

Análisis teórico de la dependencia con la temperatura de los espectros de heteroestructuras de puntos cuánticos autoensamblados de InAs/GaAs

Sergio Felipe Mejía Campos

Trabajo de investigación para optar al título de Magíster en Física

Director

Carlos José Páez González

Doctor en Física

Codirector

Willian Gutiérrez Niño

Doctor en Física

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Bucaramanga

2026

Dedicatoria

“Let $|\psi;t\rangle$ be a state satisfying

$$\hat{H}|\psi;t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi;t\rangle,$$

the equation that governs the dynamics of a quantum system; yet there are rare moments in which the whole architecture of motion and probability seems only to anticipate the quiet irruption of a presence that transforms observation into immersion.”

→ N.D.

Agradecimientos

Quiero agradecer especialmente a mi madre y padre por ser esencia y forma. Al profesor Willian Gutiérrez por su apoyo humano, orientación, enseñanza, dedicación y confianza durante el desarrollo de esta investigación. Al profesor Carlos Páez por su continuo compromiso y aporte en la discusión de las ideas; al profesor Ilia Mikhailov por el acompañamiento y asesoría. A los integrantes y amigos del grupo FICOMACO por el ambiente de trabajo, las discusiones académicas y la disposición para compartir conocimientos, risas y experiencias.

Tabla de Contenido

Introducción	11
1. Objetivos	14
1.1. Objetivo general	14
1.2. Objetivos específicos	14
2. Estado del arte y delimitaciones del problema	16
2.1. Puntos cuánticos del grupo III–V y relevancia física	16
2.2. Influencia de la morfología y del acoplamiento lateral	16
2.3. Campos externos, espectro y control electrónico	17
2.4. Avances recientes hacia propiedades termodinámicas en nanoestructuras	18
2.5. Vacío específico que aborda esta tesis	18
3. Fundamentos físicos y teóricos	20
3.1. Nanoestructuras semiconductoras y heteroestructuras InAs/GaAs	20
3.2. Periodicidad cristalina, estados de Bloch y aproximación de función envolvente	21
3.3. Hamiltoniano de Pauli, teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, modelo de Kane y reducción de Löwdin	22
3.4. Masa efectiva no parabólica dependiente de energía, posición y temperatura	23
3.5. Influencia de campos magnético y eléctrico sobre la energía	24
3.6. Ensamble canónico y termodinámica de espectros discretos	26
4. Modelo físico del sistema	28
4.1. Hamiltoniano efectivo de conducción en presencia de campos externos	28
4.2. Aproximación adiabática: separación axial y en el plano	29
4.3. Problema axial y condiciones de Ben Daniel–Duke	30
4.4. Geometría tipo volcán y potencial adiabático	31

4.5. Hamiltoniano efectivo bidimensional para sistemas aislados y acoplados	32
4.6. Espectro dependiente de temperatura: mecanismo doble de renormalización	33
4.7. Formulación termodinámica con espectro $E_n(T; D, \mathbf{B}, \mathbf{F})$	35
4.8. Parámetros utilizados en este trabajo	37
5. Metodología numérica	38
5.1. Método de elementos finitos y formulación débil	38
5.2. Discretización espacial y tratamiento de la dependencia energética	39
5.3. Cálculo numérico de propiedades termodinámicas	40
5.4. Criterios de convergencia y resumen del procedimiento computacional	41
6. Resultados y discusión	43
6.1. Espectro dependiente de la temperatura: modelo de Kane vs modelo parabólico	43
6.2. Desdoblamiento espectral, simetría y acoplamiento interanillo	47
6.3. Análisis del mínimo energético	49
6.4. Control externo de la hibridación y repulsión de niveles	49
6.5. Respuesta termodinámica bajo campos externos	53
7. Conclusiones	60
Referencias Bibliográficas	63
Apéndices	67

Lista de Tablas

1.	Propiedades de heteroestructuras InAs/GaAs.	80
2.	Parámetros de Varshni para InAs e GaAs.	81

Lista de Figuras

1.	Geometría tipo volcán.	32
2.	Potencial adiabático	34
3.	Mallado utilizado para los anillos acoplados	40
4.	Comparación espectral del modelo de Kane y el modelo parabólico.	44
5.	Reordenamiento espectral debido a la evolución térmica	45
6.	Espectro electrónico de baja energía de la molécula de nanoanillos acoplados lateralmente como función de la distancia centro-centro D	48
7.	Espectro electrónico de la molécula de nanoanillos en presencia de un campo magnético perpendicular $B \parallel z$	51
8.	Espectro electrónico de diferentes geometrías estructurales en presencia de campos magnéticos	53
9.	Espectro electrónico de la molécula de nanoanillos en presencia de un campo eléctrico aplicado a lo largo del plano estructural	54
10.	Funciones termodinámicas del sistema sin campo externo para distintos valores de la separación interanular D	55
11.	Funciones termodinámicas del sistema en presencia de un campo eléctrico de $F_0 = 3$ kV/cm	56
12.	Funciones termodinámicas bajo campo magnético $B_0 = 20$ T.	57
13.	Respuesta geométrica generalizada $-\partial F / \partial D$ como función de la distancia interanular D	59
14.	Representación de $V_{ad}(\rho; 300$ K) y $ R(\rho) ^2$ para el estado fundamental	80

Lista de Apéndices

	pág.
A. Determinación de la masa efectiva en el modelo de Kane	67
B. Cálculo de la energía para el estado fundamental de un anillo utilizando el método variacional	75
C. Parámetros materiales	80

Resumen

Título: Análisis teórico de la dependencia con la temperatura de los espectros de heteroestructuras de puntos cuánticos autoensamblados de InAs/GaAs. *

Autor: Sergio Felipe Mejía Campos [†]

Palabras Clave: Heteroestructuras de puntos cuánticos, física de semiconductores, dispositivos cuánticos.

Descripción: Este trabajo analiza la dependencia con la temperatura del espectro electrónico de heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con geometría anular, consideradas tanto de forma aislada como acopladas lateralmente. La descripción se construye a partir del modelo multibanda de Kane, que permite incorporar la no parabolicidad de la banda de conducción, la mezcla interbanda y la variación térmica de la masa efectiva y de la brecha de energía. Mediante una aproximación adiabática se reduce el problema tridimensional a un Hamiltoniano efectivo bidimensional, cuyo potencial de confinamiento depende de la geometría, la temperatura, la separación entre centros y la presencia de campos externos. Los niveles ligados se obtienen con el método de elementos finitos y un procedimiento autoconsistente para tratar la dependencia de la masa efectiva con la energía. Se estudia la evolución del espectro con la temperatura y con la separación interanular, así como la reorganización de los estados bajo campos eléctricos y magnéticos. Los resultados muestran que la reducción térmica de la masa efectiva domina sobre el debilitamiento de la barrera de confinamiento en el régimen analizado y produce desplazamientos y reordenamientos de los niveles que no aparecen en la aproximación parabólica. También se identifica una separación intermedia energéticamente favorable, asociada a la deslocalización de la función de onda y a una reducción de la contribución cinética. Finalmente, a partir del espectro discreto se calculan la energía interna, la entropía, la capacidad calorífica y la energía libre de Helmholtz, lo que permite relacionar la respuesta termodinámica con la geometría y los campos externos.

* Trabajo de investigación para optar al título de Magíster en Física.

[†] Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Carlos José Páez González, Doctor en Física. Codirector: Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Física.

Abstract

Title: Theoretical analysis of the temperature dependence of the spectra of self-assembled InAs/GaAs quantum dot heterostructures. *

Author: Sergio Felipe Mejía Campos [†]

Keywords: Quantum dot heterostructures, physics of semiconductors, quantum devices.

Description: This work analyzes the temperature dependence of the electronic spectrum of self-assembled InAs/GaAs heterostructures with ring-like geometry, considered both as isolated structures and as laterally coupled systems. The description is based on the multiband Kane model, which incorporates conduction-band nonparabolicity, interband mixing, and the thermal variation of the effective mass and band gap. An adiabatic approximation reduces the three-dimensional problem to an effective two-dimensional Hamiltonian whose confinement potential depends on geometry, temperature, center-to-center separation, and external fields. Bound-state energies are obtained with the finite element method and a self-consistent procedure that accounts for the energy dependence of the effective mass. The evolution of the spectrum is studied as a function of temperature and inter-ring separation, together with the reorganization of the states produced by electric and magnetic fields. The results show that, in the analyzed regime, the thermal reduction of the effective mass dominates over the weakening of the confinement barrier and produces level shifts and reorderings that are absent in the parabolic approximation. An energetically favorable intermediate separation is also identified and related to wave-function delocalization and a reduction of the kinetic contribution. Finally, the internal energy, entropy, heat capacity, and Helmholtz free energy are calculated from the discrete spectrum. These quantities connect the thermodynamic response with the geometry and the external fields and provide a complementary characterization of the confined electronic states.

* Master's thesis.

[†] Faculty of Sciences. School of Physics. Advisor: Carlos José Páez González, Doctor of Physics. Co-advisor: Willian Gutiérrez Niño, Doctor of Physics.

Introducción

Las nanoestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad ofrecen un escenario especialmente adecuado para modificar las propiedades electrónicas de los portadores de carga mediante confinamiento cuántico (1–3). Dentro de esta familia, las heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs ocupan un lugar destacado porque combinan fuerte confinamiento, compatibilidad con tecnologías epitaxiales y posibilidad de ajuste geométrico del sistema. En estos materiales, la forma, el tamaño y la distribución espacial de las nanoestructuras influyen de manera decisiva sobre el espectro electrónico. Por ello, la morfología no actúa como un simple detalle estructural, sino como un parámetro físico de control.

El desarrollo experimental de estas heteroestructuras ha avanzado junto con el perfeccionamiento de técnicas de crecimiento epitaxial, como la epitaxia por haces moleculares (MBE), la epitaxia por haces químicos (CBE) y los mecanismos de autoensamble tipo Stranski–Krastanow, que permiten controlar con mayor precisión la geometría y la composición del confinamiento (4, 5). En este contexto, las nanoestructuras con morfología anular o tipo cráter/volcán tienen un interés particular, pues su geometría no simplemente conexas favorece la aparición de fenómenos de coherencia de fase y modifica de forma sustancial la localización espacial de los estados electrónicos (6–11).

El problema se vuelve más rico cuando dos nanoestructuras se acoplan lateralmente. En ese régimen, la distancia entre centros, la simetría espacial y el tunelamiento entre las regiones confinantes gobiernan la formación de estados hibridados y de configuraciones electrónicas con carácter de molécula artificial (12, 13). En heteroestructuras de InAs/GaAs, este comportamiento es particularmente sensible a la morfología individual de cada elemento y a la presencia de la capa

de humectación o de mojado, pues ambos factores modifican la deslocalización de los portadores y la estructura de los niveles ligados (14, 15). Por ello, el estudio de sistemas aislados y acoplados lateralmente permite analizar de manera natural la competencia entre confinamiento, hibridación y control geométrico.

Desde la perspectiva de la estructura de bandas, una descripción realista de heteroestructuras InAs/GaAs exige ir más allá de la aproximación parabólica de masa efectiva. Debido al carácter de brecha angosta del InAs, la no parabolicidad de la banda de conducción y la mezcla interbanda pueden modificar de forma apreciable los espaciamientos entre niveles y la dependencia térmica del espectro (14, 16–18). Por esta razón, el modelo de Kane proporciona un marco adecuado para derivar un Hamiltoniano efectivo de conducción con parámetros dependientes de la energía, la posición y la temperatura, lo que permite incorporar de forma consistente el efecto térmico de la brecha de banda y de la masa efectiva.

Con el espectro discreto ya determinado, la descripción del sistema puede llevarse al dominio termodinámico. En nanoestructuras fuertemente confinadas, la función de partición canónica se construye a partir de los niveles electrónicos disponibles; por ello, magnitudes como la energía interna, la energía libre de Helmholtz, la entropía y la capacidad calorífica actúan como sondas directas de la estructura del espectro. Esta conexión adquiere especial relevancia cuando los niveles dependen explícitamente de la temperatura, pues en tal caso la respuesta termodinámica no está gobernada únicamente por la redistribución térmica de ocupaciones, sino también por el corrimiento intrínseco del propio espectro.

A pesar de los avances recientes en el estudio de propiedades termodinámicas de nanoestructuras confinadas, una parte importante de la literatura se ha apoyado en potenciales simplificados y en descripciones parabólicas de masa efectiva. En consecuencia, permanece menos desarrollada la caracterización termodinámica de heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs cuando se consideran de manera conjunta una geometría anular realista, acoplamiento lateral, campos eléctricos y magnéticos externos, y una descripción no parabólica dependiente de la temperatura. Este punto es relevante porque la respuesta térmica del sistema depende de pequeñas reorganiza-

ciones del sector de los niveles de energía más bajos, precisamente la región más sensible a la no parabolicidad, a la hibridación interanular y a la acción de campos externos.

Sobre esta base, el presente trabajo estudia la respuesta electrónica frente a perturbaciones externas asociadas con campos eléctricos, campos magnéticos y temperatura de un electrón confinado en heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con morfología anular tipo volcán, tanto aisladas como acopladas lateralmente. La estructura electrónica se describe mediante un Hamiltoniano efectivo monobanda derivado del modelo de Kane, con parámetros dependientes de la energía, la posición y la temperatura, y se resuelve numéricamente mediante el método de elementos finitos. El análisis compara la descripción no parabólica con un modelo parabólico de referencia y se examina el efecto de la separación entre centros de los anillos y de campos eléctricos y magnéticos externos sobre el espectro. A partir de los niveles obtenidos, se construye la formulación termodinámica en el ensamble canónico, con énfasis en la entropía y la capacidad calorífica, para establecer cómo la geometría, el acoplamiento lateral, la no parabolicidad y la dependencia térmica del Hamiltoniano determinan la respuesta del sistema.

1. Objetivos

1.1. Objetivo general

- Realizar un estudio teórico y numérico del espectro electrónico y de la respuesta termodinámica de un electrón confinado en heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con morfología anular tipo cráter o volcán, tanto aisladas como acopladas lateralmente, mediante un Hamiltoniano efectivo derivado del modelo de Kane y resuelto por el método de elementos finitos, con el propósito de determinar cómo la temperatura y los campos eléctricos y magnéticos externos modifican los niveles ligados y las magnitudes termodinámicas del sistema.

1.2. Objetivos específicos

- Desarrollar un modelo teórico para heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con geometría anular, primero en el régimen de anillos cuánticos aislados y luego en sistemas de dos anillos acoplados lateralmente, donde la intensidad del acoplamiento se module mediante la variación de la distancia entre centros, con el fin de estudiar de forma sistemática el efecto de este parámetro geométrico sobre el confinamiento electrónico, la hibridación entre estados y la formación de estados moleculares.
- Comparar el modelo de Kane con la aproximación parabólica en términos del espectro electrónico y de su dependencia con la temperatura, así como analizar el efecto de la no parabo-

licidad de la banda de conducción sobre la respuesta termodinámica del sistema.

- Calcular el espectro de baja energía de un electrón confinado en heteroestructuras de InAs/GaAs mediante un Hamiltoniano efectivo derivado del modelo de Kane, incorporando la no parabolicidad de la banda de conducción y la dependencia de los parámetros efectivos con la energía, la posición y la temperatura.
- Analizar el efecto de campos eléctricos y magnéticos externos sobre el espectro electrónico del sistema, con énfasis en los corrimientos Stark y Zeeman, la polarización espacial, la hibridación interanillo y la reorganización espectral asociada al control externo.
- Formular y calcular, a partir del espectro discreto obtenido, la energía interna, la energía libre de Helmholtz, la entropía y la capacidad calorífica en el marco del ensamble canónico, para determinar cómo la temperatura, la separación entre centros y los campos externos modifican la respuesta termodinámica del sistema.

2. Estado del arte y delimitaciones del problema

2.1. Puntos cuánticos del grupo III–V y relevancia física

Las nanoestructuras semiconductoras III–V constituyen una plataforma fundamental para estudiar el confinamiento cuántico de portadores de carga (1–3). En particular, los puntos cuánticos (*quantum dots*, QDs) presentan confinamiento en las tres direcciones espaciales, lo que conduce a espectros discretos y a su interpretación como átomos artificiales. Esta propiedad, junto con su alta eficiencia luminiscente y su integración en arquitecturas fotónicas, ha hecho de las heteroestructuras InAs/GaAs sistemas de gran interés para aplicaciones optoelectrónicas y de información cuántica (19, 20).

El avance en técnicas de crecimiento epitaxial, como MBE, CBE y el autoensamble tipo Stranski–Krastanow, ha permitido controlar con mayor precisión el tamaño, la forma y la distribución espacial de estas nanoestructuras (4, 5). Como resultado, la relación entre morfología y estructura electrónica se ha convertido en un tema central dentro del estudio de materiales de baja dimensionalidad.

2.2. Influencia de la morfología y del acoplamiento lateral

Dentro de las distintas morfologías accesibles, los anillos cuánticos (*quantum rings*, QRs) destacan por su geometría no simplemente conexa. Esta característica los convierte en sistemas especialmente adecuados para estudiar fenómenos de coherencia de fase, oscilaciones de Aharonov–Bohm, corrientes persistentes e interferencia cuántica (6–11). Por ello, los QRs constituyen una

plataforma natural para analizar cómo la conectividad del confinamiento modifica la estructura de niveles y la localización electrónica.

Cuando dos nanoestructuras se acoplan lateralmente, el tunelamiento, la simetría espacial y la separación entre centros generan estados hibridados cuya física no puede describirse como una simple suma de constituyentes aislados (12, 13). En puntos cuánticos dobles laterales de InAs/GaAs, se ha mostrado que la morfología individual de cada elemento y la presencia de capas de humectación o mojado afectan de manera importante la deslocalización de los portadores y la respuesta óptica del sistema (14, 15). En anillos laterales acoplados, estas consideraciones son todavía más fuertes, ya que la distancia entre centros puede inducir reorganizaciones espectrales y cambios de simetría en los autoestados del operador de Hamilton (21, 22).

2.3. Campos externos, espectro y control electrónico

La aplicación de campos eléctricos y magnéticos externos constituye una herramienta eficiente para modificar la estructura electrónica de nanoestructuras confinadas. En sistemas anulares, los campos externos pueden desplazar niveles de energía, favorecer la polarización espacial y alterar la jerarquía de los estados ligados (23–25). En particular, el campo magnético desempeña un papel destacado en geometrías anulares, donde la geometría del confinamiento amplifica su influencia sobre el espectro (6, 7).

Desde el punto de vista de la estructura de bandas, una descripción realista de heteroestructuras InAs/GaAs requiere ir más allá de la aproximación parabólica. Debido a la brecha angosta del InAs, la no parabolicidad de la banda de conducción modifica la masa efectiva y, por tanto, los espaciamientos entre niveles ligados (14, 16–18). A ello se suma la dependencia térmica de la brecha de banda, que altera la escala de confinamiento y hace que el espectro no pueda considerarse rígido en un intervalo amplio de temperaturas.

2.4. Avances recientes hacia propiedades termodinámicas en nanoestructuras

En los últimos años, el análisis de nanoestructuras confinadas ha incorporado cada vez con mayor frecuencia magnitudes termodinámicas derivadas del espectro discreto. La entropía, la energía libre de Helmholtz y la capacidad calorífica son sensibles a la estructura fina de niveles, a las pequeñas separaciones energéticas y a la redistribución térmica de ocupaciones. Por ello, estas cantidades se han convertido en herramientas útiles para identificar acoplamiento cuántico, pequeñas separaciones entre niveles y reorganizaciones espectrales.

En anillos y sistemas anulares dobles, diversos trabajos han mostrado que la entropía y la capacidad calorífica dependen de manera no trivial de la geometría, de la separación entre centros de los anillos y de la presencia de campos externos, pudiendo incluso exhibir anomalías tipo Schottky (26–28). Estos avances muestran que la termodinámica constituye una vía complementaria para caracterizar la estructura electrónica de nanoestructuras fuertemente confinadas (20).

2.5. Vacío específico que aborda esta tesis

A pesar de estos avances, gran parte de la literatura se ha desarrollado a partir de potenciales de confinamiento simplificados y modelos parabólicos de masa efectiva. En consecuencia, permanece poco explorada la caracterización termodinámica de nanoestructuras anulares autoensambladas cuando se consideran simultáneamente una geometría realista, acoplamiento lateral, campos externos y una descripción no parabólica dependiente de la temperatura.

En este contexto, esta tesis aborda el estudio de un electrón confinado en heteroestructuras anulares autoensambladas de InAs/GaAs, aisladas y acopladas lateralmente, sometidas a campos eléctricos y magnéticos externos. La estructura electrónica se describe mediante un Hamiltoniano efectivo derivado del modelo de Kane, con parámetros dependientes de la energía, la posición y la temperatura. A partir del espectro electrónico obtenido, se construye una descripción termodinámica en el ensamble canónico, con énfasis en la entropía y la capacidad calorífica, con el fin

de establecer cómo la no parabolicidad, la geometría, el acoplamiento lateral y la reorganización espectral inducida por la temperatura y los campos externos determinan la respuesta térmica del sistema.

3. Fundamentos físicos y teóricos

3.1. Nanoestructuras semiconductoras y heteroestructuras InAs/GaAs

Cuando dos sólidos semiconductores con diferentes brechas de energía (E_g) se combinan, se forman heterojunturas que permiten la aparición de potenciales de confinamiento para los portadores de carga y la modificación de la estructura de bandas. Históricamente, las primeras nanoestructuras semiconductoras fueron obtenidas mediante técnicas de crecimiento epitaxial, como la deposición química y los mecanismos de autoensamble tipo Stranski–Krastanow, que hicieron posible la formación controlada de capas y regiones confinantes en heteroestructuras (4, 5). Estas primeras configuraciones dieron lugar a pozos cuánticos (*quantum wells*, QWs), donde los portadores se mueven cuasi libremente en dos dimensiones, y más adelante a hilos cuánticos (*quantum wires*, QWRs), en los que el confinamiento se produce en dos direcciones espaciales.

El desarrollo posterior de métodos litográficos, técnicas *top-down*, autoensamble y síntesis coloidal permitió la obtención de puntos cuánticos, en los cuales los portadores quedan confinados en las tres direcciones espaciales (29–32). Esta propiedad conduce a espectros discretos y convierte a estas nanoestructuras en sistemas análogos a átomos artificiales. Dentro de este marco, las heteroestructuras InAs/GaAs han adquirido especial relevancia debido a su viabilidad experimental y al amplio control que ofrecen sobre la morfología, el tamaño y el acoplamiento lateral entre nanoestructuras.

En el contexto de heteroestructuras, es posible distinguir entre alineaciones de bandas tipo I y tipo II. En una heteroestructura tipo I, las bandas de conducción y valencia del material de menor brecha quedan confinadas dentro del material de mayor brecha, favoreciendo la localización

conjunta de electrones y huecos. En cambio, en una heteroestructura tipo II, las bandas quedan desalineadas de manera que los electrones y huecos se localizan preferentemente en materiales distintos, reduciendo su recombinación. Por su parte, la aleación también puede clasificarse según el tipo de dopaje en semiconductores tipo n y tipo p , dependiendo de si se introduce un exceso de electrones o de huecos en la estructura (33).

3.2. Periodicidad cristalina, estados de Bloch y aproximación de función envolvente

En un semiconductor cristalino ideal, el potencial periódico satisface la relación de invariancia traslacional (18, 34)

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (1)$$

donde $\mathbf{R}$ es un vector de la red cristalina. Esta propiedad implica que el Hamiltoniano conmuta con el operador de traslación,

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\mathbf{R}}] = 0, \quad (2)$$

y, en consecuencia, es posible elegir autoestados comunes de ambos operadores. Los estados de Bloch $|n, \mathbf{k}\rangle$ satisfacen entonces

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} |n, \mathbf{k}\rangle, \quad \hat{H} |n, \mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle, \quad (3)$$

lo que conduce al teorema de Bloch para la función de onda electrónica,

$$\langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ posee la periodicidad de la red.

En heteroestructuras y nanoestructuras, el potencial de confinamiento varía en escalas mucho mayores que el parámetro de red. Esto permite separar la función de onda en una parte rápida, asociada a la periodicidad cristalina, y una parte lenta que captura la modulación espacial debi-

da al confinamiento (34). Para un electrón en la banda de conducción, la función de onda puede aproximarse como

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx U(\mathbf{r})u_{c0}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

donde $u_{c0}(\mathbf{r})$ es la parte periódica evaluada típicamente cerca del punto Γ ($\mathbf{k} \approx 0$) y $U(\mathbf{r})$ es la función envolvente suave que contiene la información sobre el potencial de confinamiento y los campos externos (35). Esta aproximación constituye la base de los modelos de masa efectiva y de la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

3.3. Hamiltoniano de Pauli, teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, modelo de Kane y reducción de Löwdin

El punto de partida microscópico para describir un electrón no relativista en un cristal, en presencia de campos electromagnéticos externos, es el Hamiltoniano de Pauli (34),

$$H_{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m_0} \hat{\Pi}^2 - e\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) + \frac{g_0\mu_B}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + H_{\text{SO}}, \quad (6)$$

donde $\hat{\Pi} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$, m_0 es la masa del electrón libre, $\mathbf{A}$ y ϕ son los potenciales vector y escalar, respectivamente, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa las matrices de Pauli y $\mu_B = e\hbar/(2m_0c)$ es el magnetón de Bohr. El término de acoplamiento espín-órbita puede escribirse, en el orden $1/c^2$ (18, 34),

$$H_{\text{SO}} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U) \cdot \hat{\Pi}, \quad U(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Aunque la Ec. (6) proporciona una descripción microscópica general, en heteroestructuras su aplicación directa resulta poco práctica. Por ello se recurre a la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, la cual permite expandir el Hamiltoniano cristalino cerca del punto Γ y describir el acoplamiento entre bandas a partir de una base reducida de estados de Bloch (18). En semiconductores III-V, dicha base incluye el estado tipo s de conducción y los estados tipo p de valencia. Al incorporar el acoplamiento espín-órbita, la banda de valencia se reorganiza en los subespacios Γ_{8v} y Γ_{7v} (36).

El modelo multibanda de Kane describe este acoplamiento interbanda a través de elementos

de matriz del operador momento. El parámetro efectivo que cuantifica dicho acoplamiento es el parámetro de Kane P , asociado al elemento $\langle S|\hat{p}_x|X\rangle$ y sus equivalentes por simetría. El efecto principal de esta interacción se manifiesta en la curvatura de la banda de conducción y, por tanto, en la aparición de no parabolicidad.

Para reducir el problema multibanda a una descripción efectiva de la banda de conducción, el Hamiltoniano puede escribirse en forma de bloques,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{cc} & \hat{H}_{cv} \\ \hat{H}_{vc} & \hat{H}_{vv} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

donde $\hat{H}_{cc}$ actúa sobre el subespacio de conducción, $\hat{H}_{vv}$ sobre el de valencia y $\hat{H}_{cv}$ acopla ambos subespacios. La partición de Löwdin permite eliminar perturbativamente el subespacio de valencia y obtener un Hamiltoniano efectivo dependiente de la energía,

$$\hat{H}_{\text{eff}}(E) = \hat{H}_{cc} + \hat{H}_{cv} (E\mathbf{1} - \hat{H}_{vv})^{-1} \hat{H}_{vc}. \quad (9)$$

Esta reducción introduce de manera natural una masa efectiva dependiente del autovalor y, por tanto, un carácter no parabólico en la descripción de la banda de conducción (véase el Apéndice 1).

3.4. Masa efectiva no parabólica dependiente de energía, posición y temperatura

Reteniendo las contribuciones dominantes asociadas a los subespacios Γ_{8v} y Γ_{7v} , la masa efectiva de conducción en el modelo de Kane reducido puede escribirse como

$$\frac{m_0}{m^*(\mathbf{r}, E; T)} = 1 + \frac{2m_0P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g(\mathbf{r}; T) + E} + \frac{1}{E_g(\mathbf{r}; T) + \Delta_0(\mathbf{r}) + E} \right), \quad (10)$$

donde E es la energía del electrón medida desde el borde de la banda de conducción, $E_g(\mathbf{r}; T)$ es la brecha de banda local y $\Delta_0(\mathbf{r})$ representa el desdoblamiento espín-órbita de la banda de valencia, parámetros dados en la Tabla 1. Esta forma muestra que la masa efectiva depende no solo del material y de la posición, sino también del propio autovalor y de la temperatura.

La dependencia térmica de la brecha de banda se incorpora mediante las relaciones de Varshni (34, 37, 38),

$$E_g(\mathbf{r}, T) = E_g^{(M)}(T) = E_g^{(M)}(0) - \frac{\alpha_M T^2}{T + \beta_M}, \quad M \in \{\text{GaAs}, \text{InAs}\}, \quad (11)$$

$E_g^{(M)}(0)$, α_M y β_M vienen dados por la Tabla 2 (véase el Apéndice 3). En consecuencia, la temperatura modifica simultáneamente la escala de confinamiento, a través de la brecha de banda, y el término cinético, a través de la masa efectiva. Esto conduce a un corrimiento intrínseco del espectro y convierte el problema de autovalores en un problema no lineal autoconsistente.

3.5. Influencia de campos magnético y eléctrico sobre la energía

En el presente problema, el campo magnético penetra la región accesible al electrón y, por tanto, su influencia sobre la energía no puede interpretarse únicamente en términos de una fase tipo Aharonov–Bohm, sino también como una contribución orbital directa al Hamiltoniano efectivo. Para un Hamiltoniano con masa efectiva constante m^* y potencial de confinamiento $V(\mathbf{r})$, el campo magnético se introduce mediante el acoplamiento (39)

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}, \quad (12)$$

de modo que

$$\hat{H}(B) = \frac{1}{2m^*} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Adoptando el gauge simétrico para un campo uniforme perpendicular al plano,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}, \quad \mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}, \quad (14)$$

el Hamiltoniano puede reescribirse como

$$\hat{H}(B) = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m^*} \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m^*} \rho^2, \quad (15)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}). \quad (16)$$

Tomando el valor esperado sobre un estado normalizado $|\psi\rangle$, se obtiene

$$\langle \hat{H}_B \rangle_\psi = \langle \hat{H}_0 \rangle_\psi + \frac{eB}{2m^*} \langle \hat{L}_z \rangle_\psi + \frac{e^2 B^2}{8m^*} \langle \rho^2 \rangle_\psi. \quad (17)$$

Esta expresión muestra que la energía recibe una contribución lineal en B , asociada al contenido angular del estado, y una contribución cuadrática, correspondiente al término diamagnético.

Por otra parte, la acción de un campo eléctrico uniforme $\mathbf{F}$ puede introducirse mediante el término electrostático

$$\hat{H}(\mathbf{F}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}. \quad (18)$$

En consecuencia, el valor esperado de la energía sobre un estado normalizado queda dado por

$$\langle \hat{H}_F \rangle_\psi = \langle \hat{H}_0 \rangle_\psi - e\mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{r} \rangle_\psi. \quad (19)$$

Si el campo eléctrico se aplica en el plano, con magnitud F y dirección θ_F ,

$$\mathbf{F} = F(\cos \theta_F \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta_F \hat{\mathbf{y}}), \quad (20)$$

se obtiene

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{r} = F \rho \cos(\phi - \theta_F), \quad (21)$$

de manera que

$$\hat{H}(F) = \hat{H}_0 - eF \rho \cos(\phi - \theta_F), \quad (22)$$

y por tanto

$$\langle \hat{H}_F \rangle_\psi = \langle \hat{H}_0 \rangle_\psi - eF \langle \rho \cos(\phi - \theta_F) \rangle_\psi. \quad (23)$$

La influencia del campo eléctrico sobre la energía está entonces gobernada por la polarización espacial del estado en la dirección del campo. Si la distribución electrónica es simétrica respecto del centro del sistema, el corrimiento lineal puede desaparecer; en cambio, cuando el estado está descentrado o la simetría del confinamiento se reduce, aparece un corrimiento lineal apreciable.

3.6. Ensamble canónico y termodinámica de espectros discretos

Una vez determinado el espectro discreto de un Hamiltoniano efectivo $\hat{H}(\lambda)$, donde λ representa de forma general el conjunto de parámetros geométricos y externos que caracterizan al sistema, es posible construir su descripción termodinámica dentro de la mecánica estadística en equilibrio. En esta aproximación, el sistema se supone en contacto con un reservorio térmico a temperatura fija T , de manera que puede intercambiar energía con el entorno mientras permanecen constantes el número de partículas y los parámetros λ . El conjunto conceptual de copias idénticas del sistema bajo estas condiciones define el ensamble canónico.

La cantidad central de esta descripción es la función de partición,

$$Z(T, \lambda) = \sum_n e^{-\beta E_n(\lambda)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (24)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann. A partir de ella, la probabilidad de ocupación del estado n

viene dada por

$$p_n(T, \lambda) = \frac{e^{-\beta E_n(\lambda)}}{Z(T, \lambda)}. \quad (25)$$

Estas probabilidades permiten calcular el valor esperado de cualquier observable diagonal en la base espectral,

$$\langle O \rangle = \sum_n p_n O_n. \quad (26)$$

El potencial termodinámico natural del ensamble canónico es la energía libre de Helmholtz,

$$F(T, \lambda) = -k_B T \ln Z(T, \lambda), \quad (27)$$

a partir de la cual pueden obtenerse las demás magnitudes termodinámicas. En particular, la energía interna se expresa como

$$U(T, \lambda) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(T, \lambda) = \sum_n p_n E_n(\lambda), \quad (28)$$

y la entropía adopta la forma

$$S(T, \lambda) = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_\lambda = -k_B \sum_n p_n \ln p_n = k_B \ln Z + \frac{U}{T}. \quad (29)$$

Otra magnitud de interés es la capacidad calorífica a parámetros externos fijos,

$$C_\lambda(T) = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_\lambda. \quad (30)$$

Estas expresiones muestran que la termodinámica de un sistema nanoestructurado queda enteramente determinada por la estructura del espectro y por la forma en que este cambia con los parámetros de control. En particular, cuando λ representa magnitudes geométricas, campos externos o parámetros efectivos del material, cualquier modificación del confinamiento o de la estructura electrónica se refleja directamente en la función de partición y, por tanto, en la energía libre, la entropía, la energía interna y la capacidad calorífica.

4. Modelo físico del sistema

4.1. Hamiltoniano efectivo de conducción en presencia de campos externos

En el nivel de una banda efectiva de conducción, la dinámica del electrón confinado en una heteroestructura semiconductor bajo campos externos puede modelarse mediante (14, 17, 18)

$$\hat{H} = \hat{\Pi} \cdot \left[\frac{1}{2m^*(\mathbf{r}, E; T)} \hat{\Pi} \right] + V(\mathbf{r}; T) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r} \pm \frac{g_0 \mu_B}{2} B_0, \quad (31)$$

donde $m^*(\mathbf{r}, E; T)$ es la masa efectiva no parabólica dependiente de la posición, la energía y la temperatura, $V(\mathbf{r}; T)$ representa el potencial de confinamiento efectivo, $\mathbf{F}$ es el campo eléctrico externo y el último término corresponde a la proyección del término Zeeman sobre autoestados de espín, con $g_0 \approx 2$ (34) y $g_0 \mu_B B_0 / 2 \approx 1$ meV para $B_0 = 10$ T(33). El acoplamiento está dado por

$$\hat{\Pi} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}. \quad (32)$$

Para un campo magnético uniforme aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento, $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{z}}$, se adopta el gauge de Coulomb ya que proporciona una descripción continua y simétrica del potencial vector en todo el dominio,,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} \rho B_0 \hat{\boldsymbol{\theta}}. \quad (33)$$

La simetría del problema permite entonces el uso de coordenadas cilíndricas. Además, un campo

eléctrico homogéneo en el plano,

$$\mathbf{F} = F_0 \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_F), \quad (34)$$

de magnitud F_0 y orientado con ángulo θ_F , induce el término lineal

$$-eF_0\rho \cos(\phi - \theta_F), \quad (35)$$

que corresponde a la contribución Stark en el Hamiltoniano efectivo.

4.2. Aproximación adiabática: separación axial y en el plano

Las nanoestructuras autoensambladas presentan una fuerte anisotropía geométrica: el confinamiento a lo largo de la dirección de crecimiento z es, típicamente, más intenso que el confinamiento en el plano (x,y) . Esta separación de escalas energéticas permite introducir una aproximación adiabática de tipo Born–Oppenheimer, en la que la envolvente total puede factorizarse como

$$\Psi(\rho, \phi, z) = \phi(\rho, \phi) \Phi(z; \rho, \phi). \quad (36)$$

Al sustituir la Ec. (36) en la ecuación de Schrödinger asociada al Hamiltoniano de la Ec. (31), se obtiene una descomposición aproximada del problema en dos contribuciones,

$$H_{\text{eff}} \simeq H_{\rho, \phi} + H_z, \quad (37)$$

donde H_z gobierna el movimiento rápido en la dirección axial y $H_{\rho, \phi}$ describe la dinámica lenta en el plano. Esta aproximación permite tratar primero el problema unidimensional en z y utilizar posteriormente su autovalor fundamental como un potencial efectivo para el movimiento lateral.

4.3. Problema axial y condiciones de Ben Daniel–Duke

Dentro de la aproximación adiabática, el Hamiltoniano axial queda dado por

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m^*(z, E; T)} \frac{\partial \Phi(z)}{\partial z} \right] + V(z; T) \Phi(z) = E_z(\rho; T) \Phi(z), \quad (38)$$

donde $m^*(z, E; T)$ y $V(z; T)$ reflejan la composición por capas de la heteroestructura a lo largo de z , y el autovalor $E_z(\rho; T)$ actúa como un potencial de confinamiento adiabático para el movimiento en el plano.

El confinamiento axial se modela como un pozo cuántico finito de altura V_0 ,

$$V(z; T) = \begin{cases} V_0, & z < 0, \quad \text{Región 1,} \\ 0, & 0 \leq z \leq d(\rho), \quad \text{Región 2,} \\ V_0, & z > d(\rho), \quad \text{Región 3,} \end{cases} \quad (39)$$

donde $d(\rho)$ representa la altura local de la nanoestructura, dada por la Ec. 46. Para heteroestructuras InAs/GaAs, el desajuste en la banda de conducción puede aproximarse como (14, 17, 18, 34)

$$V_0 = 0.7 [E_g^{\text{GaAs}}(T) - E_g^{\text{InAs}}(T)] [\text{eV}], \quad (40)$$

con $E_g^{\text{GaAs}}(T)$ y $E_g^{\text{InAs}}(T)$ dados por la relación de Varshni, Ec. (11).

En las interfaces donde la masa efectiva cambia abruptamente, las condiciones de contorno apropiadas son las de Ben Daniel–Duke (33), que garantizan la continuidad de la envolvente y del flujo de probabilidad:

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(0), \quad \frac{1}{m_2^*} \frac{\partial \Phi_1}{\partial z} \Big|_0 = \frac{1}{m_1^*} \frac{\partial \Phi_2}{\partial z} \Big|_0, \quad (41)$$

$$\Phi_2(d) = \Phi_3(d), \quad \frac{1}{m_1^*} \frac{\partial \Phi_2}{\partial z} \Big|_{d(\rho)} = \frac{1}{m_2^*} \frac{\partial \Phi_3}{\partial z} \Big|_{d(\rho)}. \quad (42)$$

Al imponer estas condiciones sobre las soluciones analíticas de cada región, se obtiene una ecuación trascendente para los estados ligados. En forma compacta,

$$\tan(k_2 d) = \frac{2k_1 k_2 m_1^* m_2^*}{k_2^2 m_2^{*2} - k_1^2 m_1^{*2}}, \quad (43)$$

donde

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_1^* E_z}{\hbar^2}}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m_2^* (V_0 - E_z)}{\hbar^2}}. \quad (44)$$

El autovalor fundamental define entonces el potencial adiabático,

$$V_{\text{ad}}(\rho; T) \equiv E_z(\rho; T). \quad (45)$$

4.4. Geometría tipo volcán y potencial adiabático

Para describir nanoestructuras anulares con depresión central y máximos distribuidos sobre un anillo, se emplea un perfil geométrico efectivo de altura de la forma

$$d(\rho) = \frac{16h_r}{(R_e - R_i)^4} (R_e - \rho)^2 (R_i - \rho)^2 + h_{\text{WL}}, \quad (46)$$

donde R_i y R_e son los radios interno y externo, h_r controla la altura máxima del anillo y h_{WL} representa el espesor de la capa de mojado o *wetting layer*. La Figura 1 muestra la geometría tipo volcán empleada en este trabajo.

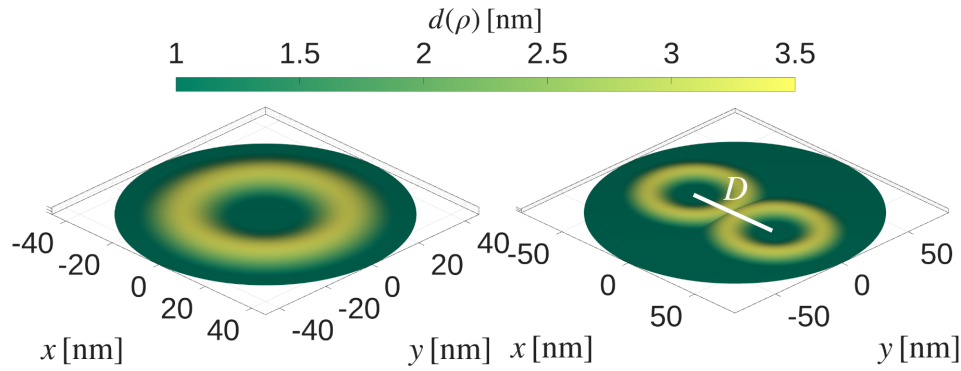
Al resolver la Ec. (43) para $1 \leq d(\rho) \leq 3.5 \text{ nm}$, el efecto del confinamiento axial puede aproximarse mediante una ley empírica del tipo

$$V_{\text{ad}}(\rho; T) \approx \frac{\xi(T)}{d(\rho)^{0.7}}, \quad (47)$$

donde $\xi(T)$ depende del modelo de banda empleado y recoge la influencia térmica sobre el poten-

Figura 1

Geometría tipo volcán empleada para modelar el confinamiento efectivo en un sistema doble acoplado. La distribución de color representa el perfil de altura $d(\rho)$ definido en la Ec. (46), evidenciando el máximo anular y la depresión central característicos de cada nanoestructura. El parámetro D denota la distancia centro–centro entre ambos volcanes y controla la intensidad del acoplamiento por tunelamiento y la formación de un potencial efectivo tipo doble pozo. Todas las dimensiones espaciales están expresadas en nm y la escala de color corresponde a $d(\rho)$ en nm.



cial adiabático. En particular,

$$\xi(T)[\text{eV} \cdot \text{nm}^{0.7}] = \begin{cases} 0.5861 - 2.091 \times 10^{-5} T[\text{K}], & \text{Kane,} \\ 0.6558 - 9.533 \times 10^{-5} T[\text{K}], & \text{Parabólico.} \end{cases} \quad (48)$$

4.5. Hamiltoniano efectivo bidimensional para sistemas aislados y acoplados

Una vez eliminado el grado de libertad axial e introducido el potencial adiabático, el Hamiltoniano efectivo bidimensional para un sistema aislado puede escribirse como

$$\hat{H}_{2D} = \hat{\Pi} \cdot \left[\frac{1}{2m^*(\mathbf{r}, E; T)} \hat{\Pi} \right] + V_{\text{ad}}(\rho; T) \pm \frac{g_0 \mu_B}{2} B_0 - eF_0 \rho \cos(\phi - \theta_F). \quad (49)$$

Este Hamiltoniano constituye el punto de partida para el cálculo de niveles ligados, densidades de probabilidad y propiedades electrónicas del anillo aislado.

En sistemas acoplados lateralmente, la separación entre centros D introduce una nueva dependencia geométrica en el potencial efectivo (Figura 2). En este caso, cada anillo aporta una contribución desplazada respecto del eje de simetría, centrada en $x = \pm D/2$. El potencial lateral resultante puede construirse como la envolvente inferior de ambos perfiles desplazados,

$$V_{\text{ad}}(x, y; T, D) = \text{mín} \{V_{\text{ad}}(\rho_-; T, D), V_{\text{ad}}(\rho_+; T, D)\}, \quad (50)$$

donde

$$\rho_{\pm} = \sqrt{(x \pm D/2)^2 + y^2}. \quad (51)$$

La operación mín indica que, en cada punto del plano, el electrón experimenta la menor energía entre las dos contribuciones locales, definiendo así la geometría efectiva del doble confinamiento y la región de acoplamiento entre ambos anillos. De este modo, el Hamiltoniano bidimensional en sistemas acoplados se obtiene al reemplazar el potencial aislado por $V_{\text{ad}}(x, y; T, D)$ en la Ec. (49).

4.6. Espectro dependiente de temperatura: mecanismo doble de renormalización

En tratamientos estándar, el espectro $\{E_i\}$ se considera fijo, es decir, independiente de la temperatura, y T entra únicamente a través de los pesos canónicos p_i . En el enfoque adoptado en esta tesis, por el contrario, los niveles son *explícitamente dependientes de la temperatura T y dependientes paramétricamente de la distancia entre centros D* , es decir,

$$E_i = E_i(T; D). \quad (52)$$

Esta dependencia surge porque la temperatura entra de manera directa a través de la brecha de banda $E_g(T)$, de la masa efectiva $m^*(\mathbf{r}, E; T)$ y, mediante el problema axial, del potencial adiabático V_{ad} .

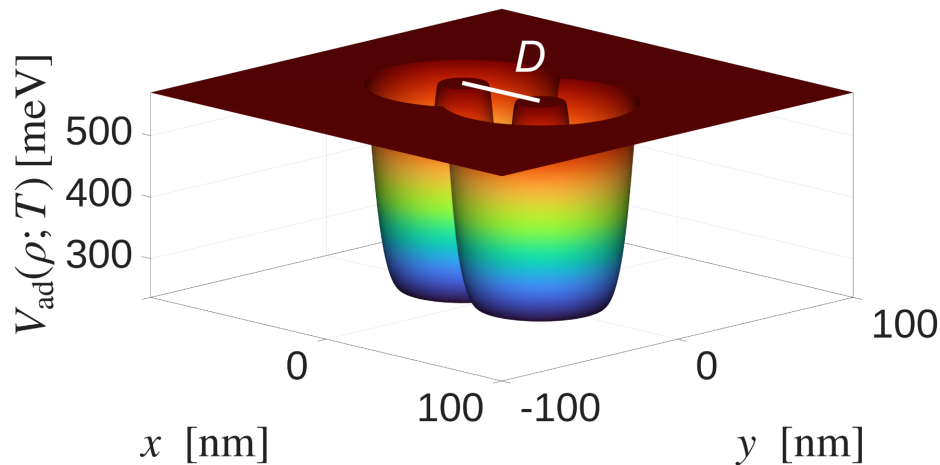
En el caso de sistemas acoplados, la dependencia respecto a D se incorpora a través de la construcción dada en la Ec. (50). Así, el espectro está controlado simultáneamente por dos mecanismos:

1. **Redistribución térmica de ocupaciones:** al variar T cambian los pesos canónicos p_i , incluso si el espectro fuese independiente de la temperatura.
2. **Renormalización del espectro:** los niveles se desplazan con T debido a la variación de los parámetros materiales y a la no parabolicidad, modificando las separaciones energéticas y la accesibilidad térmica de los estados excitados.

Esta distinción es fundamental para interpretar las diferencias entre la aproximación parabólica, en la cual la masa efectiva se considera constante, y el modelo de Kane, donde m^* depende de E y de T . En particular, a temperaturas intermedias, cuando varios estados excitados comienzan a contribuir de forma apreciable, ambas contribuciones se combinan y generan reorganizaciones espectrales que no pueden entenderse como simples corrimientos rígidos del espectro.

Figura 2

Representación espacial del potencial adiabático $V_{ad}(x, y; T, D)$ a $T = 300$ K. Se evidencia la dependencia paramétrica con la distancia entre centros D .



4.7. Formulación termodinámica con espectro $E_n(T; D, \mathbf{B}, \mathbf{F})$

Una vez obtenido el conjunto discreto de niveles $\{E_n(T; D, \mathbf{B}, \mathbf{F})\}$, la respuesta termodinámica efectiva del electrón confinado se evalúa dentro del ensamble canónico. Con el fin de simplificar la notación en lo que sigue, se introduce

$$\lambda \equiv (\mathbf{B}, \mathbf{F}), \quad (53)$$

de modo que, a partir de este punto, el espectro podrá escribirse de forma compacta como

$$E_n(T; D, \lambda). \quad (54)$$

Aquí, D representa el parámetro geométrico asociado a la separación entre centros, mientras que λ agrupa la dependencia respecto de los campos externos. Para mejorar la estabilidad numérica, se introduce primero el espectro desplazado respecto del estado fundamental,

$$\varepsilon_n(T; D, \lambda) = E_n(T; D, \lambda) - E_0(T; D, \lambda), \quad (55)$$

donde $E_0(T; D, \lambda)$ es la energía del estado base. En términos de este espectro relativo, la función de partición se escribe como

$$Z(T; D, \lambda) = \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n(T; D, \lambda)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (56)$$

con k_B la constante de Boltzmann. Las probabilidades de ocupación asociadas adoptan entonces la forma

$$p_n(T; D, \lambda) = \frac{e^{-\beta \varepsilon_n(T; D, \lambda)}}{Z(T; D, \lambda)}. \quad (57)$$

Dentro de esta construcción efectiva, la energía libre de Helmholtz se define como

$$F(T; D, \lambda) = E_0(T; D, \lambda) - k_B T \ln Z(T; D, \lambda), \quad (58)$$

mientras que la entropía se obtiene a partir de la definición

$$S(T; D, \lambda) = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{D, \lambda}. \quad (59)$$

Dado que el espectro depende explícitamente de la temperatura, esta derivada no coincide con la forma canónica usual de espectro fijo, sino que conduce a

$$S(T; D, \lambda) = k_B \ln Z + \frac{1}{T} \sum_n p_n \varepsilon_n - \sum_n p_n \frac{\partial E_n}{\partial T}. \quad (60)$$

En consecuencia, la energía interna se obtiene de

$$U(T; D, \lambda) = F + TS = \sum_n p_n E_n - T \sum_n p_n \frac{\partial E_n}{\partial T}. \quad (61)$$

En el límite de un espectro independiente de T , las Ecs. (60) y (61) se reducen a las expresiones canónicas convencionales.

La capacidad calorífica a geometría y campos externos fijos se define como

$$C_V(T; D, \lambda) = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{D, \lambda}. \quad (62)$$

En la implementación numérica, tanto la derivada que define la entropía como la que define la capacidad calorífica se evaluaron mediante diferencias finitas sobre la malla discreta de temperaturas empleada para construir el espectro $E_n(T; D, \lambda)$. De este modo, las cantidades $S(T; D, \lambda)$, $U(T; D, \lambda)$ y $C_V(T; D, \lambda)$ se obtuvieron combinando las Ecs. (56)–(62) con aproximaciones numéricas para las derivadas respecto a la temperatura, incorporando explícitamente el corrimiento intrínseco de los niveles con T .

Esta formulación pone de manifiesto que la respuesta termodinámica de la molécula de anillos cuánticos acoplados está gobernada por la acción combinada del confinamiento lateral, la hibridación entre anillos, la reorganización espectral inducida por los campos externos y la dependencia térmica del Hamiltoniano efectivo. En particular, el parámetro geométrico D modifica directamente el confinamiento lateral efectivo y los espaciamientos entre niveles de baja energía, mientras que la masa efectiva no parabólica derivada del modelo de Kane y la renormalización térmica de las brechas de banda reconfiguran el espectro con la temperatura. En consecuencia, el comportamiento de la energía libre de Helmholtz, entropía, energía interna y capacidad calorífica está controlado no solo por la redistribución térmica entre niveles, sino también por el corrimiento intrínseco de los niveles con T , así como de la hibridación debida al parámetro D y la influencia de los campos externos.

4.8. Parámetros utilizados en este trabajo

El desarrollo de este trabajo involucra los parámetros geométricos: $R_i = 10$ nm, $R_e = 40$ nm, $h_r = 2.5$ nm, $h_{WL} = 1.0$ nm así como los parámetros de banda de los materiales InAs/GaAs que se presentan en el Apéndice 3.

5. Metodología numérica

5.1. Método de elementos finitos y formulación débil

La resolución del problema de autovalores asociado al Hamiltoniano efectivo descrito en la ecuación 49, se realizó mediante el método de elementos finitos (FEM), implementado en el software comercial COMSOL MULTIPHYSICS 6.2. Esta elección se fundamenta en la flexibilidad del FEM para tratar geometrías complejas, coeficientes dependientes de la posición y condiciones de frontera no triviales, características propias de las nanoestructuras semiconductoras autoensambladas.

En COMSOL, el problema se formula dentro del módulo de ecuaciones en derivadas parciales, resolviendo la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (63)$$

donde $\hat{H}$ es el Hamiltoniano efectivo de Kane dependiente de la energía, la posición y la temperatura. En particular, la presencia de una masa efectiva no constante conduce a una ecuación diferencial del tipo

$$\nabla \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m^*(\mathbf{r}, E; T)} \nabla \Psi \right] + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}; T) \Psi = E\Psi, \quad (64)$$

la cual se introduce en COMSOL mediante su formulación variacional o débil, evitando así la discretización explícita de derivadas sobre coeficientes espaciales no uniformes.

Dentro del método de elementos finitos, la función de onda se aproxima mediante una

expansión en funciones de forma locales (40),

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (65)$$

donde $\{\varphi_i\}$ son funciones base definidas sobre la malla y c_i son coeficientes desconocidos. Al sustituir esta expansión en la ecuación de Schrödinger y proyectar sobre el espacio de prueba, se obtiene un problema matricial generalizado de autovalores de la forma

$$\mathbf{K}\mathbf{c} = E\mathbf{M}\mathbf{c}, \quad (66)$$

donde $\mathbf{K}$ es la matriz de rigidez asociada a los términos cinéticos y potenciales, y $\mathbf{M}$ es la matriz de masa asociada al producto interno de las funciones de forma.

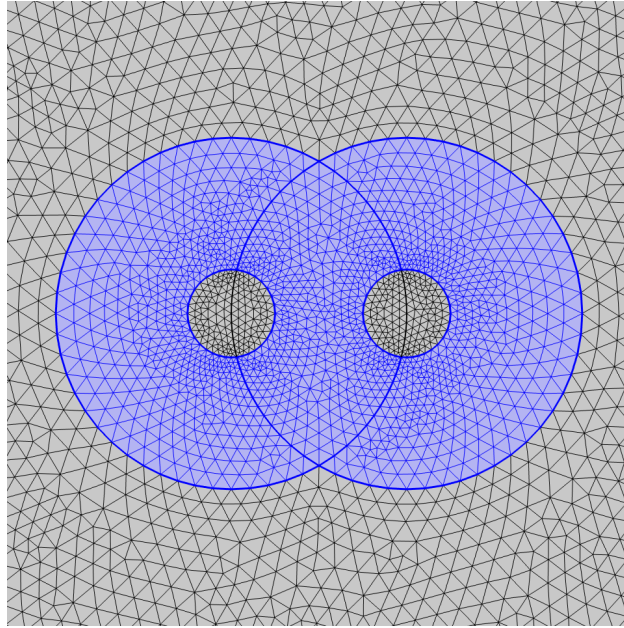
5.2. Discretización espacial y tratamiento de la dependencia energética

La discretización espacial se llevó a cabo mediante elementos triangulares en el plano bidimensional del problema efectivo. En todas las simulaciones se utilizó la malla *extra fine semiconductor mesh* de COMSOL, con refinamiento en las regiones donde el potencial y la masa efectiva presentan mayores gradientes, en particular en las interfaces InAs/GaAs y en la región de acoplamiento entre nanoestructuras. Este refinamiento es fundamental para asegurar la estabilidad numérica y la convergencia de los niveles de energía calculados.

Una particularidad del modelo de Kane es la dependencia explícita de la masa efectiva con la energía propia del estado buscado, lo que convierte el problema en un problema de autovalores no lineal. Para tratar esta dependencia, se adoptó un esquema iterativo: a partir de una estimación inicial de la energía, se calcula la masa efectiva correspondiente y se resuelve el problema linealizado; el procedimiento se repite hasta alcanzar la convergencia dentro de una tolerancia preestablecida por COMSOL.

Figura 3

Mallado triangular empleado en la discretización del sistema de anillos cuánticos acoplados. Se observa un refinamiento espacial en la región activa del confinamiento y alrededor de las interfaces, lo cual permite describir con mayor precisión la variación del potencial efectivo y de las funciones envolventes.



5.3. Cálculo numérico de propiedades termodinámicas

Una vez obtenido el espectro discreto de energías electrónicas para cada configuración geométrica, temperatura y campo externo, se procedió al cálculo de propiedades termodinámicas dentro del ensamble canónico. Dado que el espectro depende explícitamente de la temperatura, las derivadas respecto a T se evaluaron numéricamente sobre la misma malla discreta de temperaturas empleada en los cálculos espectrales. Para compactar la notación, se introdujo un operador general de diferencias finitas $D_T[X](T_i)$, definido para una malla uniforme de paso ΔT . En un punto interior T_i , se utilizó la aproximación centrada de segundo orden

$$D_T[X](T_i) \approx \frac{X(T_{i+1}) - X(T_{i-1}))}{2\Delta T}, \quad (67)$$

donde $X(T)$ representa, según el caso, una rama espectral $E_n(T)$ o la energía interna $U(T)$. Para los extremos de la malla se emplearon las correspondientes expresiones unilaterales de segundo orden:

$$D_T[X](T_1) \approx \frac{-3X(T_1) + 4X(T_2) - X(T_3)}{2\Delta T}, \quad (68)$$

$$D_T[X](T_N) \approx \frac{3X(T_N) - 4X(T_{N-1}) + X(T_{N-2})}{2\Delta T}. \quad (69)$$

De este modo, la derivada explícita de cada nivel se aproximó como

$$\partial_T E_n(T_i) \approx D_T[E_n](T_i),$$

y su contribución térmica se incorporó mediante la suma canónica correspondiente. Análogamente, la capacidad calorífica se obtuvo aplicando el mismo operador a la energía interna,

$$C_V(T_i) \approx D_T[U](T_i).$$

Así, tanto la entropía como la energía interna y la capacidad calorífica se calcularon combinando las definiciones termodinámicas con aproximaciones por diferencias finitas numéricamente consistentes sobre una misma malla de temperaturas.

5.4. Criterios de convergencia y resumen del procedimiento computacional

La metodología computacional seguida en este trabajo puede resumirse en los siguientes pasos: (i) definición geométrica del sistema y de los parámetros materiales dependientes de la temperatura; (ii) construcción del Hamiltoniano efectivo basado en el modelo de Kane; (iii) resolución numérica del problema de autovalores bidimensional mediante el método de elementos finitos en COMSOL MULTIPHYSICS; y (iv) postprocesamiento del espectro electrónico en MATLAB para el cálculo de las propiedades termodinámicas y la generación de figuras.

Los espectros se calcularon mediante el solucionador iterativo ARPACK, reteniendo los

primeros 50 autovalores para cada conjunto de parámetros externos. Este número de estados resultó suficiente para garantizar la convergencia de la función de partición y, por tanto, de las cantidades termodinámicas evaluadas. Los cálculos dependientes de la temperatura se realizaron en el intervalo de 0 a 300 K. Salvo indicación contraria, el análisis termodinámico en presencia de campos externos se llevó a cabo a 300 K. El campo magnético se varió entre 0 y 20 T, mientras que el campo eléctrico se consideró en el rango de 0 a 3 kV/cm.

6. Resultados y discusión

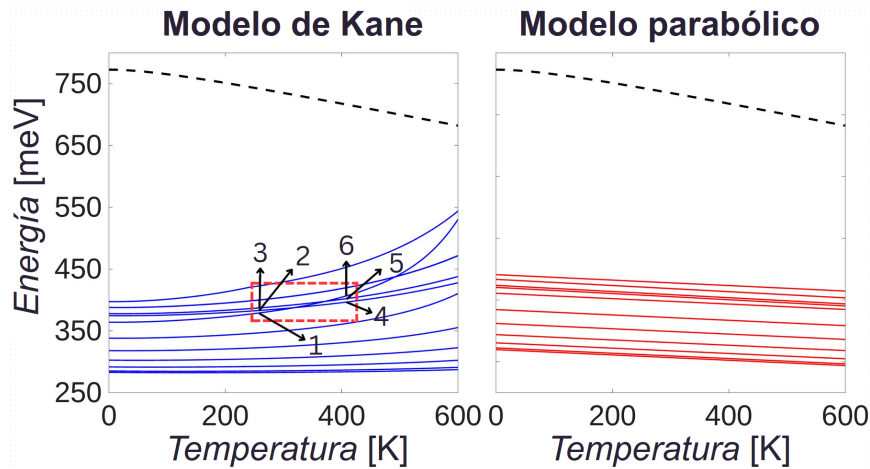
6.1. Espectro dependiente de la temperatura: modelo de Kane vs modelo parabólico

Los resultados obtenidos mediante el modelo de banda parabólica (panel derecho de la Figura 4) muestran que el efecto principal de la temperatura sobre las propiedades electrónicas de un anillo cuántico de InAs embebido en una matriz de GaAs se manifiesta a través de la variación del ancho de banda prohibida de los materiales. Un incremento de la temperatura conduce a una reducción de la brecha entre ambos materiales de acuerdo con la expresión de Varshni (Ec. 11). Para el sistema considerado, esta reducción es aproximadamente el doble en GaAs que en InAs, lo que lleva a una reducción significativa de la barrera efectiva de confinamiento electrónico. En ambos paneles de la Fig. 4, la línea negra discontinua representa la altura de la barrera del potencial de confinamiento en función de la temperatura. Se observa una reducción de aproximadamente 80 meV en el rango de temperaturas considerado, lo cual corresponde aproximadamente a un 10 % de su altura a $T = 0$ K. Este debilitamiento del confinamiento estructural favorece una mayor penetración de las funciones de onda electrónicas en la región de barrera, y como resultado se tiene un descenso en las energías de los estados ligados cuando se miden con respecto al fondo del pozo. Además, se observa que la disminución de la energía con la temperatura es monótona, consistente con el debilitamiento continuo del confinamiento.

Por otro lado, dado que el InAs presenta una pequeña separación entre las bandas de conducción y valencia, el acoplamiento interbanda se vuelve significativo, lo que hace que el modelo de Kane sea una descripción más apropiada para el sistema considerado. Esta fuerte mezcla interbanda da lugar a la no parabolicidad de la banda de conducción y a una mayor curvatura cerca del

Figura 4

Evolución con la temperatura de los estados ligados de baja energía para un anillo cuántico autoensamblado de InAs/GaAs en el intervalo 0–600 K. El panel izquierdo corresponde al modelo de Kane, que incorpora la masa efectiva no parabólica $m^(\mathbf{r}, E, T)$, mientras que el panel derecho muestra la aproximación parabólica. En ambos paneles, la curva negra discontinua representa el potencial de confinamiento, obtenido a partir de las relaciones de Varshni para las brechas de banda de GaAs e InAs (Ec. 40). El recuadro rojo en el panel del modelo de Kane señala la región espectral ampliada en la Figura 5, donde se identifican las ramas etiquetadas 1–6 y se analiza el reordenamiento inducido por la temperatura.*

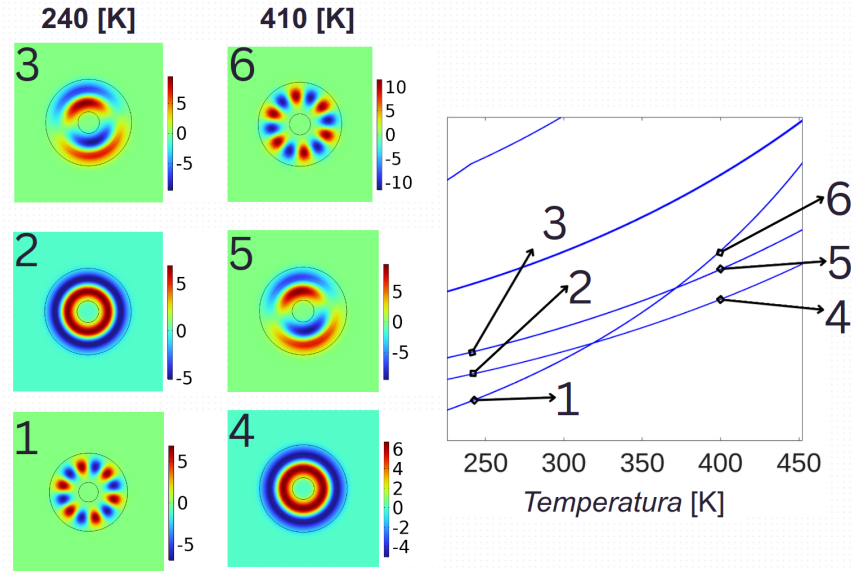


mínimo de la banda, lo cual se traduce en una reducción de la masa efectiva del electrón. Además, en modelos no parabólicos la masa efectiva depende tanto de la energía como del gap o brecha energética; por lo tanto, cualquier reducción del gap inducida térmicamente produce variaciones más pronunciadas en la masa efectiva en materiales de gap estrecho. De la Ec. 10 se deduce que la disminución del gap con la temperatura conduce a una reducción de la masa efectiva, incrementando así la contribución de energía cinética del electrón. Este comportamiento se ilustra en la Figura 4, donde los niveles de baja energía en función de la temperatura se calculan utilizando el modelo de Kane (líneas azules continuas).

Se observa que, entre los dos efectos principales inducidos por la temperatura sobre los niveles electrónicos —la reducción de la masa efectiva y la disminución de la altura de la barrera de confinamiento— el primero es dominante. Si bien es cierto que al aumentar la temperatura se tiene un incremento de la energía cinética en todos los niveles debido a la reducción de la masa efectiva, también se observa que este incremento es más pronunciado para algunos estados que para otros,

Figura 5

Ampliación de la región espectral señalada por el recuadro rojo en la Figura 4 para el modelo de Kane, junto con la parte real de las funciones de onda representativas asociadas a las ramas etiquetadas 1–6. Los mapas de la izquierda muestran las funciones envolventes en el plano para $T = 240$ K y $T = 410$ K, mientras que el panel de la derecha presenta la ampliación del espectro en el intervalo de temperaturas donde ocurre el reordenamiento de niveles. En particular, las ramas 1–3 a 240 K se conectan con las ramas 4–6 a 410 K, mostrando cómo la dependencia térmica y la no parabolicidad modifican la estructura nodal y el orden energético de los estados de baja energía.



lo cual es una diferencia notable con el modelo parabólico, donde la masa efectiva es constante y, por lo tanto, las separaciones entre niveles dependen únicamente de la geometría de confinamiento. Para entender claramente este comportamiento hay que hacer una caracterización detallada de los estados. En primer lugar si consideramos solo los primeros 7 niveles se aprecia cómo la separación entre estos es mayor a mayor energía. Lo anterior está relacionado con el hecho de que estos estados no presentan nodos radiales, por lo que según la convención usada en espectroscopia atómica para etiquetar estados según sus números cuánticos radial y angular corresponderían a estados $1s, 1p, 1d, 1f, \dots$. En este caso el cambio energético más importante de un estado a otro se dará por un incremento en el momentum angular así: $\Delta E \propto m_i^2 - m_{i-1}^2$, donde m_i es el número cuántico magnético del estado i , el cual indica el número de nodos que tendrá la función de onda en dirección azimutal. De aquí es evidente ver cómo a medida que m_i es mayor, también será mayor la

separación entre niveles energéticos contiguos. A medida que la temperatura aumenta, los estados caracterizados por un mayor número cuántico magnético presentan un incremento energético más pronunciado. Este comportamiento se explica por la reducción de la masa efectiva, que amplifica la contribución cinética asociada al movimiento azimutal, proporcional a m_i^2/m^* , favoreciendo así un mayor desplazamiento energético en estados con valores elevados de m . Por otro lado tenemos que los niveles 8, 9 y 10 forman un nuevo grupo de niveles que se encuentran muy cercanos entre sí, lo cual es debido a que conforman un nuevo grupo de estados, ahora con un nodo radial, los cuales podemos etiquetar como $2s$, $2p$ y $2d$, respectivamente. A pesar de que los niveles 7, 8 y 9 tienen energías comparables, es importante resaltar que no crecen con el mismo ritmo ante un incremento de la temperatura. Tal diferencia se debe básicamente a que estos estados pertenecen a modos radiales y angulares distintos, según sea su número de nodos en ambas direcciones, y esto cambia su sensibilidad ante la masa, lo cual se traduce en distintas contribuciones relativas de energía cinética y distinta estructura y extensión espacial de la función de onda. Además, la presencia de un nodo radial desplaza el máximo de la densidad de probabilidad hacia la región externa del anillo cuántico, incrementando así el efecto de túnel del electrón hacia la barrera. Este efecto se ve reforzado por el aumento de la temperatura, que reduce simultáneamente tanto la masa efectiva como la altura de la barrera de confinamiento, lo que conduce a una mayor longitud de penetración y a una mayor extensión espacial de los estados. Como consecuencia, el electrón experimenta un confinamiento efectivo más débil, y la contribución de energía cinética crece a un ritmo menor que en estados sin nodos radiales.

Un resultado particularmente interesante corresponde al comportamiento de los niveles 7, 8 y 9, para los cuales se hace una ampliación en la Figura 5, donde además se incluyen los gráficos de la parte real de las funciones de onda correspondientes. Debido a lo expuesto antes, el séptimo nivel termina cruzando y superando a los tres niveles superiores para temperaturas mayores a aproximadamente 300 K. Además como tenemos un sistema con simetría circular sus estados pueden cruzarse porque el número cuántico magnético es bueno y por lo tanto estados con distinto m no se acoplan.

En conjunto, estos resultados muestran que la descripción térmica del espectro no puede reducirse a una simple redistribución de pesos de Boltzmann sobre un conjunto fijo de niveles independientes de la temperatura. Por ello, el modelo de Kane proporciona un marco que permite capturar más efectos térmicos que la aproximación parabólica para analizar las propiedades electrónicas y termodinámicas en este tipo de sistemas nanoestructurados.

6.2. Desdoblamiento espectral, simetría y acoplamiento interanillo

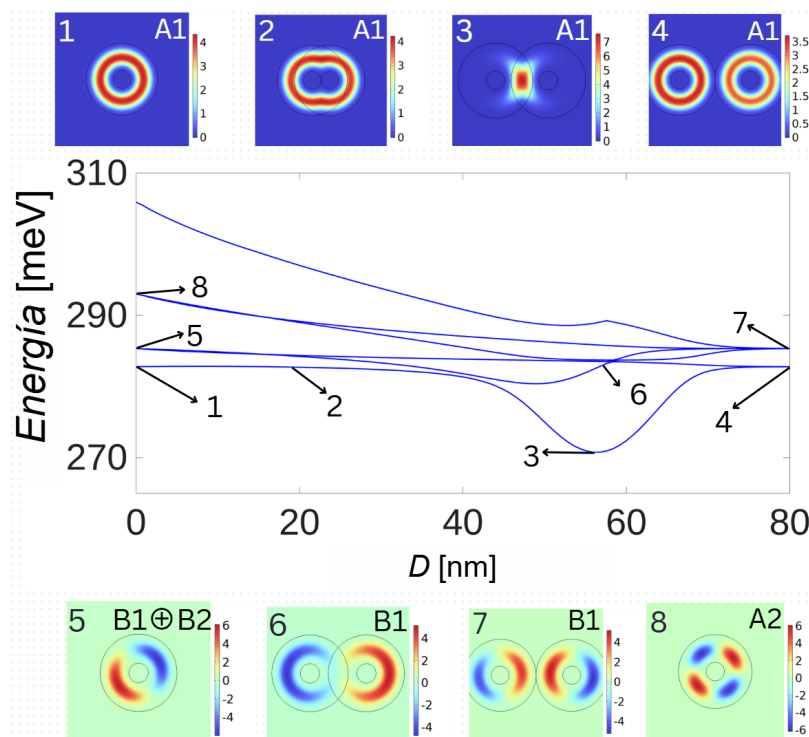
Motivados por el interés actual en sistemas nanoestructurados aún poco explorados, la Figura 6 muestra los primeros niveles electrónicos del sistema de anillos acoplados lateralmente como función de la distancia centro-centro D , a temperatura fija y en ausencia de campos externos. El papel de D es doble: por una parte, fija la separación geométrica entre los anillos y, por otra, modifica el potencial efectivo en el plano (Ec.50). En consecuencia, cada valor de D define un Hamiltoniano distinto y, por tanto, un espectro distinto. En el límite $D = 0$, el sistema se reduce a un único anillo con simetría cilíndrica $C_{\infty v}$. En ese caso, los estados pueden clasificarse por el número cuántico de momento angular m : el estado con $m = 0$ es no degenerado, mientras que los estados $\pm m$ forman dobletes.

Cuando los centros se separan, la simetría continua del anillo aislado se pierde y el sistema pasa a estar descrito por la simetría discreta C_{2v} . Físicamente, esto ocurre porque la separación entre centros introduce una dirección privilegiada en el plano. Como resultado, los dobletes del anillo aislado dejan de ser degenerados y se desdoblan en ramas distintas, que ahora se clasifican según las representaciones A_1 , A_2 , B_1 y B_2 . En particular, el doblete $|m| = 1$ da lugar a los estados B_1 y B_2 , cuyas funciones de onda presentan la distribución bilobular (véase la Figura 6).

La rama fundamental A_1 presenta un mínimo alrededor de $D \approx 56$ nm, indicando entonces que el estado fundamental presenta un carácter enlazante y fuertemente localizado. A distancias pequeñas, el estado base se extiende sobre ambos anillos y mantiene una densidad apreciable en la región que los conecta. A distancias grandes, esa conexión se debilita y los niveles tienden a

Figura 6

Espectro electrónico para los primeros estados de la molécula de anillos acoplados lateralmente como función de la distancia centro-centro D , en ausencia de campos externos y a temperatura fija $T = 300$ K. Las ramas se clasifican según las representaciones irreducibles del grupo puntual C_{2v} , mostrando el desdoblamiento de los niveles del anillo aislado y la reorganización gradual del espectro al aumentar la separación entre centros.



organizarse en pares casi degenerados, asociados a estados localizados en uno u otro anillo.

La estructura de cruces y anticruces también puede entenderse de manera sencilla a partir de la simetría. Dos ramas de distinta simetría pueden cruzarse sin mezclarse, mientras que dos ramas con la misma simetría sí pueden interactuar al acercarse en energía. En ese caso, una rama desciende y la otra asciende, dando lugar a la repulsión característica de un anticruce. Este comportamiento se observa con claridad cerca de $D \approx 40$ nm, donde dos ramas de simetría A_1 se acercan e intercambian parte de su carácter espacial: la rama inferior concentra más densidad en la región intermedia, mientras que la superior desarrolla un nodo en esa misma zona.

En conjunto, la evolución del espectro con D muestra cómo un parámetro geométrico ex-

terno controla simultáneamente la forma del potencial efectivo, la simetría del sistema y la organización de los niveles electrónicos. Adicionalmente, el cálculo de la energía para el estado fundamental se validó mediante un tratamiento variacional (véase el Apéndice 2).

6.3. Análisis del mínimo energético

Un rasgo llamativo de la Figura 6 se encuentra analizando la rama fundamental, en donde se presenta un mínimo alrededor de $D \approx 56$ nm. Este mínimo no debe interpretarse como una distancia de equilibrio estructural, sino como una propiedad electrónica del Hamiltoniano efectivo para un valor impuesto del parámetro geométrico D . En otras palabras, al variar la separación entre centros cambia la forma del confinamiento en el plano y, con ello, cambia también la forma en que el estado base puede distribuirse sobre el sistema.

El principio de incertidumbre de Heisenberg recoge mayoritariamente la explicación fenomenológica del mínimo. A distancias pequeñas, la función de onda del estado fundamental se extiende en la región interanular, manteniendo una dispersión espacial aproximadamente constante en el intervalo $0 \lesssim D \lesssim 40$. Para separaciones intermedias, $40 \lesssim D \lesssim 60$, la región de conexión aumenta y favorece un incremento en la deslocalización, lo que reduce la dispersión en momento y, por tanto, la contribución cinética. A separaciones mayores, $D \gtrsim 60$, la conectividad se debilita, la función de onda pierde extensión conjunta y la energía vuelve a crecer.

6.4. Control externo de la hibridación y repulsión de niveles

La esencia de la modificación espectral debida a los campos externos radica en que dichos campos cambian la forma en la que se distribuye sobre los dos anillos el electrón. Como resultado se obtiene un corrimiento de los niveles y un cambio en qué ramas pueden acercarse, mezclarse o repelerse.

En la Figura 7 se muestran los niveles energéticos más bajos del sistema en función de la

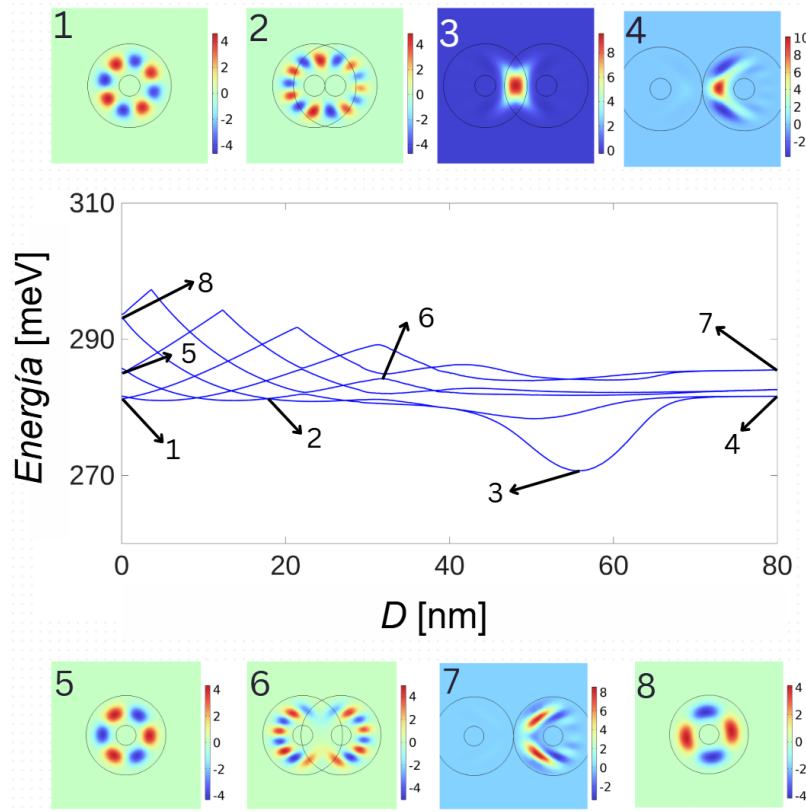
separación entre centros de los QRs, cuando se tiene un campo magnético de 10 T aplicado en la dirección de crecimiento de la estructura. En esta figura pueden observarse 3 regímenes en el espectro electrónico. Para $D < 20$ nm se tiene que el espectro tiene la firma de un comportamiento típico de una estructura anular, donde aparecen las oscilaciones en la energía del estado base y los cruces característicos en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección del crecimiento de la estructura. Cuando la estructura adquiere una configuración con dos agujeros, es decir pasa de ser doblemente a triplemente conexa, esto para $D > 20$ nm, la organización del espectro comienza a mostrar algunos cambios importantes. Dado que la ruptura de simetría rotacional fortalece la hibridación entre estados orbitales, en presencia de campo magnético esta hibridación convierte cruces en anticruces sucesivos, generando pares de niveles que se entrelazan y se separan energéticamente con los pares de niveles vecinos, dando lugar a un patrón característico de niveles “trenzados”, típico de estructuras con simetría puntual C_{2v} . El anterior comportamiento se mantiene aproximadamente hasta $D = 40$ nm, a partir de donde una nueva transformación de la estructura energética tiene lugar, pero esta vez con cambios más marcados. A medida que se sigue incrementando la separación entre centros de los QRs, los niveles de energía más bajos dejan de trenzarse en parejas, y para el caso de los estados más bajos, la separación energética se incrementa notablemente. Lo anterior es señal de que se ha pasado de un régimen extendido de las funciones de onda a un régimen fuertemente localizado, tal como se analizó en la sección 6.2, en ausencia de campo magnético.

Con el fin de profundizar en el análisis del efecto de un campo magnético aplicado perpendicularmente al plano de la estructura, se ha calculado la dependencia de los niveles energéticos más bajos en función de la intensidad del campo para cuatro configuraciones estructurales, caracterizadas por la distancia entre centros ($D = 0$ nm, 40 nm, 55.2 nm y $D = 70.4$ nm). Los resultados se presentan en la Figura 8, correspondientes a los paneles (a)–(d), respectivamente.

Para $D = 0$ nm (Fig. 8 en el panel a), el sistema exhibe las oscilaciones energéticas características asociadas al efecto Aharonov-Bohm. Al incrementar la separación hasta $D = 40$ nm, Fig. 8 panel (b), se observa una reorganización del espectro, en la cual pares de niveles comienzan a

Figura 7

Espectro electrónico de los nanoanillos en presencia de un campo magnético perpendicular $B_0 = 10 \text{ T} \parallel z$ a $T = 300 \text{ K}$. El campo reorganiza la estructura de niveles, convierte varios cruces en anticruces y modifica el carácter espacial de las funciones de onda.



acoplarse y a entrelazarse conforme aumenta la intensidad del campo magnético. Estos pares se separan progresivamente de los niveles vecinos, dando lugar a un patrón de niveles “trenzados”, como ocurre en anillos elípticos. En este régimen, aunque ya existe una región de conexión entre los anillos, el comportamiento espectral sugiere que el electrón tiende a circular preferentemente por la periferia de la estructura en lugar de localizarse en la región central. Para campos elevados (del orden de 15 T), la amplitud de las oscilaciones se atenúa significativamente, lo que indica una redistribución espacial de los estados electrónicos más bajos hacia la región de conexión.

En el caso $D = 55.2 \text{ nm}$, Fig. 8 panel (c), se destacan dos rasgos principales. En primer lugar, los dos niveles más bajos dejan de presentar oscilaciones al aumentar el campo, lo que

indica una transición hacia estados localizados en la región de conexión, donde el costo energético resulta menor que el asociado a la circulación periférica. En contraste, los niveles superiores aún muestran evidencia de corrientes persistentes, lo que sugiere que poseen suficiente energía cinética para mantener estados extendidos alrededor de la estructura. En segundo lugar, se observa que un campo magnético menor al del caso anterior (del orden de 10 T) es suficiente para suprimir las oscilaciones en todos los niveles considerados, evidenciando la localización del electrón en la región central.

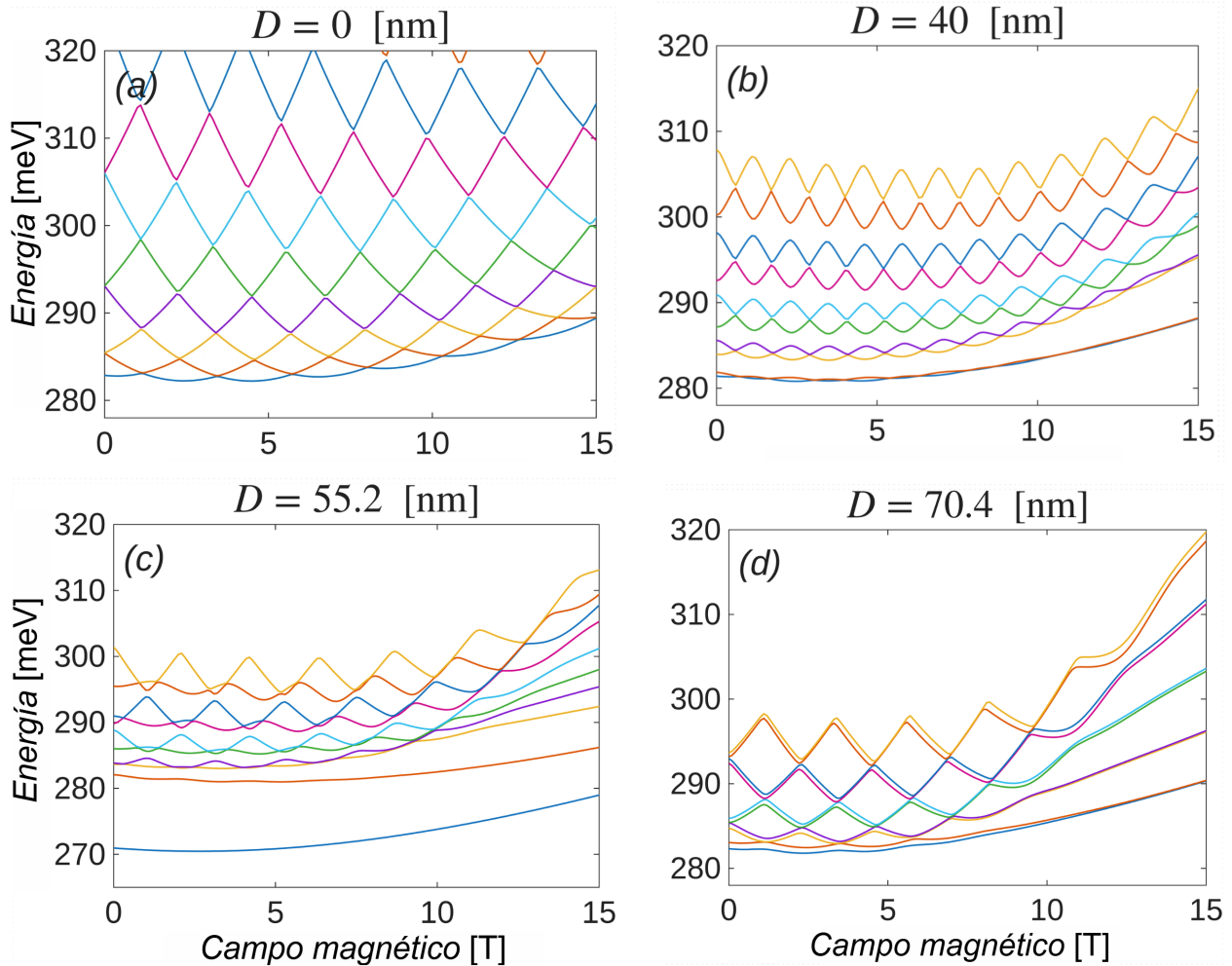
Finalmente, para $D = 70.4$ nm, Fig. 8 panel (d), los anillos se conectan a través de una región estrecha de aproximadamente 10 nm. Para campos bajos ($B < 5$ T) el espectro presenta similitudes con el de un único anillo circular ($D = 0$ nm) aunque con la aparición de pares de niveles cercanos como consecuencia del acoplamiento cuántico entre los dos anillos. A medida que el campo supera los 10 T, las oscilaciones tipo Aharonov–Bohm se suprimen nuevamente, indicando que la presencia de la región de conexión favorece la localización de los estados electrónicos en la región central de la estructura.

El campo eléctrico en el plano estructural actúa de otra manera. Como se observa en la Figura 9, este campo hace que uno de los anillos resulte energéticamente más favorable que el otro. En consecuencia, el electrón tiende a desplazarse hacia uno de los lados de la estructura y varios estados que antes estaban repartidos entre ambos anillos pasan a concentrarse más en uno de ellos. Esta redistribución espacial también transforma cruces en anticruces, pero ahora porque el campo eléctrico rompe la equivalencia entre los dos anillos y así su representación como grupo puntual.

Estos resultados ponen de manifiesto que el grado de acoplamiento entre dos anillos cuánticos idénticos controla de manera determinante sus propiedades magnéticas y la estructura del espectro electrónico bajo la acción de campos externos.

Figura 8

Espectro electrónico de baja energía en función del campo magnético perpendicular para cuatro separaciones: (a) $D = 0$ nm, (b) $D = 40$ nm, (c) $D = 55.2$ nm y (d) $D = 70.4$ nm. A medida que aumenta la separación entre anillos, el espectro se vuelve más sensible al campo y aparecen con mayor claridad acercamientos y repulsiones entre ramas cercanas.



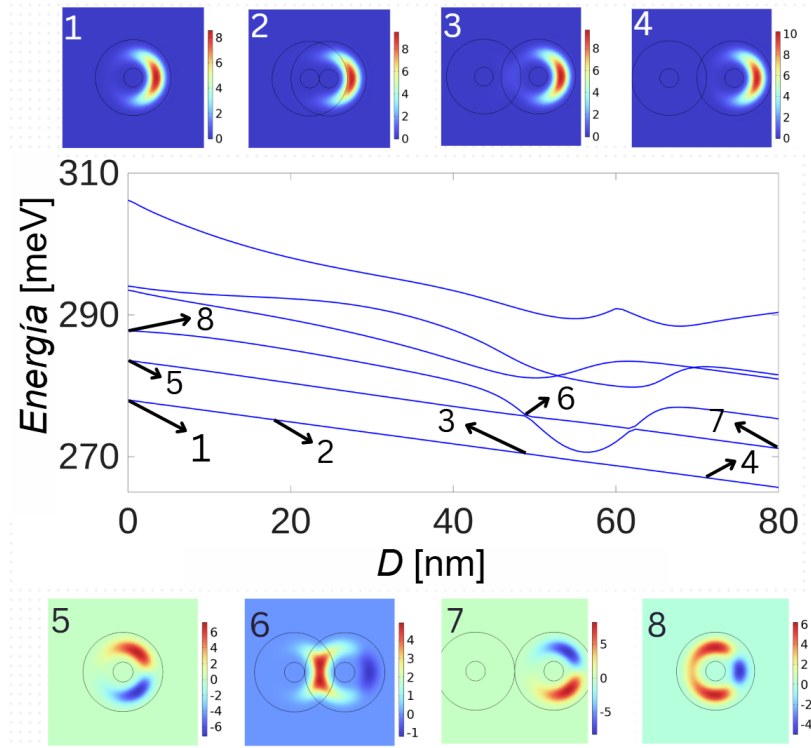
6.5. Respuesta termodinámica bajo campos externos

Las Figuras 10, 11 y 12 muestran la respuesta termodinámica del sistema sin campo externo, bajo campo eléctrico $F_0 = 3$ kV/cm y bajo campo magnético $B_0 = 20$ T, respectivamente.

Todas las cantidades se calculan a partir del espectro discreto de estados ligados, de modo

Figura 9

Espectro electrónico del conjunto de nanorillos en presencia de un campo eléctrico aplicado en el plano estructural a lo largo del eje interanular, a $T = 300$ K. El campo favorece la localización de los estados en uno de los dos anillos y reorganiza la secuencia de niveles.



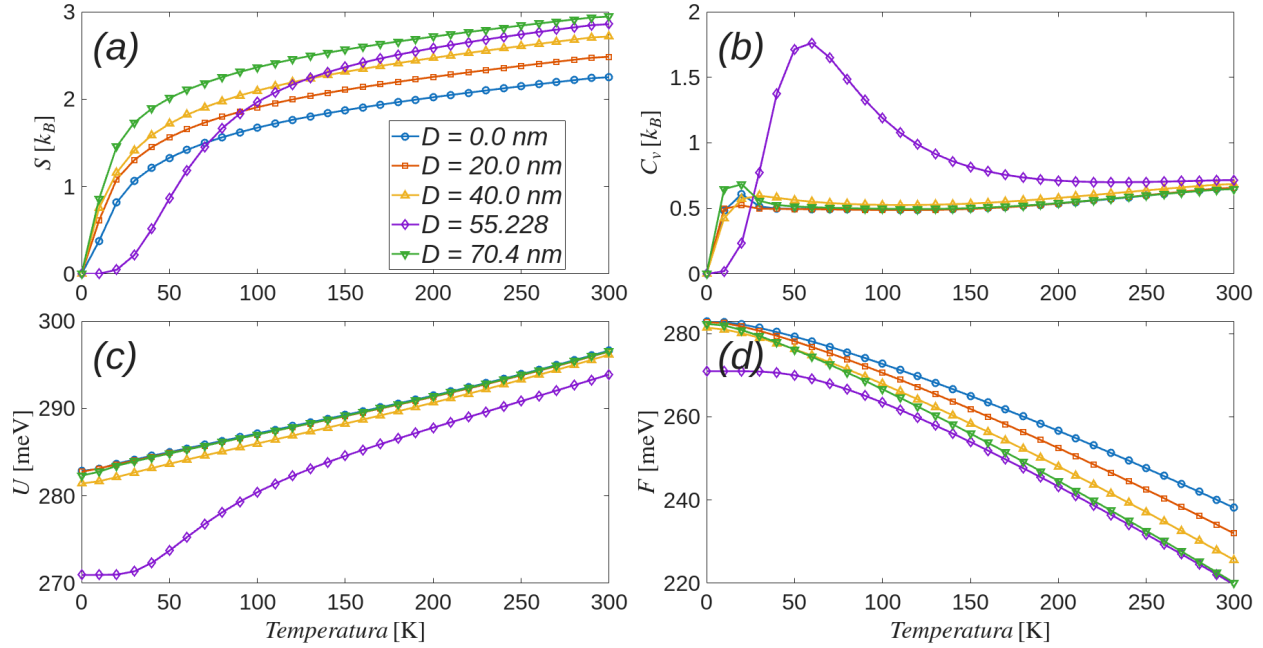
que su comportamiento refleja directamente cómo cambia ese espectro con la geometría y con los campos externos.

Sin campo (Figura 10), el panel (c) muestra que la energía interna a $T \rightarrow 0$ es mínima para $D \approx 56$ nm, alcanzando $U \approx 270$ meV frente a los ≈ 283 meV del resto de separaciones. Esta es la proyección termodinámica directa del mínimo del estado base $E_0(D)$ discutido en las secciones anteriores: a temperatura nula, $U = E_0$ y el mínimo geométrico queda impreso en la energía interna.

Al aumentar la temperatura, U crece en todos los casos porque el electrón comienza a poblar estados excitados, pero la curva de $D \approx 56$ nm crece más rápido que las demás, reflejo de que sus primeros estados excitados están más accesibles térmicamente —es decir, que la brecha sobre el estado base es menor que en otras geometrías.

Figura 10

Funciones termodinámicas del sistema sin campo externo: (a) entropía $S(T;D)$, (b) capacidad calorífica $C_V(T;D)$, (c) energía interna $U(T;D)$ y (d) energía libre de Helmholtz $F(T;D)$.



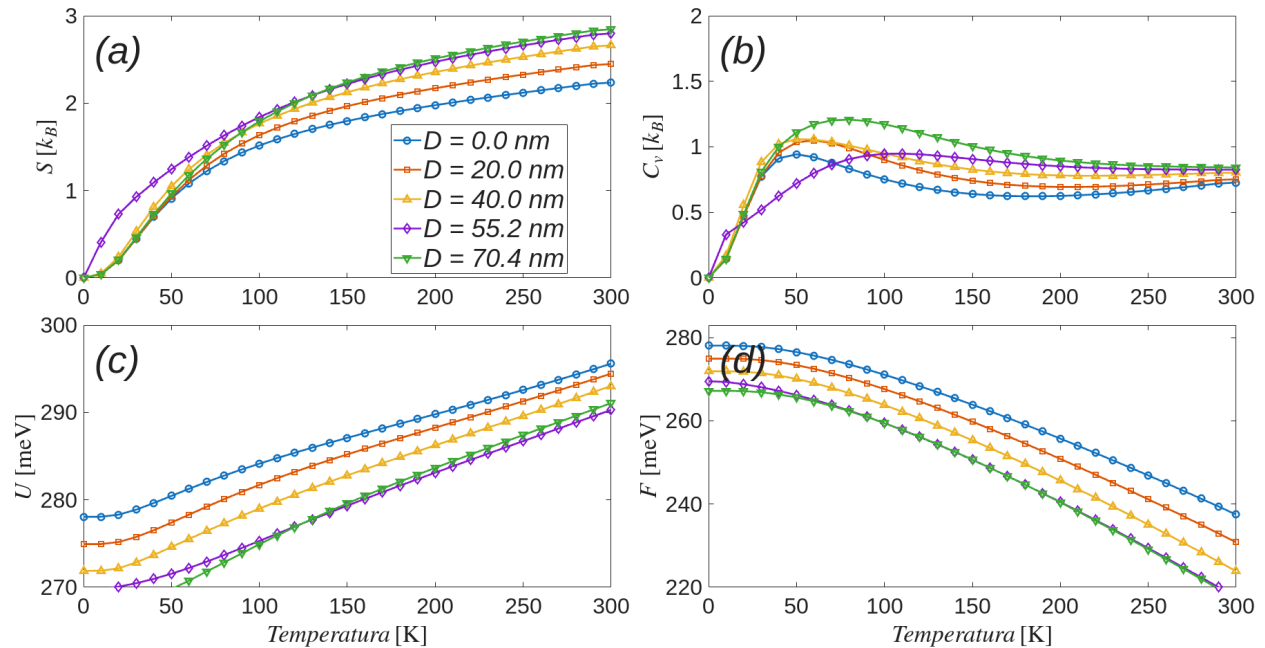
La capacidad calorífica (panel b) exhibe para $D \approx 56$ nm un pico de tipo Schottky pronunciado y estrecho en torno a $T \approx 20$ K, ausente en las demás curvas. Este pico indica que en esa geometría existe una brecha energética bien definida entre el estado base y el primer nivel excitado, de modo que la activación térmica de ese excitado concentra todo el calor específico en un intervalo de temperatura estrecho.

Las otras separaciones, con espectros menos comprimidos o menos estructurados, muestran una C_V más plana sin un máximo definido. Es importante señalar que esta C_V no tiende al valor clásico k_B en el límite de alta temperatura: al tratarse de un espectro discreto con un número finito de estados ligados, la capacidad calorífica cae una vez que todos los estados relevantes están poblados, sin equipartición.

La energía libre $F(T;D)$ (panel d) integra ambos efectos mediante $F = U - TS$. A $T = 0$, F coincide con U y reproduce el mínimo. A temperaturas crecientes, la contribución entrópica TS crece más rápido para $D \approx 56$ nm —porque su entropía crece abruptamente tras el pico de C_V —

Figura 11

Funciones termodinámicas bajo campo eléctrico $F_0 = 3 \text{ kV/cm}$: (a) $S(T;D)$, (b) $C_V(T;D)$, (c) $U(T;D)$ y (d) $F(T;D)$.



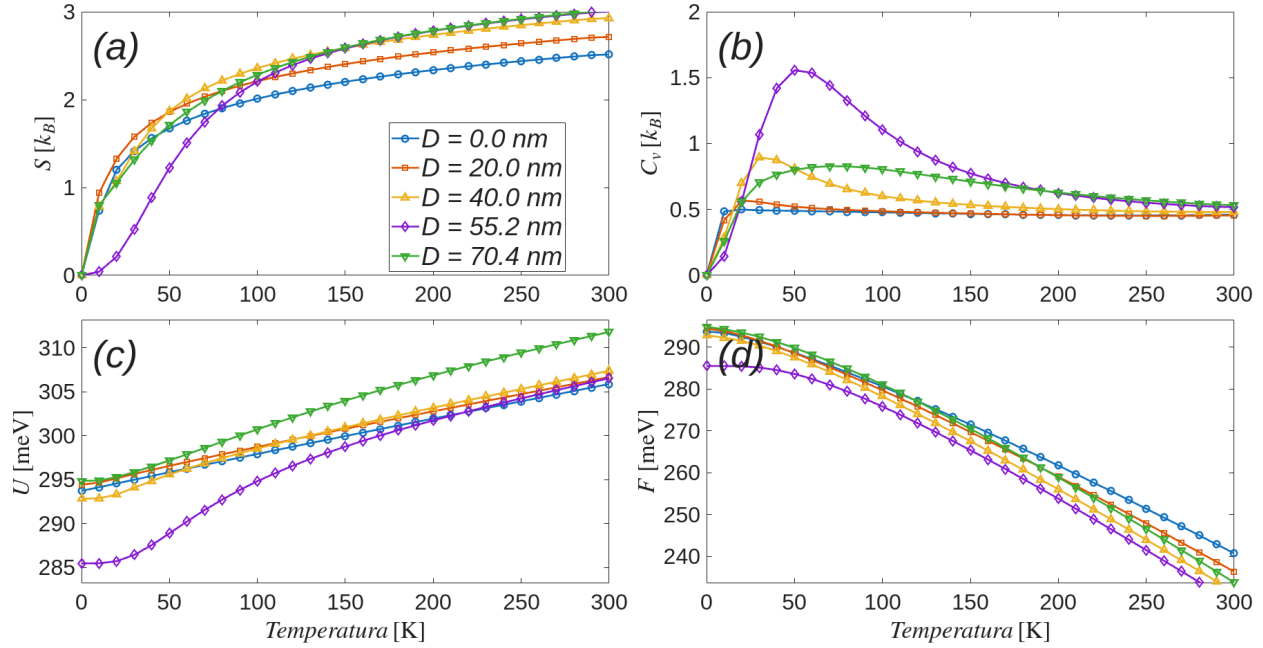
haciendo que F descienda más despacio para esa curva.

El resultado es que $D \approx 56 \text{ nm}$ permanece como la geometría de menor energía libre en todo el rango de temperatura considerado, lo que confirma que la estabilidad electrónica de esa configuración es robusta frente a excitaciones térmicas.

Bajo campo eléctrico (Figura 11), la desintonización por Stark separa los niveles de los dos anillos, ensanchando las brechas del sector de baja energía. La energía interna a $T \rightarrow 0$ sigue siendo mínima en $D \approx 56 \text{ nm}$ ($U \approx 270 \text{ meV}$), lo que muestra que el campo eléctrico no desplaza la geometría preferida del sistema. Sin embargo, el pico de C_V se aplan y se desplaza hacia temperaturas mayores ($\sim 70\text{--}90 \text{ K}$), lo cual es consistente con brechas más amplias que requieren mayor energía térmica para ser activadas. La energía libre, por su parte, mantiene a $D \approx 56 \text{ nm}$ como la curva más baja durante todo el rango, aunque la separación entre curvas se reduce respecto al caso sin campo: el campo eléctrico debilita el acoplamiento entre anillos y con ello suaviza la ventaja energética de la geometría óptima.

Figura 12

Funciones termodinámicas bajo campo magnético $B_0 = 20\text{ T}$: (a) $S(T;D)$, (b) $C_V(T;D)$, (c) $U(T;D)$ y (d) $F(T;D)$.



Bajo campo magnético (Figura 12), el efecto sobre U es diferente: el campo sube la energía del estado base en todas las geometrías, de modo que la curva de $D \approx 56\text{ nm}$ arranca ahora en $U \approx 285\text{ meV}$ en lugar de los 270 meV del caso sin campo. La geometría preferida se mantiene, pero el campo magnético eleva el costo energético absoluto del estado base al mezclar componentes angulares y reordenar el sector de baja energía.

El pico de C_V en $D \approx 56\text{ nm}$ se hace aún más agudo e intenso que sin campo, muestra de que el campo comprime selectivamente el espectro bajo el primer excitado, reduciendo la brecha de activación. La energía libre sigue identificando $D \approx 56\text{ nm}$ como la geometría electrónicamente preferida, aunque la contribución entrópica es ahora más relevante a bajas temperaturas por la mayor densidad de niveles bajos inducida por el campo.

Las Figuras 10, 11 y 12 muestran que el mínimo de U en $D \approx 56\text{ nm}$ —y con él el mínimo de F — es una característica robusta del sistema que ninguno de los dos campos externos elimina. El campo eléctrico suaviza la respuesta térmica al separar los niveles; el campo magnético

la intensifica al comprimirlos. En ambos casos, la energía libre $F(T;D)$ actúa como el indicador termodinámico de la estabilidad frente al parámetro geométrico D del sistema, reflejando en su mínimo la misma física microscópica de hibridación y curvatura de la función de onda que determina $E_0(D)$.

Una vez establecida la interpretación microscópica de la sección 6.3 y presentado el panorama termodinámico, la descripción del mínimo energético global frente al parámetro D puede extenderse a temperatura finita mediante la energía libre de Helmholtz,

$$F(T;D) = U(T;D) - T S(T;D), \quad (70)$$

que es la magnitud que determina qué configuración resulta más favorable a temperatura fija. A partir de ella se define la respuesta geométrica generalizada, la cual es una cantidad que permite estudiar la sensibilidad del sistema de anillos ante variaciones del parámetro D ,

$$\Gamma_{\text{th}}(T;D) \equiv -\left(\frac{\partial F}{\partial D}\right)_T = \underbrace{\left(-\frac{\partial U}{\partial D}\right)_T}_{\Gamma_U} + T \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial D}\right)_T}_{\Gamma_S}, \quad (71)$$

Esta cantidad no debe entenderse como una fuerza mecánica real, sino como una medida de la preferencia del sistema por una cierta separación.

La contribución Γ_U describe la parte energética del problema: recoge la tendencia del sistema a favorecer aquellas geometrías que reducen la energía interna. La contribución Γ_S representa el efecto estadístico introducido por la temperatura: al cambiar D , cambian también las separaciones entre niveles y, con ello, las ocupaciones térmicas del ensamble. A bajas temperaturas, la respuesta está dominada por Γ_U , de modo que el punto estacionario de $F(T;D)$ coincide esencialmente con el mínimo de $E_0(D)$. A temperaturas mayores, la contribución entrópica suaviza la respuesta, pero la región geoméricamente preferida sigue siendo la misma.

La Figura 13 muestra precisamente este comportamiento. El cambio de signo de Γ_{th} en la región intermedia identifica el punto D^* donde la energía libre es estacionaria. En ese punto se

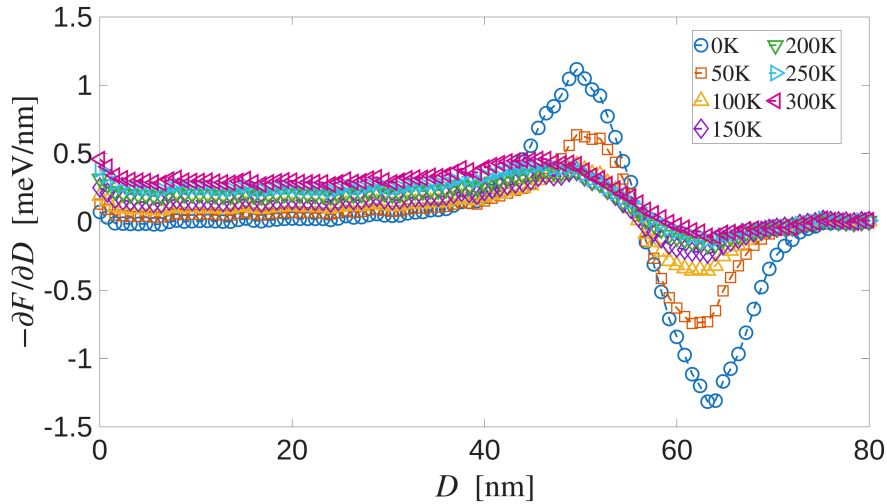
cumple

$$\Gamma_{\text{th}}|_{D^*} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial U}{\partial D} \right)_T = T \left(\frac{\partial S}{\partial D} \right)_T. \quad (72)$$

Esto significa que la tendencia del sistema a reducir su energía al variar D queda compensada por la contribución entrópica asociada a la redistribución de ocupaciones. En el presente caso, esta condición se satisface alrededor de $D \approx 56$ nm, de modo que esa región identifica la separación geométicamente más favorable tanto desde el punto de vista electrónico como termodinámico.

Figura 13

Respuesta geométrica generalizada $-\partial F/\partial D$ como función de la distancia interanular D para distintas temperaturas. El cambio de signo en la región intermedia identifica el punto estacionario de la energía libre y confirma la existencia de una separación geométicamente preferida. A mayor temperatura, la contribución entrópica suaviza la respuesta sin modificar de manera apreciable la posición de D^ .*



7. Conclusiones

En esta tesis se realizó un estudio teórico y numérico de nanoestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con geometría tipo anillo o cráter, aisladas y acopladas lateralmente, con el propósito de analizar su respuesta electrónica y termodinámica dentro de un marco efectivo derivado del modelo de Kane. Los resultados obtenidos permiten responder de manera directa a los objetivos planteados y muestran que la combinación entre geometría realista, no parabolicidad, dependencia térmica y campos externos es esencial para describir de forma consistente estos sistemas.

En relación con el primer objetivo específico, se desarrolló un modelo teórico para heteroestructuras autoensambladas de InAs/GaAs con geometría anular, tanto en el caso de un anillo aislado como en sistemas de dos anillos acoplados lateralmente. Este modelo permitió establecer de forma sistemática el papel de la distancia entre centros D sobre el confinamiento electrónico y la formación de estados moleculares. Los resultados mostraron que, al variar D , el sistema transita desde un régimen de fuerte acoplamiento, con estados extendidos sobre ambos anillos, hacia un régimen de acoplamiento débil, caracterizado por pares cuasi degenerados y una localización más marcada en cada anillo.

Respecto al segundo objetivo, la comparación entre el modelo de Kane y el modelo parabólico mostró que la no parabolicidad de la banda de conducción desempeña un papel decisivo en la descripción del sistema. Mientras el modelo parabólico predice una evolución térmica más simple y rígida del espectro, el modelo de Kane incorpora de manera explícita la dependencia de la masa efectiva con la energía y la temperatura, reproduciendo una reorganización más compleja de los niveles y una mayor sensibilidad en los estados excitados. En consecuencia, se encontró que la aproximación parabólica subestima el efecto combinado del confinamiento, la evolución térmica y

el acoplamiento interbanda, tanto en la estructura espectral como en la respuesta termodinámica.

En cuanto al tercer objetivo, se calculó el espectro de baja energía de un electrón confinado en estas heteroestructuras mediante un Hamiltoniano efectivo derivado del modelo de Kane. La inclusión de la no parabolicidad y de la dependencia de los parámetros efectivos con la energía, la posición y la temperatura permitió obtener una descripción más elaborada del sistema, particularmente en el caso de InAs/GaAs, donde la pequeña brecha de banda vuelve relevante la mezcla interbanda. A partir de este tratamiento fue posible describir no solo el corrimiento térmico de los niveles, sino también los desdoblamientos, cruces y reorganizaciones espectrales inducidos por la geometría y por la reducción de simetría al pasar del anillo aislado a la molécula de anillos.

Con relación al cuarto objetivo, se determinó que los campos eléctricos y magnéticos externos constituyen mecanismos eficaces de control de la estructura electrónica. El campo magnético perpendicular modifica la dinámica orbital, intensifica la mezcla entre estados y la repulsión de niveles, y reorganiza de forma significativa el sector de baja energía. Por su parte, el campo eléctrico aplicado en el plano favorece la polarización espacial de los estados y rompe la equivalencia entre ambos anillos, promoviendo una transición desde estados híbridos hacia configuraciones más localizadas.

Finalmente, en relación con el quinto objetivo, se formularon y calcularon la energía interna, la energía libre de Helmholtz, la entropía y la capacidad calorífica dentro del ensamble canónico a partir del espectro discreto dependiente de la temperatura obtenido. Los resultados mostraron que estas magnitudes reflejan de manera directa la estructura del espectro y sus reorganizaciones inducidas por la temperatura, la separación entre centros y los campos externos. En particular, la capacidad calorífica exhibió anomalías tipo Schottky asociadas a pequeñas separaciones entre niveles, mientras que la energía libre permitió identificar una región geométrica preferida en el régimen de baja temperatura. En conjunto, estos resultados muestran que la respuesta térmica de las moléculas de nanoanillos de InAs/GaAs está gobernada por la competencia entre confinamiento, simetría, acoplamiento lateral, no parabolicidad y control externo, confirmando que el modelo de Kane junto con una formulación termodinámica consistente constituye una herramienta ade-

cuada para el estudio de nanoestructuras semiconductoras con propiedades espectrales y térmicas ajustables.

Referencias Bibliográficas

- [1] Jacak L, Wójs A, Hawrylak P. Quantum Dots. Springer Berlin Heidelberg; 1998.
- [2] Chakraborty T. Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms. Elsevier Science; 1999.
- [3] Reimann SM, Manninen M. Electronic structure of quantum dots. Rev Mod Phys. 2002;74:1283-342.
- [4] Kelchner KM, Kuritzky LY, Fujito K, Nakamura S, DenBaars SP, Speck JS. Emission characteristics of single InGaN quantum wells on misoriented nonpolar m-plane bulk GaN substrates. Journal of crystal growth. 2013;382:80-6.
- [5] Henini M. Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics. 1st ed. Chantilly: Elsevier; 2008.
- [6] Aharonov Y, Bohm D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. Phys Rev. 1959;115:485-91.
- [7] Viefers S, Koskinen P, Deo PS, Manninen M. Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2004;21(1):1-35.
- [8] Tan WC, Inkson JC. Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model. Semiconductor Science and Technology. 1996;11(11):1635.
- [9] Fomin VM, editor. Physics of Quantum Rings. Springer Berlin Heidelberg; 2014.

- [10] Büttiker M, Imry Y, Landauer R. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. *Physics Letters A*. 1983;96(7):365-7.
- [11] Kleemans NAJM, Bominaar-Silkens IMA, Fomin VM, Gladilin VN, Granados D, Taboada AG, et al. Oscillatory Persistent Currents in Self-Assembled Quantum Rings. *Physical Review Letters*. 2007;99(14):146808.
- [12] Wu J, Wang ZM, editors. *Quantum Dot Molecules*. Springer New York; 2014.
- [13] Wang L, Rastelli A, Kiravittaya S, Benyoucef M, Schmidt OG. Self-Assembled Quantum Dot Molecules. *Advanced Materials*. 2009;21(25-26):2601-18.
- [14] García LF, Revinova SY, Mikhailov ID. Band nonparabolicity effect on spectral properties of quantum ring. *Superlattices and Microstructures*. 2017 3;103:151-60.
- [15] Rivera IE, Marín JH, Fulla MR. Shape-dependent electronic and thermodynamic properties of three-dimensional laterally coupled InAs–GaAs double quantum dots. *Results in Physics*. 2026;83:108625.
- [16] Kane EO. Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1957;1(4):249-61.
- [17] Li Y, Lu HM, Voskoboynikov O, Lee CP, Sze SM. Dependence of energy gap on magnetic field in semiconductor nano-scale quantum rings. *Surface Science*. 2003;532-535:811-5.
- [18] Yu PY, Cardona M. *Fundamentals of Semiconductors*. Springer; 2010.
- [19] Heindel T, Kim JH, Gregersen N, Rastelli A, Reitzenstein S. Quantum dots for photonic quantum information technology. *Advances in Optics and Photonics*. 2023;15(3):613-738.
- [20] Ma Z, Wu S, Li H, Chen X, Peng K, Qian C, et al. Recent progress and applications of III–V quantum dots in quantum technologies. *Applied Physics Reviews*. 2026;13.

- [21] Climente JJ, Planelles J. Characteristic molecular properties of one-electron double quantum rings under magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007;20:035212.
- [22] Baghrmryan HM, Barseghyan MG, Laroze D. Molecular spectrum of laterally coupled quantum rings under intense terahertz radiation. *Scientific Reports*. 2017;7.
- [23] Corredor CT, Gutiérrez W. Molecular states of laterally coupled quantum dots under electric fields. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*. 2014;(71):17-24.
- [24] Peng J, Hermannstädter C, Witzany M, Heldmaier M, Wang L, Kiravittaya S, et al. Heterogeneous confinement in laterally coupled InGaAs/GaAs quantum dot molecules under lateral electric fields. *Phys Rev B*. 2010;81:205315.
- [25] Duque CM, Correa JD, Morales AL, Mora-Ramos ME, Duque CA. Laterally coupled circular quantum dots under applied electric field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2016;77:34-43.
- [26] Khordad R, Rastegar H. Thermodynamic Properties of a Double Ring-Shaped Quantum Dot at Low and High Temperatures. *Journal of Low Temperature Physics*. 2018;190.
- [27] Vicente AGJ, Castro LB, Obispo AE, Meza LEA. Remarks on Thermodynamic Properties of a Double Ring-Shaped Quantum Dot at Low and High Temperatures. *Journal of Low Temperature Physics*. 2021;202.
- [28] Lafaurie LG, Suaza YA, Laroze D, Gutiérrez W, Marín JH. Thermodynamic properties of an artificial molecule quantum rings: Geometric and external field effects. *Physica B: Condensed Matter*. 2024;679:415786.
- [29] Wang ZM. Quantum Dot Devices. vol. 13 of *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*. 1st ed. New York, NY: Springer Nature; 2012.
- [30] Stangl J, Holý V, Bauer G. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Reviews of modern physics*. 2004;76(3):725-83.

- [31] Niño WG. ESPECTRO ENERGÉTICO DE D^0 Y D^- EN SISTEMAS CASI-UNIDIMENSIONALES. Universidad Industrial de Santander; 2007.
- [32] Niño WG. Estados ligados de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras.. Universidad Industrial de Santander; 2011.
- [33] Harrison P, Valavanis A. Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures. Fourth edition. ed. Chicester: Wiley; 2016.
- [34] Winkler R. Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems. Springer; 2003.
- [35] Chuang SL. Physics of Photonic Devices. 2nd ed. Wiley; 2009.
- [36] Yu PY, Cardona M. Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties. 4th ed. Springer; 2010.
- [37] Levinshtein M, Rumyantsev S, Shur M. Handbook Series on Semiconductor Parameters. WORLD SCIENTIFIC; 1996.
- [38] Varshni YP. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. Physica. 1967;34(1):149-54.
- [39] Landau LD, Lifshitz EM. Quantum mechanics : non-relativistic theory. 3rd ed. Oxford: Pergamon Press; 1977.
- [40] Multiphysics C. The Semiconductor Module User's Guide. COMSOL AB; 2022. Available from: www.comsol.com/blogs.

Apéndices

Apéndice A. Determinación de la masa efectiva en el modelo de Kane

A.1. Introducción y motivación física

En semiconductores de brecha directa, la relación de dispersión cerca del borde de la banda de conducción no siempre puede describirse mediante una ley estrictamente parabólica. Este hecho es particularmente importante en materiales III–V como InAs y GaAs, donde el acoplamiento entre la banda de conducción y las bandas de valencia modifica la curvatura de las bandas y, en consecuencia, la masa efectiva del electrón. El objetivo de este apéndice es deducir, de manera sistemática, la expresión de la masa efectiva dependiente de la energía dentro del modelo de Kane.

La estrategia seguida consta de varios pasos. Primero, se parte del Hamiltoniano de Pauli y de la forma de Bloch de las funciones de onda en un cristal periódico. Luego se transforma el problema a una representación dependiente del vector de onda $\mathbf{k}$, se escoge una base finita en el punto Γ y se construye el Hamiltoniano multibanda 8×8 . Finalmente, mediante la partición de Löwdin, se eliminan los grados de libertad de valencia y se obtiene un Hamiltoniano efectivo de conducción del cual se identifica la masa efectiva no parabólica.

A.2. Punto de partida: Hamiltoniano de Pauli y funciones de Bloch

En ausencia de campos externos, el Hamiltoniano microscópico de un electrón en un cristal puede escribirse como

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}_{\text{SO}}, \quad (73)$$

donde m_0 es la masa libre del electrón, $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico de la red y $\hat{H}_{\text{SO}}$ representa el término de acoplamiento espín-órbita. La periodicidad cristalina implica

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (74)$$

con $\mathbf{R}$ un vector de la red. De esta invariancia se sigue que el Hamiltoniano conmuta con los operadores de traslación,

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\mathbf{R}}] = 0, \quad (75)$$

por lo que es posible elegir una base de autoestados comunes de ambos operadores.

Los autoestados del problema cristalino son las funciones de Bloch,

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (76)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red y n identifica la banda. Esta descomposición permite separar la dependencia periódica de la red de la dependencia asociada al vector de onda cristalino.

A.3. Transformación unitaria: de $\hat{H}$ a $H(\mathbf{k})$

Al sustituir la forma de Bloch, Ec. (76), en la ecuación de Schrödinger estacionaria,

$$\hat{H} \psi_{n\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}, \quad (77)$$

y multiplicar por $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ a la izquierda, se obtiene

$$H(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}, \quad H(\mathbf{k}) \equiv e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (78)$$

El paso fundamental consiste en evaluar la conjugación del operador momento:

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k}. \quad (79)$$

Como consecuencia,

$$H(\mathbf{k}) = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}_{\text{SO}}. \quad (80)$$

Al expandir el término cinético se obtiene

$$H(\mathbf{k}) = \underbrace{\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V + \hat{H}_{\text{SO}}\right)}_{H(0)} + \underbrace{\frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{p}}}_{H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}. \quad (81)$$

El término lineal $\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{p}}$ es precisamente el núcleo físico del método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.

A.4. Base en Γ : modelo de Kane 8×8

Cerca del punto Γ , el Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ puede proyectarse sobre una base reducida de estados relevantes. En semiconductores III–V, la base mínima útil para describir la banda de conducción y las bandas de valencia cercanas incluye ocho estados: dos estados tipo s de conducción, degenerados por espín, y seis estados tipo p de valencia, reorganizados por el acoplamiento espín–órbita en los multipletes Γ_{8v} y Γ_{7v} .

En esta base, el Hamiltoniano adquiere la forma por bloques

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{cc} & \hat{H}_{cv} \\ \hat{H}_{vc} & \hat{H}_{vv} \end{pmatrix}, \quad (82)$$

donde $\hat{H}_{cc}$ actúa en el subespacio de conducción, $\hat{H}_{vv}$ en el de valencia y $\hat{H}_{cv}$ describe el acoplamiento interbanda. El bloque de conducción puede escribirse, a orden k^2 , como

$$\hat{H}_{cc} = E_c \mathbb{I}_2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \mathbb{I}_2, \quad (83)$$

mientras que $\hat{H}_{vv}$ contiene las energías E_v y $E_v - \Delta_0$ asociadas a los multipletes Γ_{8v} y Γ_{7v} , respectivamente. El acoplamiento $\hat{H}_{cv}$ es lineal en k y está controlado por los elementos de matriz del operador momento.

A.5. Transformación de Löwdin

El objetivo de la transformación de Löwdin es eliminar perturbativamente los grados de libertad de valencia y obtener un Hamiltoniano efectivo que actúe únicamente sobre el subespacio de conducción. Si el autovector se escribe como $\Psi = (\psi_c, \psi_v)^T$, la ecuación de autovalores se descompone en

$$(\hat{H}_{cc} - E_{\text{tot}})\psi_c + \hat{H}_{cv}\psi_v = 0, \quad (84)$$

$$\hat{H}_{vc}\psi_c + (\hat{H}_{vv} - E_{\text{tot}})\psi_v = 0. \quad (85)$$

Despejando formalmente ψ_v e insertando el resultado en la primera ecuación, se obtiene el Hamiltoniano efectivo de conducción

$$\hat{H}_{\text{eff}}(E) = \hat{H}_{cc} + \hat{H}_{cv} (E\mathbf{1} - \hat{H}_{vv})^{-1} \hat{H}_{vc}. \quad (86)$$

Esta expresión muestra que el efecto de las bandas de valencia se incorpora como una corrección efectiva en el subespacio de conducción. Dado que $\hat{H}_{cv}$ es lineal en k , la corrección resultante es de orden k^2 , precisamente el orden relevante para la masa efectiva.

A.6. Cálculo explícito de la matriz de acoplamiento

El acoplamiento entre la banda de conducción y las bandas de valencia proviene del operador

$$\hat{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (87)$$

Por simetría cúbica, los elementos de matriz relevantes satisfacen

$$\langle S | \hat{p}_x | X \rangle = \langle S | \hat{p}_y | Y \rangle = \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle \equiv p_{cv}, \quad (88)$$

mientras que los elementos cruzados se anulan. Se define entonces el parámetro de Kane

$$P \equiv \frac{\hbar}{m_0} p_{cv}. \quad (89)$$

Al proyectar el operador de acoplamiento sobre la base de estados acoplados por espín y momento angular, se obtiene que las contribuciones de los subespacios Γ_{8v} y Γ_{7v} al término de Löwdin están ponderadas por factores distintos. El resultado final de esta suma puede escribirse como

$$\hat{H}_{cv} P_{3/2} \hat{H}_{vc} = \frac{2}{3} P^2 k^2 \mathbb{I}_2, \quad \hat{H}_{cv} P_{1/2} \hat{H}_{vc} = \frac{1}{3} P^2 k^2 \mathbb{I}_2, \quad (90)$$

donde $P_{3/2}$ y $P_{1/2}$ son los proyectores sobre los subespacios Γ_{8v} y Γ_{7v} , respectivamente.

A.7. Isotropía cúbica y operadores efectivos

Un aspecto importante del resultado anterior es que la suma sobre cada multiplete produce operadores proporcionales a k^2 , sin dependencia angular explícita. Esta isotropía es consecuencia directa de la simetría cúbica de la red cristalina en el punto Γ . En otras palabras, aunque el acoplamiento $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ conecta estados con distinta estructura orbital, la suma completa sobre los estados del multiplete restituye un comportamiento efectivo isotrópico en el subespacio de conducción.

Por ello, el Hamiltoniano efectivo de conducción conserva la forma escalar

$$\hat{H}_{\text{eff}}(E) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \Delta H(E), \quad (91)$$

donde $\Delta H(E)$ es proporcional a k^2 y puede interpretarse como una corrección renormalizante de la masa efectiva.

A.8. Corrección de Löwdin y masa efectiva

Al sustituir la Ec. (90) en la corrección de Löwdin, se obtiene

$$\Delta H(E) = \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + \Delta_0 + E} \right) \mathbb{I}_2, \quad (92)$$

donde $E_g = E_c - E_v$ es la brecha fundamental y E es la energía del electrón medida desde el borde de la banda de conducción.

La dispersión efectiva de la banda de conducción queda entonces

$$E_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + \Delta_0 + E} \right). \quad (93)$$

Al identificar esta expresión con la forma

$$E_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(E)}, \quad (94)$$

se obtiene finalmente

$$\frac{1}{m^*(E)} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + \Delta_0 + E} \right), \quad (95)$$

o, de manera equivalente,

$$\frac{m_0}{m^*(E)} = 1 + \frac{2m_0 P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + \Delta_0 + E} \right). \quad (96)$$

Esta es la expresión buscada de la masa efectiva no parabólica en el modelo de Kane.

A.9. Casos límite y no parabolicidad

En el límite $E \rightarrow 0$, correspondiente al borde de la banda de conducción, la masa efectiva toma la forma

$$\frac{1}{m_0^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_0} \right), \quad (97)$$

que corresponde a la expresión base o estándar del modelo de Kane de ocho bandas.

En cambio, cuando $E \neq 0$, la masa efectiva depende explícitamente de la energía. Esta dependencia constituye la manifestación de la no parabolicidad de la banda de conducción: a medida que la energía del electrón aumenta, los denominadores de la Ec. (95) se hacen mayores, de modo que la corrección interbanda disminuye y la masa efectiva se modifica. Este efecto es especialmente relevante en semiconductores de brecha angosta, a altas temperaturas o en regímenes de confinamiento fuerte.

A.10. Extensiones del modelo

La deducción presentada puede extenderse de varias maneras. En primer lugar, las bandas remotas pueden incorporarse mediante parámetros adicionales, como el parámetro F de Luttinger–Kohn, que corrige el término libre $1/m_0$. En segundo lugar, la presencia de campos magnéticos permite relacionar la masa efectiva con magnitudes observables como la frecuencia ciclotrón y la separación entre niveles de Landau. Finalmente, en cristales con menor simetría, como los de tipo wurtzita, la deducción análoga conduce a masas efectivas anisotrópicas y requiere una base multibanda más general.

En el caso de heteroestructuras semiconductoras, además, la brecha E_g y el parámetro Δ_0 pueden depender de la posición y de la temperatura, lo que permite generalizar la expresión de la masa efectiva a la forma $m^*(\mathbf{r}, E; T)$, utilizada en el cuerpo principal de esta tesis.

A.11. Resumen de la deducción

La deducción de la masa efectiva en el modelo de Kane puede resumirse en los siguientes pasos. Primero, se parte del Hamiltoniano de Pauli para un electrón en un potencial periódico y se introduce la forma de Bloch de las funciones de onda. Segundo, mediante la transformación unitaria $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, se obtiene el Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$, en el cual aparece de manera natural el término $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Tercero, se proyecta este Hamiltoniano sobre una base finita en el punto Γ , dando lugar al modelo de Kane 8×8 . Cuarto, se aplica la transformación de Löwdin para eliminar los grados de libertad de valencia y obtener un Hamiltoniano efectivo de conducción. Finalmente, al identificar el coeficiente de k^2 en la dispersión resultante, se obtiene la expresión de la masa efectiva dependiente de la energía.

El resultado final muestra que la masa efectiva de conducción no es, en general, una constante, sino una magnitud renormalizada por el acoplamiento interbanda y dependiente de la energía, la composición del material y la temperatura. Esta dependencia constituye la base física de la no parabolicidad empleada en el modelo efectivo desarrollado en esta tesis.

Apéndice B. Cálculo de la energía para el estado fundamental de un anillo utilizando el método variacional

B.1. Planteamiento variacional del problema

En el caso $D = 0$, la molécula de nanoanillos recupera la simetría cilíndrica de un sistema aislado, de modo que el potencial adiabático depende únicamente de la coordenada radial, $V_{\text{ad}}(\rho; T)$. En ausencia de campos externos, el Hamiltoniano efectivo bidimensional puede escribirse como

$$\hat{H}_{2\text{D}}^{(0)} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{1}{2m^*(\rho, E; T)} \hat{\mathbf{p}} + V_{\text{ad}}(\rho; T), \quad (98)$$

para $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Por tanto, el problema espectral queda dado por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*(\rho, E; T)} \nabla \right) + V_{\text{ad}}(\rho; T) \right] \psi(\rho, \phi) = E \psi(\rho, \phi). \quad (99)$$

Para un estado estacionario de prueba dependiente de un conjunto de parámetros variacionales α_i , denotado por $|\psi_t; \alpha_i\rangle$, la energía variacional se define como

$$E_t[\psi_t, \psi_t^*] = \frac{\langle \psi_t | \hat{H}_{2\text{D}}^{(0)} | \psi_t \rangle}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle}, \quad \frac{\partial E_t}{\partial \alpha_i} = 0. \quad (100)$$

B.2. Función de prueba

Debido a la simetría circular del anillo, puede elegirse una función de prueba del tipo

$$\psi_t(\rho, \phi) = N R(\rho) e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (101)$$

donde $R(\rho)$ es una función radial real o compleja suficientemente regular, m es el número cuántico angular y N es la constante de normalización. La condición

$$\langle \psi_t | \psi_t \rangle = 1 \quad (102)$$

implica

$$2\pi|N|^2 \int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho \, d\rho = 1. \quad (103)$$

B.3. Promedios variacionales

Usando la Ec. (99), el valor esperado del Hamiltoniano puede descomponerse como

$$E_t = \langle \hat{H}_{2D}^{(0)} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle V_{ad} \rangle, \quad (104)$$

donde

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*(\rho, E; T)} \nabla \right). \quad (105)$$

El promedio del potencial adiabático se obtiene directamente como

$$\langle V_{ad} \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \psi_t^*(\rho, \phi) V_{ad}(\rho; T) \psi_t(\rho, \phi) \rho \, d\rho \, d\phi. \quad (106)$$

Sustituyendo la función de prueba (101), resulta

$$\langle V_{ad} \rangle = 2\pi|N|^2 \int_0^\infty V_{ad}(\rho; T) |R(\rho)|^2 \rho \, d\rho. \quad (107)$$

Por su parte, el promedio de la contribución cinética puede escribirse, tras una integración por partes y suponiendo condiciones de contorno apropiadas para la función envolvente, como

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{1}{m^*(\rho, E; T)} \left[\left| \frac{\partial \psi_t}{\partial \rho} \right|^2 + \frac{1}{\rho^2} \left| \frac{\partial \psi_t}{\partial \phi} \right|^2 \right] \rho \, d\rho \, d\phi. \quad (108)$$

Al sustituir (101), se obtiene

$$\langle \hat{T} \rangle = 2\pi |N|^2 \frac{\hbar^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{m^*(\rho, E; T)} \left[\left| \frac{dR}{d\rho} \right|^2 + \frac{m^2}{\rho^2} |R(\rho)|^2 \right] \rho d\rho. \quad (109)$$

En consecuencia, la energía variacional asociada a la función de prueba (101) queda

$$E_t = 2\pi |N|^2 \int_0^\infty \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*(\rho, E; T)} \left[\left| \frac{dR}{d\rho} \right|^2 + \frac{m^2}{\rho^2} |R(\rho)|^2 \right] + V_{ad}(\rho; T) |R(\rho)|^2 \right\} \rho d\rho. \quad (110)$$

Si se utiliza explícitamente la condición de normalización (103), la expresión anterior puede escribirse de manera equivalente como el funcional

$$E_t[R, R^*] = \frac{\int_0^\infty \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*(\rho, E; T)} \left[\left| \frac{dR}{d\rho} \right|^2 + \frac{m^2}{\rho^2} |R(\rho)|^2 \right] + V_{ad}(\rho; T) |R(\rho)|^2 \right\} \rho d\rho}{\int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho d\rho}. \quad (111)$$

Para el estado fundamental se espera $m = 0$, de modo que el funcional se reduce a

$$E_t^{(m=0)}[R, R^*] = \frac{\int_0^\infty \left[\frac{\hbar^2}{2m^*(\rho, E; T)} \left| \frac{dR}{d\rho} \right|^2 + V_{ad}(\rho; T) |R(\rho)|^2 \right] \rho d\rho}{\int_0^\infty |R(\rho)|^2 \rho d\rho}. \quad (112)$$

B.4. Elección de la parte radial

Con el fin de capturar la localización de la densidad de probabilidad alrededor del radio característico del anillo y, al mismo tiempo, mantener una forma analíticamente tratable, se propone una función radial de prueba gaussiana tipo hidrogenoide de la forma

$$R(\rho; \ell, \alpha, \rho_c) = \rho^\ell \exp \left[-\frac{\alpha}{2} (\rho - \rho_c)^2 \right], \quad \alpha > 0, \quad \rho_c > 0, \quad (113)$$

donde α controla el ancho de la distribución radial, ρ_c fija el radio efectivo de localización, y $\ell \geq 0$ permite incorporar un comportamiento regular tipo hidrogenoide cerca del origen. Para el caso más simple, se puede considerar $\ell = 0$, la función radial de prueba queda

$$R(\rho) = \exp\left[-\frac{\alpha}{2}(\rho - \rho_c)^2\right], \quad (114)$$

y la energía variacional se simplifica a

$$E_t(\alpha, \rho_c) = \frac{\int_0^\infty \left[\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*(\rho, E; T)} (\rho - \rho_c)^2 + V_{ad}(\rho; T) \right] e^{-\alpha(\rho - \rho_c)^2} \rho \, d\rho}{\int_0^\infty e^{-\alpha(\rho - \rho_c)^2} \rho \, d\rho}. \quad (115)$$

La estimación variacional del estado base se obtiene imponiendo las condiciones de estacionariedad respecto de los parámetros libres,

$$\frac{\partial E_t}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E_t}{\partial \rho_c} = 0, \quad (116)$$

Desde el punto de vista físico, el parámetro ρ_c debe converger hacia la región donde el potencial adiabático presenta su mínimo, mientras que α ajusta la localización radial. Una elección inicial razonable es

$$\rho_c^{(0)} \approx \frac{R_i + R_e}{2}, \quad (117)$$

ya que esta cantidad corresponde al radio medio del anillo. De este modo, el problema variacional radial queda reducido a la minimización numérica de la Ec. (115) para una masa efectiva fijada. La solución de la Ec. 115 se plantea numéricamente utilizando el método de trapecios para la integral y como un problema autoconsistente en la energía fundamental, debido a la dependencia de la masa efectiva de la misma. El problema se resuelve para los parámetros de este trabajo: $R_i = 10$ nm, $R_e = 40$ nm, $h_r = 2.5$ nm, $h_{WL} = 1.0$ nm y $T = 300$ K, usando los valores de InAs $E_g(300 \text{ K}) = 0.3774$ eV, $\Delta_0 = 0.34$ eV y $E_P = 20.5$ eV, para $E_P = 2m_0P^2/\hbar^2$, el potencial adiabático

dado en la Ec. 47 y la masa efectiva del modelo de Kane dada en la Ec. 10.

Implementación numérica y resultados

El código que se utilizó para la resolución del problema variacional implementa una minimización autoconsistente para el estado fundamental de un anillo aislado ($D = 0$) con los parámetros presentados anteriormente. El cálculo variacional converge hacia

$$E_0^{(\text{var})} \approx 0.2826150 \text{ eV} = 282.6150 \text{ meV}. \quad (118)$$

Los parámetros variacionales óptimos obtenidos son

$$\alpha^* \approx 0.03081 \text{ nm}^{-2}, \quad \rho_c^* \approx 24.3116 \text{ nm}, \quad (119)$$

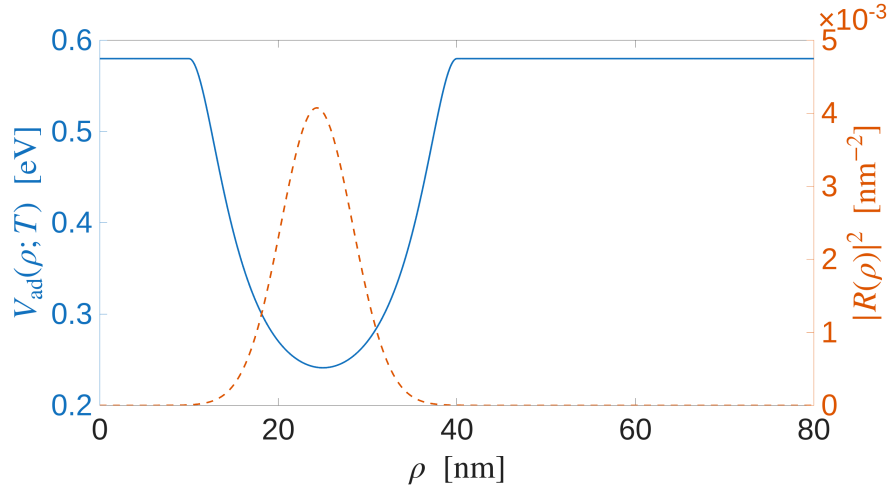
mientras que la masa efectiva autoconsistente en la energía fundamental resulta

$$\frac{m^*(E_0)}{m_0} \approx 0.02714. \quad (120)$$

Estos resultados muestran que el mínimo variacional se localiza, como era de esperarse, en una región radial cercana al radio medio del anillo, y que la no parabolicidad del modelo de Kane incrementa la masa efectiva respecto al valor de borde de banda. En consecuencia, el procedimiento implementado proporciona una estimación autoconsistente del estado fundamental.

Figura 14

Potencial adiabático $V_{\text{ad}}(\rho; T)$ del anillo aislado a $T = 300$ K (eje izquierdo) y densidad radial variacional asociada al estado fundamental, $|R(\rho)|^2$ (eje derecho), obtenida mediante la función radial gaussiana desplazada de prueba. La función radial se localiza alrededor de $\rho_c \approx 24.4$ nm, en la región del mínimo del potencial efectivo, lo que confirma que la estimación variacional captura la localización esperada del estado base en la geometría anular.



Apéndice C. Parámetros materiales

C.1. Parámetros de banda y Varshni

El Hamiltoniano efectivo introducido en el texto principal depende de un conjunto de parámetros de banda característicos de los materiales InAs y GaAs. Con el fin de facilitar la referencia, estos valores se resumen en las siguientes tablas.

Tabla 1

Propiedades de heteroestructuras InAs/GaAs.

Material	m^*/m_0	E_g [eV]	$2m_0P/\hbar^2$ [eV]	Δ_0 [eV]
InAs	0.024	0.42	20.5	0.34
GaAs	0.067	1.52	24.6	0.49

Nota. Tomado de (34, 37).

Tabla 2*Parámetros de Varshni para InAs e GaAs.*

Material	$E_g(0)$ [eV]	α [eV/K]	β [K]
InAs	0.415	2.76×10^{-4}	283
GaAs	1.519	5.405×10^{-4}	204

Nota. Tomado de (34, 37).