco, no debería ser sensible al flujo, ya que el acoplamiento con el flujo resulta de signo opuesto para el electrón y para el hueco. Sin embargo, el excitón es una partícula compuesta, por lo tanto polarizable, y en este caso el área barrida por las trayectorias del electrón y el hueco será diferente y determinará la fase acumulada por el excitón [85,86]. En este sentido, se ha mostrado teóricamente que la posible aparición del efecto AB para excitones puede ser estimulada cuando el excitón es radialmente polarizado mediante un campo eléctrico [87,88] o debido a la presencia de una impureza [89]. A pesar de esto, la existencia de las oscilaciones AB de excitones neutros en QRs tipo I, cuando ambas partículas están confinadas en el anillo, sigue siendo motivo de controversia en los últimos años, ya que algunos trabajos predicen que las oscilaciones AB pueden ser muy débiles o incluso pueden no aparecer para un anillo de ancho finito [90,91]. Por otro lado, algunos cálculos teóricos [92-94] determinan que para el caso de QRs tipo II, es más factible la observación de las oscilaciones AB debido a la asimetría presente en el confinamiento efectivo para el electrón y el hueco. Esto lleva a que el electrón y el hueco recorran trayectorias con diferentes radios efectivos y por lo tanto, después de dar una vuelta, acumulen fases diferentes debido a que el flujo magnético que atraviesa sus trayectorias es diferente. Desde el punto de vista experimental, se tiene que recientemente ha sido demostrada la existencia de una débil interferencia tipo AB para excitones en QRs semiconductores tipo I [95] y tipo II [96]. Dejando de lado los complejos móviles, y dirigiendo nuestra atención hacia los complejos inmóviles, podemos decir que se ha llevado a cabo un número considerable de investigaciones para el caso de impurezas D^0 [97-99] y de impurezas D^- [99-101] confinadas en QRs, pues son sistemas fundamentales en el estudio de las propiedades opto-electrónicas de nanoestructuras semiconductoras.

De especial interés para nosotros en este trabajo de investigación son los sistemas de pocas partículas confinadas en NWSLs. Hasta donde conocemos, la mayor parte de trabajos que se han realizado sobre el espectro electrónico de donadoras, uno o dos electrones, excitones, y triones en nanohilos, consideran un modelo de confinamiento con potencial homogéneo dentro del hilo. En lo que respecta a las NWSLs, tenemos que aunque la posibilidad de fabricarlas se dio en el año 2002, ya en 1990, Ulloa y colaboradores [102] habían publicado un trabajo visionario en el cual determinaron la conductancia en una superred unidimensional. Inspirados en el trabajo pionero de Ulloa, Wu y colaboradores [103] en 1991, utilizando el método de matriz de transferencia, caracterizaron las propiedades de conductividad y coeficientes de transmisión de un QWW con estructura serial periódica. A parte de la realización de estos dos trabajos pioneros, puede decirse que el interés de los investigadores teóricos se ha retomado luego de la fabricación de las primeras NWSLs. Muestra de ello son los trabajos que se han llevado a cabo para el caso de un electrón confinado en una NWSL [104] y un trabajo más reciente donde se ha analizado el efecto de la posición de una impureza neutra y cargada negativamente localizada dentro de una NWSL sobre la energía del estado base usando el método de dimensión fractal [105]. Otra de las pocas investigaciones teóricas sobre sistemas de pocas partículas en NWSLs fue la realizada en 2005 por Zhang y colaboradores [106] quienes analizaron el espectro de absorción para un excitón en una superred de puntos cuánticos en nanohilos cilíndricos en presencia de campo eléctrico. Como se ha podido constatar, el volumen de trabajos teóricos acerca del análisis de sistemas de pocas partículas en NWSLs resulta poco hasta ahora, esta fue una de las razones más relevantes que motivaron al desarrollo de esta investigación.

Finalmente puede decirse que el gran volumen de trabajos teóricos y experimentales realizados durante los últimos años sobre nanoestructuras semiconductoras, demuestran el gran interés de los investigadores por establecer los factores que más significativamente influyen en el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en LDSs bajo condiciones de fuerte confinamiento, ya sea estructural o por medio de campos eléctricos y magnéticos, debido a que éstos son los que en última instancia van a determinar su aplicabilidad tecnológica.

1.3. APROXIMACIÓN DE LA MASA EFECTIVA EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

Un bloque de material semiconductor es en esencia un conjunto de un inmenso número de núcleos atómicos con sus respectivos electrones. Para poder determinar los estados estacionarios y el espectro energético de tal sistema de partículas se debe resolver la ecuación de Schrödinger para el cristal, lo cual resulta prácticamente imposible debido a que el número de variables independientes que describen el sistema está determinado por el número total de partículas del cristal. Por lo tanto frente a estas limitaciones, se hace necesario hacer una serie de aproximaciones sucesivas para poder obtener resultados razonables.

Como primera aproximación se divide todo el sistema de partículas en livianas (electrones) y pesadas (núcleos atómicos). Puesto que la masa del núcleo es mucho mayor que la masa del electrón, se tiene entonces que las velocidades de los electrones superan notoriamente a las velocidades de los núcleos (aproximadamente dos órdenes). Esto permite considerar, en primera aproximación, el movimiento de los electrones en un campo de potencial de núcleos fijos. Tal consideración es conocida como *aproximación adiabática o de Born-Oppenheimer*. Para reducir aún más el número de variables que se tienen, se entra a considerar que los núcleos y sus electrones internos están tan fuertemente ligados que se pueden considerar como una única partícula, de tal forma que cada uno de estos puntos de la red cristalina se considera como una coraza iónica cuya carga neta es la del núcleo menos la de sus electrones internos que lo apantallan. Por lo tanto, para los únicos electrones que se va a considerar variables de movimiento será para los electrones de valencia. A esta aproximación se le conoce como *aproximación de valencia*. A pesar de las simplificaciones ya hechas, todavía resta un hamiltoniano que incluye las órbitas de todos los electrones de valencia, lo cual es un número todavía extraordinariamente grande (10^{23} electrones por cm^3). El siguiente gran paso, es suponer que cada electrón de valencia percibe aproximadamente un mismo potencial promedio efectuado por todos los otros electrones, el cual, debido a las simetrías de la red cristalina, se puede suponer periódico. Esta consideración, llamada *aproximación de campo promedio*, reduce el problema al análisis del movimiento de un electrón con función de onda $\Phi(\vec{r})$ sometido a la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}_{1e} \Phi(\vec{r}) = \left(\frac{p^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) = E_{1e} \Phi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

donde el potencial periódico $V(\vec{r})$ subsuma la interacción del electrón con el campo electrónico promedio y la red iónica. Según el *teorema de Bloch*, las soluciones de (1.1) pueden escribirse

como una función de Bloch $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ donde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ es periódica bajo cualquier traslación a lo largo de un vector de la red cristalina \vec{R} , esto es, las funciones de Bloch son funciones propias de un operador de traslación: $\hat{T}_{\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Para probar que en verdad existe un tal conjunto de funciones de Bloch que resuelva la ecuación (1.1) basta notar que, debido a la periodicidad de la red, el hamiltoniano \hat{H}_{1e} conmuta con el operador $\hat{T}_{\vec{R}}$ y por lo tanto ambos pueden ser diagonalizados simultáneamente. Debido a que existe cierta arbitrariedad en la elección de \vec{k} en cuanto que cualquier vector $\vec{k} + \vec{G}_n$ (con \vec{G}_n un vector de la red recíproca) es también una posible función de Bloch, estas funciones se clasifican más frecuentemente con los dos índices $\Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ donde \vec{k} debe encontrarse dentro de la primera zona de Brillouin (*Esquema en zona reducida*). La dependencia del valor propio $E_{1e}(n,\vec{k})$ es la bien conocida *estructura de bandas electrónica* donde el número n expresa justamente el *índice de la banda*.

Todo lo dicho hasta ahora, vale para el espectro electrónico de un semiconductor volumétrico sin considerar el efecto de ninguna perturbación externa (como campos eléctricos y/o magnéticos) o la presencia de iones distintos (sea una impureza o toda una heteroestructura). Debido a que en este trabajo se deben considerar justamente estas alteraciones respecto al hamiltoniano \hat{H}_{1e} , es preciso explicar cómo se incluyen. La primera aproximación que se puede considerar es el potencial coulombiano $U(\vec{r})$ debido a la presencia de la donadora:

$$\hat{H}'_{1e} = \hat{H}_{1e} + U(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_e} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon|\vec{r} - \vec{\xi}|}. \quad (1.2)$$

La forma de este potencial, donde el efecto electromagnético de la red cristalina se resume en el apantallamiento hecho por la constante dieléctrica ϵ , se justifica si el movimiento electrónico se desarrolla en una región de un tamaño significativamente mayor al de una celda unitaria. El siguiente paso para resolver (1.2) es el uso de un procedimiento conocido como *aproximación de masa efectiva*, al cual puede llegarse definiendo primero unas funciones llamadas *funciones de Wannier* $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ las cuales están relacionadas con las funciones de Bloch de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \\ \Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) \end{aligned} \quad (1.3)$$

siendo N el número de celdas unitarias del cristal. Los vectores \vec{R}_i son vectores de traslación del cristal. El hecho de que el cristal sea finito obliga a que se deban imponer unas *condiciones de frontera periódica* (Condiciones de Born-von Kármán) sobre los posibles valores de \vec{k} a tal punto que estos se reducen a un número finito y todos ellos dentro de la primera zona de Brillouin. Por esta razón, para cada valor de n , el conjunto de funciones de Wannier $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ forma un conjunto completo de funciones para una solución del hamiltoniano en (1.2) de tal forma que si se tiene un valor propio E el vector propio se puede escribir como

$\Phi'(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} \psi(\vec{R}_i) a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$. A la función $\psi(\vec{R})$ se le conoce como función envolvente. Si el potencial $U(\vec{r})$ varía muy lentamente a lo largo de la red se puede suponer de cierta manera que \vec{R} varía en forma continua. Dadas estas suposiciones y aplicando la forma de $\Phi'(\vec{R})$, la ortonormalidad de las funciones de Wannier y de Bloch, y la ecuación (1.3) en la (1.2) se obtiene que

$$\left[E(n, \vec{k}) + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E \psi(\vec{R}); \quad (1.4)$$

en este caso se debe interpretar $\vec{k} = -i\nabla_{\vec{R}}$ debido a que en el límite continuo $\hbar\vec{k}$ y \vec{R} forman pares de variables canónicas conjugadas análogos a \vec{p} y \vec{r} .

El electrón sobrante de la donadora es un electrón que está relativamente libre en comparación con los otros electrones de la red; por consiguiente, se puede hacer uso del *modelo de electrones casi libres* y suponer que la energía de este electrón se encuentra algo por encima del piso de la banda de conducción. Si se supone que sobre esa banda hay un punto mínimo en el centro de la primera zona, isotrópico y no degenerado¹; y que la energía no se separa demasiado de la del piso de la banda de conducción, el operador $E(n, -i\nabla_{\vec{R}})$ se puede aproximar a

$$E(c, \vec{k}) \approx E(c, 0) + \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(n, 0) \right] k^2 = E_c - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2, \quad (1.5)$$

con E_c la energía del piso de la banda de conducción y $m^* \triangleq \frac{\hbar^2}{2 \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right]}$ la masa efectiva de los electrones de conducción del material. La ecuación (1.4) queda entonces:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = (E' - E_c) \psi(\vec{R}). \quad (1.6)$$

Una vez considerado el efecto de la donadora, la presencia de una heteroestructura puede hacerse mediante lo que se conoce como la *aproximación de la función envolvente* la cual interpreta las heterojunturas como barreras de potencial cuya altura es la diferencia entre los pisos de las bandas de conducción². En el modelo matemático empleado aquí, esto es equivalente a introducir el potencial adicional $V(\rho, z)$. En este mismo sentido se puede incluir el efecto de un campo eléctrico constante F , aplicado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, adicionando el término eFz en el Hamiltoniano del sistema.

Resta, finalmente, la inclusión del campo magnético. Si la función envolvente $\psi(\vec{R})$ fuera realmente un orbital electrónico, la presencia del campo magnético podría incluirse cambiando el operador $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{R}} = \vec{p}$ por $\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)$. Es posible interpretar la función envolvente

¹ Los compuestos considerados en este trabajo cumplen en buen grado estas condiciones.

² También habría una diferencia entre las masas efectivas y las constantes dieléctricas pero estas se despreciarían en este trabajo.

como un auténtico orbital en el caso de que el movimiento electrónico sea bastante confinado. Debido a que los campos magnéticos aquí considerados son lo suficientemente grandes ($\sim 8.5 T$) y la nanoestructura ofrece una gran barrera de potencial, ese gran confinamiento está asegurado y por tanto dicha interpretación es válida. Se ha llegado entonces a la ecuación de Schrödinger para un electrón confinado en una nanoestructura en presencia de un ión-impureza, de un campo eléctrico en dirección del crecimiento y de un campo magnético:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\rho, z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|} \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (1.7)$$

donde se ha cambiado \vec{R} por \vec{r} para enfatizar que Ψ se interpreta como un orbital electrónico. De acuerdo con lo que se ha dicho en esta sección, debe recordarse siempre que tanto E como E_0 deben interpretarse como la energía del electrón medida a partir del piso de la banda de conducción del cristal que conforma el interior de la heteroestructura.

1.4. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

La mayoría de los problemas relacionados con sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras no pueden ser resueltos en forma exacta. Soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger existen solamente para unos pocos sistemas idealizados. Por esta razón, para resolver problemas generales se debe recurrir a métodos aproximados y numéricos. En general la ecuación de Schrödinger (1.7), la cual describe un electrón confinado en una heteroestructura, en presencia de un ión-impureza y de campos externos, no es separable. Lo anterior hace que resulte imposible obtener una solución analítica. Además, una solución numérica directa de esta ecuación de onda en tres dimensiones exige una cantidad enorme de trabajo computacional, por lo tanto demanda una importante disposición de recursos de cómputo, con los cuales nuestro grupo de investigación no cuenta en la actualidad. Por tales razones, se debe recurrir a una técnica aproximada que permita separar las variables y reducir notablemente el exigente trabajo computacional; tal técnica es conocida como *aproximación adiabática* (A.A). Dicha aproximación es la misma que se utiliza en el análisis de un cristal al despreciar el movimiento de los núcleos atómicos, por ser mucho más pesados que los electrones. Sin embargo, surge una diferencia de apreciación, pues en el caso de una nanoestructura se toma ventaja, no de la diferencia de masas entre partículas, sino de la diferencia significativa que se tiene entre las diferentes dimensiones características de dicha estructura. La justificación de dicho planteamiento viene dada por las características topológicas mismas que exhiben algunas nanoestructuras, en especial los SAQDs y las NWSLs.

Como se mencionó en la sección 1.1.1, estudios estructurales sobre puntos cuánticos auto-ensamblados con topología de anillo, han demostrado que el radio exterior de estos QR oscila entre 30 y 70nm, el radio del hueco central está entre los 20 y 30 nm, mientras que su altura varía entre 2 y 4nm. Esta evidencia experimental deja claro que, los QRs autoensamblados presentan radios mayores que el ancho de sus secciones transversales, lo cual hace que se puedan tratar como anillos delgados. Además sus alturas son tan pequeñas que pueden considerarse casi planos. Estas características llevan a que el confinamiento en la

sección transversal sea mucho más fuerte que el confinamiento en la dirección angular, y por lo tanto, todos los portadores de carga confinados presentarán un movimiento transversal rápido y un movimiento angular o rotacional relativamente lento. Esto permite que se pueda aplicar con confianza la aproximación adiabática para desacoplar el movimiento transversal rápido, del movimiento angular lento, lo cual facilita en gran medida la realización de estudios teóricos sin dejar de lado la incidencia de la morfología y el tamaño del anillo. Paralelamente tenemos que para las NWSLs, la diferencia que existe entre sus dimensiones longitudinales y trasversales resulta aún más notable que para el caso de los QRs, por lo cual, la aplicación de la AA estará igualmente justificada. Dicha AA ha sido amplia y exitosamente usada en el análisis de algunos problemas de mecánica cuántica [107] y en problemas de pocas partículas en nanoestructuras [108].

Para ilustrar cuantitativamente la validez de esta aproximación en el estudio de sistemas de pocas partículas en nanoestructuras semiconductoras, consideremos, sin pérdida de generalidad, un breve análisis de la ecuación Schrödinger para el caso de una donadora neutra confinada dentro de un QR delgado bidimensional, con radio medio R_0 y ancho W . El Hamiltoniano adimensional en la aproximación de masa efectiva para esta donadora neutra se puede escribir como:

$$H = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\rho) - \frac{2}{|\mathbf{p} - \boldsymbol{\xi}|}. \quad (1.8)$$

Donde, los vectores $\boldsymbol{\xi} = (\xi_\rho, \xi_\varphi)$ y $\mathbf{p} = (\rho, \varphi)$ describen las posiciones en el plano XY, del ion y del electrón respectivamente. El potencial de confinamiento $V(\rho)$, que surge de la discontinuidad en la banda de conducción de los dos materiales que forman la heterojuntura del QR, es definido como:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{para } R_0 - W/2 < \rho < R_0 + W/2 \text{ (Dentro del QR)} \\ V_0, & \text{para } 0 < \rho < R_0 - W/2 \text{ y } \rho > R_0 + W/2 \text{ (Fuera del QR)} \end{cases} \quad (1.9)$$

Por lo tanto, como puede verse, la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (1.8) no es separable. No obstante, para encontrar los autovalores de la energía se puede sacar provecho de la notable diferencia que existe entre las dos dimensiones características de la estructura ($R_0 \gg W$). Para iniciar, se realizará la siguiente consideración para el término rotacional del electrón en el Hamiltoniano (1.8), $1/\rho^2 (\partial^2/\partial \varphi^2) \approx 1/R_0^2 (\partial^2/\partial \varphi^2)$, dado que $R_0 \gg W$ puede suponerse que el electrón se rotará aproximadamente por el radio medio del anillo. Ahora, si aplicamos un rescalamiento respecto al ancho del QR ($\rho = R_0 \tilde{\rho}$), al Hamiltoniano (1.8), tenemos que bajo esta transformación el movimiento electrónico radial se limitará a la región normalizada $0 \leq \tilde{\rho} \leq 1$. Según esta normalización, la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (1.8) adquiere la siguiente forma:

$$\left[-\frac{1}{W^2}\Delta_{\tilde{\rho}} - \frac{1}{R_0^2}\Delta_{\varphi} + V_{eff}(\tilde{\rho}, \varphi) \right] f_0(\tilde{\rho}, \varphi) = E f_0(\tilde{\rho}, \varphi), \quad (1.10)$$

$$\Delta_{\tilde{\rho}} = \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}}, \quad \Delta_{\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad V_{eff}(\tilde{\rho}, \varphi) = V(\tilde{\rho}) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}|}.$$

Esta ecuación de Schrödinger puede interpretarse como si describiera dos “partículas” con movimientos unidimensionales en ρ y φ , las cuales interactúan a través del potencial $V_{eff}(\tilde{\rho}, \varphi)$. Es interesante anotar que dada la diferencia entre las dos dimensiones (R_0, W), estas “partículas” se comportarán como si una fuese “liviana”, con masa W^2 , y la otra fuese “pesada” con masa R_0^2 . Por lo tanto, se tiene que la energía cinética de la “partícula liviana” que vibra en ρ , resulta mucho mayor que la energía de la “partícula pesada” que rota en φ . Por lo tanto tenemos que nuestro electrón se moverá rápidamente en la dirección radial, mientras que su movimiento rotacional será notablemente más lento. En el caso de un QR típico, la relación entre las supuestas masas (las dimensiones características del QR) está dentro del rango $R_0^2/W^2 \approx 25$ a 400 , con lo cual queda justificado que pueda procederse a usar la A.A.

La aplicación de esta diferencia sustancial en las energías cinéticas para diferentes direcciones consiste en congelar momentáneamente el movimiento de la “partícula masiva” para analizar el movimiento de la “partícula ligera”, manteniendo en este caso, a la variable φ como un parámetro del cual dependerá la energía. La ecuación de Schrödinger para esta partícula ligera puede escribirse como:

$$\left[-\frac{1}{W^2} \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} + V_{eff}(\tilde{\rho}, \varphi) \right] f_{\rho}(\tilde{\rho}, \varphi) = E_{\rho}(\varphi) f_{\rho}(\tilde{\rho}, \varphi). \quad (1.11)$$

Una vez se obtenga el autovalor de la energía $E_{\rho}(\varphi)$, se reemplaza en la ecuación de Schrödinger (1.10), la cual describe el movimiento completo del electrón, es decir, se descongela su movimiento radial para determinar cuál es su aporte a la energía total del sistema. La ecuación que se obtiene de esto es:

$$\left[-\frac{1}{R_0^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + E_{\rho}(\varphi) \right] \phi(\varphi) = E \phi(\varphi), \quad (1.12)$$

donde es claro que E es la energía total del electrón, y la función de onda completa está dada como $f_0(\mathbf{p}) = f_{\rho}(\tilde{\rho}, \varphi) \phi(\varphi)$. Esta aproximación será usada en la presente tesis, cuando se realice el análisis de diferentes tipos de sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en algunos modelos de NWSLs y QRs.

2. CONSIDERACIONES DE SIMETRÍA EN NANOESTRUCTURAS

2.1. CLASIFICACIÓN DE LOS ESTADOS ELECTRÓNICOS DE DONADORAS EN NANOESTRUCTURAS AXIALMENTE SIMÉTRICAS

Uno de los principios que se usan comúnmente para identificar los estados electrónicos de sistemas atómicos o de donadoras en el bloque es la clasificación de acuerdo con los valores del momento angular orbital total L . No obstante, este principio no resulta válido para donadoras confinadas en heteroestructuras, ya que no existe en general una ley de conservación del momento angular total de los electrones, debido a que el potencial resultante no presenta simetría central. Sin embargo, si la heteroestructura tiene simetría axial y además la impureza se encuentra localizada sobre su eje de simetría, entonces la proyección del momento angular orbital sobre dicho eje de simetría se conserva, y se puede realizar una clasificación de los estados electrónicos de donadoras confinadas en tales estructuras de acuerdo con los valores de esta proyección. El valor absoluto de la proyección del momento angular orbital a lo largo del eje de simetría puede denotarse con la letra Λ , de forma similar a las moléculas axialmente simétricas, donde Λ puede tomar los valores $0, 1, 2, \dots$. Los estados electrónicos con diferentes valores de Λ podrían denotarse con las letras griegas mayúsculas correspondientes a los respectivos símbolos latinos de los términos atómicos con diferentes valores de L , como se realiza para estados moleculares. Así, para $\Lambda = 0, 1, 2$ se habla de términos Σ, Π, Δ , respectivamente. Todos los estados electrónicos con valores de Λ diferentes de cero, serán doblemente degenerados, esto debido a que para cada valor de la energía corresponden dos estados, los cuales difieren en la dirección de la proyección del momento angular orbital sobre el eje de simetría. Los estados Σ son también doblemente degenerados, ya que se tiene un estado inalterado Σ^+ , y otro estado denotado como Σ^- , cuya función de onda cambia de signo al ser reflejada respecto a un plano de simetría que pasa a través del eje.

2.2. SIMETRÍAS EN NANOESTRUCTURAS SEGÚN INTERACCIONES DE CORTO Y LARGO ALCANCE

Como ya hemos señalado antes, existe un gran número de trabajos publicados sobre sistemas de pocas partículas en nanoestructuras semiconductoras. Sin embargo, en contraste con la estructura ordenada del espectro atómico, lo cual es una consecuencia del potencial esféricamente simétrico que liga los electrones, el espectro de energía presentado por los sistemas de pocas partículas confinados en heteroestructuras semiconductoras carece de cualquier simetría especial. En este sentido se tiene que la elaboración de un enfoque unificado para analizar los estados localizados de portadores de carga, que sea común para todos los tipos de heteroestructuras, presenta un considerable grado de dificultad. Dentro de los aspectos más relevantes que dificultan el estudio de estos sistemas pueden mencionarse básicamente dos. Por un lado se tiene la singularidad presente en el término de la interacción Coulombiana, y por otro, el rompimiento de la simetría central del potencial Coulombiano debido a la presencia del confinamiento estructural. A pesar de estas dificultades, quedan afortunadamente algunos tipos de simetría que siguen cumpliéndose para las interacciones de corto alcance (potencial Coulombiano) o de largo alcance (potencial de confinamiento estructural). Uno podría utilizar estas simetrías parciales tanto para facilitar los cálculos numéricos del espectro energético de sistemas de pocas partículas en heterojunturas semiconductoras, como para interpretar los resultados de dichos cálculos y facilitar la clasificación de los correspondientes niveles. Basados en esto, tenemos entonces que las heteroestructuras semiconductoras más investigadas se pueden separar convencionalmente en dos grandes grupos, cada uno de los cuales presenta una simetría específica. Un grupo estaría conformado por estructuras que presentan un grado de confinamiento estructural no tan alto. Dentro de este grupo podríamos tener sistemas como QWs, MQWs, QWWs, SLs y NWSLs. El otro grupo estaría constituido por sistemas con un alto grado de confinamiento, como es el caso de los SAQDs, más especialmente los QRs, por ser objetos importantes del estudio abordado en este trabajo de investigación. Las simetrías presentes en estos dos grupos son notablemente diferentes y por lo tanto los métodos de cálculo serán también diferentes. Esta clasificación ha sido también el criterio sobre el cual se ha planteado la organización de la presente tesis.

Para heteroestructuras que ofrecen un confinamiento estructural relativamente débil, es decir, con dimensiones características mayores a $1a_0^*$, tenemos que el análisis de un sistema de partículas confinado en su interior deberá sacar provecho de la simetría de corto alcance relacionada con la interacción Coulombiana entre partículas. Para mostrar cómo estas simetrías parciales permiten clasificar los estados ligados de sistemas de pocas partículas consideremos como ejemplo el caso más simple, correspondiente a una D^0 centrada en una heteroestructura con simetría axial. En este caso, cuando la separación entre el electrón y el ión tiende a cero, la singularidad en el potencial Coulombiano debe compensarse con una correspondiente divergencia positiva en la energía cinética, lo cual impone una condición adicional sobre el comportamiento de las funciones de onda, tal condición es conocida en la literatura como: “cusp”. Esta condición, para el caso de una impureza hidrogenóide, se puede expresar como:

$$\lim_{r \rightarrow \xi} \frac{|\mathbf{r} - \xi|^l}{\psi(\mathbf{r})} \frac{d}{dr} \left[\frac{\psi(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \xi|^l} \right] = -\frac{1}{l+1}; \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Esta expresión nos indica que para distancias infinitesimales entre el electrón y el ión, el momento angular orbital, l puede considerarse como un “buen” número cuántico a pesar de la presencia de un confinamiento no isotrópico en la estructura. En este sentido, los diferentes subniveles correspondientes al mismo número cuántico Λ pueden ser referidos como estados tipo s (s-like states), por ejemplo $\Sigma^{(1s)}$, $\Sigma^{(2s)}$, etc., estados tipo p (p-like states), por ejemplo, $\Sigma^{(2p)}$, $\Pi^{(3p)}$, etc, de acuerdo con sus simetrías a cortas distancias de la impureza. Aquí las letras griegas en mayúscula son verdaderos números cuánticos que dan la proyección sobre el eje de simetría, mientras que los superíndices muestran la similitud de los correspondientes subniveles con los orbitales hidrogenoides a corta distancia de la impureza.

Para sistemas con más de una partícula, la condición de “cusp” debe cumplirse, no solo en relación con los centros cargados inmóviles, sino también para separaciones entre cada par de partículas móviles. Por ejemplo, para un par electrón-hueco cuyos vectores de posición son $\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h$ en presencia de una carga inmóvil positiva con vector de posición \mathbf{r}_i , la función de onda $\psi = \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ correspondiente al estado base, debe satisfacer no una, sino tres condiciones de “cusp”:

$$\frac{\psi'_{r_{eh}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)}{\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)} \xrightarrow{r_{eh} \rightarrow 0} -1; \quad \frac{\psi'_{r_{ei}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)}{\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)} \xrightarrow{r_{ei} \rightarrow 0} -1; \quad \frac{\psi'_{r_{hi}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)}{\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)} \xrightarrow{r_{hi} \rightarrow 0} +1, \quad (2.2)$$

donde se tiene que r_{eh}, r_{ei}, r_{hi} son las separaciones entre electrón-hueco, electrón-ión y hueco-ión, respectivamente.

En las pocas publicaciones sobre estados excitados de donadoras neutras confinadas en nanoestructuras semiconductoras que se han llevado a cabo hasta ahora, no se ha tenido en cuenta la importante influencia que tiene la condición de “cusp” sobre las correspondientes funciones de onda. Por lo tanto, la utilización de esta herramienta podría no solo facilitar la interpretación de los resultados del cálculo de las energías de los estados excitados, sino también servir como un importante criterio para optimizar las funciones de prueba de sistemas de pocas partículas en concordancia con las simetrías de corto y largo alcance. Según esta metodología las funciones de prueba para pequeñas separaciones entre las partículas deben cumplir la condición de “cusp”, mientras que cuando las separaciones entre ellas son muy grandes la simetría de la función de onda se modifica y se hace similar a la simetría de la heteroestructura. Se puede esperar que el cumplimiento de estas condiciones al momento de seleccionar la función de prueba asegurará que los algoritmos usados para analizar el espectro de sistemas de pocas partículas tengan una convergencia más rápida de los valores estimados de las energías hacia sus valores exactos. En este sentido, uno de los logros de esta tesis doctoral fue poder ampliar los métodos elaborados anteriormente en el grupo FICOMACO para analizar los estados electrónicos localizados inducidos por la presencia de donadoras en heteroestructuras con simetría axial, tales como QWs, MQWs, SLs y NWSLs.

Para el caso de nanoestructuras que presenten un régimen de confinamiento estructural fuerte, tendremos que para llevar a cabo el análisis de un sistema de partículas confinado en su interior, deberá tenerse en cuenta la simetría de largo alcance, es decir las características del confinamiento estructural. Un ejemplo importante de esta índole, es el caso de los QRs

autoensamblados, ya que debido a sus dimensiones características pueden ser considerados como anillos delgados. Esta particular morfología, casi unidimensional, se traduce en un fuerte confinamiento para los portadores de carga en la dirección transversal del anillo, rasgo importante del cual se puede sacar ventaja mediante el uso de la aproximación adiabática (AA). Como veremos en los capítulos 3 y 4, el empleo de esta técnica ha resultado supremamente valioso para el desarrollo de esta tesis, pues nos ha permitido analizar el espectro energético de algunos importantes sistemas de pocas partículas confinados en NWSLs y QRs, bajo el efecto de campos externos eléctricos y magnéticos. Uno de los principales logros de este trabajo fue elaborar una técnica unificada para analizar la influencia que pueden tener diferentes tipos de defectos estructurales, tanto en NWSLs como en QRs, sobre los diferentes estados de algunos sistemas de pocas partículas y sobre el carácter del movimiento de los portadores de carga. Dentro de los defectos estructurales que se pueden analizar con esta metodología tenemos: variaciones en el grosor de la sección transversal y la forma de la estructura, sea un anillo o un hilo.

3. ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN NANOHILOS CON PERIODICIDAD ESTRUCTURAL

En las últimas décadas diferentes tipos de nanoestructuras semiconductoras tales como pozos cuánticos individuales (QWs), pozos cuánticos múltiples (MQWs), superredes (SL), hilos cuánticos (QWWs) y puntos cuánticos (QDs) han sido ampliamente estudiados, tanto teórica como experimentalmente. Un logro más reciente en el campo de los materiales semiconductores nanoestructurados ha sido la fabricación de unos nanohilos que presentan periodicidad estructural a lo largo de su longitud; a tales estructuras se las ha denominado *Superredes en Nanohilos* (NWSL). En la sección 1.1.2 se presentó una breve descripción de estas. La incorporación de una estructura de superred en el interior del hilo ofrece nuevas perspectivas en la física de sistemas de baja dimensionalidad, pues gracias al acoplamiento que existe entre el confinamiento periódico longitudinal y el confinamiento lateral, tal estructura podrá presentar una combinación de características de SL, MQW, QWW, e incluso podría considerarse como un sistema de QDs acoplados. En estas estructuras, el confinamiento lateral adquiere un carácter relevante sobre el comportamiento de los portadores de carga, ya que su incremento favorece el tunelamiento de los portadores de carga a través de las barreras de la NWSL. En este sentido, las propiedades eléctricas y ópticas de estos sistemas mostrarán una alta sensibilidad a cualquier variación de sus parámetros estructurales, tanto geométricos como composicionales, y a su vez también a la aplicación de campos externos eléctricos y magnéticos en dirección axial. Dichas propiedades también pueden ser modificadas por la presencia de impurezas, debido a la alteración que se crea sobre la distribución espacial de los portadores de carga, y por lo tanto sobre su respectivo espectro energético. Esta alteración dependerá notablemente de la posición de dichas impurezas.

En vista de que ofrecen una amplia gama de posibilidades para modificar y controlar sus propiedades ópticas y eléctricas, estas estructuras resultan ser objetos muy interesantes de estudiar. Por lo cual es de gran importancia, plantear métodos teóricos que permitan llevar a cabo un análisis detallado de algunos sistemas de pocas partículas confinados en NWSL. Vale la pena comentar que si bien, el problema teórico del análisis de sistemas de pocas partículas en

superredes ha recibido una atención extensa [109], en el caso de las NWSLs no se tiene esta situación. Es en este sentido que se ha planteado el desarrollo del presente capítulo, en el cual presentamos una aproximación relativamente sencilla para llevar a cabo el estudio de algunos sistemas fermiónicos de pocas partículas confinados en NWSLs y en hilos de sección transversal no uniforme, bajo la influencia de campos eléctricos y magnéticos aplicados en dirección axial.

3.1 MODELO DEL CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL

Durante el desarrollo del presente capítulo se considerarán dos modelos de NWSL con sección transversal circular. Un primer modelo, al que llamaremos estructura de *NWSL composicional*, puede describirse como un hilo de composición periódicamente modulada de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs en dirección axial, el cual se encuentra embebido en una matriz de Ga_{1-y}Al_yAs. El segundo modelo, al cual nos referiremos como una estructura de *NWSL estructural*, es un hilo de composición homogénea pero con el radio de su sección transversal variable a lo largo de la dirección de crecimiento, el cual se encuentra rodeado por aire.

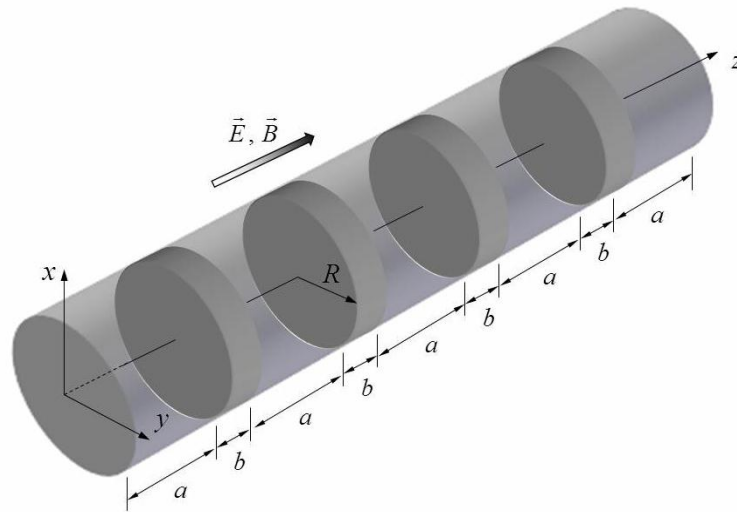


Fig. 7 Modelo de una NWSL composicional

Para el caso de la NWSL de tipo composicional tenemos que dicha estructura presenta una sección transversal circular de radio R y una configuración periódica de pozos y barreras lograda mediante la variación de la concentración de Aluminio a lo largo del eje principal del nanohilo. Una representación del modelo de una NWSL composicional es mostrada en la figura (7). Para describir la composición de la estructura consideramos un modelo en el cual la concentración de aluminio dada como $c(\rho, z)$ es igual a $c(z)$ dentro de la NWSL y es igual a y fuera de esta. La concentración a lo largo de la estructura se considerará igual a cero dentro de los n pozos idénticos de ancho a e igual a x en las $n-1$ barreras de ancho b . Este modelo que puede parecer algo rígido, en realidad está en buena concordancia con algunos datos experimentales publicados [40], los cuales revelaron que existe poca interdifusión de los diferentes compuestos en las juntas. En la fig. (8) se ilustra la distribución de la concentración de aluminio a lo largo del eje de la NWSL.

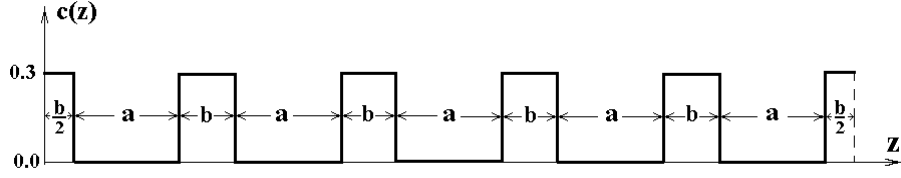


Fig. 8 Distribución de la concentración de aluminio a lo largo del eje z de la NWSL

En nuestro modelo, hemos asumido que el potencial de confinamiento creado por la discontinuidad que existe entre las bandas de conducción y valencia en las juntas, está dado por una función seccionalmente constante, cuyo valor varía con la concentración de aluminio c dentro y fuera de la NWSL a través de la relación $\Delta E_g(c) = 1.36c + 0.22c^2$ (eV) [110]. Donde una contribución del 60% será para la discontinuidad en la banda de conducción y del 40% para la de la banda de valencia. En coordenadas cilíndricas los potenciales de confinamiento $V_k(\rho, z)$, son iguales a cero en los pozos, y en las barreras son: $0.6\Delta E_g(x)$ si $k=e$ (para el electrón), y $0.4\Delta E_g(x)$ si $k=h$ (para el hueco). Fuera de la NWSL tenemos que serán $0.6\Delta E_g(y)$ o $0.4\Delta E_g(y)$, para el electrón y el hueco, respectivamente.

En el segundo tipo de NWSL a considerar, la de tipo estructural, tenemos que el radio de su sección transversal, denotado como $R(z)$, presentará una variación periódica de acuerdo con la posición a lo largo del eje principal. Para simular dicha estructura, consideraremos que el potencial de confinamiento $V(\rho, z)$ será igual a cero cuando $0 \leq \rho \leq R(z)$, es decir en el interior de la estructura, y fuera de esta será $0.6\Delta E_g(y)$, para el caso de un electrón. Una representación del modelo de una NWSL estructural es mostrada en la figura (9).

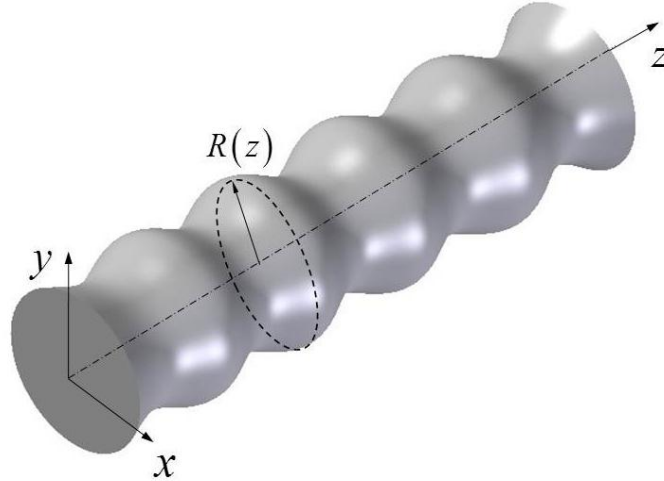


Fig. 9 Modelo de una NWSL estructural

Por cuestiones de comodidad y claridad, en adelante se usarán unidades efectivas para describir los Hamiltonianos en forma adimensional. El radio de Bohr efectivo $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ cuando consideremos longitudes y el Rydberg efectivo $Ry = e^2 / 2\epsilon a_0^*$ para el caso de energías. Otros parámetros adimensionales a considerar son $\alpha = ea_0^* F / Ry^*$ y $\gamma = e\hbar B / 2m^* c Ry^*$, los cuales hacen las veces de unidades adimensionales para la intensidad del campo eléctrico F , y del campo magnético B , respectivamente. Es pertinente mencionar en

este punto que nuestro modelo no tendrá en cuenta la variación de parámetros del material en las juntas, tales como la constante dieléctrica y la masa efectiva, en vista de que su consideración exige un trabajo más detallado, lo cual queda fuera del alcance de nuestros objetivos, pues este trabajo pretende cubrir solamente los rasgos más sobresalientes de la NWSL. Los valores de la constante dieléctrica y la masa efectiva que serán utilizados en los presentes cálculos pertenecen al GaAs, y son $\epsilon=12.5$ y $m_e^*=0.067m_0$, para el electrón; mientras que las masas efectivas del hueco pesado son $m_z^*=0.45m_0$ y $m_\rho^*=0.10m_0$, para los movimientos en dirección axial y transversal, respectivamente.

3.2 UN ELECTRÓN EN UNA NWSL

Para el análisis de un electrón confinado en la NWSL, se considera un potencial de confinamiento $V_e(\rho, z)$, el cual es mucho más fuerte en la dirección transversal, que a lo largo de la estructura, es decir que la NWSL que se considera en este caso es delgada, lo cual permitirá hacer uso de la A.A. El hamiltoniano adimensional en coordenadas cilíndricas que describe el electrón en la NWSL está dado como:

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_e(\rho, z) \quad (3.1)$$

En el marco de la aproximación adiabática, la solución de la ecuación de Schrödinger uniparticular

$$\hat{H}_e f_e(\vec{r}) = E_e f_e(\vec{r}), \quad (3.2)$$

puede obtenerse planteando la función de onda electrónica $f_e(\vec{r})$ como un producto de dos funciones:

$$f_e(\rho, z) = f_\rho(\rho, z) f_z(z), \quad (3.3)$$

donde $f_\rho(\rho, z)$ describe el movimiento rápido del electrón en dirección radial y $f_z(z)$ el movimiento lento a lo largo del eje principal de la NWSL. Inicialmente se considera que el movimiento del electrón está “congelado” a lo largo del eje z , lo cual permite realizar, en exclusiva, el análisis del movimiento transversal, esto es, resolver el siguiente problema:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial f_\rho(\rho, z)}{\partial \rho} + V(\rho, z) f_\rho(\rho, z) = E_\rho(z) f_\rho(\rho, z). \quad (3.4)$$

La solución de la ecuación (3.4) es la bien conocida función de onda de un electrón confinado en un pozo cuántico circular de barrera finita, la cual sabemos se puede expresar en términos de las funciones de Bessel, mientras la energía $E_\rho(z)$ es la primera raíz que se obtiene de la ecuación trascendente que surge de la continuidad de la función de onda y su derivada en el punto $\rho = R$, para alguna posición fija a lo largo del eje z .

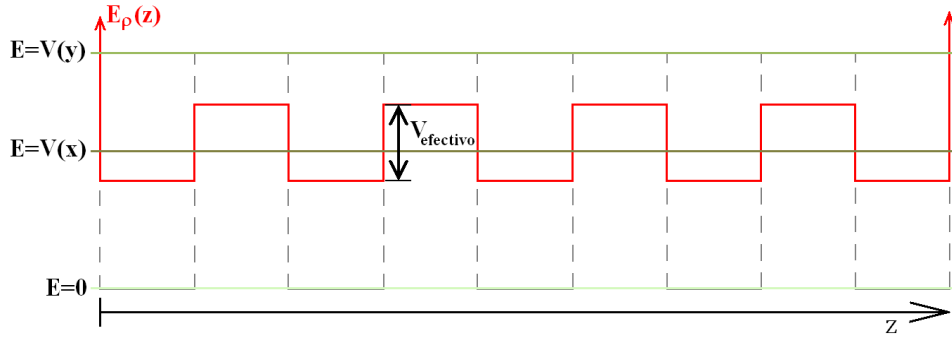


Fig. 10 Potencial efectivo para el electrón en dirección del eje principal de la NWSL

En nuestro caso $E_\rho(z)$ es una función periódica seccionalmente constante, como se aprecia en la figura (10). En esta función, los valores bajos corresponden a la energía del estado base de un QW circular con las energías en el pozo de cero y en la barrera de $0.6\Delta E_g(y)$, mientras los valores más altos corresponden a la energía del estado base en un QW circular con las energías en el pozo y la barrera de $0.6\Delta E_g(x)$ y $0.6\Delta E_g(y)$ respectivamente. La diferencia entre estos dos valores define lo que se considerará en adelante la altura de la barrera efectiva para el movimiento del electrón a lo largo del eje z . Una vez hallada la función $E_\rho(z)$, se procede a encontrar la función $f_z(z)$ y la energía total del electrón (E_e), “descongelando” el movimiento lento en dirección axial en la ecuación (3.2) se obtiene la siguiente ecuación:

$$-\frac{\partial^2 f_z(z)}{\partial z^2} + E_\rho(z) f_z(z) = E_0 f_z(z). \quad (3.5)$$

Esta ecuación es resuelta numéricamente mediante el método de barrido trigonométrico (ver apéndice A). A manera de ilustrar el comportamiento de un electrón en este tipo de estructura, en la Figura (11) se muestra una gráfica de la densidad de probabilidad de un electrón confinado en una NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$, embebida en una matriz de $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.

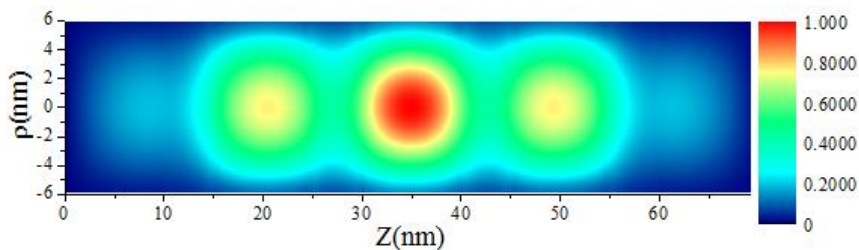


Fig. 11 Distribución de probabilidad del electrón en una NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$ embebida en una matriz de $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$

Las estructura considerada tiene un radio igual a 5nm y los anchos de las capas alternantes son de 10 y 5 nm, para pozos y barreras, respectivamente. Este grafico muestra

evidentemente que la máxima probabilidad de encontrar al electrón es en el pozo central, como era de esperarse. Pero a la vez se aprecia una alta probabilidad de hallar dicha partícula en los pozos contiguos, lo cual revela una presencia importante de tunelamiento a través de las barreras efectivas que limitan el primer pozo. Por otro lado, para los pozos de los extremos se deduce del gráfico que el tunelamiento no fue suficiente para obtener una probabilidad apreciable de la presencia del electrón allí. En vista de estas consideraciones, surge una importante cuestión de esta investigación. ¿Qué tipo de acople existe entre el confinamiento radial y el confinamiento en dirección axial? Para dar respuesta a este interrogante, a continuación se presenta un análisis al respecto. Ya antes se mostró que la altura de las barreras efectivas en dirección axial están dadas por la diferencia entre el valor más bajo y más alto de la energía $E_{\rho}(z)$. Ahora para observar que tan sensible será la altura de estas barreras efectivas a la variación del radio de la NWSL, se ha realizado un gráfico (Figura 12) que revela como es esta dependencia.

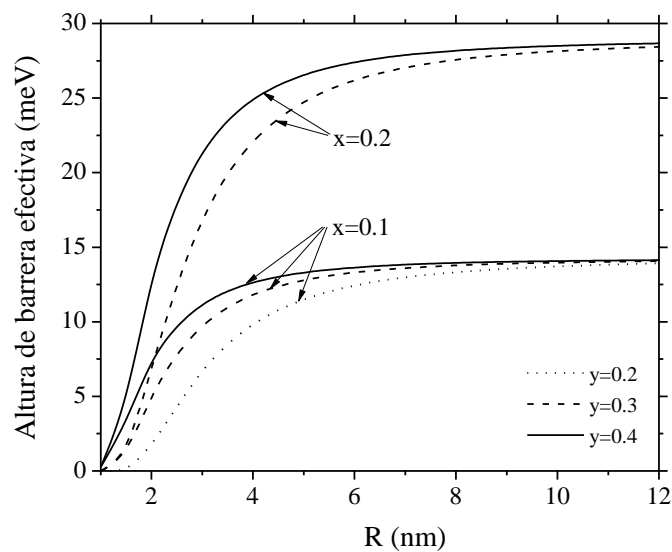


Fig. 12 Altura de barrera efectiva para el movimiento del electrón a lo largo del eje en función del radio de la NWSL, para diferentes concentraciones de Aluminio en las barreras x y en la matriz y , para una NWSL con 5 pozos y 4 barreras de anchos 10nm y 5nm respectivamente.

Este gráfico muestra claramente como a medida que el radio de la NWSL se reduce, la altura de la barrera efectiva también decrece para las concentraciones de Aluminio consideradas tanto en las barreras internas de la NWSL, como en la matriz que rodea la estructura. Sin embargo este efecto es poco apreciable para radios mayores a $1a_0^* \approx 10\text{nm}$, para lo cual tenemos que la altura de la barrera efectiva prácticamente no depende de la variación del radio. Sin duda, este comportamiento resulta muy interesante, ya que la notable reducción en la altura de las barreras al aumentar el confinamiento radial (reducción del radio), es una clara manifestación de que se va a favorecer el tunelamiento del electrón a través de las barreras que constituyen la estructura de superred a lo largo del hilo. Lo anterior pone de manifiesto como los confinamientos radial y axial están acoplados, y permite vislumbrar como se pueden alterar las propiedades que exhiben los portadores de carga confinados en estas estructuras. De la misma manera se puede observar que la altura de la barrera efectiva para el caso límite de radios muy grandes depende muy débilmente de la concentración de Aluminio en la matriz, y es prácticamente la misma barrera efectiva que para una superred (SL).

3.3 UNA IMPUREZA D^0 EN UNA NWSL CON CONFINAMIENTO RADIAL INFINITO

Como primer modelo de nuestro análisis tenemos una NWSL para la cual consideraremos el potencial radial parabólico, lo cual simplificará nuestros cálculos y permitirá realizar un planteamiento más general. Tenemos por lo tanto que el Hamiltoniano general y adimensional que describe, dentro de la aproximación de la masa efectiva, una D^0 centrada ($Q=1$), en una heteroestructura semiconductor con simetría axial, o un electrón ($Q=0$), confinado en dicha estructura, está definido como:

$$H = H^{(0)}(Q) + V(z) + \alpha z; \quad (3.6)$$

$$H^{(0)}(Q) = -\Delta - \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z-\xi)^2}} + \frac{\tilde{\gamma}^2 \rho^2}{4} + i\gamma \hat{L}_z; \quad \tilde{\gamma}^2 = \gamma^2 + 4V_0/R_0^2$$

Las coordenadas cilíndricas (ρ, z, φ) y $(0, \xi, 0)$, definen las posiciones del electrón y la donadora, respectivamente. El potencial de confinamiento considerado en nuestro modelo está definido como $V_c(\rho, z) = V(z) + V_0 \rho^2 / R_0^2$, el cual es axialmente simétrico y separable. El confinamiento parabólico en dirección radial es definido por dos parámetros, R_0 y V_0 , los cuales están asociados con el radio de la nanoestructura y la altura de la barrera de potencial en la juntura lateral, respectivamente. En el límite cuando R_0 es mucho mayor que un radio de Bohr efectivo, el potencial de confinamiento total $V_c(\rho, z)$ se convierte en el potencial correspondiente a un QW, un MQW o una SL, dependiendo de la forma que presente $V(z)$, el cual describe el confinamiento en la dirección axial. Tenemos además que en el Hamiltoniano (3.6) se incluye el efecto de un campo eléctrico y magnético en dirección axial. Para el campo magnético se tiene que el término diamagnético se agrupa con el potencial de confinamiento radial en el término $\tilde{\gamma}^2 \rho^2 / 4$, mientras que el término paramagnético, el cual tiene en cuenta la interacción del momento angular con el campo magnético, corresponde al último término en el Hamiltoniano.

Teniendo en cuenta las consideraciones de simetría comentadas en el capítulo 2, tenemos que nuestro sistema presenta simetría axial, por lo cual la proyección del momento angular orbital sobre el eje de simetría se conserva. Bajo esta consideración, los términos electrónicos de la donadora se pueden describir por el Hamiltoniano H_Λ , el cual se define como:

$$H_\Lambda = H_\Lambda^{(0)}(Q=1) + V(z) + \alpha z + \gamma \cdot \Lambda; \quad \Lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.7)$$

$$H_\Lambda^{(0)}(Q) = -\Delta_\Lambda - \frac{2Q}{r} + \frac{\tilde{\gamma}^2 \rho^2}{4}; \quad \Delta_\Lambda = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\Lambda^2}{\rho^2}; \quad r = \sqrt{\rho^2 + (z-\xi)^2},$$

donde Λ denota el valor absoluto del momento angular proyectado a lo largo del eje de simetría de la estructura, como se estableció en la sección 2.1. Como se mencionó en el capítulo 2, la

singularidad del potencial Coulombiano impone una fuerte restricción sobre la función de onda que satisface H_Λ . Si el electrón se aproxima a la impureza, entonces el término Coulombiano en el Hamiltoniano (3.7) se hace lo suficientemente grande como para desprestigiar la influencia del confinamiento estructural y los campos externos. Esto lleva a que la simetría esférica sea restaurada en esta región, y por lo tanto el comportamiento de las funciones de onda se tornará similar al de las funciones de una donadora libre. Aquí surge entonces la cuestión sobre el tipo de correspondencia que existe entre los estados electrónicos para la donadora libre y la donadora confinada. Dicha correspondencia se obtiene al comparar el comportamiento de las funciones de onda para pequeñas y grandes separaciones entre el electrón y el ión. A cortas distancias entre el electrón y el ión, cuando el potencial puede considerarse esféricamente simétrico, se tendrán estados hidrogenoides puros caracterizados por los números cuánticos: principal n , orbital l y azimutal m (denotado en adelante como Λ). Los orbitales correspondientes para estos estados están dados como $\chi_{n,l,\Lambda}(\rho, z) = R_{n,l}(r)P_{l,\Lambda}((z-\xi)/r)$, donde $R_{n,l}(r)$ y $P_{l,m}((z-\xi)/r)$ son las respectivas partes radial y angular de las funciones de onda hidrogenoides, teniendo en cuenta que los orbitales estarán centrados en la posición de la impureza.

En regiones donde el electrón se encuentre alejado de la impureza, el confinamiento estructural y los campos externos se tornan dominantes respecto al potencial Coulombiano. En estas circunstancias, la similitud de los estados electrónicos con los estados hidrogenoides puros se hará cada vez más difusa, tanto así, que los nuevos estados para el electrón serán el resultado de una completa mezcla de aquellos estados puros. La modificación que tendrá la función de onda con el incremento de la separación entre el electrón y el ión, puede tenerse en cuenta mediante la consideración de un factor adicional que tenga la misma simetría que el potencial de confinamiento. Siguiendo este razonamiento, presentamos las eigenfunciones del Hamiltoniano (3.7) en la forma:

$$\hat{H}_\Lambda \Psi_{n,l,\Lambda} = E_{n,l,\Lambda} \Psi_{n,l,\Lambda}, \quad (3.8)$$

$$\Psi_{n,l,\Lambda} = f_\Lambda(\rho) \chi_{n,l,\Lambda}(\rho, z) \Phi_{n,l,\Lambda}(z), \quad f_\Lambda(\rho) = \rho^{|\Lambda|} e^{-\gamma \rho^2/4}.$$

Aquí $\Phi_{n,l,\Lambda}(z)$ y $f_\Lambda(\rho)$ son funciones envolventes que describen la modificación de los orbitales de Slater debido al confinamiento producido por la estructura y los campos externos, en dirección longitudinal y transversal, respectivamente. La función envolvente $f_\Lambda(\rho)$, relacionada con el confinamiento en dirección radial, se obtiene al resolver el problema de un electrón bajo un confinamiento dado por $(\tilde{\gamma}^2 \rho^2/4 + \Lambda^2/\rho^2)$, mientras que la función envolvente en dirección z es desconocida. Con el propósito de derivar una ecuación diferencial para la función desconocida $\Phi_{n,l,\Lambda}(z)$, consideramos el siguiente funcional:

$$F[\Phi_{n,l,\Lambda}] = \langle f_\Lambda(\rho) \chi_{n,l,\Lambda}(\rho, z) \Phi_{n,l,\Lambda}(z) | H_\Lambda - E | f_\Lambda(\rho) \chi_{n,l,\Lambda}(\rho, z) \Phi_{n,l,\Lambda}(z) \rangle \quad (3.9)$$

De acuerdo con el principio variacional de Schrödinger la mejor de todas las funciones de prueba (3.8) estará dada por la función $\Phi_{n,l,\Lambda}(z)$ para la cual el funcional $F[\Phi_{n,l,\Lambda}]$ tiene un

valor estacionario. Sustituyendo el Hamiltoniano (3.7) en el funcional (3.9) se obtiene la expresión explícita para dicho funcional. El principio variacional lleva entonces a la ecuación diferencial:

$$-\frac{1}{J(z)} \frac{d}{dz} \left(J(z) \frac{d\Phi_{n,l,\Lambda}(z)}{dz} \right) + \left[V(z) + \alpha z + \frac{h(z)}{2J(z)} \right] \Phi_{n,l,\Lambda}(z) = (E_{n,l,\Lambda} - E_{\Lambda} - E_n - \gamma\Lambda) \Phi_{n,l,\Lambda}(z), \quad (3.10)$$

dónde:

$$E_n = -1/n^2; \quad E_{\Lambda} = \tilde{\gamma}(|\Lambda|+1) \quad (3.10a)$$

$$J(z) = \int_0^{\infty} f_{\Lambda}^2(\rho) \chi_{n,l,\Lambda}^2(\rho, z) \rho d\rho = B_{\Lambda}(z); \quad (3.10b)$$

$$h(z) = \int_0^{\infty} \chi_{n,l,\Lambda}^2(\rho, z) \frac{d}{d\rho} \left\{ \rho \frac{d[f_{\Lambda}^2(\rho)]}{d\rho} \right\} d\rho = 4\Lambda^2 B_{\Lambda-1}(z) + \tilde{\gamma}^2 B_{\Lambda+1}(z) - 2\tilde{\gamma}(2|\Lambda|+1) B_{\Lambda}(z); \quad (3.10c)$$

$$B_{\Lambda}(z) = \int_0^{\infty} \rho^{2|\Lambda|+1} e^{-\tilde{\gamma}\rho^2/2} R_{n,l}^2(r) \cdot Y_{l,\Lambda}^2((z-\xi)/r) d\rho; \quad (3.10d)$$

Además, la ecuación (3.10) debe complementarse con dos condiciones de frontera para los rangos de corto y largo alcance. Para estados localizados de la donadora, el electrón estará situado principalmente en la vecindad de la donadora ($\xi_z - R_{\max} < z < \xi_z + R_{\max}$), por lo tanto, el comportamiento de la función envolvente lejos de la localización de la donadora no es importante debido al rápido decrecimiento que tiene el factor correspondiente al orbital de Slater. Basados en esto, hemos asumido en nuestros cálculos que $\Phi(\xi_z + R_{\max}) = 0$, donde el valor de R_{\max} se ha tomado de algunos radios de Bohr efectivos. Por otro lado, cerca de la impureza la forma de la función envolvente es significativa ya que la función de onda completa (3.8) debe satisfacer la condición de “cusp” (2.1), y esta es satisfecha solamente si la solución de la ecuación (3.10) cumple que $\Phi'(\xi_z) = 0$. La ecuación (3.10) junto con estas dos condiciones de frontera constituyen el problema de contorno que nos interesa en esta parte, el cual se ha resuelto numéricamente mediante el método de barrido trigonométrico (ver apéndice A) [111]. El principal atractivo de nuestro método de cálculo del espectro energético de donadoras consiste en su universalidad y aplicabilidad a cualquier heteroestructura que tenga simetría axial. Una vez la energía de la donadora, $E_{n,l,\Lambda}$ es encontrada, entonces se puede determinar la energía de enlace sustrayendo este valor al valor de la energía más baja que tiene el electrón confinado en la nanoestructura. En nuestros cálculos hemos determinado $E_b(n,l,\Lambda)$ como la diferencia entre los resultados de dos problemas obtenidos al poner en la expresión (3.7) los valores $Q=0, n=0, l=0, \Lambda=0$, para el electrón y $Q=1$, para la donadora.

Con el propósito de chequear la exactitud de nuestro procedimiento, primero hemos calculado la energía de enlace correspondiente al estado base $\Sigma^{(1s)}$ para una donadora centrada

en QWs de GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As con anchos de 10 y 20nm. Nuestros resultados se muestran a lo largo de la Tabla I con los resultados obtenidos por el método Monte Carlo Cuántico [112] para varios valores de campo magnético.

Γ	L(nm)	Este trabajo [Ry*]	Ref. [112]
0	10	2.053	2.090±0.040
0	20	1.733	1.740±0.030
1	10	2.942	2.920±0.060
1	20	2.497	2.520±0.050
3	10	2.899	2.890±0.050
3	20	3.290	3.360±0.070

Tabla 1. Comparación de la energía de enlace del estado base de una D⁰ centrada en un QW con los resultados obtenidos mediante el método Monte Carlo Ref. [112]

Los resultados de la Tabla I muestran claramente que el presente trabajo arrojó energías de enlace que están en excelente concordancia con los cálculos Monte Carlo. Esto nos permite afirmar que nuestra función de prueba (3.3) es razonable y provee resultados con gran exactitud para la energía del estado base de una D⁰ en un QW.

En la figura (13) presentamos la energía de enlace del estado base de la donadora en función del ancho del pozo, para un QW de GaAs-(Ga,Al)As. Nuestros resultados son comparados con los correspondientes cálculos obtenidos usando el método variacional [113], dimensión fractal [114] y Monte Carlo [112]. Se aprecia que en general, la concordancia entre nuestros resultados y los obtenidos por los demás métodos es excelente, considerando la relativa simplicidad de nuestro procedimiento. Cabe destacar que para valores intermedios del ancho del pozo nuestros resultados tienen la mejor correspondencia con los obtenidos por el método Monte Carlo. Sin embargo, para QWs con anchos mayores a $2 a_0^*$ nuestras energías están por encima de las obtenidas por las otras dos técnicas variacionales, y caso contrario para pozos estrechos. Esto se debe básicamente al hecho de que para pozos con ancho notable la simetría de nuestra función de prueba es la que mejor se ajusta a la simetría del sistema, mientras para pozos muy estrechos nuestra función de prueba debería modificarse. Para este caso particular suponemos que la función envolvente desconocida debería escogerse como función de ρ .

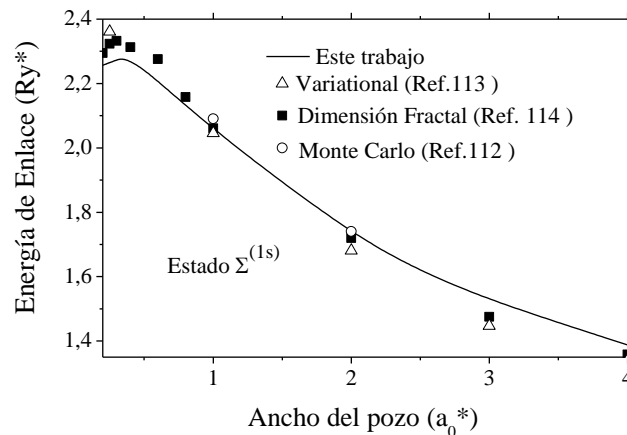


Fig. 13 Comparación de los resultados obtenidos por diferentes métodos para la energía de enlace del estado base de una donadora centrada en un QW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As en función del ancho del pozo.

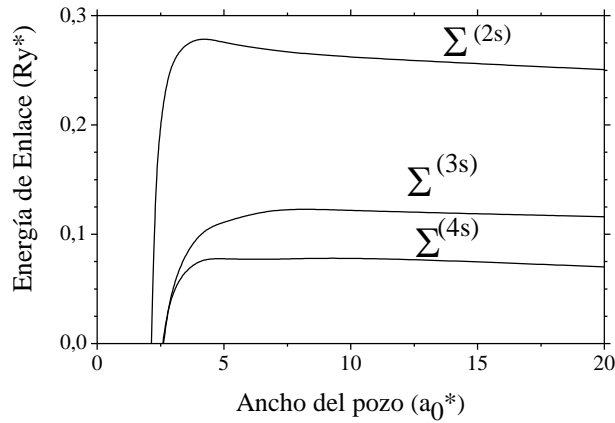


Fig. 14 Energías de enlace de una donadora centrada para algunos estados excitados tipo s en función del ancho del pozo, para un QW de GaAs/Ga_{0,3}Al_{0,7}As.

Hemos calculado además la energía de enlace en función del ancho del pozo, para algunos estados excitados tipo s de una donadora centrada en un QW de GaAs/Ga_{0,3}Al_{0,7}As, las cuales se presentan en la figura (14). En estas curvas se puede ver que para pozos con anchos grandes, las energías de enlace tienden a los correspondientes valores exactos del sistema en bloque, particularmente, a $Ry^*/4$ para el estado $\Sigma^{(2s)}$, a $Ry^*/9$ para el estado $\Sigma^{(3s)}$, y a $Ry^*/16$ para el estado $\Sigma^{(4s)}$ respectivamente. Se aprecia también como, a medida que el ancho del pozo decrece, las energías de enlace crecen ligeramente en un comienzo, y luego caen abruptamente a cero cuando el ancho del pozo se aproxima al valor de $4a_0^*$. Respecto a este comportamiento, resulta interesante anotar que las tres funciones de onda correspondientes a estos orbitales tipo s tienen su primer nodo cerca del punto $r = 2a_0^*$. Por lo tanto, hemos asociado este resultado con la imposibilidad de que puedan formarse estados excitados estables respecto a la ionización, para donadoras confinadas en QW, cuando el primer nodo de sus funciones de onda se halla localizado fuera del pozo.

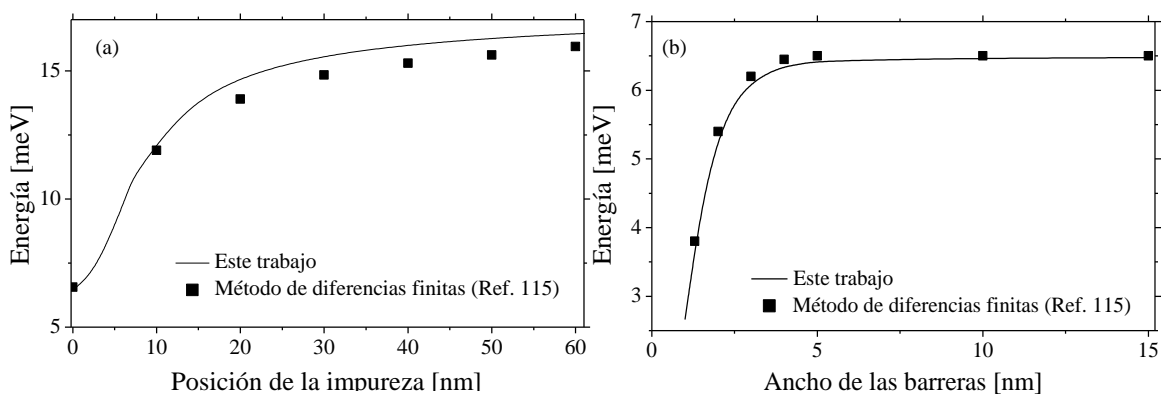


Fig. 15 Comparación con el método de diferencias finitas. Energía del estado base de una D^0 en un MQW de GaAs/Ga_{0,67}Al_{0,33}As con cinco pozos de ancho 15 nm (a) en función de la posición de la impureza, medida desde el centro del pozo del extremo izquierdo (b) en función del ancho de las barreras entre los pozos para la impureza localizada en el centro del pozo central.

Para mostrar el buen desempeño de nuestro método al ser aplicado a sistemas más complejos, en la figura (15) hemos comparado nuestros resultados (líneas continuas) con los

resultados obtenidos en la referencia [115] mediante el método de diferencias finitas (símbolos), al analizar el problema de una donadora en un sistema de multipozos de GaAs/Ga_{0.67}Al_{0.33}As. En la gráfica (15a) se muestra la energía del estado base en función de la posición de la impureza, tomada respecto al centro de uno de los pozos de los extremos, para un sistema de cinco pozos de ancho 15 nm. En la gráfica (15b) se presenta la variación de la energía respecto al ancho de las barreras entre los pozos, para el mismo sistema anterior y con la impureza localizada en el centro del pozo central. La buena concordancia que tienen nuestros resultados con este método de diferencias finitas para un sistema de cinco pozos, confirma nuevamente la validez del presente tratamiento, el cual resulta notablemente más sencillo.

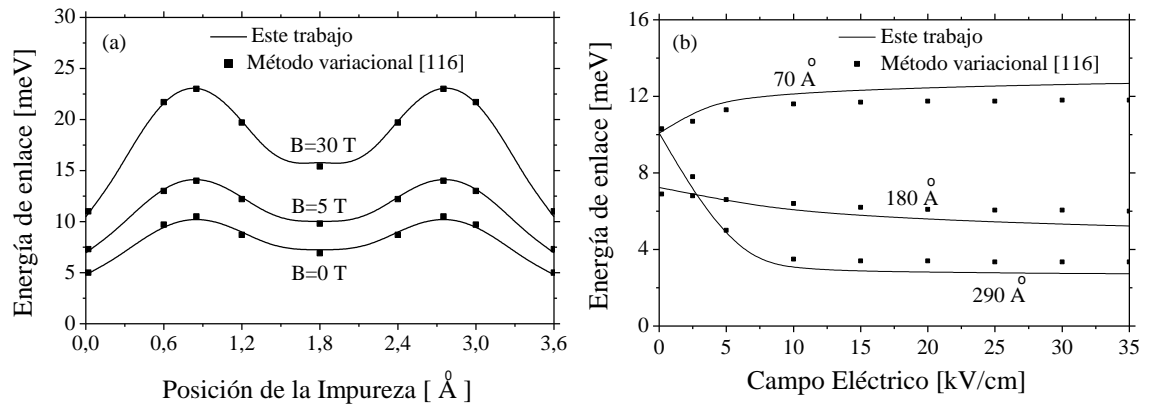


Fig. 16 Comparación de los resultados del cálculo de la energía de enlace de una D⁰ en un triple QW en función de (a) la posición de la impureza para diferentes valores de campo magnético y (b) de la intensidad de campo eléctrico para tres posiciones de la impureza.

Por último, hemos comparado los resultados obtenidos con nuestro método, para el caso de una donadora en un triple pozo cuántico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, con los obtenidos por medio del método variacional en la referencia [116]. En dicho trabajo han empleado como función de prueba, una combinación lineal de funciones Gaussianas con al menos 300 parámetros variacionales, a fin de garantizar una convergencia adecuada. En esta referencia [116] se ha considerado una estructura formada por un pozo central de 40Å acoplado a dos pozos laterales de 140Å, a través de barreras de 20Å de espesor a ambos lados. Las alturas de las barreras para los pozos laterales y el central han sido tomadas de 200 y 50 meV, respectivamente. En la figura (16), presentamos energías de enlace en tal estructura en función de (a) la posición de la impureza, para tres valores diferentes de campo magnético y (b) en función de la intensidad de un campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento, para tres posiciones diferentes de la impureza, correspondientes al centro de cada uno de los tres pozos. La correspondencia que se obtiene entre nuestros resultados (líneas continuas) y los de la referencia [116] es gratificante, considerando la simplicidad de nuestro procedimiento.

En lo que sigue de esta sección se presentan los resultados del análisis del efecto del confinamiento estructural y de campo eléctrico sobre el estado base de una donadora centrada en una NWSL de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs con sección transversal circular. Se ha asumido que el potencial de confinamiento en dirección z está definido por una función seccionalmente constante $V(z)$, el cual es igual a cero en los pozos y a V_0 en las barreras, tal como se ha descrito en la sección 3.1. En nuestros cálculos hemos considerado que las estructuras tienen periodicidad estructural en dirección axial, con celdas unidad definidas por pozos de

ancho $a = 10\text{nm}$, y barreras de espesor $b = 5\text{nm}$. Además, con el objeto de analizar el papel que juega el número de celdas unidad que presente la estructura, se considerarán estructuras que tengan 1, 3, 5 y 11 celdas en dirección axial. Por otro lado, para analizar el efecto del confinamiento radial se consideraran tres radios diferentes para la estructura: 10nm, 40nm e infinito, caso particular que modela una típica SL. Según los parámetros de los materiales presentes en estas estructuras tenemos que el Rydberg efectivo, Ry^* tiene un valor de 5.83meV, el radio de Bohr efectivo, a_0^* un valor aproximado de 10nm y la altura de las barreras, V_0 será de aproximadamente $40Ry^*$.

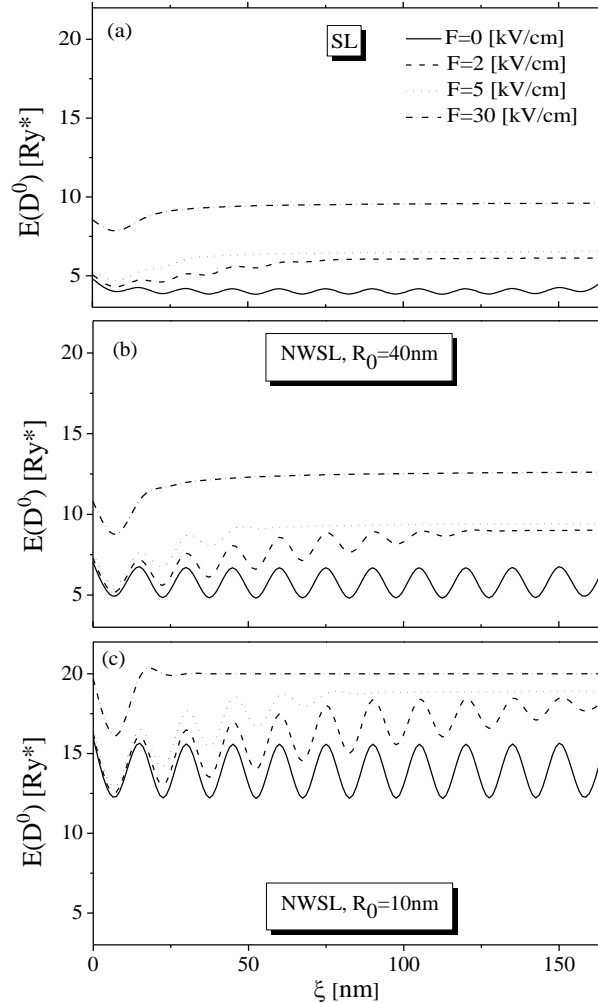


Fig. 17 Energía del estado base de una donadora centrada en la heteroestructura con 11 celdas unidad de dimensiones ($a = 10\text{nm}, b = 5\text{nm}$) en función de la posición de la impureza y para diferentes valores de campo eléctrico en (a) una SL y en una NWSL de radios (b) $R_0 = 40\text{nm}$ y (c) $R_0 = 10\text{nm}$.

La figura (17) muestra la dependencia que tiene la energía de una donadora neutra centrada, respecto de la distancia ξ tomada desde el extremo izquierdo de la NWSL para varios valores de campo eléctrico externo aplicado en dirección positiva del eje z . Cuando no existe campo eléctrico aplicado, se aprecia que la variación de la energía de la donadora al desplazar la impureza desde la mitad de la estructura hacia los extremos muestra un carácter ondulatorio. Tal comportamiento es causado por las diferencias notables que existen en la probabilidad de encontrar el electrón en diferentes partes de la NWSL, como se ilustró en la figura (11). Cuanto

mayor sea la probabilidad de encontrar al electrón en el lugar en el cual se ubica la impureza, más fuerte será la atracción entre el electrón y el ión, y por ende, mayor será el descenso que tenga la energía de la donadora. Cuando el campo eléctrico está ausente, la mayor probabilidad de encontrar al electrón está en la mitad del pozo central, por lo que en este punto la energía es mínima. Al remover la impureza desde este punto hacia uno de los extremos de la estructura, la energía del sistema $E(D^0)$ se incrementa debido al incremento que se da en la separación media entre el electrón y el ión hasta que alcanza un máximo local en el centro de la primera barrera adyacente, donde la probabilidad de encontrar al electrón es sustancialmente menor que en el pozo. Si seguimos moviendo la impureza y esta entra en el pozo vecino, tenemos entonces que la energía decrece nuevamente hasta que se posiciona en el centro del pozo. Ya que la probabilidad de encontrar al electrón en este pozo es menor que en el pozo central, el nuevo mínimo local está por encima del mínimo alcanzado en el pozo central.

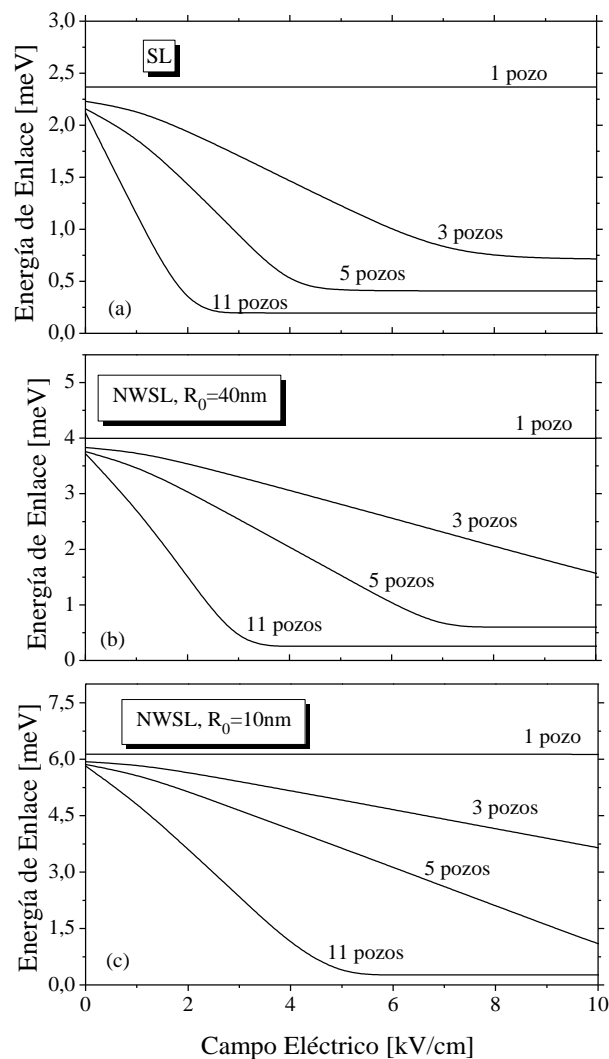


Fig. 18 Energía del estado base para una donadora localizada en la mitad del pozo central de una (a) SL y una NWSL de radio (b) $R = 40nm$ y (c) $R = 10nm$, para diferente número de pozos y en función del campo eléctrico.

Cuando se aplica el campo eléctrico al sistema se observa que la situación cambia sustancialmente. El carácter ondulante de la energía va desapareciendo con el incremento de la

intensidad del campo, y la posición del mínimo absoluto en la energía se va desplazando hacia el centro del primer pozo, lo que nos indica que la distribución de probabilidad para el electrón cambia en la estructura. Es interesante resaltar este hecho, ya que nos da una idea de cómo la distribución de carga en la estructura se puede ir alterando paulatinamente con la variación del campo eléctrico, considerando valores de campo que pueden ir desde cero hasta intensidades no tan fuertes (30 kV/cm en este caso).

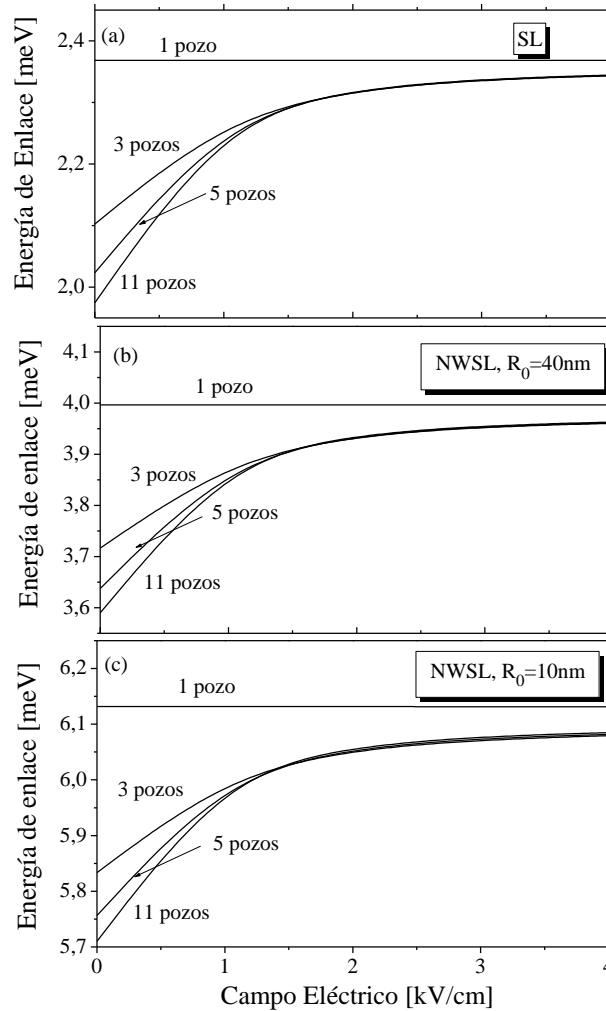


Fig. 19 Energía del estado base para una donadora localizada en el centro del primer pozo de una (a) SL y una NWSL de radio (b) $R = 40nm$ y (c) $R = 10nm$, para diferente número de pozos y en función del campo eléctrico.

Al comparar las figuras 17(a), (b) y (c), se puede observar el papel que juega el confinamiento radial sobre el comportamiento del sistema. Es claro ver cómo al reducirse el radio de la estructura, la amplitud de las oscilaciones en la energía se hace mayor y alcanza prácticamente el mismo valor en todas las celdas. Esto obedece básicamente a que el confinamiento lateral adicional produce un incremento en los niveles de energía del electrón, lo cual implica una mayor probabilidad de tunelamiento entre pozos contiguos de la estructura. Lo anterior nos permite concluir que la probabilidad de encontrar el electrón en cualquiera de las celdas a lo largo de la estructura se incrementa cuando la NWSL presenta un importante confinamiento transversal (radio de la NWSL comparable con el radio de Bohr efectivo). También puede observarse que para los casos de mayor confinamiento radial se hace necesario

aplicar un campo eléctrico mayor a fin de hacer desaparecer el carácter ondulante en la energía, lo cual está en consonancia con el carácter más homogéneo que presenta la distribución electrónica a lo largo de la estructura.

En la figura (18) se presentan los resultados de los cálculos de la energía de enlace de una donadora situada en el centro del pozo central en función de la intensidad de campo eléctrico en un nanohilo con una, tres, cinco, y once celdas, para tres radios diferentes. Aquí se observa un efecto similar al mencionado antes; el confinamiento transversal proporciona una reducción en la pendiente descendente que exhiben dichas curvas hasta que se alcanza un valor mínimo en la energía. Lo anterior se traduce en que es necesario aplicar un campo eléctrico de mayor intensidad para conseguir que la distribución electrónica se concentre casi exclusivamente en el primer pozo, tal como se concluyó de la figura (18). Además es notable el efecto que tiene el incremento del número de pozos en la estructura sobre la variación de la distribución de probabilidad electrónica, ya que es para las estructuras con mayor número de celdas que se nota un cambio más marcado en la energía de enlace del sistema. Esta característica sumada a la que ofrece el confinamiento radial de la estructura da una oportunidad especial de tener un sistema en el cual conseguir diferentes distribuciones de carga, controladas por un campo eléctrico. En la figura (19) se presenta la misma situación que la figura (18), pero con la impureza situada en el centro del primer pozo de la NWSL. Por lo tanto, a medida que el campo eléctrico se incrementa, el electrón será atraído con mayor fuerza hacia el primer pozo, y por tunelamiento podrá atravesar las barreras hasta acercarse a la impureza. Por lo tanto, la energía de enlace del sistema aumenta hasta alcanzar un valor máximo.

3.4 UNA IMPUREZA D^0 EN UNA NWSL CON CONFINAMIENTO RADIAL FINITO

En esta sección consideraremos una estructura de hilo cilíndrico con periodicidad estructural a lo largo del eje de simetría, tal como en la sección anterior, pero ahora se tomara un modelo en el cual el potencial de confinamiento será finito en dirección radial. Esta consideración se hace con el objetivo de tener en cuenta el tunelamiento que puede tener el electrón no solo en dirección axial, sino también en dirección radial al reducir el tamaño de la estructura. Al considerar el problema de una D^0 confinada en una NWSL con potencial de confinamiento finito en dirección radial partimos del Hamiltoniano del sistema:

$$\hat{H}_{D^0}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \hat{H}_0(\vec{r}) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} \quad (3.11)$$

A partir del cual se puede escribir la ecuación de Schrödinger como $\hat{H}_{D^0}\psi_{D^0}(\vec{r}) = E_{D^0}\psi_{D^0}(\vec{r})$, donde $\psi_{D^0}(\vec{r})$ representa la función de onda y E_{D^0} la energía de la D^0 en la heteroestructura, cuya posición en la NWSL está dada por el vector $\vec{\xi}$. En primera instancia se calculará la función de onda y la energía del estado base de la donadora neutra en la heteroestructura. Para resolver este problema se aplica el Método de Dimensión Fractal [114], y además se hace uso de la aproximación adiabática para resolver el problema del electrón libre, sacando ventaja de la

diferencia que existe entre las dimensiones transversal y longitudinal de la heteroestructura, tal como se expuso en la sección 3.2.

Para resolver la correspondiente ecuación de onda proponemos una función de onda de prueba que tiene la siguiente forma:

$$\psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\vec{r})\Phi_{D^0}(|\vec{r} - \vec{\xi}|), \quad (3.12)$$

donde $f_0(\vec{r})$ es la función de onda para el electrón en la NWSL, la cual se obtuvo mediante el proceso descrito en la sección 3.2, y la función envolvente Φ_{D^0} depende solo de la distancia de separación entre el electrón y la impureza, esta función describe la modificación de la distribución de carga del electrón debida a la presencia del ión. Adicionalmente, según el principio variacional de Schrödinger, la función Φ_{D^0} debe satisfacer el siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \left\langle f_0\Phi_{D^0} \left| H_0 - \frac{2}{r} - E_{D^0} \right| f_0\Phi_{D^0} \right\rangle \rightarrow \min, \quad (3.13)$$

tal como se mostró en la sección anterior, esto lleva a una ecuación de onda tipo Hidrogenoide:

$$\frac{d^2\Phi_{D^0}(r)}{dr^2} + \frac{1}{J(r)} \frac{dJ(r)}{dr} \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} - E_b\Phi_{D^0}(r) = 0, \quad (3.14)$$

donde la parte radial del jacobiano tridimensional, r^2 es sustituida por la expresión

$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi f_\rho^2 \left(\sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \xi_\rho^2 - 2r\xi_\rho \sin \theta \cos \varphi} \right) f_z^2 (r \cos \theta - \xi_z) \sin \theta d\theta. \quad (3.15)$$

Conociendo la función de onda del estado base del electrón en la NWSL, el jacobiano puede ser hallado a través de una estimación numérica de esta integral. Así pues la función envolvente Φ_{D^0} y la energía E_b , pueden ser halladas como una solución del siguiente problema de contorno:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) &= -E_b \Phi_{D^0}(r), \\ \frac{d\Phi_{D^0}(r=0)}{dr} &= -\Phi_{D^0}(r=0), \quad \Phi_{D^0}(\infty) = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

La energía de enlace del sistema se ha definido como la diferencia entre la energía del estado base del electrón y de la donadora, $E_b = E_0 - E_{D^0}$. Para resolver numéricamente el problema (3.16) se hace uso del método de barrido trigonométrico (ver apéndice A).

Dentro de los resultados obtenidos con este modelo de NWSL presentamos en primer lugar, en la figura 20, una gráfica que exhibe la relación que existe entre la energía de enlace de la D^0 y el radio de la NWSL. En esta figura se presentan los resultados de los cálculos realizados para NWSLs con diferentes concentraciones x de aluminio en las barreras y rodeada de una matriz con una concentración de aluminio $y > x$. Las concentraciones de aluminio en la matriz son: $y=0.2$ (líneas punteadas), $y=0.3$ (líneas a trazos) y $y=0.4$ (líneas sólidas), mientras

que en las barreras se han tomado $x=0.1$ y $x=0.2$. Cada estructura está compuestas por 5 pozos idénticos de ancho $a=10nm$ y 4 barreras internas de ancho $b=5nm$; y la donadora se halla localizada sobre el eje de simetría ($\xi_\rho = 0$) y en la mitad del pozo central ($\xi_z = 0.5L$), donde L es la longitud total de la NWSL.

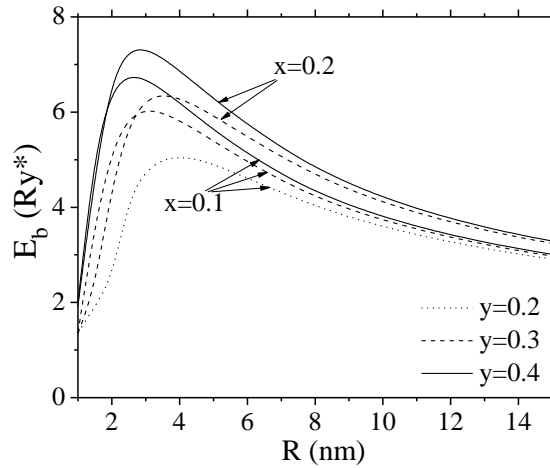


Fig. 20 Energía de enlace de una D^0 ubicada sobre el eje del nanohilo y en el centro del pozo central, en función del radio de una NWSL de 5 pozos, para diferentes concentraciones de Aluminio x en las barreras y en la matriz y .

Se observa claramente para todas las concentraciones, como a medida que el radio de la estructura disminuye, la energía de enlace crece hasta alcanzar un valor máximo y luego cae rápidamente tendiendo a un valor de $1Ry^*$. Este comportamiento puede entenderse si se contemplan los cambios que sufre la función de onda electrónica al ir variando las condiciones del confinamiento. Inicialmente, cuando comienza a reducirse el radio de la NWSL la función de onda electrónica se comprime, y la separación media entre el electrón y el ión se hace cada vez menor, por lo que la energía de enlace E_b se incrementa hasta que alcanza su máximo valor. Pero debe tenerse en cuenta que al incrementarse el confinamiento radial, simultáneamente con el ascenso de los niveles energéticos del electrón, tiene lugar una reducción de la altura efectiva de las barreras de la estructura, como se mostró en la sección 3.2, lo cual facilitará el tunelamiento del electrón a los pozos contiguos al pozo central. Por lo tanto, cuando el confinamiento radial se incrementa hasta alcanzar un radio crítico, la función de onda electrónica se extiende a lo largo de la estructura, reduciéndose así la separación media entre la impureza y el electrón, llevando a una reducción en la energía de enlace, la cual se distingue a la derecha del máximo de estas curvas. Este descenso en la energía continúa aun después de que la función de onda del electrón se ha extendido completamente, ya que tiene lugar un tunelamiento en dirección radial hacia la matriz, hasta que dicha función se desborde completamente fuera de la NWSL. En estas circunstancias la distribución electrónica se recoge nuevamente en las cercanías de la impureza pareciéndose cada vez más a la de una D^0 libre en un semiconductor en bloque con energía de $1Ry^*$, como se observa en las curvas. Es interesante resaltar que el valor del radio crítico depende principalmente de la concentración de aluminio presente en la matriz, como puede observarse en estas curvas. Cuando la concentración de aluminio en la matriz toma el valor más alto, esto es $y=0.4$, se encuentra que el radio crítico es el menor de todos, como es de esperarse. Esto obedece a que cuando la altura de la barrera de potencial entre la NWSL y la matriz es mayor, entonces el confinamiento radial debe ser mayor si se pretende que el electrón túnele hacia la matriz.

Con este modelo también se ha calculado la variación de la energía de enlace de la D^0 , cuando se toman diferentes posiciones dentro de una NWSL de radio $R=5nm$. En este caso se han considerado concentraciones de aluminio: $x=0.1$ en las barreras internas de la NWSL y $y=0.4$ en la matriz. En la Figura 21(a) se presenta la dependencia de la energía de enlace en función de la posición de la donadora en dirección del eje principal de la NWSL para diferentes posiciones radiales de la misma. Se puede observar que la dependencia de la energía de enlace en todas las curvas es ondulada con un punto máximo correspondiente a la configuración donde la D^0 está localizada en el centro del pozo central, también se puede apreciar que el comportamiento ondulado de estas curvas se hace cada vez más notorio para cuando la posición radial de la donadora se acerca al eje principal y se desvanece lentamente a medida que la posición radial de la donadora aumenta.

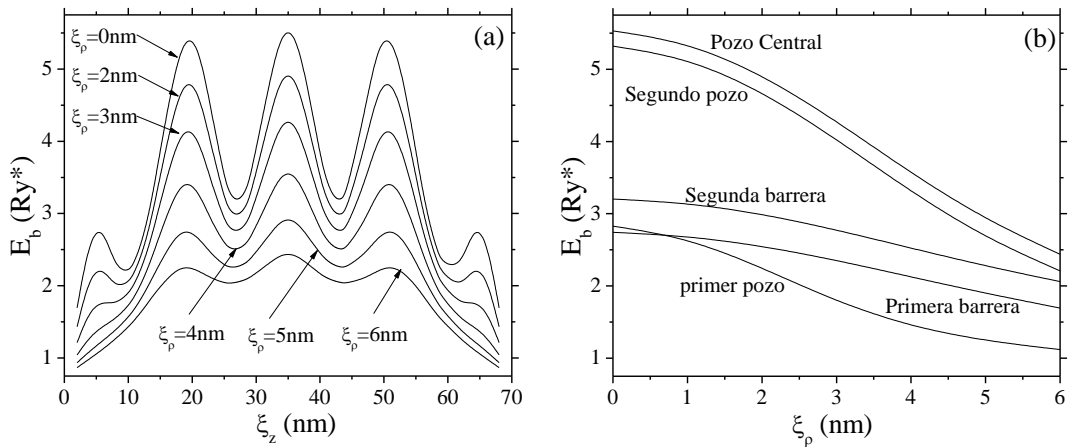


Fig. 21 Energía de enlace de una D^0 en una NWSL de $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$ de radio $5nm$, embebida en una matriz de $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$, como función de la posición de la impureza: a) a lo largo del eje z , ξ_z , medida desde el extremo izquierdo de la estructura y para varias posiciones radiales ξ_ρ medidas desde el eje principal de la NWSL; b) en dirección radial ξ_ρ , para diferentes posiciones en z .

Este carácter ondulado de la energía de enlace está asociado con la variación de la densidad de probabilidad de encontrar al electrón en diferentes partes de la NWSL, tal como se comentó en la sección anterior. Cuanto mayor es la probabilidad de encontrar al electrón en el lugar donde se localiza la impureza, tanto mayor es la interacción Coulombiana y por lo tanto mayor es la energía de enlace. La mayor probabilidad de encontrar al electrón ocurre en la mitad del pozo central, por lo que en esta posición la energía de enlace es máxima. Al comenzar a alejar la impureza de esta posición privilegiada, la energía de enlace comienza a decrecer debido al incremento de la separación media entre el electrón y el ión, hasta que E_b alcanza un mínimo local en el centro de la primera barrera adyacente al pozo central donde la probabilidad de encontrar al electrón es naturalmente menor que en el pozo. A medida que la donadora se desplaza hacia el extremo de la NWSL y entra al pozo vecino la energía de enlace crece nuevamente hasta que la donadora alcanza el centro de este pozo, el nuevo máximo local es solo un poco más bajo que el pico principal debido al fuerte confinamiento en dirección radial. Finalmente, cuando la donadora alcanza los extremos de la NWSL, la separación promedio entre el electrón y el ión llega a ser máxima y por lo tanto, la energía de enlace llega a ser mínima.

En la figura 21(b) se presenta la dependencia de la energía de enlace, pero esta vez en función de la posición de la donadora al eje de la NWSL, ξ_ρ considerando como posiciones a lo largo del eje z , la mitad de los tres primeros pozos y de las dos primeras barreras. En todas las curvas se puede observar un decrecimiento notable y monótono de la energía de enlace a medida que la donadora se aleja del eje principal. Esto se debe al hecho de que la mayor probabilidad de encontrar al electrón es en la región cercana al eje, lo que se traduce en un aumento de la distancia promedio entre el electrón y el ión a medida que la donadora se aleja del eje. Adicionalmente se puede notar que la energía de enlace para cuando la donadora se encuentra en las barreras decrece más lentamente que cuando se encuentra en los pozos. Esta diferencia se debe a que la función de onda del electrón en las barreras es mucho más extendida que en los pozos, lo que hace que la densidad de probabilidad del electrón en las barreras sea muy baja y se mantenga casi uniforme al alejarse del eje, así pues la distancia de separación media entre el electrón y el ión tampoco crece considerablemente, lo que implica que la energía de enlace disminuya levemente.

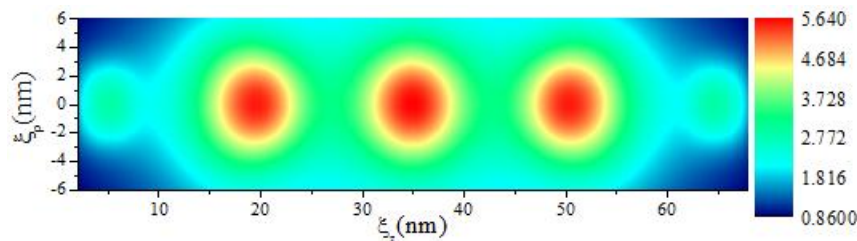


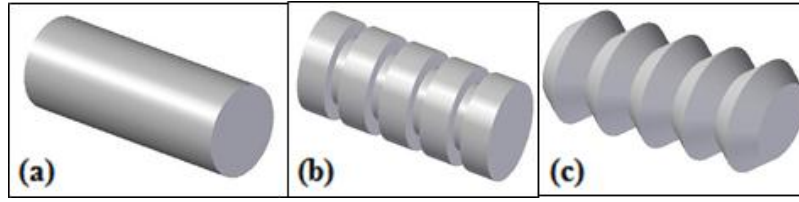
Fig. 22 Distribución de la energía de enlace de una D^0 en una NWSL de $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$ embebida en una matriz de $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ para diferentes posiciones del ión

Con el propósito de mostrar que existe una fuerte relación entre la distribución de probabilidad electrónica y la energía de enlace de la donadora, en la Figura (22) se muestra la distribución de la energía de enlace para diferentes posiciones de la impureza sobre un corte hecho a lo largo del eje de la NWSL. Esta grafica muestra una forma bastante parecida a la que presenta la densidad de probabilidad del electrón dentro de la NWSL en la figura (11), sin embargo en la figura (22) se puede observar que en los tres pozos centrales la energía de enlace resulta casi igual, a diferencia del comportamiento que se ve en la distribución de probabilidad electrónica. Este rasgo característico está relacionado con la gran capacidad de ligar que tiene la impureza sobre el electrón, pues el electrón permanece ligado a la donadora casi igualmente en los tres pozos centrales. Para los pozos de los extremos se tiene que la donadora mengua su capacidad de ligar al electrón, ya que cerca de los extremos de la estructura, el confinamiento radial no es comparable con la barrera de potencial infinita que se encuentra en las tapas del hilo.

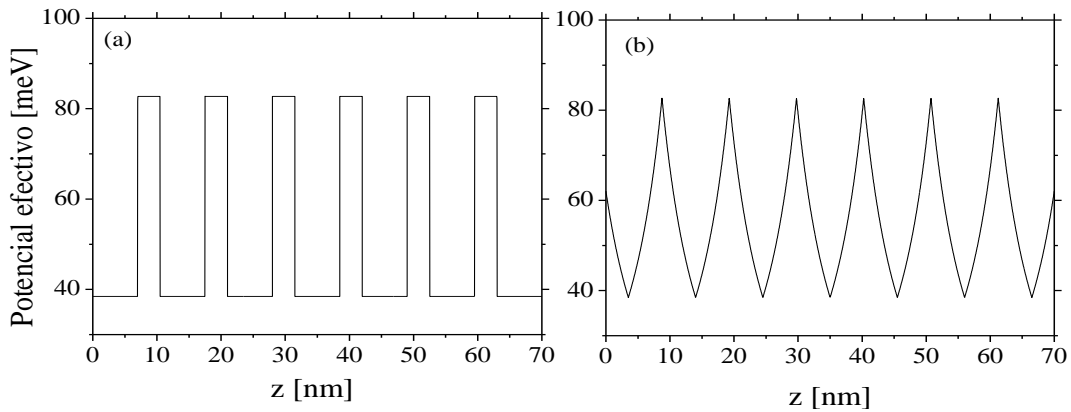
3.5 UNA IMPUREZA D^0 EN UN QWW CON SECCIÓN TRANSVERSAL PERIÓDICAMENTE VARIABLE

Aprovechando la flexibilidad que ofrece nuestro modelo matemático para describir NWSL moduladas composicionalmente, hemos querido extender nuestro análisis a hilos que presentan su sección transversal periódicamente variable. Tales estructuras se han denominado

en la sección 3.1 como NWSL estructurales. En la Figura (23) se ilustran algunas de las formas de NWSLs estructurales que se analizarán durante el desarrollo de esta sección.



El modelo matemático utilizado en esta sección es similar al utilizado en la sección anterior cuando se consideró la D^0 en una NWSL, pero ahora el hilo será composicionalmente homogéneo y será su radio $R(z)$ el que varíe periódicamente respecto al eje principal de la estructura. En este caso tenemos que la concentración de aluminio dentro del nanohilo será nula $x=0$, lo que indica la no existencia de barreras internas. Así pues el potencial de confinamiento estará dado como cero para $\rho < R(z)$, esto es dentro del nanohilo, y $V_c(y)$ para $\rho > R(z)$, donde la matriz es de $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$. Sin embargo y a pesar de que el perfil del nanohilo es variable, para cualquier valor de z la sección transversal del nanohilo es circular, lo que garantiza que el método utilizado para el análisis de la D^0 en la NWSL es igualmente aplicable para estas estructuras. Dentro de los modelos que se consideran a lo largo de esta sección tenemos nanohilos con sección transversal variable periódicamente similares a los que aparecen en las figuras 23b y 23c.



Tomaremos como punto de partida de nuestro análisis, la relación que existe entre la altura de las barreras efectivas de potencial que aparecen a lo largo del hilo, debido a la no uniformidad de la sección transversal, y la variación del radio de la estructura. La forma de este potencial efectivo se presenta en la figura (24), para hilos de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ con perfil lateral rectangular (24a) y con perfil lateral triangular (24b). La estructura considerada presenta 7 regiones de ancho $L_w = 7\text{nm}$ y radio máximo, $R_{\max} = 8\text{nm}$, que se interpretarán para nuestro caso como los pozos, y 6 regiones con radio mínimo, $R_{\min} = 5\text{nm}$, que se interpretarán como las barreras. La longitud total del hilo es de 70nm . Estas curvas se han obtenido mediante el

mismo procedimiento con el cual se obtuvo la gráfica expuesta en la figura (10) para el caso de una NWSL composicional, pero en este caso tal potencial periódico está relacionado es con la variación del confinamiento transversal a lo largo del hilo. Como puede apreciarse, existe una clara semejanza entre estas curvas de potencial y la forma del perfil del nanohilo. En este caso, los picos de máxima energía que presentan las barreras, corresponden a las zonas en las cuales se tiene el radio más reducido, esto es $R(z) = R_{\min}$, y de la misma manera las regiones donde la energía es más baja, es decir el fondo de los pozos, corresponden a las partes donde el radio resulta mayor, esto es $R(z) = R_{\max}$. Esto resulta porque las regiones donde el hilo sufre un estrangulamiento, $R(z) = R_{\min}$, constituyen obstáculos para el movimiento del electrón a lo largo de la estructura, los cuales desde el punto de vista de la energía, son verdaderas barreras de potencial. Para conocer la relación que existe entre la altura de dichas barreras efectivas y los radios R_{\min} y R_{\max} del nanohilo, en la figura (25) se presenta una gráfica de la altura de la barrera efectiva en función de la diferencia entre los radios extremos del nanohilo $\Delta R = R_{\max} - R_{\min}$, considerando cuatro valores diferentes de R_{\max} . En estas curvas se puede apreciar cómo, la altura de las barreras de potencial se incrementa a medida que el radio mínimo R_{\min} tiende a un valor más y más pequeño, mientras el radio máximo R_{\max} se mantiene fijo, lo cual resulta bastante lógico debido a que cuanto más se estrangule el hilo, mayor será el obstáculo que encuentre el electrón para moverse en esta región. Al comparar las cuatro curvas se nota que, cuando el radio externo de la estructura es menor, entonces la altura de la barrera efectiva aumenta más rápidamente a medida que el radio interno se reduce. Lo que implica que cuanto más delgado sea el hilo, más notable va a ser cualquier variación que presente el tamaño de su sección transversal, pues al estar más confinado radialmente el electrón, entonces cualquier estrangulamiento que presente el hilo se constituirá en un obstáculo notable.

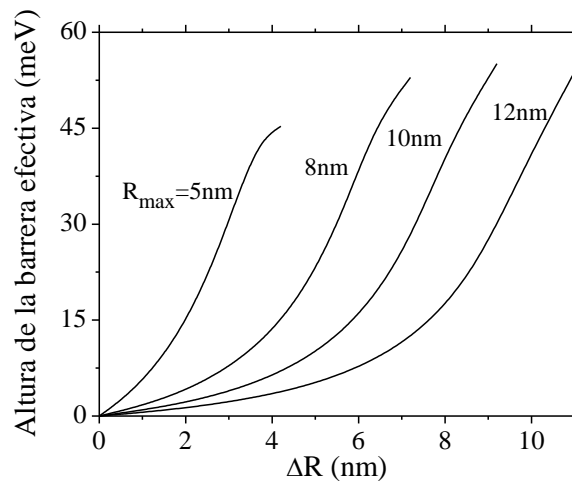


Fig. 25 Altura de la barrera efectiva que confina a las partículas dentro del nanohilo de perfil lateral periódico en función de la diferencia entre los radios $\Delta R = R_{\max} - R_{\min}$, para diferentes valores de R_{\max}

Para los resultados que se presentan a continuación se han considerado nanohilos de 70nm de longitud, cuyo perfil lateral puede ser uniforme con $R = 8nm$, o variable periódicamente, con 7 regiones de ancho $L_w = 7nm$ y $R_{\max} = 8nm$, que se interpretarán para nuestro caso como los pozos, y 6 regiones con $R_{\min} = 5nm$, que se interpretarán como las barreras. En la figura (26) se observa el comportamiento de la energía de enlace de una

donadora neutra en un nanohilo, con perfil lateral uniforme (a-c) y con perfil lateral rectangular (d-f) y triangular (g-i), en función de la posición de la impureza a lo largo del eje del hilo, medida desde el extremo izquierdo del nanohilo. Se han considerado diferentes posiciones radiales de la donadora y también el efecto que tiene un campo eléctrico externo aplicado en la dirección de crecimiento del nanohilo.

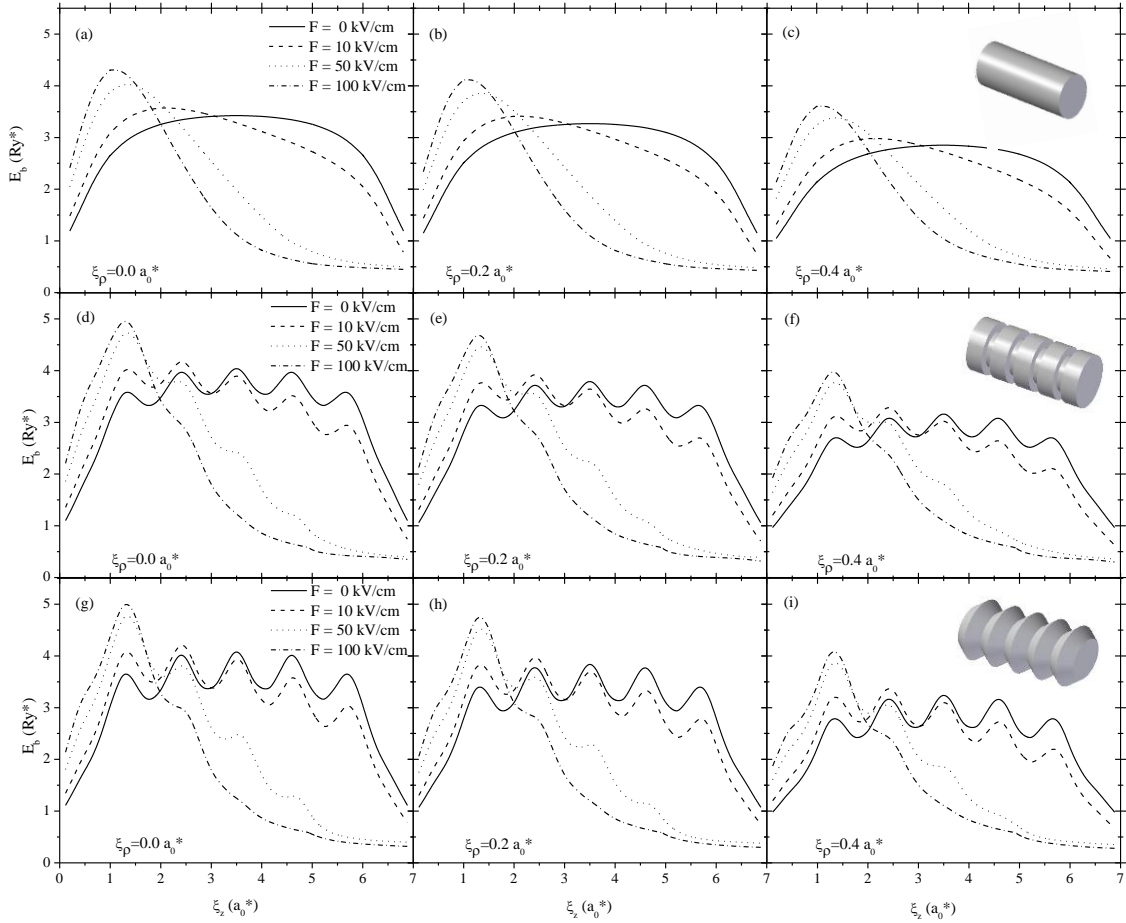


Fig. 26 Efecto de la variación del perfil de un QWW de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As sobre la energía de enlace de una D⁰. Las gráficas muestran la energía de enlace en función de la posición de la impureza a lo largo del eje del QWW, ξ_z considerando diferentes posiciones radiales ξ_ρ de la impureza e intensidades de campo eléctrico a lo largo del eje z.

En estas gráficas se observa cómo, en ausencia de campo eléctrico, la curva de la energía de enlace del sistema es modelada notablemente por la forma del perfil. En las gráficas que corresponden a los hilos de perfil periódico se observa una ondulación en la energía de enlace, de forma similar a la que se obtuvo para la NWSL de tipo composicional, lo que muestra que un nanohilo de perfil variable se comporta como una NWSL. Se observa para los tres tipos de hilos que la energía de enlace es mayor cuando la donadora se localiza en el centro de la estructura, para las diferentes posiciones en direcciones radial. Al comparar las curvas obtenidas para los hilos de perfil lateral periódico se puede observar, que si bien los valores de las energías de enlace para el nanohilo de perfil triangular son mayores que las del nanohilo de perfil rectangular, dicha diferencia no es muy notoria. El origen de dicha diferencia se debe a que el hilo con perfil triangular impone un confinamiento mayor, pues el volumen que ocupa cada región que se ha considerado como pozo, es menor que el de la correspondiente región en el nanohilo de perfil rectangular, y por o tanto su energía de enlace también será mayor. El

efecto del campo eléctrico sobre la energía de enlace es evidenciable en el todos los casos, pues las gráficas sufren una notable transformación que pone de manifiesto el desplazamiento que sufre la densidad electrónica en dirección opuesta a la dirección del campo, tal como se obtuvo para el caso de la NWSL composicional. Por ultimo tenemos que al descentrar la impureza y alejarla del eje del hilo, la energía de enlace se reduce en todos los casos, pero mantiene su forma ondulante para los hilos con perfil periódico. Esto muestra lo importante que resulta el efecto del confinamiento estructural sobre el comportamiento de las partículas confinadas.

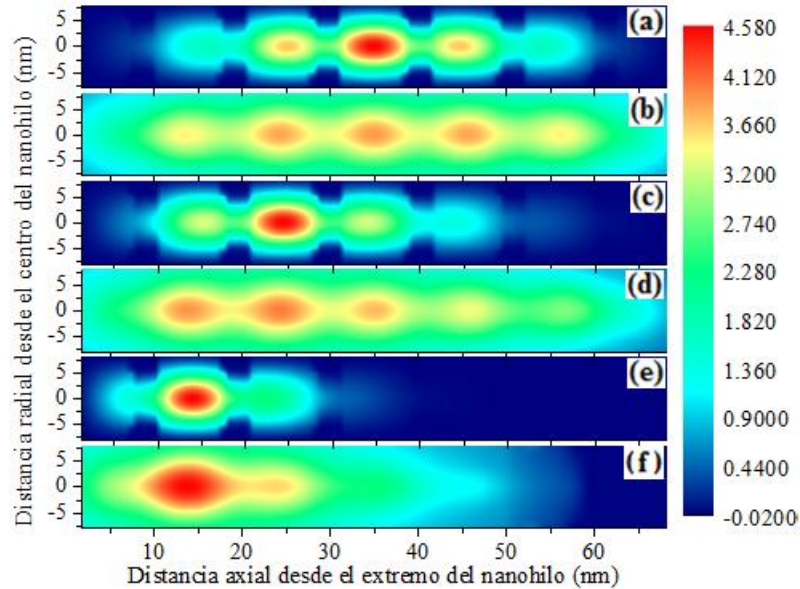


Fig. 27 Distribución electrónica y la distribución de la energía de enlace de una D^0 para diferentes intensidades de campo eléctrico: (a,b) $F=0\text{kv/cm}$, (c,d) $F=10\text{kv/cm}$ y (e,f) $F=50\text{kv/cm}$, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico rectangular de $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.

Con el propósito de mostrar la relación existente entre la distribución de probabilidad para el electrón libre en el hilo y la energía de enlace de la donadora, en las figuras (27) y (28) se muestran las distribuciones de la probabilidad electrónica y de la energía de enlace para diferentes posiciones de la impureza sobre un corte hecho a lo largo del eje de la NWSL, además se analiza el efecto de un campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento. En dichos gráficos se aprecia la buena correspondencia que existe entre la distribución electrónica y la energía de enlace de la donadora, tal como se había supuesto al analizar las curvas de la figura (26). Por otro lado, se pueden observar las modificaciones generadas por un campo eléctrico aplicado en dirección axial, sobre la distribución del electrón libre y las energías de enlace de la D^0 dentro de los tres tipos de hilos. En este caso, la influencia del campo eléctrico sobre la densidad de probabilidad del electrón se nota en el corrimiento que esta sufre en dirección opuesta a la dirección del campo, y para el caso de la energía de enlace tenemos que de igual manera su distribución en el hilo se modifica de forma bastante semejante. Otro aspecto que resulta interesante en estos resultados, es que permiten ver como la densidad de probabilidad electrónica dentro del nanohilo conserva la forma del perfil, al igual que sucede con las curvas de la energía de enlace.

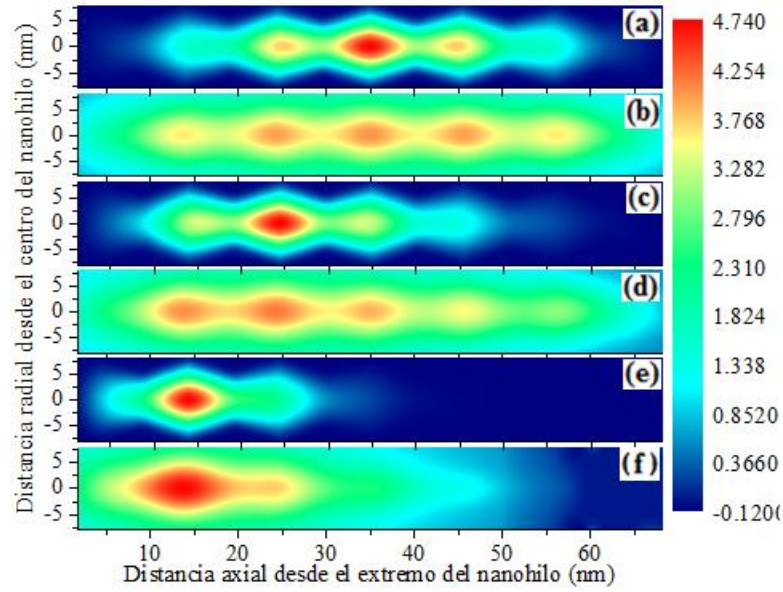


Fig. 28 Distribución electrónica y la distribución de la energía de enlace de una D^0 para diferentes intensidades de campo eléctrico: (a,b) $F=0\text{kv/cm}$, (c,d) $F=10\text{kv/cm}$ y (e,f) $F=50\text{kv/cm}$, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico triangular de $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.

En la medida en que se aumenta la intensidad del campo eléctrico, el parecido que existe entre la distribución electrónica y la energía de enlace con el perfil del nanohilo, se desvanece. Esto sucede debido a que el incremento del campo eléctrico lleva a una concentración de la densidad de probabilidad electrónica hacia el extremo izquierdo del hilo, perdiendo casi totalmente la interacción con las barreras internas creadas por los radios menores del nanohilo. Debido a esto, y como era de esperarse, para campos eléctricos apreciables, la distribución de la energía de enlace casi no depende de la forma del perfil del nanohilo, esto se puede observar al comparar la similitud que existe entre las curvas de la figura 27(f) y la 28(f), que muestran que para un campo de $F=50\text{kv/cm}$, la distribución de la energía de enlace es casi idéntica en ambos casos, a pesar de que los perfiles de los nanohilos son diferentes.

3.6 UN EXCITÓN X^0 EN UNA NWSL

Esta sección está dedicada al análisis de un excitón confinado dentro de una NWSL de tipo composicional, en presencia de campos eléctricos y magnéticos aplicados en dirección axial. El modelo teórico de la estructura se tomará tal como en la sección anterior, es decir una NWSL de $\text{GaAs/Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, embebida en una matriz de $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$. Nuestro sistema es descrito por el siguiente Hamiltoniano adimensional:

$$\begin{aligned}
 H &= H_e + H_h - \frac{2}{r_{eh}}, \\
 H_e &= -\Delta_{\rho_e} - \Delta_{\varphi_e} - \Delta_{z_e} + V_{e\text{eff}}(\rho_e, z_e), \\
 H_h &= -\eta_{\rho}(\Delta_{\rho_h} + \Delta_{\varphi_h}) - \eta_z \Delta_{z_h} + V_{h\text{eff}}(\rho_h, z_h),
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

donde η se define como el cociente entre la masa del electrón y la masa del hueco en dirección radial y axial, $\eta_\rho = m_e / m_\rho$ y $\eta_z = m_e / m_z$, respectivamente. El potencial efectivo sobre los portadores de carga incluye el confinamiento estructural y el confinamiento producido por campos externos, de tipo magnético y eléctrico, aplicados en dirección axial. Dicho potencial está definido para cada partícula como:

$$V_{i_{\text{eff}}}(\rho_i, z_i) = V_i(\rho_i, z_i) + \frac{\gamma^2 \rho_i^2}{4} + (-1)^i \alpha F z_i; \quad i = e, h. \quad (3.18)$$

Para el caso cuando $i = e$, tenemos el potencial efectivo para el electrón, mientras que si $i = h$, se hace referencia al potencial efectivo del hueco.

Para solucionar este problema haremos uso nuevamente del Método de Dimensión Fractal [105, 114], ya utilizado en las secciones precedentes para analizar el problema de la donadora neutra. En este caso se propone una función de onda que satisfaga el Hamiltoniano (3.17), como un producto de funciones que tiene la siguiente forma:

$$\Psi = f_e(\rho_e, z_e) f_h(\rho_h, z_h) \Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|), \quad (3.19)$$

donde las funciones $f_e(\rho_e, z_e)$ y $f_h(\rho_h, z_h)$ son solución de los problemas uniparticulares:

$$H_e f_e = E_e f_e, \quad (3.20a)$$

$$H_h f_h = E_h f_h, \quad (3.20b)$$

y la función envolvente desconocida $\Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)$, depende solamente de la separación entre el electrón y el hueco, y describe la correlación asociada con la atracción de las dos partículas correspondientes. Para determinar esta función envolvente partimos del principio variacional de Schrödinger, el cual nos dice que para hallar la función Φ óptima que se ajuste a nuestro sistema, es necesario minimizar el siguiente funcional respecto a dicha función:

$$F[\Phi] = \langle f_e f_h \Phi | H_e + H_h - 2/r_{eh} - E_x | f_e f_h \Phi \rangle \rightarrow \min. \quad (3.21)$$

Como ya se ha demostrado en la Ref [105], la función de prueba (3.19) satisface el funcional (3.21), si la función envolvente Φ es solución del siguiente problema de Cauchy:

$$\begin{aligned} -(J(r)\Phi'(r))' + (-2/r)\Phi(r) + J_0(r)E_b\Phi(r) &= 0, \quad 0 < r < \infty; \\ \Phi'(0)/\Phi(0) &= -1/(1+\eta_\rho), \quad \Phi(\infty) = 0, \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde

$$J(r) = (1+\eta_\rho)J_0(r) + (\eta_z - \eta_\rho)J_1(r) \quad (3.23)$$

$$J_0(r) = 4\pi r \int_0^L dz_e \int_{\max\{0, (z_e-r)\}}^{\min\{L, (z_e+r)\}} dz_h \int_0^\infty \rho_e d\rho_e \int_0^1 dx \frac{f_e^2(\rho_e, z_e) [F_+(z_e, z_h, \rho_e, x) + F_-(z_e, z_h, \rho_e, x)]}{\sqrt{(2-x^2)}}$$

$$J_1(r) = \frac{4\pi}{r} \int_0^L dz_e \int_{\max\{0, (z_e-r)\}}^{\min\{L, (z_e+r)\}} dz_h \int_0^\infty \rho_e d\rho_e \int_0^1 dx \frac{f_e^2(\rho_e, z_e) [F_+(z_e, z_h, \rho_e, x) + F_-(z_e, z_h, \rho_e, x)]}{\sqrt{(2-x^2)}} (z_e - z_h)^2 \quad (3.24)$$

$$F_\pm(z_e, z_h, \rho_e, x) = f_h^2 \left(\sqrt{\rho_e^2 + r^2 - (z_e - z_h)^2} \pm 2\rho_e \sqrt{r^2 - (z_e - z_h)^2} (1-x^2), z_h \right)$$

Aquí E_b es la energía de enlace para el estado base del excitón, definida como $E_b = E_e + E_h + e\hbar B/2\mu R y^* - E$, siendo E la energía del excitón. Para resolver el problema de Cauchy (3.22), se ha utilizado el Método de Barrido Trigonométrico (ver apéndice A) [111].

A continuación presentamos los resultados de nuestros cálculos para NWSLs con los mismos parámetros utilizados para el análisis de la D^0 en la sección anterior. Se considera un modelo de una NWSL de GaAs/Ga_{0,9}Al_{0,1}As embebida en una matriz de Ga_{0,6}Al_{0,4}As, con 5 pozos de ancho $a=10\text{nm}$ y cuatro pozos de $b=5\text{nm}$ con radio $R=5\text{nm}$. Todos los resultados que se presentan corresponden a cálculos hechos para un excitón con hueco pesado. En la figura 29(a) se muestra la variación de la energía de enlace del excitón, E_b , en función del radio del hilo, R para varios valores del campo magnético. Para un valor fijo del campo magnético, se observa que a medida que el radio del hilo disminuye la energía de enlace aumenta, desde el valor correspondiente a una SL de GaAs/Ga_{0,9}Al_{0,1}As (cuando el radio es grande), hasta que alcanza un valor máximo y luego disminuye al valor característico de la energía de enlace de un excitón en el bloque, en este caso del material de la matriz, cuando el radio del hilo tiende a cero. Esto se debe al hecho de que, a medida que el radio del hilo disminuye las funciones de onda de los portadores se comprimen, lo que implica que la energía de enlace del sistema aumente. Sin embargo por debajo de cierto valor del radio, la función de onda penetra notablemente en la región de las barreras y hacia la matriz, lo que provoca un descenso en la energía de enlace. Para valores pequeños del radio del hilo ($R < 8\text{nm}$), la energía de enlace del excitón permanece casi invariante ante la aplicación de un campo magnético, lo que se traduce en que el efecto del confinamiento estructural es mucho más significativo que el producido por el campo magnético.

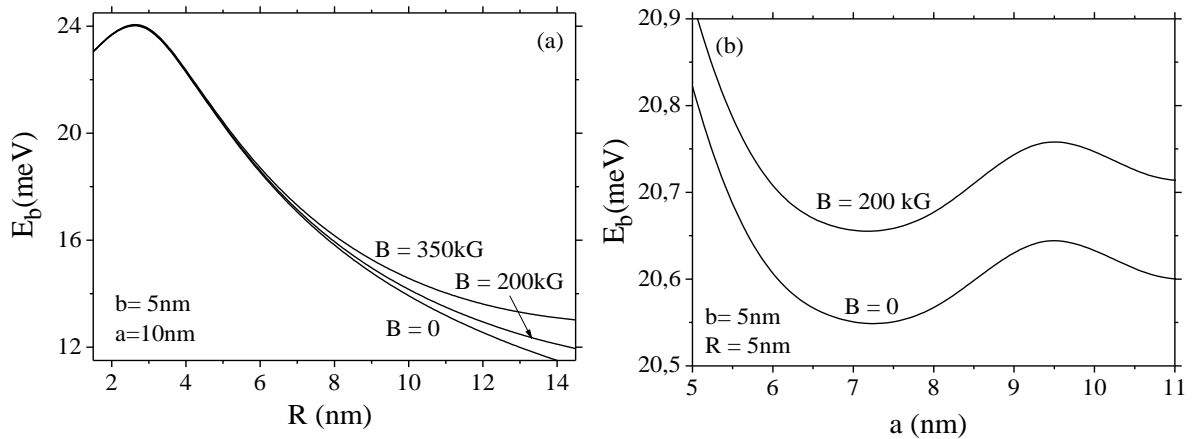


Fig. 29 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del radio (a) y el ancho del pozo (b) para varios valores del campo magnético aplicado en una NWSL de GaAs/Ga_{0,9}Al_{0,1}As/Ga_{0,6}Al_{0,4}As .

En la figura 29(b) se observa la variación de la energía de enlace E_b del excitón en función del ancho de los pozos a . El comportamiento que presentan dichas curvas se debe principalmente al hecho de que el hueco al ser pesado, no tiene un amplio alcance de tunelamiento, por lo que tiene el máximo de su distribución de probabilidad en el pozo central, mientras que el electrón al ser más ligero tiene una alta probabilidad de hallarse en los pozos vecinos al pozo central cuando los pozos sean estrechos. Cuando se comienza a incrementar el ancho de los pozos, entonces la separación entre el electrón y el hueco aumenta y la energía de enlace decrece inicialmente. Pero a medida que el ancho del pozo se sigue incrementando entonces el electrón tiende a tunelar a través de las barreras hacia el pozo central, donde ahora no estará tan confinado y además se halla el hueco, por lo tanto la configuración del excitón con el electrón y el hueco en el mismo pozo se hace cada vez más probable. Como resultado de lo anterior, la separación entre el electrón y el hueco disminuye, mientras la energía de enlace comienza a crecer nuevamente. Finalmente, como las partículas están principalmente localizadas en el mismo pozo, el incremento sucesivo del ancho del pozo conduce al aumento de la separación y la energía de enlace empieza a descender un poco hasta que finalmente se estabilice en un valor fijo. Adicionalmente se puede observar que el efecto del campo magnético sobre la energía de enlace del excitón es, como se espera, un aumento a penas apreciable, debido al efecto dominante del confinamiento radial de la NWSL.

En la figura (30) se muestra la variación de la energía de enlace del excitón en función de los anchos de los pozos (a) y de las barreras (b), para varios valores del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje z . Con el ánimo de entender el comportamiento estas curvas, debe tenerse en cuenta que debido al fuerte confinamiento radial en la estructura, las alturas de las barreras entre los pozos resultan pequeñas, como se mostró en la sección 3.2, por lo que las funciones de onda del estado base del electrón y el hueco están extendidas a lo largo de la estructura. Cuando el ancho del pozo o de la barrera es pequeño, las partículas túnelan fuertemente hacia los pozos de los extremos. A medida que el ancho de la celda unidad (ancho de pozo más ancho de barrera) aumenta, la distancia de separación entre el electrón y el hueco crece bajo la acción del campo eléctrico aplicado. Se tiene entonces que entre mayor es la intensidad del campo eléctrico más grande es la separación y más fácilmente cae la energía de enlace. Al mismo tiempo, el incremento de la dimensión de la celda unitaria conduce a la disminución de las energías uni-particulares y al decrecimiento de la probabilidad de tunelamiento, lo que llevará a que la partícula más pesada (el hueco), pase de un estado extendido a lo largo de la estructura a un estado fuertemente localizad dentro del pozo central. En el mismo sentido el incremento del tamaño de las celdas unitarias provoca que el estado del electrón llegue a ser cada vez más localizado en la celda central, lo que lleva a una inminente reducción en la separación electrón-hueco y a un ascenso en la energía de enlace. Finalmente, cuando la celda unitaria llega a ser más grande que la dimensión del excitón la energía de enlace decrece de nuevo.

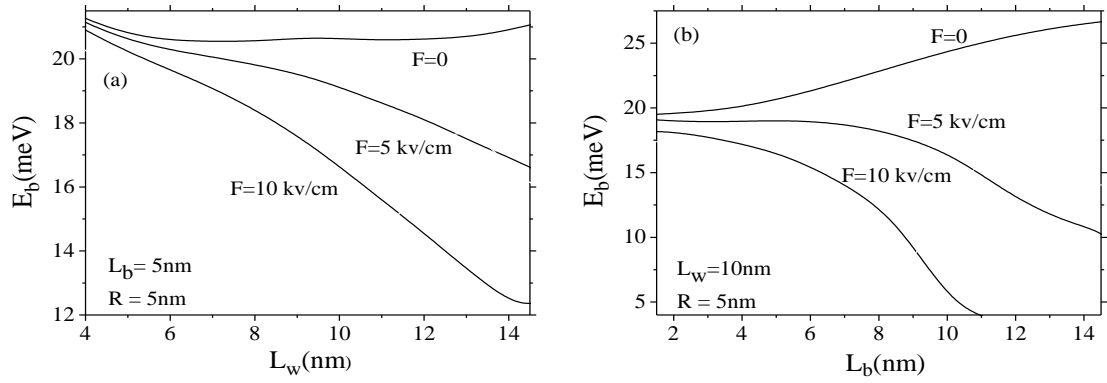


Fig. 30 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del ancho del pozo (a) y de la barrera (b) para varios valores del campo eléctrico en dirección del eje z de una NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$.

En la figura (31) se presentan las curvas de las energías de enlace en función del radio (a) y el número de pozos en NWSL (b). La dependencia de las energías de enlace en función del radio tienen el comportamiento típico para hilos y puntos cuánticos de forma cilíndrica: inicialmente con la disminución del radio E_b se incrementa, después pasa por un máximo y vuelve a descender debido al desbordamiento de la función de onda. En algunos trabajos anteriores [114-117] se demostró que el valor máximo en las curvas para hilos cuánticos y discos cuánticos es diferente. En el primer caso este valor es del orden de $4-6 \text{ Ry}^*$ y en el segundo caso es de $7-10 \text{ Ry}^*$, es decir que al pasar del hilo al disco el valor máximo de la energía de enlace se incrementa alrededor 50% debido al confinamiento adicional en la dirección axial. Al disminuir el número de pozos internos en la NWSL la geometría se transforma y se hace más parecida a la geometría de un disco y por esta razón la energía de enlace de una donadora confinada en esta heterojuntura varía en concordancia con el cambio de la simetría de la estructura desde una simetría típica para un hilo hasta una simetría típica para un disco. Tanto el valor máximo de la energía de enlace en las curvas en Fig31(a) como la energía de enlace en Fig. 31(b) se incrementa aproximadamente en 50% cuando el número de pozos en la NWSL se disminuye desde $n_p = 20$ hasta $n_p = 5$.

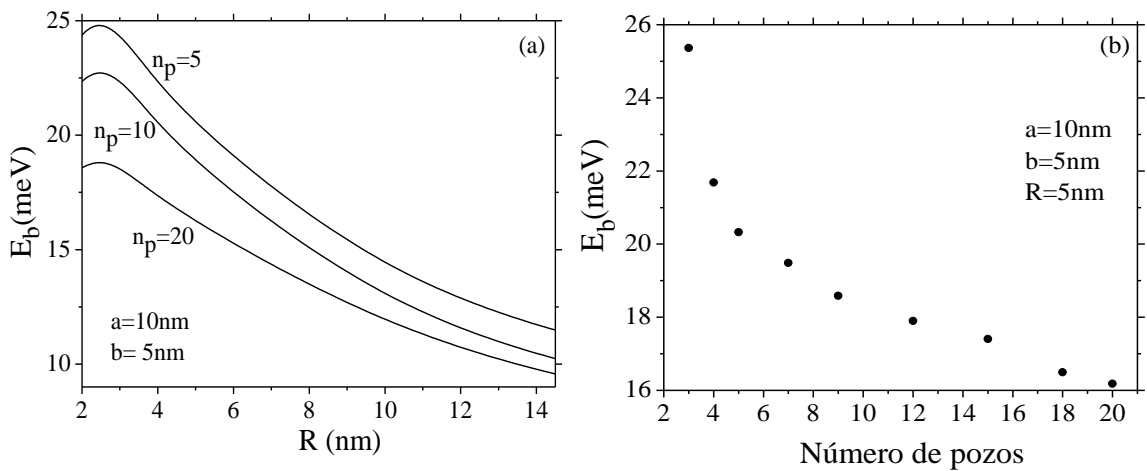


Fig. 31 Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función: del radio de la NWSL para varios números de pozos (a) y del número de pozos internos de la NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$

La figura (32) muestra la evolución de la distribución de densidad de probabilidad condicional de encontrar electrón en diferentes partes del plano que resulta de un corte a lo largo de eje de la NWSL, debido al desplazamiento de la posición del hueco a lo largo de eje. En la Fig. 32(a) se muestra la distribución de la densidad de probabilidad de encontrar electrón en ausencia del hueco. Se ve que en este caso el electrón se localiza con mayor probabilidad en el pozo central, como ya se había mencionado antes. La probabilidad de encontrar electrón en los dos pozos vecinos es un poco menor pero también es notable y la probabilidad es casi cero en el resto de la estructura.

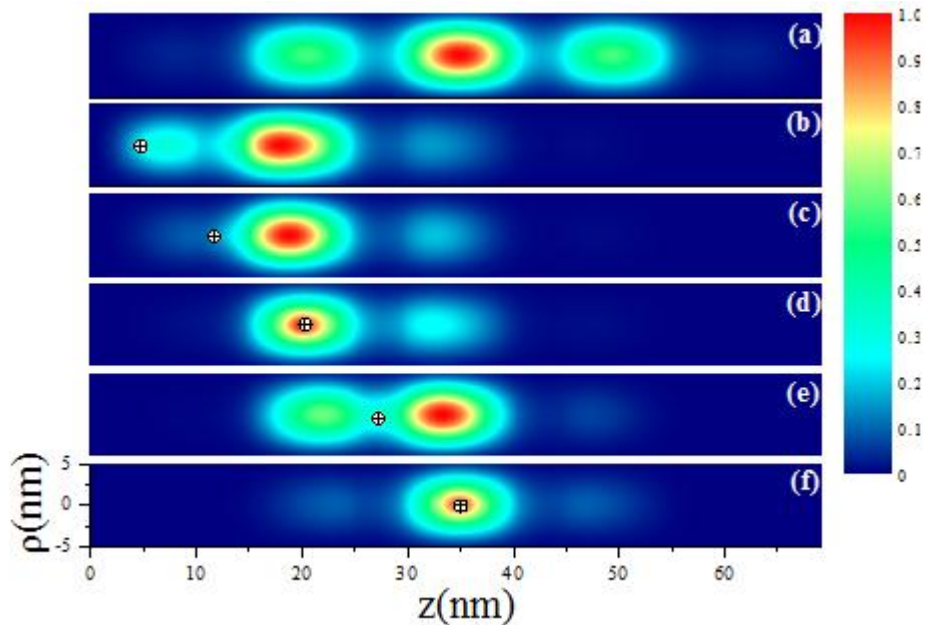


Fig. 32 Densidad de probabilidad condicional del electrón; (a) libre en la NWSL, (b-f) para diferentes posiciones del hueco sobre el eje de la NWSL de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$ embebida en una matriz de $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$, con 5 pozos de 10nm y 4 barreras de 5nm y de Radio 5nm. Las posiciones del hueco están señaladas con círculos cruzados.

Estos gráficos de densidad de probabilidad electrónica condicional muestran claramente como la presencia del hueco en diferentes zonas de la estructura modifica sustancialmente la distribución de probabilidad del electrón. Se evidencia además una competencia entre el potencial Coulombiano que ejerce el hueco sobre el electrón y el potencial de confinamiento que impone la estructura con su sistema de pozos y barreras.

4. ESTADOS LIGADOS DE PORTADORES DE CARGA EN ANILLOS CUANTICOS

Como ya se mencionó en las secciones 1.1 y 1.2, los QRs son escenarios magníficos para la observación de fenómenos mecano-cuánticos en sistemas de pocas partículas. Esto gracias a que estas estructuras presentan una topología que no es simplemente conexa, y además un alto grado de confinamiento para los portadores de carga. Uno de los fenómenos más interesantes y estudiados con relación a sistemas de pocas partículas en QRs, es el efecto *Aharonov-Bohm* (AB), el cual se manifiesta por medio de oscilaciones periódicas en su espectro energético respecto a la variación del campo magnético, las cuales se conocen como oscilaciones *Aharonov-Bohm* (AB). Dicho comportamiento en el espectro energético conduce a un comportamiento similar de otras propiedades físicas del anillo, como es el caso por ejemplo del espectro de absorción. Otro aspecto importante consiste en el hecho de que los QRs pueden ofrecer más posibilidades de variar el espectro energético en forma controlada, gracias a las variaciones topológicas que pueden ir desde un sistema bidimensional, como es el caso del disco cuántico, el cual se obtiene cuando el radio interno tiende a cero, hasta la situación casi unidimensional correspondiente al caso límite en el cual el espesor del anillo es muy pequeño. Este capítulo tiene como objetivo general dar respuesta a la pregunta: ¿En qué medida, diferentes tipos de perturbaciones tales como la presencia de impurezas, variaciones en el ancho del anillo y distorsiones en la forma circular del mismo, pueden estimular la localización de los diferentes estados de sistemas de pocas partículas, y de esta manera cambiar las propiedades eléctricas y ópticas de tales sistemas? En los análisis que presentamos en este capítulo no consideraremos el espín de las partículas, y aunque los efectos magnéticos debidos a este pueden ser importantes, no están dentro de los objetivos que motivaron la realización de esta tesis.

4.1 MODELO DEL CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL

En esta sección se definen los parámetros geométricos y físicos que se consideraron para modelar las estructuras de forma anular que se estudian a lo largo del capítulo. Para tener la posibilidad de comparar los resultados de nuestros cálculos con los de otros autores hemos considerado QRs de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ sumergidos dentro de una matriz de $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ [61]. En nuestros cálculos hemos despreciado el desajuste que existe en las juntas tanto de la constante dieléctrica, como de la masa efectiva de los portadores de carga, y hemos tomado los valores correspondientes a la región interior del QR debido a que el confinamiento hace que los portadores de carga se encuentren fundamentalmente en esta región. En el sistema ternario de

$In_{0.55}Al_{0.45}As$ la constante dieléctrica es: $\varepsilon=12.71$ y masas efectivas para electrón y hueco pesado son: $m_e^*=0.076m_0$ y $m_h^*=0.45m_0$, respectivamente, donde m_0 es la masa del electrón en el vacío. La constante de red del material del anillo es cercana a los 0.6 nm . En los cálculos realizados se considera un modelo con discontinuidades en las juntas, para la BC de valor $V_e=258\text{meV}$ y en BV de valor $V_h=172\text{meV}$. En los diferentes cálculos realizados se utilizaron dos conjuntos diferentes de unidades, las correspondientes al electrón y las correspondientes al excitón. Para el caso del electrón, el radio de Bohr efectivo correspondiente a estos parámetros del material es $a_0^*=\varepsilon\hbar^2/m^*e^2\approx 8.86\text{nm}$, el Rydberg efectivo es $Ry^*=e^2/2a_0^*\varepsilon\approx 6.40\text{meV}$ y la unidad de campo magnético es $\gamma=e\hbar B/2m_e^*cRy^*$; $\gamma=1\rightarrow B=8.4\text{T}$. Mientras que para el caso del excitón, tenemos que el radio de Bohr y el Rydberg efectivo son iguales a $a_0^*=\hbar^2\varepsilon/\mu e^2\approx 10.36\text{nm}$ y $Ry^*=e^2/2\varepsilon a_0^*\approx 5.47\text{meV}$, donde $\mu=m_e^*m_h^*/(m_e^*+m_h^*)\approx 0.065m_0$ representa la masa efectiva, y en este caso, la unidad de campo magnético es $\gamma=e\hbar B/2\mu^*cRy^*$; $\gamma=1\rightarrow B=6.7\text{T}$.

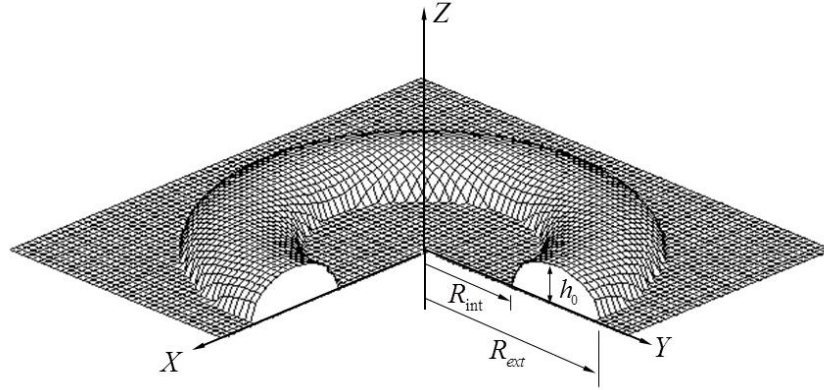


Fig. 33 Esquema de un QR con sección transversal semi-elíptica

Para la descripción geométrica de las estructuras estudiadas en el presente capítulo, hemos considerado un modelo generalizado de QR, el cual se muestra en la figura 33. En nuestro modelo, el QR es una capa delgada en el plano XY limitada por un radio exterior R_{ext} y un radio interior R_{int} , donde la altura h está relacionada con la distancia ρ , tomada desde el eje de simetría del anillo, mediante la función:

$$h(\rho) = h_w + h_p(\rho) \cdot \mathcal{G}(\rho - R_{int}) \mathcal{G}(R_{ext} - \rho) \quad (4.1)$$

$$R_c = (R_{ext} + R_{int})/2; \quad w = R_{ext} - R_{int}.$$

Aquí h_w es el espesor de la capa húmeda (WL – “wetting layer”), $h_p(\rho)$ es una función que define la altura del anillo sobre la capa húmeda, mientras que los parámetros R_c y w definen el radio de la línea central y el ancho del QR, respectivamente. La función $\mathcal{G}(x)$ es la función escalón de Heaviside, la cual es igual a cero para $x < 0$ y a uno para $x > 0$. Este modelo ofrece una gran versatilidad al definir la morfología del QR, ya que permite modelar desde anillos circulares de ancho constante, cuando los radios exterior e interior permanecen fijos al hacer un barrido respecto al ángulo azimutal, hasta anillos de forma irregular y ancho variable, cuando los radios interior y exterior varían respecto al ángulo azimutal. Las fórmulas

(4.1) permiten también modificar la forma de la sección transversal del anillo al cambiar el factor $h_p(\rho)$. Por ejemplo si se quiere que la sección transversal del QR sea rectangular debe definirse una altura constante $h_p = h_0$. Por otro lado, un modelo que resulte más cercano a la morfología presentada por los QRs autoensamblados podría ser un anillo con sección transversal de forma semi-elíptica, dada por la función:

$$h_p(\rho) = h_0 \sqrt{1 - 4(\rho - R_c)^2 / w^2}; \quad (4.2)$$

aquí h_0 es la altura máxima del anillo sobre la capa húmeda. Esta notable versatilidad permite que nuestro modelo se ajuste bastante bien a la forma real que presentan los QR autoensamblados, para los cuales, como ya se mencionó en la sección 1.1.1, se tiene que su altura es considerablemente pequeña en relación con su radio medio.

4.2 UN ELECTRÓN EN UN QR UNIDIMENSIONAL ATRAVESADO POR UN CAMPO MAGNÉTICO

En esta sección se tomará como punto de partida el análisis de un rotor rígido cuántico unidimensional, es decir un electrón en un QR unidimensional de radio R , el cual es atravesado por un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento de la estructura (eje z). Esto con el propósito de lograr una mayor claridad al exponer en las siguientes secciones el efecto que tiene la presencia de impurezas o variaciones en la morfología del anillo, sobre el espectro energético de dicho sistema. Por otro lado el desarrollo de esta sección puede resultar ventajoso igualmente cuando se lleve a cabo el análisis del excitón. El Hamiltoniano que describe el estado del electrón confinado en el QR, dentro del marco de la aproximación de masa efectiva está dado como:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 \quad (4.3)$$

donde el operador de momentum en coordenadas cilíndricas esta dado como $\vec{P} = -(i\hbar d/Rd\varphi) \hat{e}_\varphi$, ya que el electrón solo dispone de un grado de libertad (ángulo azimutal φ) al estar confinado en un anillo circular unidimensional. Para introducir el campo magnético en dirección del eje de simetría, hemos tomado un potencial vectorial magnético según el gauge de Coulomb, esto es $\vec{A} = 1/2(\vec{B} \times \vec{\rho})$. Según estas consideraciones, el Hamiltoniano (4.3) se puede escribir de manera explícita, usando las unidades mencionados en la sección 4.1 para el electrón, en forma adimensional como:

$$H = -\frac{1}{R^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} - i\gamma \frac{d}{d\varphi}. \quad (4.4)$$

El Hamiltoniano expresado en esta forma deja al descubierto los dos términos que aparecen de la interacción del electrón con el campo magnético, el término diamagnético y el término paramagnético. Con base en el Hamiltoniano anterior, tenemos por lo tanto que la ecuación de onda que describe el estado m -ésimo del sistema será:

$$-\frac{1}{R^2} \frac{d^2 \phi_m(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \phi_m(\varphi) - i\gamma \frac{d\phi_m(\varphi)}{d\varphi} = E_m \phi_m(\varphi), \quad (4.5)$$

la cual tiene solución analítica. Las funciones de onda que satisfacen el problema (4.5) serán funciones armónicas respecto al número cuántico azimutal m , dadas como:

$$\phi_m(\varphi) = e^{im\varphi} / \sqrt{2\pi}, \quad (4.6)$$

y por lo tanto, los valores posibles de energía que podrá tener el electrón estarán dados como:

$$E_m = \frac{m^2}{R^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + \gamma m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.7)$$

El primer término a la derecha de esta expresión corresponde a la energía cinética del electrón en el QR en ausencia de campo magnético, y los dos términos restantes son los aportes correspondientes a la interacción del electrón con el campo magnético. Aquí, γm es la energía correspondiente al término paramagnético, la cual define el acople entre el campo magnético y el momento magnético permanente del electrón al rotar en el anillo, dicho termino podrá ser positivo o negativo, dependiendo del sentido de giro de la partícula, el cual está determinado por el signo del número cuántico m . Por otro lado, $\gamma^2 R^2/4$ es la energía correspondiente al término diamagnético, la cual siempre es positiva, por lo que produce un incremento en la energía cinética del electrón. El origen físico de este término puede explicarse por la variación que sufre la corriente de probabilidad asociada al electrón ante la presencia del campo magnético externo, lo que da origen a un momento magnético inducido, el cual es antiparalelo al campo ya que de acuerdo con la ley de Lenz se opone al campo aplicado, por lo que el cambio en la energía asociado con este acople será siempre positivo.

Para comprender mejor la importancia del resultado expresado en la ecuación (4.7) presentamos en la figura (34), el espectro energético de un electrón en un QR unidimensional de radio $1 a_0^*$ en función de la intensidad de un campo magnético aplicado en dirección perpendicular al plano del anillo. En esta figura se puede apreciar como cada nivel energético con $|m| \geq 1$ se halla doblemente degenerado en ausencia del campo magnético externo debido a la simetría rotacional que presenta el sistema, pues el electrón tiene dos posibles sentidos de giro ($\pm m$) para cada valor de energía. Cuando se aplica el campo esta degeneración se rompe y cada nivel se desacopla en dos niveles debido a que la energía relacionada con el acople paramagnético depende del sentido de giro del electrón. Para el caso en el cual el electrón gira en sentido horario, m es positivo y por lo tanto el término paramagnético produce un incremento en la energía, mientras que cuando el electrón gira en sentido anti-horario se tiene una reducción en la energía ya que m es negativo en este caso. Este carácter del acople paramagnético sumado

a la forma cuadrática del termino diamagnético lleva a que la energía del estado base tenga un comportamiento oscilatorio a medida que se varía la intensidad del campo magnético, como se puede observar en la figura 34, a tales oscilaciones se les conoce como *oscilaciones de Aharonov-Bohm*. Algo que resulta muy interesante en relación con estas oscilaciones es el hecho de que el momento angular del electrón en el estado base puede ser diferente de cero, lo cual está estrechamente relacionado con la aparición de las fascinantes corrientes persistentes en QRs. El cambio que se da del momento angular en el estado base de 0 a -1, de -1 a -2, y si sucesivamente, es una característica que distingue decisivamente los QRs de los QDs.

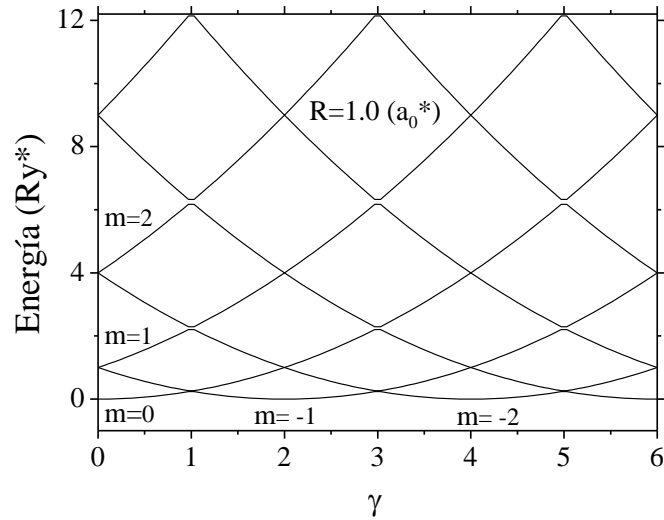


Fig. 34 Espectro energético de un electrón en un QR unidimensional en función de la intensidad de un campo magnético uniforme aplicado en dirección transversal al plano del anillo.

Otro aspecto interesante que se pueden destacar al observar la gráfica 34 es el hecho de que la energía del estado base se hace cero periódicamente respecto a la intensidad del campo magnético, explícitamente para los valores $\gamma = 2|m|/R^2$, y además la doble degeneración de los estados excitados que se tenía en ausencia de campo vuelve a darse. Por otro lado se tiene además que la brecha existente entre el estado base y el primer excitado se anula para valores equidistantes de intensidad de campo magnético definidos como $\gamma = 2|m+1|/R^2$. En este último caso debe observarse un efecto de transparencia del anillo ante el campo electromagnético, debido a que el electrón no requiere la adición de energía para realizar la transición del estado base al estado excitado más cercano. Vale la pena mencionar que este interesante comportamiento en el espectro energético de un electrón en un QR es una consecuencia del efecto *Aharonov-Bohm*, el cual es un efecto completamente mecano-cuántico.

4.3 UNA IMPUREZA D^0 EN UN QR

Para esta sección hemos considerado un QR circular de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ con sección transversal de forma semi- elíptica, el cual se halla dentro de una matriz de $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. El modelo geométrico de esta estructura está definido por las expresiones (4.1) y (4.2), en este caso no consideraremos el espesor de la WL. El potencial de confinamiento debido a la discontinuidad de la banda de conducción en las juntas de la estructura está dado por la

función $V^{(3D)}(\rho, z)$, la cual es igual a cero dentro de la capa de $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ y a infinito fuera de esta. Consideraremos el caso cuando la impureza está localizada en el plano de la base del anillo, y su posición está determinada en coordenadas cilíndricas por el vector posición, $(\rho = \xi, \varphi = 0, z = 0)$, como se puede apreciar en la figura 35.

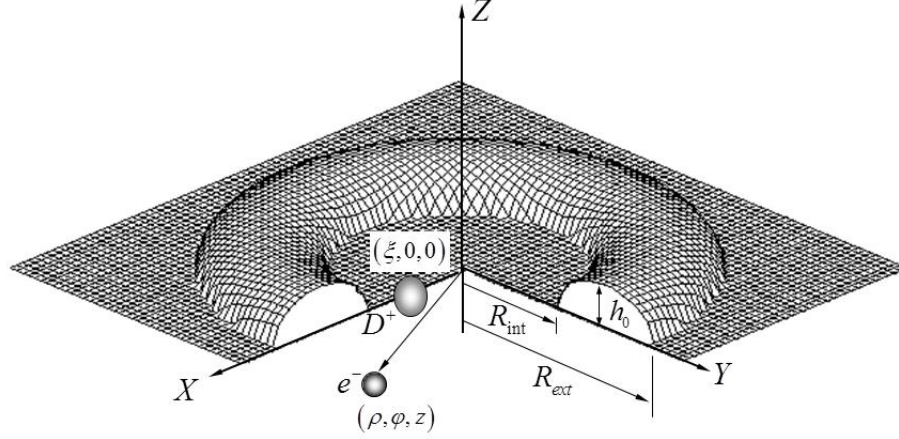


Fig. 35 Esquema de una D^0 en un QR toroidal de sección transversal semi-elíptica.

Según la aproximación de masa efectiva, tenemos que el Hamiltoniano adimensional que describe el electrón en el QR, en presencia de la impureza y un campo magnético perpendicular al plano del anillo, en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) , está dado como:

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V^{(3D)}(\rho, \varphi) + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}|}, \quad (4.8)$$

donde la separación entre el electrón y la impureza está expresada explícitamente como $|\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}| = \sqrt{\rho^2 + \xi^2 + z^2 - 2\rho\xi \cos \varphi}$. Teniendo en cuenta que los QRs autoensamblados presentan como característica particular que su altura es notablemente menor que su ancho y su radio medio, podemos entonces aplicar con confianza la aproximación adiabática A.A con el fin de separar el movimiento rápido en dirección z , del movimiento lento en el plano. En este sentido tenemos que la función de onda para el movimiento rápido del electrón en el estado base, con su respectiva energía se obtiene como solución del siguiente problema:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V^{(3D)}(\rho, z) \right] f_z(z, \rho) = E_z(\rho) f_z(z, \rho); \quad (4.9)$$

donde $f_z(\rho, z)$ y $E_z(\rho)$ son la función de onda y la energía que satisfacen el estado más bajo de un pozo cuántico rectangular infinito con ancho $d(\rho)$, considerando la distancia radial ρ como un parámetro. En este sentido tenemos que:

$$f_z(z, \rho) = \sqrt{2/\pi} \sin(\pi z/d(\rho)); \quad E_z(\rho) = \pi^2/d^2(\rho). \quad (4.10)$$

Lo que nos lleva a que las funciones propias del Hamiltoniano (4.8) pueden describirse como:

$$\Psi^{(3D)}(\rho, z, \varphi) = f_z(z, \rho) \psi^{(2D)}(\rho, \varphi) / \sqrt{\rho}, \quad (4.11)$$

siendo $\psi^{(2D)}(\rho, \varphi)$ una función de onda variacional bidimensional que describe el movimiento del electrón en el plano. De acuerdo con el principio variacional de Schrödinger, una función $\psi^{(2D)}(\rho, \varphi)$, para la cual el funcional $F[\Psi^{(2D)}] = \langle \Psi^{(3D)} | H - E | \Psi^{(3D)} \rangle$ tiene un valor estacionario, es una función propia del Hamiltoniano (4.8), por lo que al tomar la derivada funcional con respecto a $\psi^{(2D)}$ se obtiene una ecuación de la forma:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + V^{(2D)}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} - V_c(\rho, \varphi) \right] \psi^{(2D)}(\rho, \varphi) = E \psi^{(2D)}(\rho, \varphi) \quad (4.12a)$$

$$V^{(2D)}(\rho) = \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - \frac{1}{4\rho^2} + \frac{\pi^2}{h^2(\rho)} \quad (4.12b)$$

$$V_c(\rho, \varphi) = \int_0^{d(\rho)} \frac{2f_z^2(z, \rho) dz}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos(\varphi)}} \quad (4.12c)$$

En la ecuación de onda (4.12a), los dos primeros términos describen el movimiento del electrón en dirección radial bajo la influencia del potencial de confinamiento efectivo bidimensional $V^{(2D)}(\rho)$. Los dos términos siguientes corresponden a la rotación azimutal del electrón y el término $V_c(\rho, \varphi)$ describe la interacción Coulombiana efectiva del electrón con la impureza.

La ecuación general (4.12) puede aplicarse para calcular los niveles energéticos más bajos de cualquier QD con simetría axial, el cual puede presentar morfologías de disco, lente, anillo, etc. En este caso, estamos interesados en el análisis de las propiedades típicas de estructuras en forma de anillo. Para llevar a cabo la solución de nuestro problema se han considerado dos estrategias diferentes, dado que estamos interesados en analizar el efecto que tiene tanto la variación del ancho del QR, como la variación de la posición de la impureza, sobre el espectro del electrón confinado en el anillo y en presencia de un campo magnético perpendicular al plano de este. Dada la complejidad del problema, para poder realizar el análisis respecto a la variación del ancho del anillo, hemos considerado que la impureza estará localizada en el centro del QR ($\xi = 0$). Bajo esta condición, la ecuación (4.12) adquiere la forma particular de un problema de fuerza central bidimensional, para el cual, los movimientos radial y angular pueden separarse y por lo tanto la ecuación puede ser resuelta en forma exacta. En este caso la ecuación en dirección radial que se obtiene luego de separar la parte angular adquiere la forma:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - \frac{1}{4\rho^2} + \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} + \frac{\pi^2}{h^2(\rho)} + m\gamma \right] R(\rho) = E R(\rho) \quad (4.13)$$

la cual ha sido resuelta mediante el método de barrido trigonométrico (ver apéndice A) [111].

Por otra parte, para realizar el análisis de la variación de la posición de la impureza, hemos tomado otra consideración a fin de poder reducir el problema bidimensional a un problema en una dimensión. En este caso hemos considerado anillos dentro del llamado límite adiabático, es decir anillos donde no solo la altura, sino también su ancho es notablemente menor que su radio medio ($w \ll R_c$), para poder separar la variable radial de la angular con una aproximación justificada. Debido a la marcada diferencia que existe entre las escalas de los desplazamientos en dirección radial y azimutal, resulta conveniente reemplazar la variable ρ por una nueva variable adimensional x mediante la sustitución $\rho = R_c + x \cdot w/2$. Según esto, la ecuación (4.12) al ser reescalada puede escribirse como:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{H}^{(2D)} - E \right] \psi^{(2D)}(x, \varphi) = 0; \\ & H^{(2D)} = -\frac{4}{w^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}^{(2D)}(x) - \frac{1}{(R_c + wx/2)^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} - \tilde{V}_c(x, \varphi); \\ & -1 < x < +1; \quad 0 < \varphi < 2\pi; \quad \psi^{(2D)}(-1, \varphi) = \psi^{(2D)}(+1, \varphi) = 0; \quad \psi^{(2D)}(x, 0) = \psi^{(2D)}(x, 2\pi) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Aquí se han usado las notaciones $\tilde{V}^{(2D)}(x) = V^{(2D)}(R_c + x \cdot w/2)$ y $\tilde{V}_c(x, \varphi) = V_c(R_c + x \cdot w/2, \varphi)$, y se ha tenido en cuenta el hecho de que la nueva variable x toma valores entre -1 y 1 dentro del anillo. La ecuación (4.14) puede ser vista como la ecuación de Schrödinger que describe dos partículas con movimientos unidimensionales y masas $w^2/4$ y R_c^2 , respectivamente, las cuales interactúan a través del potencial $\tilde{V}_c(x, \varphi)$. Ya que una de estas masas es más pequeña que la otra, podemos aplicar el bien conocido procedimiento adiabático para separar los movimientos y resolver primero la ecuación en dirección radial:

$$\left[-\frac{4}{w^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}^{(2D)}(x) - \tilde{V}_c(x, \varphi) \right] f(x, \varphi) = E_0(\varphi) f(x, \varphi), \quad (4.15)$$

en este caso φ es tratado como parámetro. Una vez que la ecuación (4.15) ha sido resuelta y la dependencia de la energía respecto al ángulo azimutal es encontrada, entonces la solución de la ecuación (4.14) puede presentarse en la forma:

$$\psi^{(2D)}(x, \varphi) = f(x, \varphi) \Phi(\varphi) \quad (4.16)$$

donde la función variacional $\Phi(\varphi)$ describe la rotación del electrón alrededor del eje del QR. En este punto tenemos que las energías de los estados más bajos se encuentran al minimizar el siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty dx \int_{-\pi}^\pi d\varphi f(x, \varphi) \Phi(\varphi) \left[\hat{H}^{(2D)}(x, \varphi) - E \right] f(x, \varphi) \Phi(\varphi) \rightarrow \min \quad (4.17)$$

Al tomar la derivada funcional con respecto a Φ obtenemos una ecuación de onda de la forma:

$$-\frac{d}{d\varphi} \left(B(\varphi) \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} \right) - i\gamma \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} + [E_0(\varphi) - E] \Phi(\varphi) = 0; \quad (4.18)$$

$$B(\varphi) = \int_{-1}^{+1} \frac{f^2(x, \varphi)}{(R_c + wx/2)^2} dx; \quad -\pi < \varphi < \pi; \quad \Phi(-\pi) = \Phi(\pi); \quad \Phi'(-\pi) = \Phi'(\pi)$$

La función $E_0(\varphi)$ encontrada al resolver la parte radial, aparece en la ecuación (4.18) como un potencial adiabático efectivo el cual gobierna la rotación del electrón alrededor del eje. La estructura del espectro energético dado por el par de ecuaciones (4.15) y (4.18) es similar al espectro vibro-rotacional de una molécula. El conjunto de niveles vibracionales corresponden al movimiento del electrón en la dirección radial, y están dados por los diferentes potenciales adiabáticos $E_0(\varphi)$, los cuales se caracterizan por presentar una separación entre sí del orden $1/w^2$, de acuerdo con la ecuación (4.15). Cada uno estos niveles se desdobra en una serie de subniveles rotacionales con espaciamiento entre ellos del orden $1/R_c^2$ de acuerdo con la ecuación (4.18). En el presente análisis se considera solamente el grupo de los subniveles rotacionales más bajos, los cuales corresponden a las soluciones de la ecuación (4.18) para la curva más baja del potencial adiabático $E_0(\varphi)$.

La ecuación (4.15) ha sido resuelta numéricamente mediante el método de barrido trigonométrico (ver apéndice A), mientras que el problema unidimensional que se obtiene al final para la variable angular, dadas las condiciones periódicas que presenta, ha sido resuelto utilizando el método de Fourier, como se ilustra a continuación. En este caso se tiene que la función de onda para el movimiento azimutal puede definirse como una expansión en series de Fourier:

$$\Phi(\varphi) = \sum_{m=-N}^N c_m e^{im\varphi}, \quad (4.19)$$

lo cual, luego de aplicar el principio variacional de Schrödinger (4.17), lleva a que el problema (4.18) quede reducido a un problema lineal de ecuaciones algebraicas:

$$\sum_{m=-N}^N [E \delta_{m',m} - A_{m',m}] c_m = 0; \quad m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N; \quad (4.20)$$

$$A_{m',m} = m' \cdot m \cdot b_{m'-m} + v_{m'-m} - \gamma m \delta_{mm'}$$

con

$$v_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} E_0(\varphi) e^{-im\varphi} d\varphi; \quad b_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} B(\varphi) e^{-im\varphi} d\varphi; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N \quad (4.21)$$

La condición de que el anterior sistema de ecuaciones tenga una solución diferente de cero lleva a la siguiente ecuación secular de grado N :

$$\det \| E \delta_{m',m} - A_{m',m} \| = 0; \quad m', m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N \quad (4.22)$$

Diagonalizando la ecuación secular (4.22) se puede obtener el k -ésimo subnivel de energía rotacional E_k y su correspondiente grupo de coeficientes $c_m^{(k)}$, $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$. Si para el k -ésimo subnivel, el coeficiente $c_m^{(k)}$ está definido como un delta de Kronecker $c_m^{(k)} = \delta_{m,k}$, entonces dicho subnivel es un estado rotacional puro con momento angular m , en caso contrario estará definido como una superposición de varios estados rotacionales con diferente momento angular. Tenemos entonces que las funciones de onda completas de nuestro sistema están dadas por la siguiente expresión:

$$\Psi^{(k)}(\rho, z, \varphi) = \sqrt{2/\pi} \sin(\pi z/h(\rho)) f(2(\rho - R_c)/w, \varphi) / \sqrt{\rho} \sum_{m=-N}^N c_m^{(k)} e^{im\varphi} \quad (4.23)$$

Con el fin de analizar las propiedades de nuestro sistema, se pueden determinar dos cantidades muy útiles a partir de $\Psi^{(k)}(\rho, z, \varphi)$, la densidad electrónica $N_k(\vec{r}) = |\Psi^{(k)}(\vec{r})|^2$ y los coeficientes de absorción para bajas temperaturas en la aproximación dipolar usando la siguiente relación:

$$\alpha(E) = cE \sum_f \left| \langle \Psi^{(k)} | \vec{e} \cdot \vec{d} | \Psi^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(E - \Delta E^{(k)}), \quad (4.24)$$

donde \vec{d} es el operador del momento dipolar eléctrico, c es un factor constante, y $\Delta E^{(k)}$ es la diferencia de energía entre el estado inicial $|\Psi^{(0)}\rangle$ y el estado final $|\Psi^{(k)}\rangle$. Para luz polarizada circularmente, el vector de polarización complejo de un campo eléctrico externo constante $\vec{e}^\pm = (1/\sqrt{2})(1, \pm i)$ corresponde a luz polarizada circularmente a la derecha (+) e izquierda (-), respectivamente.

A continuación se presentan los resultados de los cálculos realizados para una donadora neutra en un QR en presencia de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección del eje de simetría del anillo. Primero hemos analizado el efecto del ancho del anillo sobre las oscilaciones de AB en la energía, cuando la impureza se halla localizada en el centro del QR. Para esto hemos considerado tres anillos con diferentes R_{int} en cada caso. En la figura 36 se presentan los gráficos de los ocho niveles energéticos más bajos en función de la intensidad del campo magnético γ , con parámetros geométricos $d_0 = 4\text{nm}$, $R_{\text{ext}} = 20\text{nm}$ y para tres valores diferentes de radio interno R_{int} . La reducción del radio interno de 18nm a cero, produce un cambio notable en la forma del QR, el cual pasa de ser un anillo muy delgado, a ser casi un QD con forma de lente, como puede apreciarse en las imágenes insertadas en cada gráfico. Al observar la secuencia de los gráficos (a-c), se puede apreciar como este cambio en la geometría de la estructura lleva a una modificación interesante del espectro, en especial se ve como a medida que él R_{int} se reduce, las oscilaciones en la energía del estado base se hacen menos notables y su periodo de oscilación se incrementa sustancialmente, mostrando cierta tendencia a un comportamiento parabólico, como es el comportamiento típico de un QD.

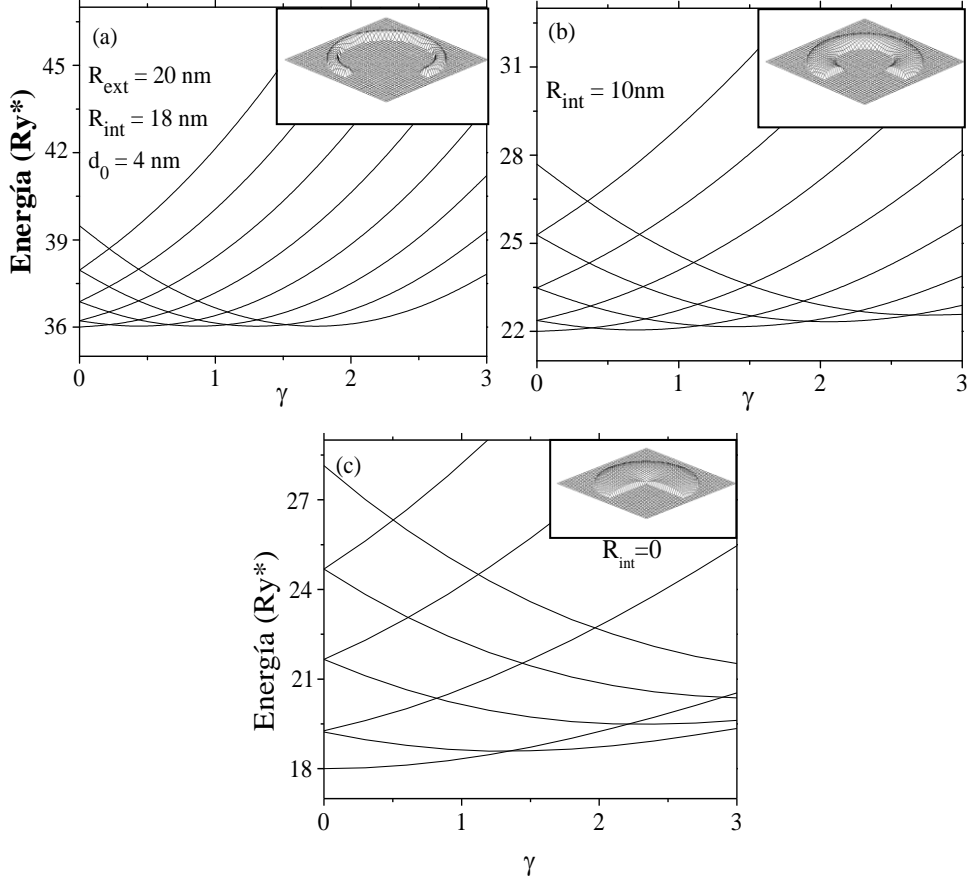


Fig. 36 Niveles energéticos más bajos en función de γ para una donadora centrada en QRs de sección transversal semi-elíptica con diferentes anchos.

Los resultados presentados en la figura 36 son exactos, mientras para el caso de una donadora descentrada nuestra metodología solo nos permite resolver el problema en forma aproximada, como se mencionó anteriormente. A continuación se muestran los resultados de los cálculos para donadoras descentradas en QR delgados ($R_i \ll R_a$), llevados a cabo en el marco de la aproximación adiabática, para analizar el efecto de la posición de la impureza sobre las propiedades espectrales. Como primera medida, con el ánimo de tener una mayor claridad sobre los cambios que se dan en el comportamiento del electrón al variar la posición de la impureza, se ha analizado la variación que sufre el potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal dado por

$$V_c(\varphi) = - \int_{R_i}^{R_e} \int_0^{h(\rho)} \frac{2f_z^2(\rho, z) \rho d\rho dz}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos\varphi + z^2}} \quad (4.25)$$

Este es el potencial efectivo que “siente” el electrón durante su movimiento azimutal. Las curvas para dicho potencial se muestran en la figura 37, para un QR con $R_c = 10a_0^*$, $w = 2a_0^*$, $d_0 = 0.5a_0^*$ y para diferentes valores de $\beta = \xi/R_c$, parámetro que está relacionado con la posición de la impureza, el cual será igual a cero para el caso de la donadora centrada, e igual a uno cuando la impureza se halle dentro del anillo a una distancia R_c del eje.

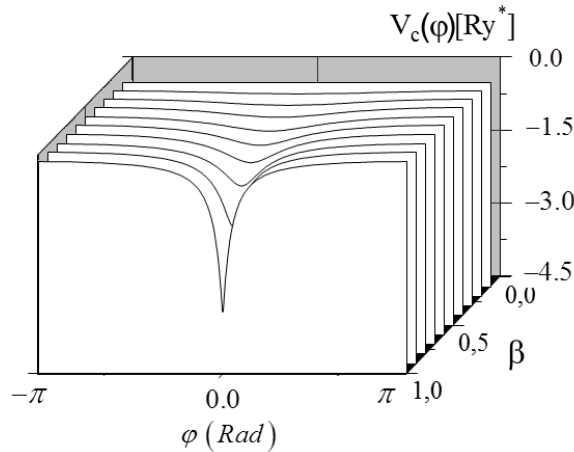


Fig. 37 Curvas del potencial efectivo para la interacción Coulombiana $V_c(\varphi)$ considerando diferentes posiciones de la impureza

En la figura (37) se puede observar como en el caso cuando β tiende a cero, es decir, cuando la impureza se aproxima al eje z , este potencial efectivo Coulombiano presenta un perfil cada vez más uniforme. Esta forma en el potencial, hace que el movimiento del electrón confinado, adquiera la forma típica de un rotor isotrópico unidimensional. Lo anterior muestra cómo la presencia de una impureza centrada o localizada lejos del QR, no introduce más que un potencial constante adicional, lo cual no produce cambios importantes sobre el comportamiento del electrón confinado. Por otro lado, cuando la impureza cargada positivamente es descentrada se produce una ruptura en la simetría rotacional del potencial efectivo; por lo tanto, para valores intermedios de β las curvas adquieren la forma típica de un pozo con un único mínimo para $\varphi=0$, el cual se hace más y más profundo en la medida en que la impureza se aproxima al interior del anillo ($\beta \rightarrow 1$). Esta ruptura de la simetría rotacional del potencial hace que el electrón tenga ahora el comportamiento típico de un rotor anisotrópico unidimensional, lo cual posibilita la aparición de efectos interesantes relacionados con la posición de la impureza. Como puede apreciarse en la figura (37), el potencial efectivo es simétrico respecto a $\varphi=0$ y además es periódico, con periodo igual a 2π radianes.

En la figura (38) se muestra la dependencia de los niveles energéticos más bajos de la donadora en función de la distancia de la impureza al eje del anillo, (a) sin y (b) con campo magnético aplicado ($\gamma=0.5$), para un QR delgado con ancho $w=2a_0^*$ y radio medio $R_c=10a_0^*$. En el grafico 38(a) se aprecia como la posición de la impureza tiene un efecto significativo sobre los niveles energéticos del electrón. Para los casos cuando $\beta \rightarrow 0$ (donadora centrada) y cuando $\beta \rightarrow \infty$ (impureza alejada fuera del anillo), el electrón confinado presenta el comportamiento típico de un rotor rígido unidimensional. Por otra parte, cuando $\beta \rightarrow 1$, un comportamiento interesante aparece en el espectro energético, se rompe la degeneración que presentan los niveles para $\beta=0$, y tiene lugar un desacople de estos en niveles pares e impares debido a la simetría par presentada por el potencial respecto a la variable angular φ . A medida que la impureza se va acercando más al QR, la separación entre los niveles pares e impares se va haciendo cada vez mayor debido a la evolución que va teniendo el perfil del pozo de potencial, el cual se va tornando cada vez más profundo y angosto, como se ve en la figura 37.

Por otro lado, la figura 38(a) también revela claramente como la posición de la impureza tiene su mayor influencia sobre la energía del estado base y algunos de los primeros estados excitados, los cuales decrecen notoriamente hacia valores mínimos cuando $\beta \rightarrow 1$. Particularmente se tiene que cuando se considera la donadora localizada dentro de un QR cuyo ancho tiende a cero, la energía del estado base tiende a $-\infty$ de manera similar a lo que ocurre con el átomo de hidrogeno en una dimensión. Por lo tanto entre más delgado sea el anillo, más bajos serán los mínimos en estas curvas. Todas estas características son el resultado del acople que existe entre el potencial Coulombiano y el potencial de confinamiento, lo cual hace que la interacción electrón- impureza dependa fuertemente de la posición de la impureza.

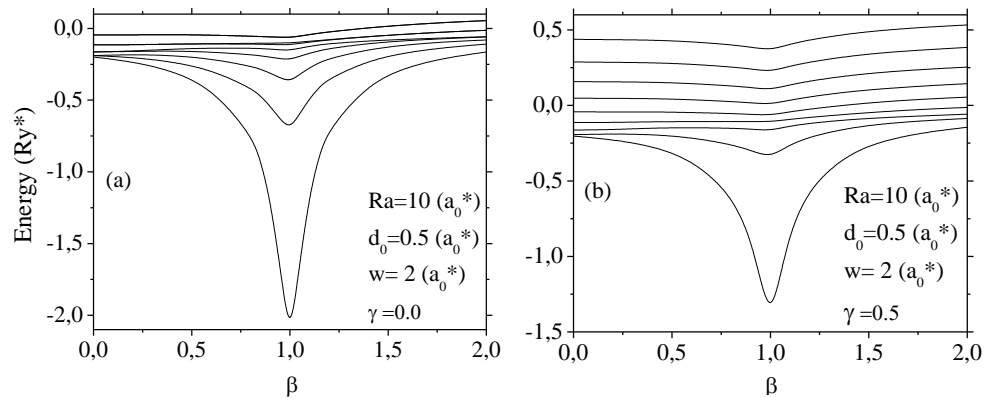


Fig. 38 Energías electrónicas como función de la distancia de la impureza al eje del QR (a) sin y (b) con campo magnético aplicado en dirección z.

En la figura 38(b) se aprecia como el efecto que tiene la posición de la impureza sobre el espectro electrónico se hace menos marcado cuando se aplica un campo magnético externo. En dicha figura puede verse como para un campo magnético relativamente débil ($\gamma = 0.5$) la mayor parte de los niveles energéticos se hacen menos sensibles a la posición de la impureza. Además se ve como el campo magnético desacopla los niveles energéticos en dos, el más bajo para momento angular negativo y el más alto para momento angular positivo.

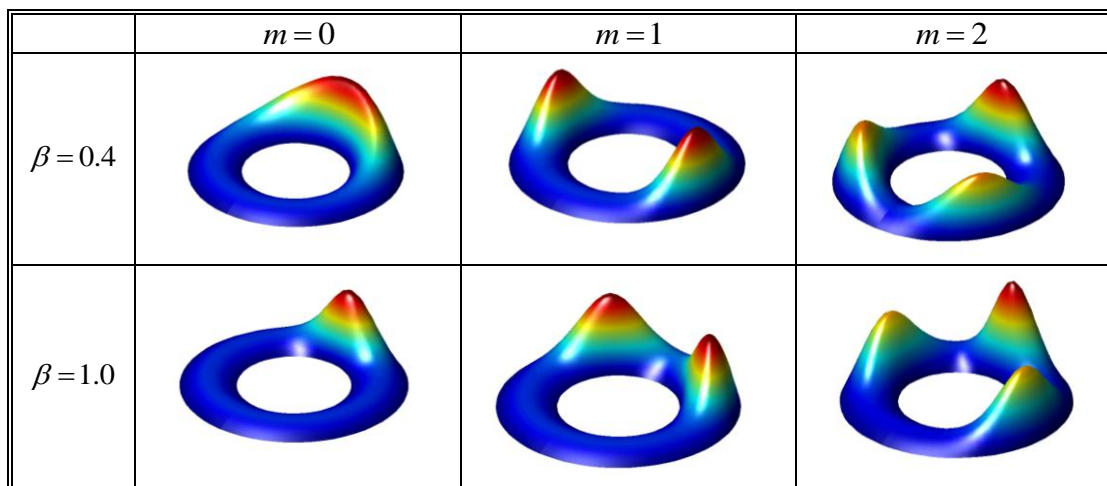


Fig. 39. Densidad de probabilidad electrónica en el plano x - y para los tres estados más bajos y para dos posiciones diferentes de la impureza, para un QR con $R_c = 10.0a_0^*$ y $w = 4.0a_0^*$

Para tener una mejor comprensión del papel que juega la posición de la impureza sobre los estados electrónicos, se ha calculado la densidad de probabilidad electrónica en el plano $x-y$ para los tres estados más bajos, considerando dos posiciones diferentes de la impureza. Estos resultados se presentan en las figura 39. Las distribuciones de probabilidad de la figura 39 muestran claramente cómo el desplazamiento de la impureza hacia el interior del QR lleva a una fuerte localización del electrón en la vecindad de la impureza, transformando por lo tanto su distribución para un movimiento rotacional alrededor del eje, en una distribución típica para un movimiento oscilatorio alrededor del punto más cercano a la impureza dentro del anillo. Lo anterior sumado al comportamiento de las curvas de energía (figura 38) son manifestaciones de la existencia de una localización tipo Anderson en sistemas de pocas partículas [118]. Además se observa como el estado que más sufre la localización es el estado base y el estado de mayor energía ($m=2$), es el menos transformado.

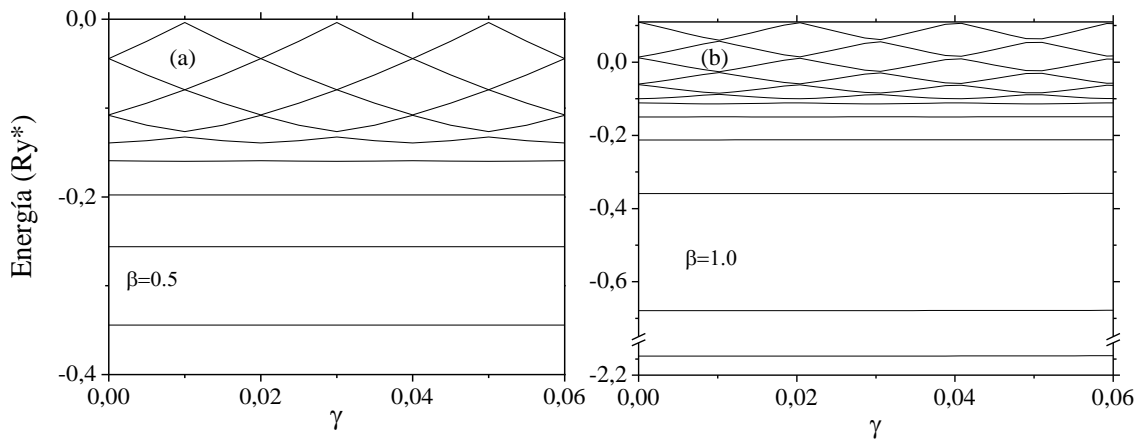


Fig. 40 Niveles energéticos más bajos en función de la intensidad del campo magnético en para una donadora descentrada en un QR con $R_c = 10.0a_0^*$ y $w = 2.0a_0^*$, para las posiciones (a) $\beta = 0.5$ y para (b) $\beta = 1.0$

Con el fin de analizar lo que ocurre con uno de los rasgos más interesantes que pueden exhibir los QRs, como son las oscilaciones de Aharonov-Bohm, cuando se encuentra presente una impureza descentrada respecto al anillo, en la figura 40 se presenta la dependencia de los niveles energéticos más bajos respecto a la intensidad del campo magnético para este caso. Llama la atención en estos gráficos el ver como la presencia de la impureza descentrada trae consigo la aparición de algunos niveles (más bajos) que no manifiestan dependencia respecto a la intensidad del campo magnético aplicado, mientras que los demás niveles (más altos) exhiben el ya antes visto comportamiento periódicamente oscilatorio en la energía, típico de un electrón o una donadora centrada en un QR de forma circular. Esta notable diferencia en el comportamiento de la energía se debe básicamente a dos regímenes que van a presentarse en el movimiento del electrón, dependiendo del estado en que se encuentre. En el primer caso, cuando se tienen estados invariantes ante la intensidad del campo magnético, el electrón se halla dentro de un régimen de movimiento oscilatorio en la vecindad de la impureza, por lo tanto estos estados serán *estados localizados*. Por otro lado, para los niveles en los cuales el comportamiento en la energía se torna periódicamente oscilatorio tenemos que el electrón se halla dentro de un régimen de movimiento rotacional a lo largo del anillo. En tal caso tenemos que los estados electrónicos serán *estados extendidos*, ya que el electrón tiene energía cinética suficiente para vencer la atracción Coulombiana y rotar completamente en el QR. Además si se comparan las figuras 40a y 40b, se observa como cuando la impureza se halla más cerca del QR

($\beta=1.0$) se presenta no solo un descenso en las energías, sino un mayor número de estados localizados.

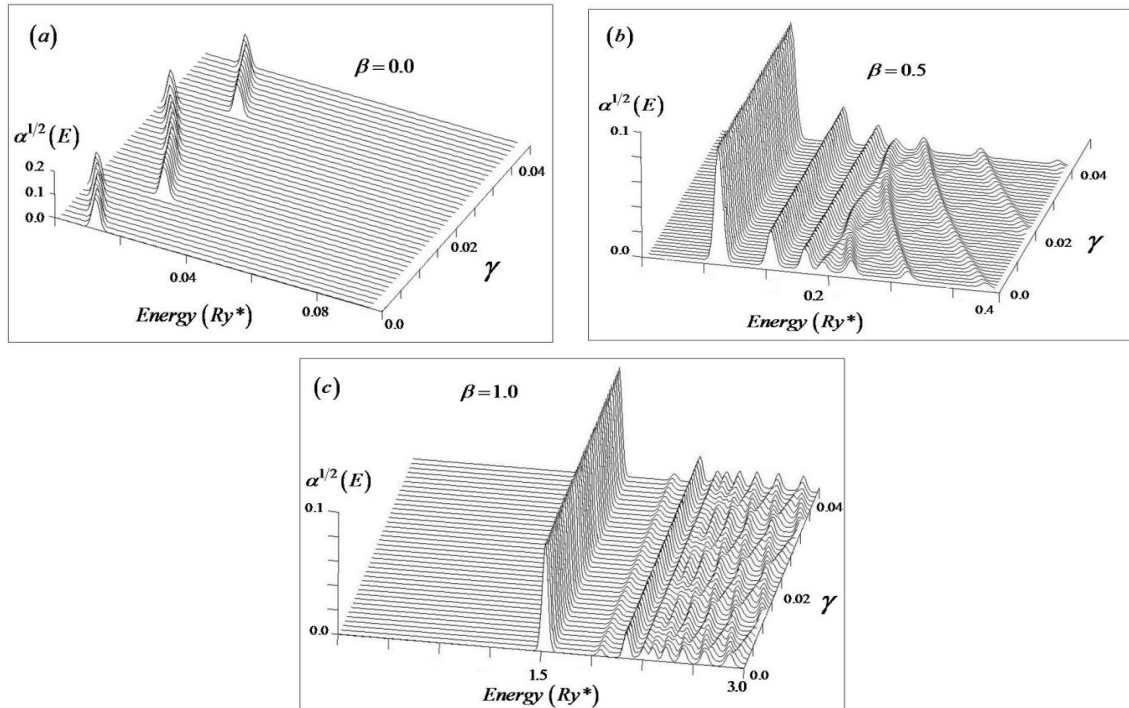


Fig. 41 Espectro infrarrojo lejano (FIR) para una donadora neutra en un QR con posición (a) $\beta=0.0$, (b) $\beta=0.5$ y (c) $\beta=1.0$. (En cada gráfico, γ se incrementa desde cero en pasos de 0.001, y se ha considerado luz polarizada circularmente a la izquierda)

Con el objeto de analizar la influencia que tiene la posición de una impureza sobre el espectro infrarrojo lejano (FIR) de un electrón en un QR, hemos graficado el correspondiente FIR para tres posiciones diferentes de la impureza. Comenzando por el caso de una D^0 centrada en el QR (Figura 41a), tenemos que el espectro energético de dicho sistema es el mismo que el presentado por un electrón, salvo un descenso que se da en las energías debido a la interacción Coulombiana electrón-ión. Por lo tanto la energía del estado base oscila respecto al campo magnético y el número cuántico azimutal m cambia como $0 \rightarrow -1 \rightarrow -2 \rightarrow \dots$, como se aprecia en la figura 36a. De acuerdo con lo anterior, se obtiene una regla de selección que determina que las únicas transiciones que se pueden dar del estado base con momento angular l , serán al estado excitado con momento angular $l \pm 1$. En este sentido el espectro FIR para la donadora centrada muestra un único pico de absorción, el cual muestra un comportamiento descendente con saltos periódicos a medida que se incrementa el campo magnético, debido a la particular regla de selección y a las oscilaciones de AB que presentan los niveles de energía. El caso cuando la impureza es descentrada tenemos que la simetría rotacional se rompe y los estados de la D^0 son ahora una mezcla de los estados de un electrón con diferente número cuántico m . En este caso debido a la mezcla de estados, las transiciones a los demás estados excitados se hacen posibles, incluso con probabilidades bastante grandes, lo cual lleva a la aparición de otros picos en el espectro FIR, como puede observarse en las figuras 41b y 41c. Otras características importantes que se aprecian en estas figuras es que la impureza puede inducir oscilaciones AB en el espectro FIR, y además su posición puede alterar notablemente la posición de los picos y las probabilidades de transición. Por otro lado se observan además algunos picos cuyas posiciones no dependen del campo magnético aplicado, estos corresponden a las transiciones

que se dan a los estados fuertemente localizados. Estos importantes cambios que se dan en el espectro FIR muestran como las propiedades ópticas del sistema pueden alterarse sustancialmente por la presencia de la impureza.

4.4 COMPLEJO D_2^+ EN UN QR DELGADO

Motivados por las posibilidades de construir sistemas nanoscópicos de dos niveles que puedan utilizarse como parte funcional en dispositivos aplicados a la optoelectrónica, la espintrónica, e incluso a las tecnologías de la información cuántica. Recientemente, se ha propuesto utilizar un sistema ionizado de dos donadoras acopladas (D_2^+) confinado en un punto cuántico [119]. Este sistema puede codificar la información lógica ya sea en el espín o en los grados de libertad de la carga del único electrón, y nos permite manipular convenientemente sus propiedades moleculares, tales como la separación que existe entre los niveles enlazante y anti-enlazante más bajos o la distribución espacial de los portadores de carga en el sistema [120]. Este hecho ha despertado el interés en qubits de carga, donde los estados lógicos están representados por los dos estados orbitales más bajos del electrón posicionado en las diferentes impurezas. El análisis teórico del sistema D_2^+ en un QD esférico ha demostrado que el confinamiento estructural puede ampliar notablemente la diferencia de energía entre los dos estados electrónicos más bajos y los demás estados excitados, lo que favorece la identificación del sistema de cuasi-dos niveles requerido para los propósitos de computación cuántica [121]. En este sentido se puede esperar que un QR con uno o dos electrones capturados y en presencia de un sistema de dos impurezas será un mejor candidato para este fin que un QD esférico, por el hecho de que las brechas entre los niveles de energía más bajos en el QR son mayores y la localización de los electrones es más fuerte. Además, un campo magnético externo aplicado a lo largo del eje da una posibilidad adicional para controlar las propiedades de los estados moleculares debido a la notable influencia que puede llegar a tener sobre el espectro energético del sistema. Motivados entonces por la posibilidad de que un sistema de dos donadoras ionizadas pueda tener un papel importante en el desarrollo de nanotecnología, hemos desarrollado un estudio teórico de las propiedades moleculares de un sistema D_2^+ confinado en un QR, el cual se expone a continuación. Además, el estudio del comportamiento cuántico del D_2^+ puede servir de base para entender mejor algunas de las propiedades de triones X^+ (excitones con carga positiva), confinados en QRs tipo II, en el caso límite cuando la masa efectiva del hueco es mucho mayor que la del electrón.

Para esta sección hemos considerado un modelo de QR circular con sección transversal de forma rectangular, definido por la expresión (4.1), con $h_p = \Delta\hbar$. Los parámetros de los materiales se han definido en la sección 4.1. El potencial de confinamiento debido a la discontinuidad de la banda de conducción en las juntas de la estructura está dado por la función $V^{(3D)}(\rho, z)$, la cual es igual a cero dentro del anillo y a infinito fuera de este. Consideraremos el caso cuando las impurezas se encuentran localizadas en el plano de la base del anillo, como se puede apreciar en la figura 42.

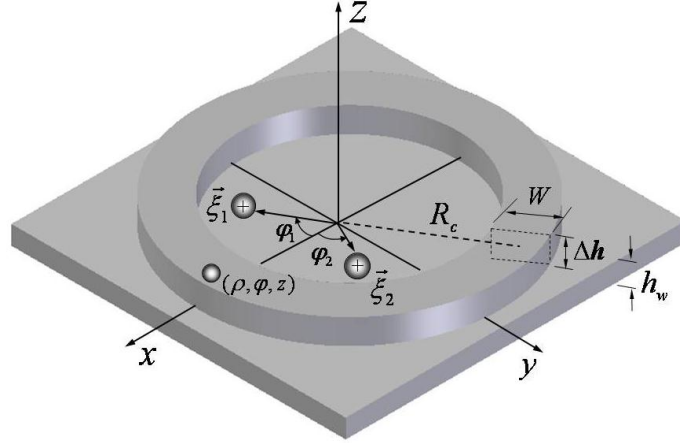


Fig. 42 Esquema de un complejo D_2^+ en un QR toroidal de sección transversal rectangular.

Según la aproximación de masa efectiva, tenemos que el Hamiltoniano adimensional que describe el electrón en el QR, en presencia del par de impurezas y un campo magnético perpendicular al plano del anillo, en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) , está dado como:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + V^{(3D)}(\rho, z) - \sum_{i=1,2} \frac{2}{|\mathbf{r} - \vec{\xi}_i|} \quad (4.26)$$

Para resolver el problema descrito por el Hamiltoniano (4.26) hemos seguido el mismo procedimiento descrito en la sección anterior para el caso de una donadora neutra en un QR. Aquí hemos calculado los niveles energéticos más bajos de un sistema de dos donadoras simplemente ionizado en un QR tridimensional de forma toroidal. El modelo del QR estudiado tiene como parámetros geométricos: radio de la línea central $R_c = 10a_0^*$, ancho $w = 1a_0^*$, espesor de la WL y altura del anillo sobre la WL, $h_w = 0.2a_0^*$ y $\Delta h = 0.2a_0^*$, respectivamente. Con el fin de ayudar al análisis del efecto que tiene la posición de las impurezas sobre la estructura del espectro energético, hemos usado dos parámetros para definir las posiciones: $\beta_i = \xi_i/R_c$, $i=1,2$, donde ξ_i es la distancia de cada donadora al centro del anillo y el ángulo $\Delta\varphi$ entre los vectores posición de las impurezas.

Inicialmente hemos calculado algunas curvas para el potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal dado por

$$V_c(\varphi) = \int_{R_i}^{\text{Re}} \int_0^{h(\rho)} \left[\frac{-2f_z^2(\rho, z) \rho d\rho dz}{\sqrt{\rho^2 + \xi_1^2 - 2\rho\xi_1 \cos(\varphi - \varphi_1)}} + \frac{-2f_z^2(\rho, z) \rho d\rho dz}{\sqrt{\rho^2 + \xi_2^2 - 2\rho\xi_2 \cos(\varphi - \varphi_2)}} \right]. \quad (4.27)$$

Los resultados cuando las donadoras se hallan localizadas en posiciones diametralmente opuestas ($\Delta\varphi = \pi$) y considerando diferentes índices de posición β_i se despliegan en la figura 43. El caso cuando los índices de posición son idénticos ($\beta_1 = \beta_2$), se muestra en la figura 43(a), mientras que el caso cuando los índices de posición son diferentes, se exhibe en la figura 43(b). En estos gráficos se puede apreciar como al desplazar las donadoras hacia el interior del QR, las curvas adquieren dos mínimos cada vez más profundos, por lo que tenemos entonces un

perfil de potencial de un pozo cuántico doble, el cual es simétrico en el primer caso y asimétrico en el segundo. La profundidad de los mínimos del potencial se hace muy pequeña cuando los índices de posición tienden a cero, y esta se incrementa drásticamente cuando el valor de los índices de posición se aproxima a uno. Por lo tanto, es posible cambiar la profundidad y la simetría del potencial Coulombiano efectivo que experimenta el electrón al rotar, al modificar la posición de las donadoras. Por otro lado tenemos que la altura y el ancho de la barrera entre los pozos puede cambiarse al variar el ángulo $\Delta\varphi$. Es claro que el ancho de la barrera coincide con el ángulo $\Delta\varphi$ entre los vectores posición de las donadoras. Así que al reducir este ángulo, puede reducirse el ancho efectivo entre los pozos. En la figura 44 se muestra la evolución en la forma del potencial Coulombiano efectivo al variar el ángulo $\Delta\varphi$. En ella se aprecia como la altura y el ancho de la barrera entre pozos se reduce cuando el ángulo entre los vectores posición tiende a cero, y se han considerado para el arreglo de las donadoras tanto el caso simétrico ($\beta_1 = \beta_2 = 0.8$), como el asimétrico ($\beta_1 = 0.7, \beta_2 = 0.8$).

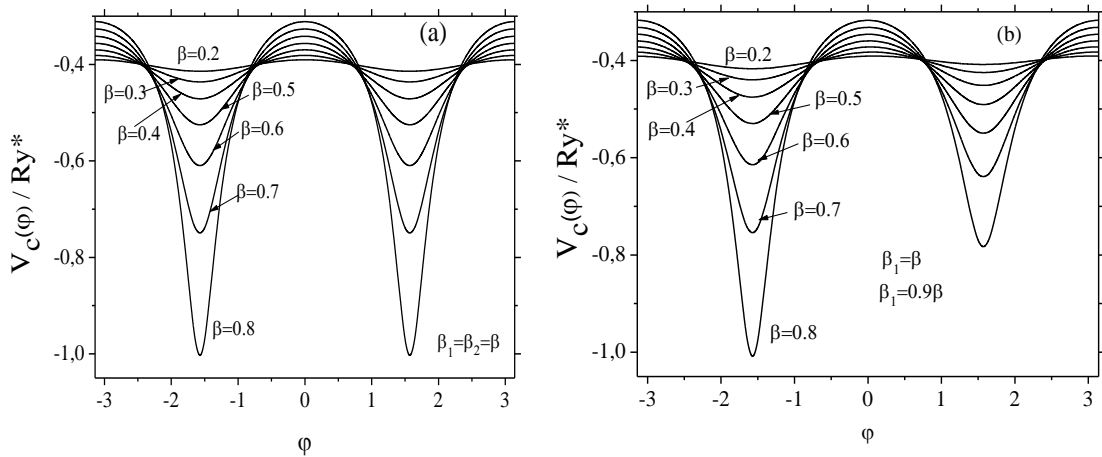


Fig. 43 Curvas del potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal para diferentes índices de posición β_i para donadoras con posiciones diametralmente opuestas (a) caso simétrico y (b) caso asimétrico.

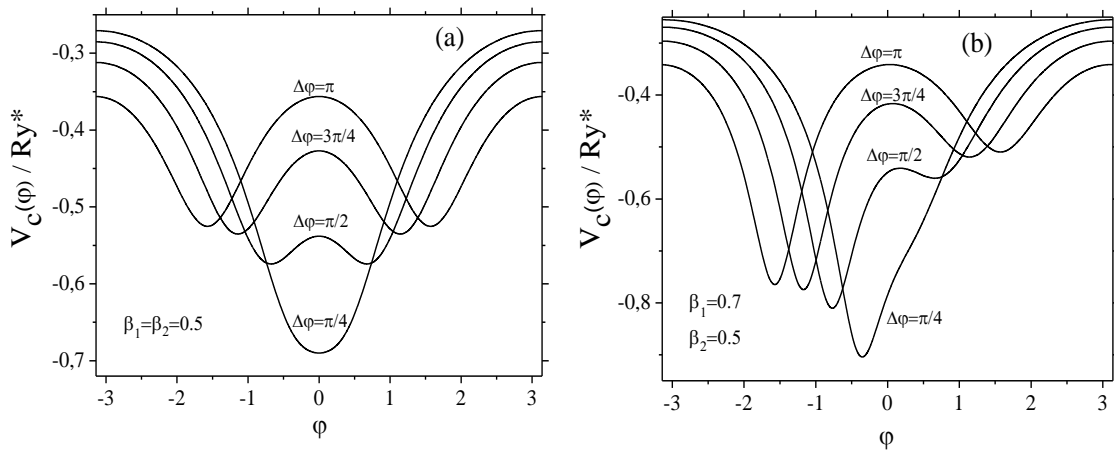


Fig. 44 Curvas del potencial Coulombiano efectivo en dirección azimutal para diferentes ángulos entre los vectores posición de las donadoras $\Delta\varphi$ considerando (a) caso simétrico y (b) caso asimétrico.

La forma del potencial Coulombiano efectivo afectará esencialmente el carácter del movimiento del electrón a lo largo del QR y por lo tanto este podrá exhibir diferentes tipos de movimiento azimutal. Si el potencial presenta pozos suficientemente profundos y la barrera entre ellos es lo suficientemente ancha, entonces el electrón estará localizado fuertemente en uno de los pozos y no podremos tener corrientes persistentes. Por otro lado, cuando el ancho o la altura de la barrera se reduce entonces la probabilidad de que el electrón túnele entre pozos se hace mayor, y cuando los pozos de potencial son poco profundos, entonces el electrón puede rotar alrededor del eje, haciendo posible la aparición de corrientes persistentes.

En lo que sigue, analizaremos el espectro energético solo para el caso cuando los índices de las posiciones de las donadoras coincidan, esto es ($\beta_1 = \beta_2 = \beta$) y por lo tanto el potencial Coulombiano efectivo tome la forma de un pozo doble simétrico. Este potencial romperá la invariancia rotacional del sistema, lo que llevará a una mezcla de los estados rotacionales puros del electrón con diferente momento angular, y por consiguiente a la transformación de los niveles rotacionales más bajos en niveles vibracionales, tal como en el caso de una única impureza. Cuanto más cercanas estén las impurezas de la línea central del QR, mayor será la altura de la barrera entre los pozos, por lo tanto más fuerte será la mezcla de los estados rotacionales y mayor el número de estados localizados que aparecen.

Las energías de algunos de los niveles más bajos de un complejo D_2^+ en función del parámetro β , para donadoras con posiciones diametralmente opuestas se han graficado en la figura 45(a) y para donadoras con ángulo ($\Delta\varphi = \pi/5$), entre sus vectores posición se presentan en la figura 45(b). Se ve como en ambos casos, las energías del estado base y algunos de los estados excitados más bajos dependen apreciablemente de las posiciones de las impurezas. Cuando las donadoras son desplazadas del centro del QR hacia su interior, la distancia promedio entre el electrón y los iones disminuye y por lo tanto las energías de estos estados decrecen debido al incremento de la atracción electrón-iones hasta que alcanzan un valor mínimo cuando las donadoras se ubican sobre la línea central, es decir cuándo $\beta = 1.0$.

Este incremento de la atracción electrón-ión cuando las donadoras son desplazadas hacia la línea central convertirá los estados electrónicos rotacionales que tienen menor energía cinética en estados localizados. Entre menor sea la energía cinética del electrón, mayor será la localización y el descenso en el nivel de energía. Por lo tanto, la mayor separación entre niveles sucesivos se da entre el estado base y el primer estado excitado, tal como se puede apreciar en la figura 45. También podemos observar que el cambio en las posiciones de las impurezas alcanza a tener un débil efecto sobre los niveles más altos, cuyas energías cinéticas son mayores que la energía de atracción entre el electrón y los iones. Estos estados corresponden a niveles rotacionales ubicados por fuera de los pozos de potencial, y sus respectivas funciones de onda son similares a aquellas para los correspondientes estados rotacionales puros.

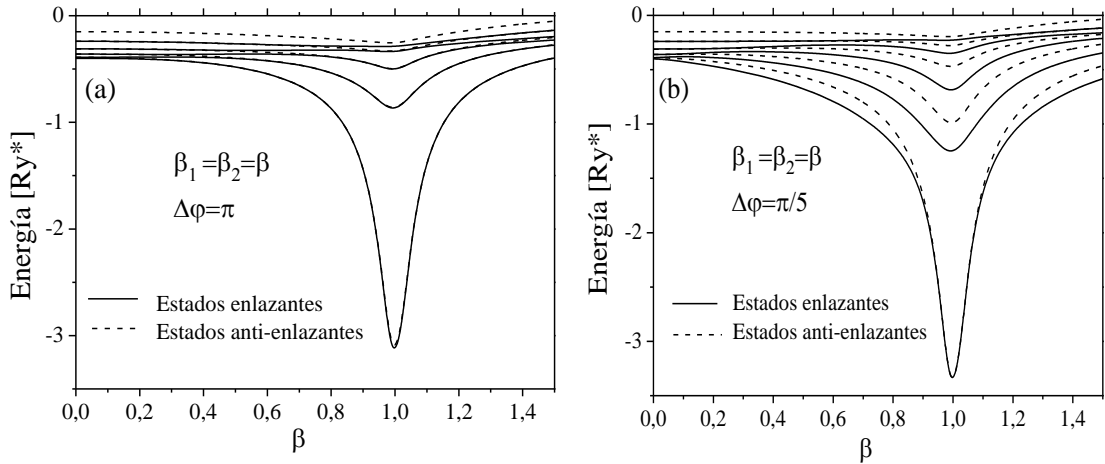


Fig. 45 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función del índice de posición β para dos valores diferentes del ángulo $\Delta\varphi$.

Debido a la estructura de pozo doble simétrico que presenta el potencial, todos los niveles de energía se desacoplan en pares de subniveles como se ve en la figura 45, subniveles enlazantes (líneas solidas) y subniveles anti-enlazantes (líneas a trazos). Para el caso de las donadoras localizadas diametralmente opuestas, este desdoblamiento se hace casi imperceptible como se ve en la figura 45(a), mientras que cuando el ángulo $\Delta\varphi$ entre los vectores posición de las impurezas decrece hasta $\pi/5$, el desdoblamiento se hace notable y dependiente de la posición de las impurezas, tal como se advierte en la figura 45(b). Este comportamiento se debe al hecho de que el ancho de la barrera entre pozos se reduce cuando $\Delta\varphi$ disminuye, lo que lleva a que la probabilidad de tunelamiento a través de la barrera aumente y por lo tanto a que el desdoblamiento de los niveles se haga más notorio.

En la figura 46 se despliegan algunos de los niveles más bajos en función del ángulo $\Delta\varphi$ entre los vectores posición de las impurezas para dos valores diferentes del índice de posición β . Se observa como la separación entre cada par de subniveles, enlazante y anti-enlazante, se incrementa cuando el ángulo $\Delta\varphi$ decrece, y también se distingue como cuando las donadoras tienden a estar localizadas diametralmente opuestas, esto es cuando $\Delta\varphi \rightarrow \pi$, los dos subniveles se funden en uno, configurándose de esta manera un sistema de dos pozos aislados. A medida que el ángulo $\Delta\varphi$ se reduce, el ancho de la barrera que separa los pozos disminuye, lo cual incrementa la probabilidad de tunelamiento del electrón trayendo consigo la posibilidad de que ocurra intercambio electrónico entre pozos y un desdoblamiento en cada nivel de energía. Además al comparar las figuras 46(a) y 46(b) se aprecia como al ser mayor el índice de posición, el desacople de los niveles es menor, lo cual es completamente valido, ya que cuanto más cerca se encuentren las impurezas del anillo mayor será la altura de la barrera, tal como se pudo determinar en la figura 43.

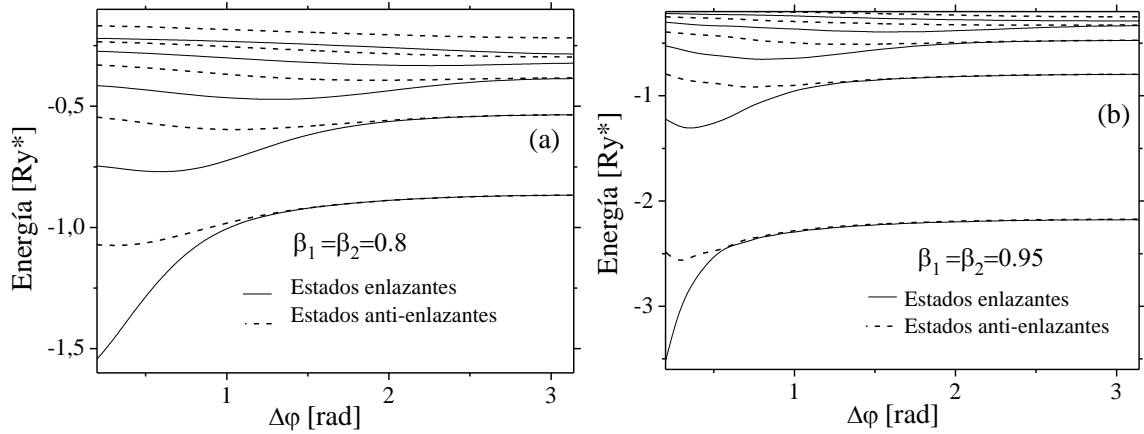


Fig. 46 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función del ángulo $\Delta\varphi$ para dos valores diferentes del índice de posición β

A continuación, en la figura 47, se muestran algunos de los niveles de energía más bajos en función de la intensidad del campo magnético, considerando diferentes índices de posición β y diferentes ángulos $\Delta\varphi$, entre los vectores posición de las impurezas. Al igual que cuando se analizó el caso de una sola impureza en la sección anterior, en este caso tenemos de igual manera que cuando las donadoras se encuentran muy cercanas al eje de simetría del QR, el potencial Coulombiano efectivo se mantiene casi homogéneo al realizar un barrido respecto al ángulo azimutal. Por lo tanto, las curvas de energía en función del campo magnético deben ser muy similares a las que se obtienen para el electrón, salvo un descenso constante que se da en todos los niveles debido a la interacción electrón-iones, como se observa en la figura 47(a).

Como ya se comentó antes, cuando las donadoras son desplazadas desde el eje hacia el interior del QR, manteniendo el ángulo $\Delta\varphi$ fijo en π , el perfil del potencial Coulombiano efectivo adquiere la forma de un doble pozo simétrico cada vez más profundo. Este cambio en el potencial se manifiesta en las curvas de energía desplegadas en la figuras 47(a)-(c), como una separación que surge entre parejas de algunos de los niveles, comenzando por los dos más bajos y continuando hacia los más altos. Se puede apreciar como al aumentar β , esta brecha de separación se hace cada vez mayor entre cada par de niveles, mientras que estas duplas, conformadas por un estado enlazante y otro anti-enlazante, se mantienen entrelazadas y ondulan con el mismo periodo pero con amplitud de oscilación cada vez menor. En las figuras de la derecha, esto es, las figuras 47(d)-(f), se aprecia el efecto que tiene la reducción del ángulo $\Delta\varphi$ sobre el espectro energético en función del campo magnético. Como rasgo principal se puede destacar el hecho de que todas las parejas de niveles entrelazados que aparecieron al aumentar el índice de posición, ahora se han desacoplado, quedando separados los estados enlazantes de los anti-enlazantes, lo cual está en concordancia con la forma que adquiere el potencial Coulombiano efectivo, ya que para un ángulo $\Delta\varphi = \pi/5$, el par de pozos que se tenían del caso anterior se funden en un único pozo (ver figura 44a). Por otro lado, se observa que el carácter oscilante que estaba presente en el caso anterior para los pares de niveles acoplados, ahora ha desaparecido casi completamente, quedando solo una ligera huella de ello en los estados desacoplados poco profundos. Lo anterior se debe a que en esta configuración el sistema se asemeja lo suficiente al caso de una única donadora, para el cual los estados más bajos son insensibles al campo magnético.

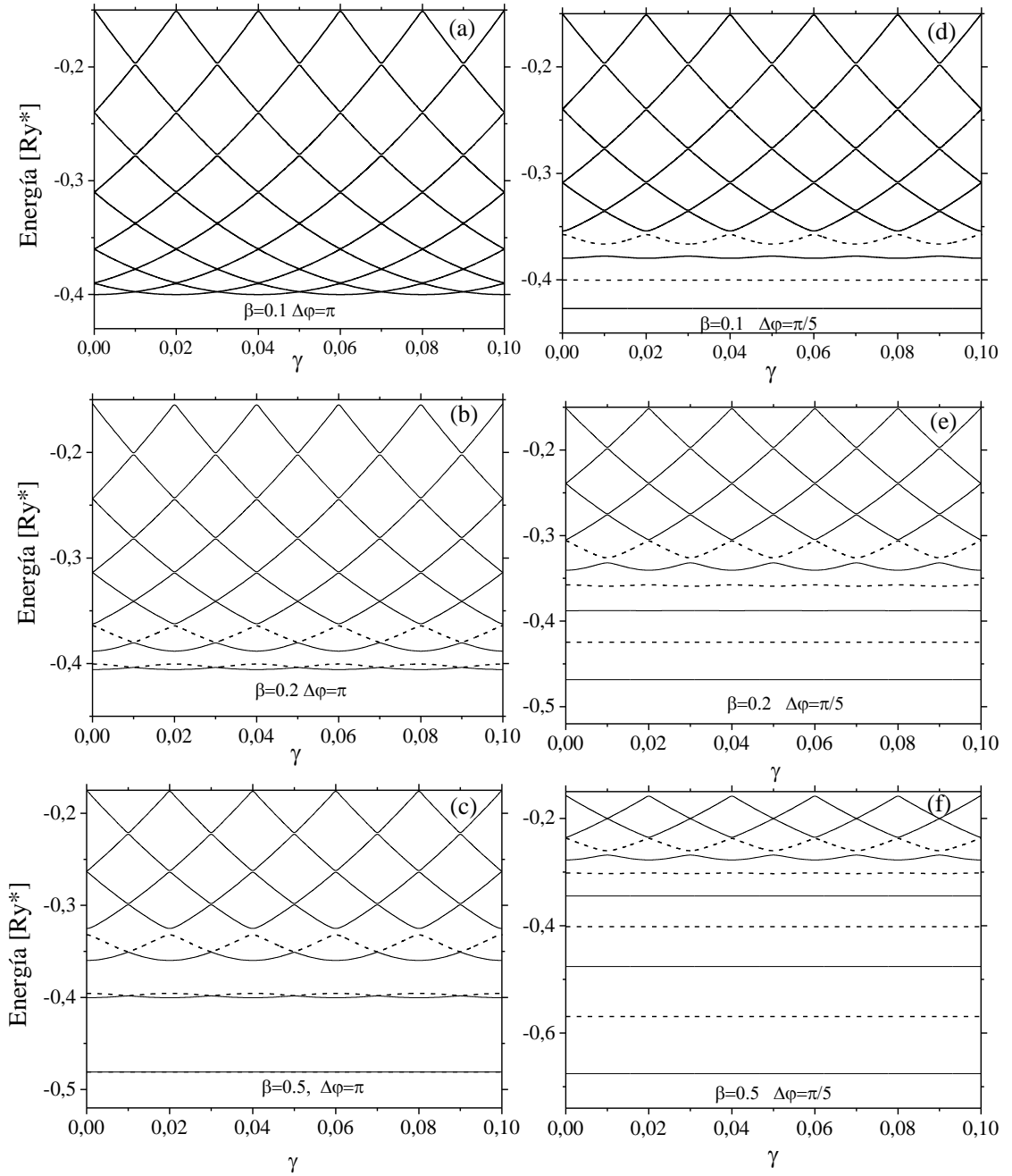


Fig. 47 Energías de algunos de los estados más bajos de una D_2^+ confinada en un QR en función de la intensidad del campo magnético aplicado, considerando valores diferentes del índice de posición β y del ángulo $\Delta\varphi$.

Con el objeto de analizar la influencia que tiene la posición de las impurezas sobre el espectro infrarrojo lejano (FIR) de un electrón en un QR, hemos graficado el correspondiente FIR para cuatro índices de posición de la impureza diferentes. Comenzando por el caso de las donadoras localizadas en el centro del QR (Figura 41a), tenemos que el espectro FIR de dicho sistema es el mismo que el presentado por un electrón o el de una donadora centrada, donde se observa el único pico de absorción que permite la regla de selección. El pico sufre un salto positivo en la energía cuando la intensidad del campo magnético adquiere los siguientes valores $\gamma = 1/R_c^2, 3/R_c^2, 5/R_c^2, \dots$, tal como se observa en la figura 41(a).

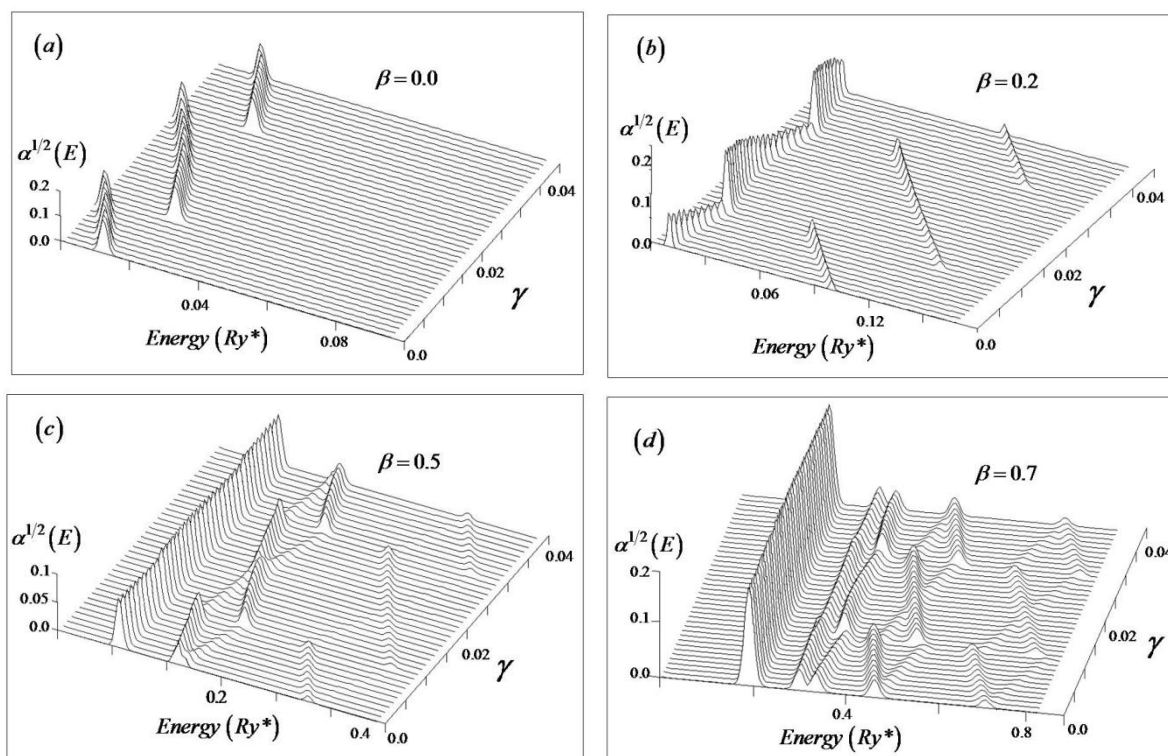


Fig. 48 Espectro infrarrojo lejano (FIR) para un complejo D_2^+ en un QR con ángulo $\Delta\varphi = \pi$ e índices de posición (a) $\beta = 0.0$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 0.5$ y (d) $\beta = 0.7$. (En cada gráfico, γ se incrementa desde cero en pasos de 0.001, y se ha considerado luz polarizada circularmente a la izquierda)

En el caso cuando las impurezas son desplazadas del eje de simetría hacia el interior del anillo (figuras 48b-d) se observa una importante transformación del espectro FIR debido a la mezcla de estados que tiene lugar por la presencia de las impurezas, tal como se analizó en la sección anterior para el caso de la D^0 . Una de las características más importantes que se aprecia en estas figuras es el hecho de que las impurezas descentradas inducen un desacople de cada pico de absorción en dos, con el incremento del campo magnético. Lo anterior lleva a que el espectro FIR adquiera una forma particular de parejas de picos que oscilan periódicamente respecto a la intensidad de campo magnético, excepto para los estados más bajos, los cuales resultan invariantes respecto al campo. Estos picos cuyas posiciones no dependen del campo magnético aplicado corresponden a las transiciones que se dan a los estados fuertemente localizados. En general puede anotarse que estos importantes cambios que se dan en el espectro FIR, muestran como las propiedades ópticas del sistema pueden alterarse sustancialmente por la presencia de impurezas en la vecindad del QR, y por la configuración de posiciones que estas presenten.

4.5 UNA IMPUREZA D^- EN UN QR DELGADO

Para este análisis se considerara un QR de forma toroidal, como se muestra en la figura 49, el cual presenta los mismos parámetros físicos descritos en la sección 4.1 en la primera parte. Nuestro modelo de QR es generado por la revolución de una sección transversal

circular de radio R_t alrededor del eje z , donde dicha sección está centrada a la distancia media R_a del eje de giro.

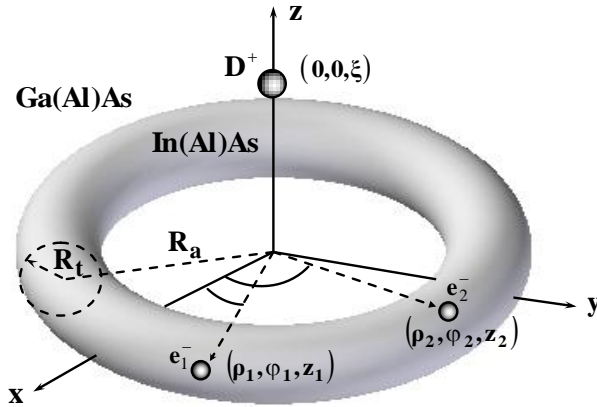


Fig. 49 Esquema de una D^- confinada en un anillo cuántico de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ de forma toroidal.

En este caso se tiene una D^- , la cual puede describirse como un sistema compuesto por una impureza donadora cargada positivamente y dos electrones. Se supone la impureza centrada, la cual puede estar localizada sobre cualquier punto del eje de simetría (z), y su posición está dada por la distancia ξ a lo largo de dicho eje. El potencial de confinamiento del QR está definido como cero dentro del QR, y $V_0 = 258meV$ fuera de este. Para este modelo, se analizarán los estados más bajos del sistema, por lo que se considerará que los electrones permanecerán siempre en el interior del QR. En el marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional del sistema en coordenadas cilíndricas está dado como:

$$H = \sum_{i=1}^2 H_0(\vec{r}_i) + \frac{2}{r_{12}}, \quad (4.28)$$

$$H_0(\vec{r}_i) = -\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \rho_i \frac{\partial}{\partial \rho_i} - \frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_i(\rho_i, z_i) - \frac{2\tau}{\sqrt{\rho_i^2 + (z_i - \xi)^2}},$$

donde r_{12} es la separación entre los dos electrones, y $V_i(\rho_i, z_i)$ es el potencial de confinamiento para el i -ésimo electrón. Se ha introducido el parámetro τ con el propósito de poder considerar el problema de la D^- , para el cual $\tau = 1$, y adicionalmente el problema de dos electrones en el QR, para el cual $\tau = 0$. Considerando que el par de electrones permanecerá prácticamente siempre dentro del anillo debido al confinamiento y teniendo que $R_t \ll R_a$, se puede hacer la siguiente sustitución $\rho_i = R_a + x_i$, con $x_i = \tilde{\rho}_i \cos \theta_i$, donde se tiene que $x_i \ll R_a$. Con base en la anterior sustitución, el Hamiltoniano (4.28) se puede escribir en forma aproximada como sigue:

$$H = \sum_{i=1}^2 H_0(r_i) + \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2 + 4R_a^2 \sin^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right)}}, \quad (4.29)$$

$$H_0(r_i) = -\frac{1}{\tilde{\rho}_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_i} \tilde{\rho}_i \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_i} - \frac{1}{\tilde{\rho}_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} - \frac{1}{Ra^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + V_i(\tilde{\rho}_i) + V_{Ne}(\tilde{\rho}_i, \theta_i),$$

para lo cual se han introducido coordenadas polares $(\tilde{\rho}, \theta)$ para la sección transversal, como se muestra en la figura 50, donde $\tilde{\rho}^2 = z^2 + x^2$ y $x = \tilde{\rho} \cos \theta$, además de la coordenada azimutal (φ) alrededor del eje z .

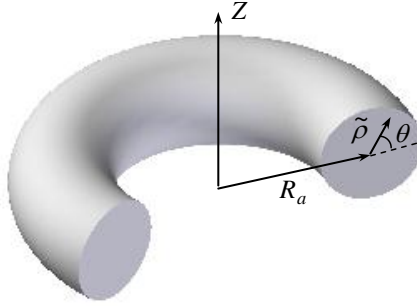


Fig. 50 Esquema del anillo en las nuevas coordenadas polares

Aquí, el potencial de confinamiento para el i -ésimo electrón en estas nuevas coordenadas está dado como:

$$V_i(\tilde{\rho}_i) = \begin{cases} 0 & ; \tilde{\rho}_i < R_i \\ V_0 & ; \tilde{\rho}_i > R_i \end{cases}, \quad (4.30)$$

y el potencial de interacción Coulombiana entre cada electrón y el núcleo de la donadora está dado por la siguiente expresión:

$$V_{Ne}(\tilde{\rho}_i, \theta_i) = -\frac{2\tau}{\sqrt{(R_a + \tilde{\rho}_i \cos \theta_i)^2 + (\tilde{\rho}_i \sin \theta_i - \xi)^2}} \quad (4.31)$$

La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (4.29) no es separable debido al potencial de repulsión entre los dos electrones, el cual presenta dependencia de cuatro variables $\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \varphi_1, \varphi_2$. Lo anterior hace que resulte imposible obtener una solución analítica. Por lo tanto, se debe aplicar el procedimiento de la aproximación adiabática para realizar una separación de variables en forma aproximada. Dicha aproximación toma ventaja de la clara diferencia que se tiene entre las dimensiones transversal y longitudinal del QR, de la misma manera que se hizo en las secciones precedentes 4.3 y 4.4. Lo anterior hace posible que el movimiento de cada uno de los electrones dentro del anillo pueda descomponerse en dos, un movimiento transversal rápido, y un movimiento rotacional lento en dirección azimutal. La solución correspondiente al movimiento transversal rápido de cada uno de los dos electrones, nos da una función de onda en términos de exponenciales complejas para la componente angular θ y de funciones de Bessel para la dirección radial $\tilde{\rho}$, como se muestra a continuación:

$$f_f(\tilde{\rho}, \theta) = f_f(\tilde{\rho}) f_f(\theta) \quad (4.32)$$

donde la parte angular de la función de onda para el movimiento trasversal rápido tiene la forma

$$f_f(\theta) = \exp(in\theta); n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.33)$$

y la parte radial está definida como

$$f_f(\tilde{\rho}) = \begin{cases} J_0(k\tilde{\rho}) & ; \tilde{\rho} < R_t \\ \frac{J_0(kR_t)}{K_0(\chi R_t)} K_0(\chi\tilde{\rho}) & ; \tilde{\rho} > R_t \end{cases} \quad \text{con: } k = \sqrt{E_f} \text{ y } \chi = \sqrt{V_0 - E_f} \quad (4.34)$$

Los valores que corresponden a la energía para el movimiento del electrón en la sección transversal (E_f) son hallados de la ecuación trascendente:

$$k \frac{J_1(kR_t)}{J_0(kR_t)} - \chi \frac{K_1(\chi R_t)}{K_0(\chi R_t)} = 0 \quad (4.35)$$

En nuestro análisis, como ya se mencionó anteriormente, sólo se considerarán los estados más bajos, por lo tanto, sólo se calculará el primer nivel para el movimiento transversal, mientras que para el movimiento azimutal se tomarán algunos de los niveles más bajos. Ahora, la parte del Hamiltoniano que corresponde al movimiento azimutal lento del par de electrones a lo largo del anillo, queda expresada como:

$$H_a = -\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} + V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2) + 2V_{Ne}. \quad (4.36)$$

Aquí el potencial efectivo de la interacción electrón-electrón $V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2)$ es expresado como sigue:

$$V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2) = 2 \int_0^\infty \tilde{\rho}_1 f_0^2(\tilde{\rho}_1) d\tilde{\rho}_1 \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho}_2 f_0^2(\tilde{\rho}_2) d\tilde{\rho}_2}{\sqrt{\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2 + 4R_a^2 \sin^2[(\varphi_1 - \varphi_2)/2]}}, \quad (4.37)$$

y el potencial efectivo de interacción Coulombiana entre cada electrón y el núcleo de la donadora esta dado por la siguiente expresión:

$$V_{Ne} = -2\tau \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho} f_0^2(\tilde{\rho}) d\tilde{\rho}}{\sqrt{(R_a + \tilde{\rho} \cos \theta)^2 + (\tilde{\rho} \sin \theta - \xi)^2}}, \quad (4.38)$$

donde $f_0(\tilde{\rho})$ es la componente radial de la función de onda para el estado base, la cual está expresada en términos de funciones de Bessel. Por otro lado, el Hamiltoniano (4.36) puede hacerse separable, si se introduce una coordenada de centro de masa $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$, y una coordenada angular relativa $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, para describir el movimiento azimutal de los dos

electrones en el QR. Después de hacer la transformación de coordenadas, el Hamiltoniano (4.36) adquiere la siguiente forma:

$$H_a = -\frac{1}{2R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} - \frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_{ee}(\varphi) + 2V_{Ne}. \quad (4.39)$$

Aquí el potencial efectivo V_{Ne} , es un término constante, el cual varía sólomente al mover la impureza, o al cambiar los parámetros geométricos del anillo. El potencial efectivo de la interacción electrón-electrón $V_{ee}(\varphi)$ es un potencial unidimensional, el cual sólo depende de la posición angular relativa del par de electrones. El Hamiltoniano (4.39) es separable, y la parte correspondiente a la coordenada del centro de masa presenta la forma de un rotor rígido unidimensional, por lo tanto, el problema de valores propios correspondiente se reduce a la siguiente ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2 \Phi_{m,s}(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \left[\frac{M^2}{2R_a^2} + V_{ee}(\varphi) + V_{Ne} \right] \Phi_{m,s}(\varphi) = E(M, m, s) \Phi_{m,s}(\varphi), \quad (4.40)$$

donde la función de onda correspondiente se expresa en forma de producto:

$$\Psi_{M,m,s}(\varphi_1, \varphi_2) = e^{iM\Theta} \Phi_{m,s}(\varphi) \quad (4.41)$$

Los tres números cuánticos que aparecen aquí están relacionados con el momento angular del centro de masa M , con las rotaciones relativas m , donde $(M, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ y con s como el número cuántico que define la paridad, donde las soluciones pares ($s = +$), corresponden a estados singletes y las soluciones impares ($s = -$), corresponden a estados tripletes. La ecuación (4.40) se resuelve mediante el método de barrido trigonométrico (ver apéndice A).

Con el propósito de controlar la precisión de nuestro procedimiento numérico, primero se han calculado las energías de algunos de los niveles más bajos para dos electrones confinados en un QR casi unidimensional. Aprovechando el hecho de que para este problema se encontró una solución exacta para el caso límite cuando el radio de la sección transversal del anillo tiende a cero, es decir cuando el QR es unidimensional [67], se ha realizado un comparación entre nuestros resultados y los de dicho trabajo, los cuales se muestran en la figura 51.

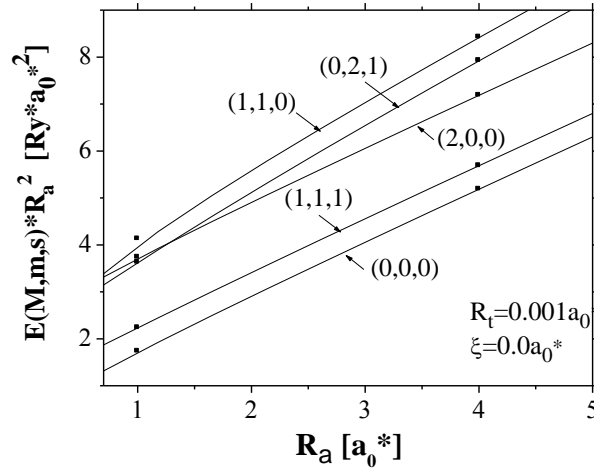


Fig. 51 Energías normalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un anillo casi-unidimensional. Las líneas sólidas son nuestros resultados, y los rectángulos negros son puntos tomados de la referencia [67]

En la figura 51 se muestran las energías renormalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones confinados en un QR muy delgado ($R_t = 0.001a_0^*$), en función del radio medio del anillo. Se han comparado nuestros resultados (líneas sólidas), con los resultados obtenidos para un modelo unidimensional el cual tiene solución exacta (rectángulos negros) Ref. [67]. Se ve una concordancia excelente entre nuestros resultados y los obtenidos mediante la solución exacta.

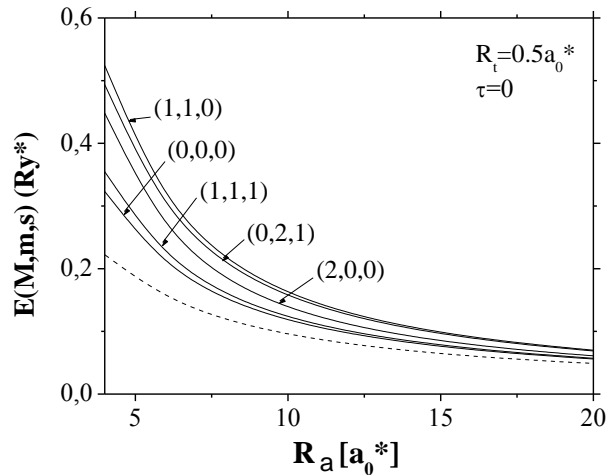


Fig. 52 Energías para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_t = 0.5a_0^*$. La línea punteada muestra la energía de dos electrones congelados en los lados diametralmente opuestos del anillo.

En la figura 52 se presentan los resultados de los cálculos de las energías para dos electrones en un QR de ancho finito, cuya sección transversal tiene un radio $R_t = 0.5a_0^*$. Adicionalmente, se ha graficado en línea punteada la energía de una estructura congelada hipotética, constituida por dos electrones, los cuales están fijos en puntos diametralmente opuestos y a la máxima distancia posible dentro del anillo. Lo anterior, con el objeto de aclarar la forma como cambian las contribuciones de energía cinética y potencial en la energía total de los diferentes estados.

El valor de la energía para la estructura de los dos electrones congelados se ha estimado como $E \approx 2/(2R_a + 2R_t)$. Debido a que la diferencia entre las líneas sólidas y la línea punteada representa aproximadamente la energía cinética correspondiente a cada uno de los estados, puede observarse, que la contribución de la energía cinética llega a ser menor y menos significativa a medida que el radio medio del anillo aumenta, y a la vez, la estructura electrónica se hace cada vez más parecida a la estructura congelada. Con base en lo anterior, se puede afirmar que el efecto de la correlación electrónica se refuerza a medida que el radio del anillo se incrementa, y este llega a ser predominante para un radio de $20a_0^*$.

Para llevar a cabo el análisis de la D^- , hemos comenzado por realizar el cálculo de las energías para algunos de los niveles más bajos cuando la impureza se halla en el centro de un QR con radio transversal $R_t = 0.5a_0^*$, en función del radio medio del anillo. Estos resultados se presentan en la figura 53.

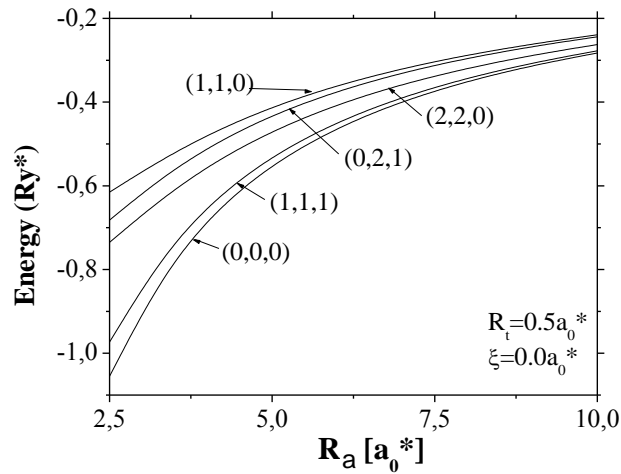


Fig. 53 Energías para los cinco estados más bajos de una D^- centrada en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_t = 0.5a_0^*$.

Es bien sabido que el ión negativo del hidrógeno, el cual es matemáticamente análogo de una donadora cargada negativamente en un semiconductor en bloque, presenta un único estado ligado con energía igual a $-1.055Ry^*$. En nuestro caso, los dos electrones están confinados dentro del anillo, y ninguno de ellos puede escapar del pozo, a pesar de la repulsión presente entre estos; por lo tanto, para la D^- confinada en esta heteroestructura es posible la aparición de estados ligados adicionales. Se puede ver en la figura 52 que cuando el radio medio del anillo se reduce, las energías de todos los niveles decrecen en forma monótona, y la energía del estado base tiende exactamente al valor correspondiente para la D^- en el bloque, $-1.055Ry^*$. Esto es debido a que la energía de atracción se incrementa cuando la separación entre el núcleo de la donadora y los electrones se reduce, y cuando el radio medio del anillo llega a ser aproximadamente de un par de radios de Bohr efectivos, esta separación es similar a la de una D^- en el bloque. También se puede observar que la separación entre diferentes niveles de energía decrece cuando el radio se incrementa. De la ecuación (60) es claro ver que las contribuciones, de las rotaciones relativas y del centro de masa, a la energía total, decrecen en forma inversamente proporcional al cuadrado del radio medio del anillo. Por lo tanto, las

diferencias entre las energías de los diferentes niveles con diferentes números cuánticos M y m , proporcionales a M/R_a^2 o m/R_a^2 , llegan a ser cada vez más insignificantes cuando el radio medio del anillo se incrementa.

Con el ánimo de analizar el efecto que tendrá el desplazamiento de la impureza a lo largo del eje de simetría sobre el espectro energético del sistema, en la figura 54 se muestra la variación de las energías, para los cinco estados más bajos, cuando se desplaza la impureza a lo largo del eje z .

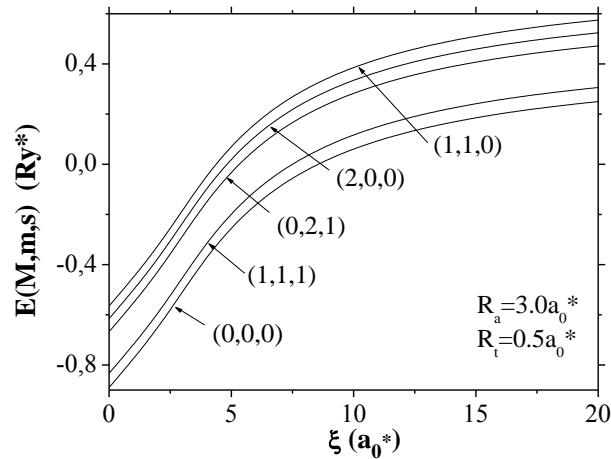


Fig. 54 Energías para los cinco estados más bajos de una D^- centrada en función de la distancia al plano del anillo, para un QR con $R_t = 0.5a_0^*$.

Cuando la impureza se desplaza a lo largo del eje alejándose del anillo, la separación entre esta y los electrones se incrementa, ya que estos permanecen dentro del anillo, independientemente de la posición de la impureza. Esta es la razón por la cual todos los niveles en la figura 54 crecen a medida que la impureza se aleja del plano de simetría del anillo. Este crecimiento inicialmente es significativo, pero cuando la separación entre la impureza y el plano del anillo llega a ser mayor que $20a_0^*$, la razón de crecimiento se reduce considerablemente, notándose la poca interacción que tiene entonces con los electrones.

4.6 UN EXCITÓN X EN UN QR DE FORMA IRREGULAR

Sin duda alguna, uno de los sistemas de pocas partículas que gozan de mayor atención en lo que se refiere al estudio de nanoestructuras en forma de anillo, es el excitón. Es un hecho que la existencia de las oscilaciones AB de excitones neutros en QRs tipo I, esto es, cuando ambas partículas están confinadas en el anillo, sigue siendo aún hoy, motivo de controversia. Esto se debe a que algunos trabajos predicen que las oscilaciones AB pueden ser muy débiles o incluso pueden no aparecer para un anillo de ancho finito [90,91]. Por otro lado, algunos cálculos teóricos [92-94] determinan que para el caso de QRs tipo II, es más factible la observación de las oscilaciones AB debido a la asimetría presente en el confinamiento efectivo para el electrón y el hueco. Esto lleva a que el electrón y el hueco recorran trayectorias con

diferentes radios efectivos y por lo tanto, después de dar una vuelta, acumulen fases diferentes debido a que el flujo magnético que atraviesa sus trayectorias es diferente. Este estudio se ha realizado con el objeto de arrojar algo más de claridad sobre la cuestión de la existencia o inexistencia de oscilaciones AB para el caso de excitones en QRs tipo I. El punto novedoso de nuestro análisis es el haber considerado distorsiones en el ancho, y en la forma del anillo, y analizar su efecto sobre el espectro excitónico en función de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento de la estructura.

Nuestro análisis yace sobre un par electrón-hueco con masas efectivas m_e, m_h , respectivamente, confinado en un QR plano de barrera infinita, cuyas fronteras están definidas en coordenadas polares por las funciones $R_{\text{int}}(\theta)$, $R_{\text{ext}}(\theta)$, y donde la línea central y el ancho están dados como $R_c(\theta) = 0.5(R_{\text{ext}}(\theta) + R_{\text{int}}(\theta))$ y $w(\theta) = R_{\text{ext}}(\theta) - R_{\text{int}}(\theta)$. En este caso hemos considerado modelos de QRs con ancho variable y línea central de forma circular, por lo tanto no hemos tenido en cuenta los efectos asociados con la variación en la forma de la línea central. El Hamiltoniano que describe nuestro sistema en presencia de un campo magnético uniforme aplicado en dirección perpendicular al plano del QR, se puede expresar como:

$$H = H_e(\mathbf{r}_e) + H_h(\mathbf{r}_h) - \frac{2}{|\mathbf{r}_{eh}|},$$

$$H_i(\mathbf{r}_i) = \eta_i \left[-\Delta_i + V(\mathbf{r}_i) + \frac{\gamma^2 r_i^2}{4} - i\gamma q_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right]; \quad i = e, h, \quad (4.42)$$

aquí, $\eta_e = \mu/m_e$; $\eta_h = \mu/m_h$, donde $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ es la masa reducida del excitón, y \mathbf{r}_e y \mathbf{r}_h son los vectores posición para el electrón y el hueco, respectivamente. Ahora, en coordenadas relativas y de centro de masa $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, $\mathbf{R}_{cm} = (m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h) / (m_e + m_h)$, respectivamente, tenemos que el Hamiltoniano (4.42) puede expresarse como:

$$H = H_r(\mathbf{r}) + H_{cm}(\mathbf{R}_{cm}) + U(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{cm});$$

$$H_r(\mathbf{r}) = -\Delta_r + V(\mathbf{r}) + (\eta_e^3 + \eta_h^3) \gamma^2 r^2 / 4 + i\gamma \partial / \partial \theta - 2/r;$$

$$H_{cm}(\mathbf{R}_{cm}) = \mu / (m_e + m_h) \left[-\Delta_{R_{cm}} + V(\mathbf{R}_{cm}) + \gamma^2 R_{cm}^2 / 4 \right];$$

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{cm}) = V(\mathbf{R}_{cm} + \eta_e \mathbf{r}) + V(\mathbf{R}_{cm} - \eta_h \mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) - V(\mathbf{R}_{cm}) + \gamma^2 (\eta_e - \eta_h) \mathbf{r} \cdot \mathbf{R}_{cm} / 2 \quad (4.43)$$

con $V(\mathbf{r})$ como el potencial de confinamiento, el cual es igual a cero y a infinito, dentro y fuera del QR, respectivamente. Los parámetros físicos del sistema se han tomado tal como se definieron en la sección 4.1 y nuestro análisis se ha realizado bajo la consideración de que el hueco es tipo pesado. Dada la complejidad que presenta este problema, para poder resolverlo hemos hecho uso del procedimiento estándar correspondiente a la A.A. para QRs delgados, el cual ya ha sido descrito en las secciones precedentes. En este sentido, podemos formular las eigenfunciones del Hamiltoniano (4.42) para el excitón en la forma:

$$\Psi(r, \theta, R, \Theta) = f_r(r, \theta) f_R(R, \Theta) \Phi(\theta, \Theta) \quad (4.44)$$

donde tenemos que $f_r(r, \theta)$ y $f_R(R, \Theta)$ son las funciones de onda correspondientes a la parte radial de los Hamiltonianos relativo y de centro de masa, considerando que el movimiento angular se ha congelado, las cuales pueden expresarse en forma explícita como:

$$f_r(r, \theta) = \sqrt{2/w(\theta)} \cos(\pi(r - R_c(\theta))/w(\theta)) \quad (4.45a)$$

$$f_R(R, \Theta) = \sqrt{2/w(\Theta)} \cos(\pi(R - R_c(\Theta))/w(\Theta)) \quad (4.45b)$$

Las correspondientes energías radiales para el estado base quedan expresadas como $E_r(\theta) = \pi^2/w^2(\theta)$ y $E_R(\Theta) = \pi^2/w^2(\Theta)$. Por otro lado se tiene que la función $\Phi(\theta, \Theta)$ que aparece en (4.44), es una función envolvente desconocida, la cual describe el movimiento rotacional de las dos partículas. La ecuación de onda para dicha función envolvente se obtiene al aplicar el principio variacional de Schrödinger y minimizar el funcional de energía con respecto a la función envolvente $\Phi(\theta, \Theta)$, tal como se hizo en la sección 4.3 para el caso de la D^0 . En este caso, la ecuación de onda tiene la forma:

$$\begin{aligned} [H_\theta(\theta) + H_{cm}(\Theta) + U(\theta, \Theta)]\Phi(\theta, \Theta) &= E\Phi(\theta, \Theta); \\ R_c^2 H_\theta &= -\partial^2/\partial\theta^2 + \pi^2 R_c^2/w^2(\theta) + (\eta_e^3 + \eta_h^3)\gamma^2 R_c^4 \sin^2 \theta/2 + i\gamma R_c^2 \partial/\partial\theta \\ &\quad - (\sin^2 \theta/2 + w^2(\theta)/12R_c^2)^{-1/2} \\ R_c^2 H_{cm} &= \mu/(m_e + m_h) \cdot [-\partial^2/\partial\Theta^2 + \pi^2 R_c^2/w^2(\Theta) + \gamma^2 R_c^4/4]; \\ U(\theta, \Theta) &= \pi^2/w^2(\Theta + \eta_e\theta) + \pi^2/w^2(\Theta - \eta_e\theta) - \pi^2/w^2(\theta) - \pi^2/w^2(\Theta) + (\eta_e - \eta_h)^2 \gamma^2 R_c^2 \sin^2 \theta \end{aligned} \quad (4.46)$$

La ecuación (4.46) ha sido resuelta mediante el método de Fourier, en el cual la función envolvente es representada en la forma de una doble serie de Fourier $\Phi(\theta, \Theta) = \sum_{m, M=-L}^L C_{m, M} e^{im\theta} e^{iM\Theta}$, donde m y M pueden interpretarse como los números cuánticos correspondientes al momento angular para los movimientos relativo y de centro de masa, respectivamente. Los coeficientes de Fourier $C_{m, M}$ forman un vector de orden $(2L+1)^2$, cuyas componentes pueden ser encontradas al resolver el problema de eigenvalores para el Hamiltoniano (4.46) en la representación de Fourier.

A continuación se describen los resultados obtenidos para dos modelos de QRs, ambos con línea central circular, pero con formas diferentes de variación en el ancho. El primer modelo presenta un ancho variable linealmente respecto a θ , el cual está definido por una función $w(\theta) = a + (b-a)\theta/2\pi$; para $0 < \theta \leq 2\pi$, y como puede verse en la figura 55 (izquierda), presenta un salto abrupto en $\theta = 2\pi$. Aquí los parámetros a y b corresponden al ancho mínimo y máximo del QR, los cuales se dan cuando $\theta = 0$ y $\theta = 2\pi$, respectivamente. El segundo modelo es un QR con fronteras de forma ligeramente elíptica, las cuales están definidas mediante las funciones: $R_\pm(\theta) = (R_c \pm a)(R_c \pm b) / \sqrt{(R_c \pm a)^2 \sin^2 \theta + (R_c \pm b)^2 \cos^2 \theta}$, en este caso, los parámetros a y b corresponden igualmente al ancho mínimo y máximo del QR, los cuales se dan cuando $\theta = (0, \pi)$ y $\theta = (\pi/2, 3\pi/2)$, respectivamente. Una representación de este modelo se muestra en la figura 55 (derecha).

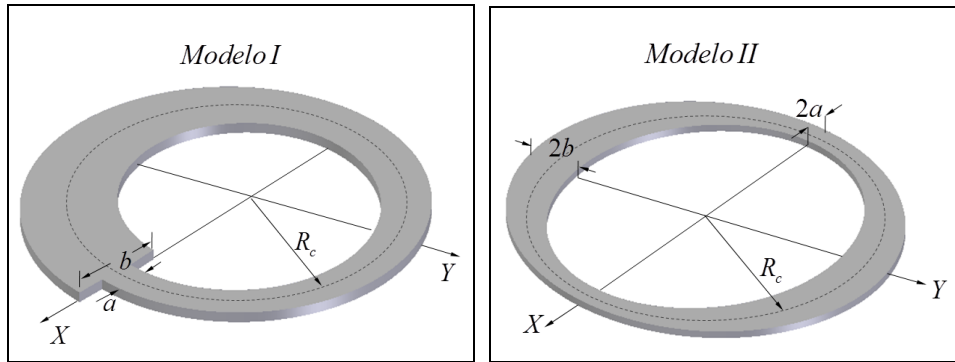


Fig. 55 Representación esquemática de los modelos I y II para QRs planos con ancho variable.

En la figura 56 se presenta una comparación de las curvas de los niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético entre dos QRs circulares, pero considerando que uno de ellos tiene ancho uniforme y el otro presenta una pequeña variación en el ancho según como se ha descrito en el modelo 1. Al observar estos gráficos se pone de manifiesto inmediatamente un hecho; no existen oscilaciones AB para el estado base de un excitón confinado en un QR de ancho finito, incluso tampoco aparecen para los primeros estados excitados, aunque se observan oscilaciones para los estados excitados superiores. Por otro lado, la comparación entre los dos gráficos (Figuras 56(a) y (b)), permite concluir que al introducir aunque sea una pequeña variación en el ancho del QR, en este caso del 1%, tiene lugar una extinción de las oscilaciones en la energía para un buen número de los niveles energéticos más bajos. Lo anterior se debe a que para un QR delgado, pequeñas variaciones en el ancho producirán grandes variaciones en la energía radial, por lo tanto la región donde el ancho sea mayor será desde el punto de vista energético un verdadero pozo de potencial para los portadores de carga, lo cual llevará a la aparición de estados localizados adicionales que no exhiben oscilaciones respecto al campo magnético.

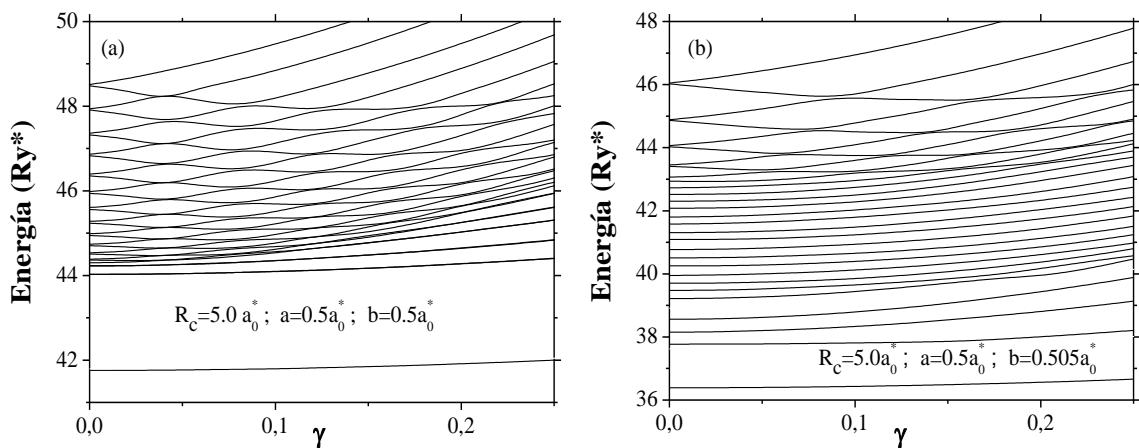


Fig. 56 Niveles de energía del excitón como función del campo magnético en un QR circular (a) con ancho uniforme de $0.5a_0^*$ y (b) con ancho variable linealmente desde $0.5a_0^*$ hasta $0.505a_0^*$. El radio de la línea central es de $5.0a_0^*$.

En la figura 57 se despliegan las curvas obtenidas para los niveles de energía en función de la intensidad de campo magnético de un QR circular con ancho uniforme (Figura 57a) y de un QR circular cuyo ancho varía elípticamente, de acuerdo con el modelo II descrito anteriormente (Figura 57b). En este caso se observa, al igual que en para el modelo I, que no existen oscilaciones de AB en el estado base y primeros estados excitados y además la comparación entre los dos gráficos (Figuras 57(a) y (b)), permite concluir de igual manera que introducir una pequeña variación en el ancho del QR, en este caso del 5% , lleva a una desaparición de las oscilaciones en la energía para un buen número de los niveles energéticos más bajos. Pero a diferencia del modelo anterior, aquí se observa que los niveles energéticos más bajos aparecen agrupados en pares, mientras que los niveles superiores tienen múltiples intersecciones. Lo anterior se debe a que la particular simetría rotacional de un QR con forma elíptica lleva a que se formen pozos de potencial en las regiones donde el ancho del anillo es máximo, esto es en nuestro caso cuando $\theta = \pi/2$ y $3\pi/2$. Por lo tanto tendremos un sistema de doble pozo simétrico en dirección azimutal, lo que hace que los niveles se desdoble en parejas, tal como ocurrió para el caso del complejo D_2^+ .

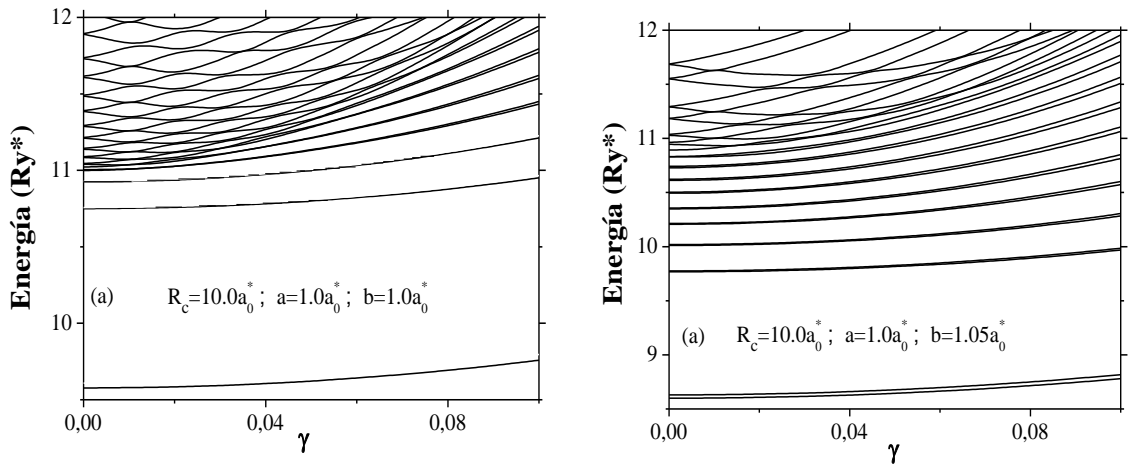


Fig. 57 Niveles de energía del excitón como función del campo magnético en un QR circular (a) con ancho uniforme de $0.5a_0^*$ y (b) con ancho variable elípticamente desde $1.0a_0^*$ hasta $1.05a_0^*$. El radio de la línea central es de $10.0a_0^*$.

En conclusión, hemos propuesto un método simple para analizar el espectro energético de un excitón neutro confinado en un QR delgado con ancho no uniforme. Nuestros resultados muestran que cualquier pequeña variación en el ancho del QR produce la extinción de las oscilaciones AB para los niveles energéticos más bajos del excitón, resultado que puede resultar de vital importancia para comprender los resultados experimentales que se tienen hasta el momento sobre dichos sistemas, ya que los QRs reales presentan importantes variaciones morfológicas tanto en el ancho, como en la altura.

CONCLUSIONES

En forma concreta, luego de la realización de este trabajo de investigación, se pueden establecer las siguientes conclusiones:

❖ En primer lugar, en este trabajo se ha presentado una metodología general y relativamente sencilla para calcular la energía de enlace de sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras que presentan simetría axial, en presencia de campos eléctrico y magnético, aplicados en la dirección de crecimiento. Haciendo uso de la aproximación adiabática, y basados en el Método de Dimensión Fractal, hemos reducido el problema general a una ecuación unidimensional para el caso de donadoras y excitones confinados en cualquier nanoestructura axialmente simétrica. Una de las características más atractivas de nuestro método es su universalidad de aplicación a diferentes modelos de confinamiento estructural en el marco del mismo procedimiento numérico, manteniendo un alto grado de exactitud en los resultados.

❖ Otro importante aporte ha sido el haber propuesto una nueva nomenclatura para clasificar los diferentes estados electrónicos de donadoras centradas en heteroestructuras semiconductoras axialmente simétricas, basados en la conservación de la proyección del momentum angular, y en la similitud que presentan las condiciones de “cusp” de las respectivas funciones de onda electrónicas en cualquier heteroestructura, para distancias infinitesimales entre el electrón y el ión.

❖ La metodología desarrollada para estudiar complejos de portadores de carga en nanoestructuras axialmente simétricas, ha sido aplicada especialmente para el análisis de donadoras y excitones confinados en nanohilos con estructura de superred (NWSL composicional) y nanohilos de espesor periódicamente variable (NWSL estructural), en presencia de campo eléctrico. Es importante destacar que este es, hasta donde sabemos, uno de los trabajos pioneros en este campo.

❖ Los resultados obtenidos para el caso de una donadora neutra en una NWSL composicional indican que la distribución de carga electrónica en la estructura se hace menos sensible al campo eléctrico, bajo condiciones de confinamiento radial fuerte y para hilos cortos, constituidos por pocas celdas unitarias. Se pudo determinar que dicho comportamiento estaba

relacionado con el importante acople que existe entre el confinamiento radial y axial, ya que al aumentar el confinamiento radial (reducción del radio) tiene lugar una notable reducción en la altura de las barreras lo cual favorece el tunelamiento del electrón a través de las barreras que constituyen la estructura de superred a lo largo del hilo. Lo anterior pone de manifiesto la forma en que la variación del confinamiento estructural en dirección radial o axial, junto con la aplicación de un campo eléctrico puede alterar las propiedades que exhiben los portadores de carga confinados en estas estructuras. Se pudo determinar que la posición de la impureza juega un papel importante en la forma que presente la distribución de probabilidad electrónica, y además se mostró la fuerte relación que existe entre la distribución de probabilidad electrónica y la energía de enlace de la donadora.

❖ Se analizó el efecto de la variación periódica del espesor sobre la energía de enlace y la distribución de carga de una donadora neutra en una NWSL estructural, considerando diferentes tipos de perfil. Los resultados obtenidos al respecto indican que un nanohilo de perfil variable tiene un efecto similar al de una NWSL composicional sobre las propiedades físicas de los portadores de carga.

❖ Se llevó a cabo también el análisis de un excitón confinado en NWSLs composicionales en presencia de campos eléctrico y magnético. Los resultados evidencian una interesante competencia entre el potencial Coulombiano que ejerce el hueco sobre el electrón y el potencial de confinamiento que impone la estructura con su sistema de pozos y barreras, además de la interacción del sistema con los campos externos aplicados.

❖ Un segundo alcance importante de este trabajo ha sido plantear una metodología general y sencilla para calcular el espectro energético de sistemas de pocas partículas confinadas en anillos cuánticos delgados, en presencia de campo magnético, aplicado en la dirección transversal al plano del anillo. Haciendo uso de la aproximación adiabática, y basados en el principio variacional de Schrödinger, hemos reducido el problema general a un problema unidimensional para el caso de donadoras y excitones confinados en QRs tipo I. Dentro de las características más atractivas de nuestro método tenemos el hecho de que permite hacer variaciones a la morfología del anillo, incluir la presencia de impurezas y tener en cuenta el efecto de la capa húmeda.

❖ Se ha realizado el análisis de una impureza donadora neutra descentrada en un QR tridimensional delgado, cuyos resultados obtenidos indican que a medida que el núcleo de la impureza se aproxima al QR, una transformación de los estados electrónicos rotacionales más bajos en estados fuertemente localizados tiene lugar, lo cual lleva a pensar en la posibilidad de una localización de Anderson en el sistema. Otra importante consecuencia que trae la presencia

de la impureza descentrada es la extinción de las oscilaciones de Aharonov-Bohm para el estado base y algunos de los primeros estados excitados, en las curvas de energía respecto a la intensidad de campo magnético. Nuestros resultados también muestran como la impureza descentrada induce una modificación completa del espectro FIR del sistema, y puede inducir oscilaciones AB en dicho espectro, lo cual es una muestra clara de cómo las propiedades ópticas del sistema pueden alterarse sustancialmente por la posición de una impureza.

❖ Se ha realizado el análisis de un complejo D_2^+ en un QR tridimensional delgado, el cual manifiesta efectos similares al caso de la donadora neutra, con la diferencia que su espectro mostrará un desdoblamiento en los niveles energéticos debido a la presencia de las dos impurezas. En este sentido se tiene por lo tanto que las impurezas descentradas inducen un desacople de cada pico de absorción en dos, con el incremento del campo magnético. Lo anterior lleva a que el espectro FIR adquiera una forma particular de parejas de picos que oscilan periódicamente respecto a la intensidad de campo magnético, excepto para los estados más bajos, los cuales resultan invariantes respecto al campo. En general puede anotarse que estos importantes cambios que se dan en el espectro FIR, muestran como las propiedades ópticas del sistema pueden alterarse sustancialmente por la presencia de impurezas en la vecindad del QR, y por la configuración de posiciones que estas presenten. Por otro lado se tiene que el fuerte confinamiento estructural impuesto sobre el sistema permite la obtención de moléculas artificiales más estables que su análogo natural (H_2^+), con la adicional característica de que la separación entre los dos estados electrónicos más bajos y los demás estados excitados pueden favorecer la construcción de un sistema nanoscópico de dos niveles requerido para propósitos de computación cuántica.

❖ Se propuso un método simple basado en la aproximación adiabática para calcular el espectro energético de dos electrones y de una D^- centrada en un anillo cuántico delgado de forma toroidal, el cual en los casos límite, de un anillo unidimensional y de una D^- en el bloque, dio resultados que se hallan en una excelente concordancia con soluciones exactas. Además, se mostró que el efecto de la correlación electrónica se hace importante cuando el radio medio del anillo se incrementa.

❖ Se ha propuesto un método simple para analizar el espectro energético de un excitón neutro confinado en un QR delgado con ancho no uniforme. Nuestros resultados muestran que cualquier pequeña variación en el ancho del QR produce la extinción de las oscilaciones AB para un buen número de los niveles energéticos más bajos del excitón, resultado que puede

resultar de vital importancia para comprender los resultados experimentales que se tienen hasta el momento sobre dichos sistemas, ya que los QRs reales presentan importantes variaciones morfológicas tanto en el ancho, como en la altura.

REFERENCIAS

- [1] T. Appenzeller, *Science* **254**, 1300 (1991)
- [2] P. Harrison: *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley-Interscience (2005)
- [3] M. R. Geller, *Quantum Phenomena In Low-Dimensional Systems*, arXiv:cond-mat/0106256v1
- [4] R. Tsu and L. Ioriatti, *Superlatt. Microstruc.*, **1**, 295 (1985); R. Tsu and D. Babić, *Appl. Phys. Lett.*, **64**, 1806 (1994); Z.Y. Deng, J.K. Guo and T.R. Lai, *Phys. Rev. B*, **50**, 5736 (1994); H. Paredes-Gutiérrez, J.C. Cuero-Yépez and N. Porrás-Montenegro, *J. Appl. Phys.*, **75**, 5150 (1994).
- [5] B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, T. Chwiej, and Adamowski, *Phys. Rev. B* **70**, 35401 (2004); G. Piacente, I. V. Schweigert, J. J. Betouras, and, F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **69**, 45324 (2004)
- [6] D. Mailly, C. Chapelier and A. Benoit, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2020 (1993)
- [7] L.W. Wang and A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 1039 (1994); M. Lannoo, C. Delerue and G. Allan, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 3415 (1994).
- [8] Y. Sugimoto, N. Ikeda, N. Carlsson, K. Asakawa, N. Kawai, and K. Inoue, *J. Appl. Phys.* **91**, 922 (2002); M. Geller, C. Kapteyn, L. Müller-Kirsch, R. Heitz, and Bimberg, *Stat. Sol. (b)* **238**, 258 (2003)
- [9] D. Bimberg, N. Kirstaedter, N. N. Ledentsov, Z. I. Alferov, P. S. Kopev, V. M. Ustinov, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron* **3**, 196 (1997), D. Pan, E. Towe, S. Kennerly, *Electron Lett.*, **34**, 1019 (1998)
- [10] M. Kastner, *Physics Today*, January, **24** (1993); M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, and A. Forchel, *Nature*, **405**, 923 (2000); D. Gammon, *Nature*, **405**, 899 (2000)
- [11] W. A. Little, *Phys. Rev. A* **134**, 1416 (1964)
- [12] V. L. Ginzburg, *Phys. Lett.* **13**, 101 (1964)
- [13] P. Yu and M. Cardona: *Fundamentals of Semiconductors*, Berlin, Springer-Verlag (1996); J. Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, Singapore (1993); V. Shchukin, N. N. Ledentsov, and D. Bimberg, *Epitaxy of Nanostructures*, Springer, Berlin/Heidelberg (2003)
- [14] L. Esaki and R. Tsu, *IBM., J. Res. Dev.* **14**, 61(1970)
- [15] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Reviews of Modern Physics*, **54**, N° 2, 437 (1982)
- [16] D. R. Bowler, *J. Phys.: Condens Matter* **16**, R721-R754 (2004)
- [17] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs: *Quantum Dots*, Springer-Verlag, New York (1997)
- [18] J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. **76**, No. 3, 725 (2004)
- [19] J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne, and R. Leon, *Phys. Rev. B* **59**, 12279 (1999)
- [20] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995)
- [21] P. W. Fry, I. E. Itskevich, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, J. J. Finley, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, L. R. Wilson, I. A. Larkin, P. A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J. P. R. David, A. G. Cullis, G. Hill, and J. C. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 733 (2000)

- [22] D. Granados and J. M. García, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401 (2003)
- [23] J. M. Garsia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmit, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. P. Kotthaus, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [24] A. Lorke, R. Luyken, *Physica B* **424**, 256 (1998).
- [25] J. M. Garcia, T. Mankad, P. O. Holtz, P. J. Wellman, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3172 (1998)
- [26] A. Lorke, R. Luyken, A. Govorov, J. Kotthaus, J. M. García, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2223 (2000)
- [27] A. Aierken, T. Hakkarainen, J. Riikonen and M. Sapanen, *Nanotechnology* **19**, 245304 (2008)
- [28] T. Raz, D. Ritter, G. Bahir, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003)
- [29] A. O. Govorov, A. V. Kalamientsev, R. Waburton, K. Karrai, S. E. Ulloa, *Physica E* **13**, 790 (2002)
- [30] A. O. Govorov, S. E. Ulloa, K. Karrai, R. J. Waburton, *Phys. Rev. B* **66**, 081309 (2002)
- [31] R. Timm, H. Eisele, A. Lenz, L. Ivanova, G. Balakrishnan, D. L. Huffaker and M. Dähnel, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256101 (2008)
- [32] J.H. He, Y.L. Chueh, W.W. Wu, S.W. Lee, L.J. Chen and L.J. Chou, *Thin Solid Films*, **469–470**, 478 (2004)
- [33] H. Wu, D.W.L. Sprung, J. Martorell, S. Klarsfeld, *Phys. Rev. B* **44**, 6351 (1991)
- [34] J.O. Vasseur, A. Akjouj, L. Dobrzyński, B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti, *Surf. Sci. Rep.* **54**, 1 (2004)
- [35] M.S. Gudiksen, L.J. Lauhon, J. Wang, D.C. Smith, C.M. Lieber, *Nature* **415** 617 (2002)
- [36] Yiyang Wu, R. Fan, P. Yang, *Nano Lett.* **2**, 83 (2002)
- [37] Sung-Wook Chung, Jae-Young Yu, J.R. Health, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2068. (2000)
- [38] M.T. Björk, B.J. Ohlsson, T. Sass, A.L. Persson, C. Theland, M.H. Magnusson, K. Deppert, L.R. Wallenberg, L. Samuelson, *Nano Lett.* **2**, 87 (2002)
- [39] Hideo Kohno, Seiji Takeda, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1202 (2003)
- [40] O. Landré, D. Camacho, C. Bougerol, Y. M. Niquet, V. Favre-Nicolin, G. Renaud, H. Renevier and B. Daudin, *Phys. Rev. B* **81**, 153306 (2010)
- [41] L. C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, *J. Appl. Phys.*, **93**, 9997 (2003)
- [42] M. A. Lampert, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 450 (1958)
- [43] J. R. Haynes, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 866 (1966)
- [44] S. Huant, S. P. Najda, and B. Etienne, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1486 (1990)
- [45] A. J. Shields, M. Pepper, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **52**, 5523(1995); H. Buhmann, L. Mansouri, J. Wang, P. H. Beton, N. More, L. Eaves, M. Henini, M. Potemski, *Phys. Rev. B* **51**, 7969 (1995); G. Finkelstein, H. Shtrikman, I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. B* **53** (1996) R 1709
- [46] B. Stébé and A. Ainame, *Superlattices Microstructure* **5**, 545 (1989)
- [47] T. Pang and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990); D. E. Phelps and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B*, **27**, 4883 (1983); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, *Phys. Stat. Sol. (b)* **220**, 171 (2000); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **210** 605 (1998); F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, *J. Phys.: Condens.*

- Matter, **10**, 7283 (1998); J. H. Marín, *Cálculo del Estado Base de los Sistemas de Pocas Partículas Confinadas en Pozos Cuánticos de GaAs-GaAlAs*, Tesis de Maestría, UIS, 1997.
- [48] R. J. Warburton, C. S. Durr, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Madeiros-Ribeiro, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **79**, 5282 (1997)
- [49] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [50] W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **98**, 915 (1955)
- [51] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981); Bastard G, *Wavemechanics Applied to Semiconductor heterostructures*, (Halsted, New York, 1988)
- [52] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. B **26**, 1974 (1982)
- [53] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, and L. F. García, Phys. Stat. Sol. (b) **224**, 757(2001)
- [54] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, Phys. Stat. Sol. (b) **213**, 325(1999)
- [55] S. Le Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B **47**, 1383 (1993)
- [56] P. A. M. Maksym and T. Chacraborty, Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990)
- [57] J. J. S. De Groote, J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **46**, 12773(1992)
- [58] J-L Zhu, J. Z. Yu, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe, J. Phys.: Condensed Matter **8**, 7857 (1990); M. El-Said, J. Phys. I, France **5**, 1027 (1995)
- [59] X-F He, Phys. Rev. B **42**, 11751 (1990); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 590 (2002)
- [60] A. Matulis and F. M. Peeters, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 7751 (1994)
- [61] K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **63**, 205311 (2000)
- [62] B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Physica E **5**, 185 (2000)
- [63] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. D, **31**, 3391 (1998)
- [64] R. Escorcía, R. Robayo, and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 431(2002)
- [65] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996)
- [66] L. Wendler and V. M. Fomin, Phys. Rev. B **51**, 17 814 (1995); D. Xu and J-L. Zhu, Phys. Rev. B **72**, 075326 (2005); A. Puente and Ll. Serra, Phys. Rev B **63**, 125334 (2001); J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **62**, 4234 (2000)
- [67] J-L Zhu, X. Yu, Z. Dai, and X. Hu, Phys. Rev. B **68**, 045324 (2003)
- [68] B. Partoens and F. Peeters, Phys. Rev. Lett. **84**, 4433 (2000); S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski and B. Szafran, Phys. Rev. B **67**, 205316 (2003)
- [69] B. Partoens, A. Matulis, and F. Peeters, Phys. Rev B **59**, 1617 (1999)
- [70] M. Büttiker, Y. Imry and R. Landauer, Phys. Lett. **96**, 365 (1983)
- [71] L. A. Lavenère-Wanderley, A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, J. Phys.: Condens. Matter **14** 259 (2002)
- [72] S.-R. Eric Yang, Phys. Rev. B **74**, 075315 (2006)
- [73] Y. V. Pershin and C. Piermarocchi, Phys. Rev. B **72**, 125348 (2005)
- [74] A. Bruno-Alfonso, and A. Latgé, Phys. Rev. B **77**, 205303 (2008)
- [75] I. Filikhin, V.M. Suslov, B. Vlahovic, Physica E **33**, 349 (2006)
- [76] V. M. Fomin, V. N. Gladilin, S. N. Klimin, and J. T. Devreese, Phys. Rev. B **76**, 235320 (2007)
- [77] J Even and S Loualiche, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L289 (2004)

- [78] R. D. Guerrero, J. C. Granada, N. Porrás-Montenegro, *Revista Colombiana De Física* **35**, 51 (2003)
- [79] T. Chakraborty and P. Pietiläinen, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994)
- [80] F. García, J. H. Marín, H. Paredes Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, No. 10, 3630 (2005)
- [81] J. H. Marin, F. García, and I. D. Mikhailov, *Braz. J. Phys.* **36**, 940 (2006); B. Szafran, S. Bednarek, and M. Dudziak, *Phys. Rev. B* **75**, 235323 (2007)
- [82] J. H. Marin, F. A. Rodríguez-Prada and I. D. Mikhailov, *Journal of physics: Conf. Series* **245**, 012020 (2010)
- [83] F. J. Culchac, J. C. Granada, and N. Porrás-Montenegro, *Phys. Stat. sol. (c)* **4**, No. 11, 4139 (2007)
- [84] B. Szafran and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **72**, 155316 (2005)
- [85] A.V. Chaplik, *Pisma Zh. Eksp. Teor. Phys.* **62**, 885 (1995) [*JETP Lett.* **62**, 900 (1995)]
- [86] R.A. Römer and M.E. Raikh, *Phys. Rev. B* **62**, 7045 (2000)
- [87] A. V. Maslov and D. S. Citrin, *Phys. Rev. B* **67**, 121304(R) (2003)
- [88] A. M. Fischer, V. L. Jr. Campo, M. E. Portnoi and R. A. Römer, *Phys. Rev. Lett* **102**, 096405 (2009)
- [89] L.G.G.V. Dias da Silva, S. E. Ulloa and T. V. Shahbazyan, *Physica E* **32**, 37 (2006)
- [90] Hui Hu, Jia-Lin Zhu, Dai-Jun Li and Jia-Jiong Xiong, *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001)
- [91] J. Song and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 125302 (2001)
- [92] A. O. Govorov, S. E. Ulloa, K. Karrai and R. J. Warburton, *Phys. Rev. B* **66**, 081309 (2002)
- [93] L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa and A. O. Govorov, *Phys. Rev. B* **70**, 155318 (2004)
- [94] M. Grochol, F. Grosse, and R. Zimmermann, *Phys. Rev. B* **74**, 115416 (2006)
- [95] M. D. Teodoro, V. L. Campo, Jr, V. Lopez-Richard, E. Marega, Jr, G. E. Marques, Y. Galvao Gobato, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, Z.Y. AbuWaar, V. G. Dorogan, Yu. I. Mazur, M. Benamara, and G. J. Salamo, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 86401 (2010)
- [96] E. Ribeiro, A. O. Govorov, W. Carvalho, Jr. and G. Medeiros-Ribeiro, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126402 (2004)
- [97] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, *Phys. Rev. B.* **61**, 15887 (2000)
- [98] F. J. Betancur, W. Gutiérrez, I. D. Mikhailov, and H. Paredes, *Braz. J. Phys.* **36**, 882 (2006)
- [99] H. Pan and J. L. Zhu, *J. Phys.: Condens Matter* **15**, 7287 (2003)
- [100] F. J. Betancur, W. Gutiérrez, J.C. Piña, *Physica B* **396** 12 (2007).
- [101] P. Pietiläinen and T. Chakraborty, *Solid State Commun.* **87**, 809 (1993); T. Chakraborty and P. Pietiläinen, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994); **52**, 1932 (1995)
- [102] S. E. Ulloa, E. Castaño and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **41**, 12350 (1990)
- [103] H. Wu, D. W. L. Sprung, J. Martorell and S. Klarsferd, *Phys. Rev. B* **44**, 6351 (1991)
- [104] C. Galeriu, L.C. Lew Yan Voon, R. Melnik, M. Willatzen, *Computer Physics Communications*, **157** 147-159 (2004); L. C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, *J. Appl. Phys.* **93** 9997 (2004); Y. M. Niquet, *Phys. Rev. B* **74**, 155304 (2006); M. P. Persson and H. Q. Xu, *Phys. Rev. B* **73**, 35328 (2006); M. Willatzen and L. C. Lew Yan Voon, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 345216 (2008); H. Ramirez y A. Camacho and Lok Lew Yan, *Rev. Mex. Fís. S* **53** (7) 78 (2007)
- [105] L. F. García, J. Silva-Valencia, I. D. Mikhailov, and J. E. Galván-Moya, *Physica B*, **403**, 5 (2008)

- [106] T. Y. Zhang, W. Zhao, J. C. Cao and G. Qasim, *J. appl. Phys* **98**, 094311 (2005)
- [107] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë: *Quantum Mechanics*, John Wiley and Sons, Paris, France (1977).
- [108] J. Betancur, W. Gutiérrez, I. D. Mikhailov and H. Paredes, *Braz. J. Phys* **36**, No. 3B, 882 (2006); J. H. Marín, I. D. Mikhailov, and J. Betancur, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1005 (2006)
- [109] M. Helm, W. Hilber, T. Fromherz, F. M. Peeters, K. Alavi, R. N. Pathak, *Phys. Rev. B* **48**, 1601(1993); M. Helm, F. M. Peeters, F. De Rosa, E. Colas, J. P. Harbison, L.T. Florez, *Phys. Rev. B* **43** 13983 (1991); J. M. Shi, F. M. Peeters, G. Q. Hai, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **44** 5692 (1991); M. Helm, W. Hilber, T. Fromherz, F. M. Peeters, K. Alavi, R. N. Pathak, F. De Rosa, E. Colas, J. P. Harbison, L. T. Florez, J. M. Shi, G. Q. Hai, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **50** 15182 (1994).
- [110] J. Cen and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **46**, 13280 (1992).
- [111] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391 (1998)
- [112] T. Pang and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990)
- [113] S. Fraizzoli, F. Bassani and R. Buczko, *Phys. Rev. B* **41**, 5096 (1990).
- [114] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra-Ortega, *Phys. Rev. B* **67**, 115317 (2003)
- [115] T. Kuhn, G. Mahler, J. L. Dunn and C. A. Bates, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 757 (1994)
- [116] M. Pacheco, Z. Barticevic, A. Latgé, *Physica B* **302**, 77 (2001)
- [117] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* **240**, 747 (2003)
- [118] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [119] J. L. Movilla, A. Ballester and J. Planelles, *Phys. Rev. B* **79**, 195319 (2009)
- [120] M. J. Calderón, B. Koiller and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **75**, 125311 (2007); A. V. Tsukanov, *Phys. Rev. B* **76**, 035328 (2007)
- [121] S. Kang, Y. M. Liu and T. Y. Shi, *Commun. Theor. Phys.* **50**, 767 (2008)

APENDICE A

Método de Barrido Trigonométrico

A continuación se describirá el método numérico empleado para obtener solución al problema de una partícula en un campo central y considerando un espacio de dimensión fractal. Supongamos que se quiere resolver el siguiente problema de contorno:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \right] + V(r)\psi(r) = E\psi(r); \quad 0 < r < \infty; \quad \psi(0) < \infty; \quad \psi(\infty) = 0 \quad (1)$$

donde la ecuación de la izquierda es la parte radial de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un espacio con Jacobiano $J(r)$. Aquí $V(r)$ es el potencial de confinamiento, y puede tener forma arbitraria, como se ilustra en la Figura A1.

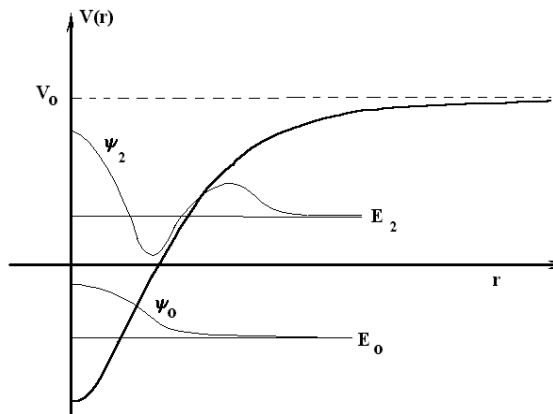


Fig.58 Potencial de confinamiento y primeros dos estados pares para dicho potencial

Dicho potencial de confinamiento solo debe cumplir la condición de que exista un límite finito para grandes valores de r , es decir que: $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = V_0$. Para el Jacobiano $J(r)$ en la ecuación (1)

deben cumplirse dos condiciones:

$$J(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^\alpha \quad (2)$$

$$h(r) = J'(r)/J(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 < \infty \quad (3)$$

El problema de Sturm-Liouville (1) se puede escribir en la forma:

$$\psi''(r) + h(r)\psi'(r) + q(r)\psi(r) = 0; \quad h(r) = J'(r)/J(r); \quad q(r) = E - V(r); \quad 0 < r < \infty; \quad (4)$$

$$\psi(0) < \infty; \quad \psi(\infty) = 0$$

La función $h(r)$ en la ecuación (4) según las propiedades (2) y (3), cumple las condiciones siguientes:

$$h(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{\alpha}{r}; \quad h(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 < \infty \quad (5)$$

La ecuación diferencial (4) presenta dos dificultades importantes al intentar conseguir una solución numérica de esta. Por un lado, la primera condición de frontera $\psi(0) < \infty$ es difícil de implementar en un procedimiento numérico, y por otra parte, el segundo término, esto es $h(r)$, presenta una singularidad en el punto $r = 0$. Esta singularidad puede cancelarse, ya sea con el tercer término si $q(0) \rightarrow -\infty$, o con la condición adicional $\psi'(0) = 0$, pero en ambas situaciones tenemos que aparecen serias dificultades en los cálculos debido a que al tomar valores en la vecindad del punto $r = 0$, aparece una diferencia de números grandes en el primer caso y un producto de un número grande por uno muy pequeño en el segundo, lo cual lleva a que los errores por redondeo se hagan importantes. Para evitar esta dificultad hacemos el cambio de variable:

$$\psi(r) = \chi(r)/r^p; \quad p = \alpha/2; \quad (6)$$

teniendo en cuenta que

$$\psi'(r) = \chi'(r)/r^p - p\chi(r)/r^{p+1}; \quad \psi''(r) = \chi''(r)/r^p - 2p\chi'(r)/r^{p+1} + p(p+1)\chi(r)/r^{p+2},$$

la ecuación (4) se reduce a la siguiente:

$$\chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) = 0; \quad w(r) = h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r; \quad (7)$$

con las condiciones de frontera:

$$\chi(0) = 0; \quad \chi(\infty) = 0 \quad (8)$$

Puede notarse que la ecuación diferencial (7) tiene una ventaja esencial comparándola con la ecuación inicial (4), puesto que el coeficiente del segundo término en (7), esto es $w(r) = \alpha/r - 2p/r$, tiende a cero cuando $r \rightarrow 0$, mientras que para el caso de la ecuación (4) el coeficiente del segundo término $h(r) \rightarrow \alpha/r \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow 0$.

Ahora, puesto que en cálculo numérico no existe el concepto de infinito, tenemos que sustituir la segunda condición de frontera por otra considerada en un punto suficientemente lejano el cual lo denotamos R_{max} . En este caso, el problema de contorno (7)-(8) puede escribirse como:

$$\chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) = 0; \quad 0 < r < R_{max}; \quad \chi(0) = 0; \quad \chi(R_{max}) = 0; \quad \psi(r) = \chi(r)/r^p \quad (9)$$

$$w(r) = h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r; \quad h(r) = J'(r)/J(r)$$

Se puede hacer una aproximación de la segunda condición de frontera de manera diferente. Para grandes valores de r , es decir cuando $r \rightarrow \infty$, la ecuación (9) se puede resolver de forma analítica, ya que $w(r) \rightarrow C_1$ según (5) y $u(r) \rightarrow E - V_0$, por lo que la ecuación (9) adquiere la forma:

$$\chi''(r) + C_1 \chi'(r) + (E - V_0) \chi(r) = 0 \quad (10)$$

La solución de esta ecuación que se anula para $r \rightarrow \infty$ es:

$$\chi(r) \propto A \exp(-gr); \quad g = \sqrt{V_0 - E + (C_1/2)^2} - C_1/2. \quad (11)$$

De aquí se puede concluir que cuando $r \rightarrow \infty$ se cumple la siguiente condición:

$$\chi'(r)/\chi(r) \rightarrow -g. \quad (12)$$

Este resultado se puede utilizar en lugar de la segunda condición de frontera en (9) y por lo tanto se puede formular el problema de contorno (9) en una forma diferente:

$$\begin{aligned} \chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) &= 0; \quad 0 < r < R_{\max}; \\ \chi(0) &= 0; \quad \chi'(R_{\max})/\chi(R_{\max}) = -g; \quad g = \sqrt{V_0 - E + (C_1/2)^2} - C_1/2. \end{aligned} \quad (13)$$

Como los problemas de contorno (9) y (13) son similares, solo difieren en las segundas condiciones de frontera, tenemos por lo tanto que los algoritmos de solución de estos dos problemas también son similares.

Para resolver los problemas de contorno (9) o (13) utilizaremos coordenadas polares de Poincare:

$$\chi(r) = A(r) \cos \vartheta(r); \quad \chi'(r) = A(r) \sin \vartheta(r) \quad (14)$$

Derivando la primera relación y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada $\chi'(r)$ en la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(r) = A(r) \frac{\sin \vartheta(r)}{\cos \vartheta(r)} [\vartheta'(r) + 1] \quad (15)$$

Por otro lado sustituyendo las expresiones (14) en la ecuación (13) y utilizando la relación (15) entre $A'(r)$ y $A(r)$ se obtiene la ecuación diferencial para la función $\vartheta(r)$:

$$\vartheta'(r) = -[\sin^2 \vartheta(r) + u(r) \cos^2 \vartheta(r) + w(r) \sin \vartheta \cos \vartheta] \quad (16)$$

Para encontrar la función $A(r)$ hay que sustituir la expresión (16) en (15) y realizar la integración:

$$A(r) = \exp \left\{ \int_0^r [1 - u(r)] \sin \vartheta(r) \cos \vartheta(r) - w(r) \sin^2 \vartheta(r) dr \right\}; \quad A(0) = 1 \quad (17)$$

En este sentido, las condiciones de frontera para los problemas (9) y (13) pueden escribirse como:

$$\vartheta(0) = \pi/2; \quad \vartheta(R_{\max}) = \pi/2 - \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (18a)$$

para el problema (9), y como:

$$\mathcal{G}(0) = -a \tan(g); \quad \mathcal{G}(R_{max}) = -a \tan(g) - \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (18b)$$

para el problema (13). Aquí n es el número del nivel de energía radial, por ejemplo, $n = 1$ corresponde al estado base, y el valor $n - 1$ da el número de nodos de la función de onda en dirección radial.

La ecuación diferencial (16) junto con la primera condición en las relaciones (18a) y (18b) definen un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden, el cual puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro buscado $E \equiv E_n$ (energía del nivel n -ésimo) y esta solución puede considerarse como una función de dos variables $\mathcal{G} = \mathcal{G}(r, E_n)$. Por otro lado, la segunda condición de frontera en las relaciones (18a) y (18b) lleva a la ecuación trascendente para la energía E :

$$\mathcal{G}(R_{max}, E_n) = \pi/2 - \pi n \quad (19a)$$

para el problema de contorno (9) y

$$\mathcal{G}(R_{max}, E_n) = -a \tan(g) - \pi n \quad (19b)$$

para el problema de contorno (13).

Por lo tanto el problema inicial de contorno (1) se puede resolver de una forma iterativa resolviendo un problema de Cauchy de primer orden (Ecuaciones 16-18), ligado con la solución de una ecuación trascendente (Ecuaciones 19).