

**SISTEMAS DE POCAS PARTICULAS EN NANOHILOS  
Y SUPERREDES DE NANOHILOS**

**JESÚS EDUARDO GALVÁN MOYA**

Trabajo de investigación para optar al título de Magíster en Física

**Director**  
**Dr. ILIA D. MIKHAILOV**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2010**

*A mi amada esposa  
Nini Johanna*

*y a mis dos hermosos "pelaitos"  
Mariana y Juan Pablo*

## **Agradecimientos**

*De manera sincera, aunque tal vez de forma muy escueta, quiero agradecer:*

*Al profesor Ilia Mikhailov de quien he abusado de su infinita paciencia para aprehender un poco de su gran conocimiento, por su colaboración y guía durante todo este tiempo, y por la constante motivación que me imprimía aún en los momentos de tropiezos durante los cálculos, que fueron los más, gracias profe por soportarme y ser un verdadero maestro.*

*Al Instituto Colombiano para el Desarrollo de la Ciencia y la Tecnología (COLCIENCIAS) quien por medio de un proyecto de investigación me otorgó la beca de sostenimiento durante todo el transcurso de mis estudios de maestría.*

*A la Universidad Industrial de Santander (UIS) quien a través de la Vicerrectoría de Investigación y extensión (VIE) y el Centro de Excelencia de Nuevos Materiales (CENM) financió mi participación como ponente en diferentes eventos nacionales e internacionales e hizo posible la publicación de los resultados obtenidos en el presente trabajo.*

*A mi amada esposa Nini Johanna y mis hermosos niños Juan Pablo y Mariana, quienes soportaron con amor y entendimiento la limitación de tiempo que en ocasiones no me permitía verlos hasta bien entrada la noche y aún en esas ocasiones siempre había una sonrisa en sus labios, gracias porque su amor me hace dar siempre más de lo que puedo.*

*A mis padres, quienes con su inmenso amor, paciencia y templanza me enseñaron a perseverar en todos mis objetivos, su respaldo aún en ese momento tan difícil ha sido el impulso más grande para alcanzar mis objetivos, con base en sus enseñanzas hoy soy lo que soy.*

*A mis hermanos Alex y Stefany por su cariño, comprensión y su aprecio tan especial, a pesar de la distancia, me estimulan a ser cada vez mejor.*

*A toda mi familia, quienes han confiado en mí y se han alegrado con mis logros, doy infinitas gracias porque sin merecerlo siempre recibo sus mejores palabras de aliento y cariño.*

*A los profesores Javier Betancur, Jereson Silva, Carlos Beltrán, Harold Paredes y Francisco García, quienes con su amistad, apoyo, paciencia y diligencia han sido claves durante todo este proceso, gracias por su continua disposición y amistad.*

*A Willian Gutiérrez, Carlos Gómez, Fredy Rodríguez, David Velasco, William Amado, Camilo Moscoso, Elber Rodríguez y Jairo Marín, amigos que me han soportado más de lo necesario y quienes con su entusiasmo y su excesiva colaboración y disposición a ayudar han aportado de una manera muy grande en mi crecimiento como persona.*

*A Dios por amarme tanto a pesar de mí, porque su excelsa misericordia sobre mí y mi familia me muestran cada vez lo inmenso que es su amor y lo fiel que es él, su inefable gracia, y me recuerda que esto no es más que uno de sus grandes propósitos para conmigo.*

## **CONTENIDO**

	Pág.
LISTA DE FIGURAS.....	x
RESUMEN.....	xi
ABSTRACT.....	x
INTRODUCCIÓN.....	1
 <b>PRIMERA PARTE:</b>	
<b>1. DESCRIPCIÓN DEL CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL EN SL Y NWSL.....</b>	
NWSL.....	8
1.1 GENERALIDADES.....	8
1.2 PARAMETROS DE LA NWSL.....	8
1.3 MODELO MATEMATICO.....	10
Método de Barrido Trigonométrico.....	13
1.4 ANALISIS DE UN ELECTRÓN EN UNA SL Y UNA NWSL.....	14
 <b>SEGUNDA PARTE:</b>	
<b>2. SISTEMAS DE DOS PARTICULAS EN NW Y NWSL .....</b>	
2.1 DONADORA NEUTRA ( $D^0$ ) CONFINADA EN UNA NWSL.....	17
Modelo matemático.....	18
Método de Dimensión Fractal aplicado al problema de la $D^0$ .....	18
Resultados y discusión.....	20
2.2 $D^0$ CONFINADA EN UN NANOHILO DE PERFIL VARIABLE.....	24
Modelo matemático.....	25
Resultados y discusión.....	25
2.3 EXCITÓN (X) CONFINADO EN UNA NWSL.....	31
Modelo matemático.....	32
Método de Dimensión Fractal aplicado al problema del X en la NWSL.....	33

Resultados y discusión.....	38
<b>TERCERA PARTE:</b>	
<b>3. SISTEMA DE TRES PARTICULAS EN NWSL.....</b>	<b>46</b>
3.1 DONADORA NEGATIVA ( $D^-$ ) CONFINADA EN UNA NWSL.....	46
Modelo matemático.....	47
Resultados y discusiones.....	49
 CONCLUSIONES.....	 53
REFERENCIAS.....	55

## LISTA DE FIGURAS

**Fig. 1** Modelo de la NWSL (pág. 9)

**Fig. 2** Representación del potencial de confinamiento de la NWSL (pág. 10)

**Fig. 3** Potencial efectivo que confina al electrón en dirección del eje principal de la NWSL (pág. 12)

**Fig. 4** Altura de barrera efectiva para el movimiento del electrón a lo largo del eje en función del radio de la NWSL, para diferentes concentraciones de Aluminio en las barreras  $x$  y en la matriz  $y$  para una NWSL con 5 pozos y 4 barreras de anchos  $10nm$  y  $5nm$  respectivamente. (pág. 13)

**Fig. 5** Densidad de probabilidad del estado base del electrón en una SL de  $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$  con 5 pozos de  $10nm$  y 4 barreras de  $5nm$  cada una (pág. 15)

**Fig. 6** Distribución de probabilidad del electrón en una NWSL de  $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$  embebida en una matriz de  $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$  (pág. 15)

**Fig. 7** Energía de enlace de una  $D^0$  ubicada sobre el eje del nanohilo y en el centro del pozo central, en función del radio de una NWSL de 5 pozos, para diferentes concentraciones de Aluminio  $x$  en las barreras y  $y$  en la matriz. (pág. 20)

**Fig. 8** Energía de enlace de una  $D^0$  en una NWSL de  $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$  de radio  $5nm$ , embebida en una matriz de  $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ , como función de: a) la posición en  $z$  de la  $D^0$   $\xi_z$  para varios valores de la distancia radial  $\xi_\rho$  medida desde el eje principal de la NWSL; b) la distancia desde el eje  $\xi_\rho$  de una  $D^0$  localizada en el centro de diferentes pozos y barreras. (pág. 22)

**Fig. 9** Curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  en una NWSL de  $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$  embebida en una matriz de  $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$  para diferentes posiciones del ión (pág. 23)

**Fig. 10** Modelos de nanohilos de perfil variable periódicamente (pág. 25)

**Fig. 11** Altura de la barrera efectiva que confina a las partículas dentro del nanohilo de perfil variable en función de la diferencia entre los radios  $\Delta R = R_{mayor} - R_{menor}$ , para diferentes valores de  $R_{mayor}$  (pág. 26)

**Fig. 12** Energías de enlace para nanohilo cilíndrico de  $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$  con radio  $R = 8nm$  (pág. 27)

**Fig. 13** Energías de enlace para un nanohilo con perfil periódico rectangular (Fig 11b) de  $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$  con  $R_{menor} = 5nm$  y  $R_{mayor} = 8nm$ , para diferentes posiciones de la  $D^0$  y en presencia de diferentes valores de campos eléctricos. (pág. 28)

**Fig. 14** Energías de enlace para un nanohilo con perfil periódico triangular (Fig. 11c) de  $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$  con  $R_{menor} = 5nm$  y  $R_{mayor} = 8nm$ , para diferentes posiciones de la  $D^0$  y en presencia de diferentes valores de campos eléctricos. (pág. 29)

**Fig. 15** Modificación de la distribución del electrón y las curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  para campos eléctricos de: (a,b)  $F=0\text{kv/cm}$ , (c,d)  $F=10\text{kv/cm}$  y (e,f)  $F=50\text{kv/cm}$ , respectivamente, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico rectangular de  $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ . (pág. 29)

**Fig. 16** Modificación de la distribución del electrón y las curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  para campos eléctricos de: (a,b)  $F=0\text{kv/cm}$ , (c,d)  $F=10\text{kv/cm}$  y (e,f)  $F=50\text{kv/cm}$ , respectivamente, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico triangular de  $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ . (pág. 30)

**Fig. 17** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del radio (a) y el ancho del pozo (b) para varios valores del campo magnético aplicado en una NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ . (pág. 39)

**Fig. 18** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del campo magnético aplicado en dirección del eje z de una NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ , para diferentes números de pozos internos. (pág. 40)

**Fig. 19** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del ancho del pozo (a) y de la barrera (b) para varios valores del campo eléctrico en dirección del eje z de una NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ . (pág. 41)

**Fig. 20** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función: del radio de la NWSL para varios números de pozos (a) y del número de pozos internos de la NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$  (pág. 42)

**Fig. 21** Densidad de probabilidades condicionales del electrón; (a) libre en la NWSL, (b-f) para diferentes posiciones del hueco sobre el eje de la NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$  embebida en una matriz de  $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ , con 5 pozos de 10nm y 4 barreras de 5nm y de Radio 5nm. Las posiciones del hueco están señaladas con cruces. (pág. 43)

**Fig. 22** Distribución de carga del excitón dentro de la NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$  (pág. 44)

**Fig. 23** Distribución de la concentración de aluminio a lo largo del eje z de la NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  (pág. 48)

**Fig. 24** Curvas de nivel de (a) la distribución de carga en el estado base de los dos electrones en una NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  y (b) las energías de la donadora cargada negativamente dada en  $(Ry^*)$  en diferentes posiciones dentro de la NWSL de radio 40nm, con 5 pozos de 10nm separados por las barreras de 5nm de ancho. Las franjas sombreadas representan las barreras internas de la NWSL. (pág. 50)

**Fig. 25** energías de enlace de la  $D^-$  en función de su distancia (a) desde el eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje z y (b) desde el extremo de la NWSL para diferentes valores de su posición radial, para NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ . (pág. 51)

## **TÍTULO**

**SISTEMAS DE POCAS PARTICULAS EN NANOHILOS Y SUPERREDES DE NANOHILOS\***

## **AUTOR(ES)**

**JESÚS EDUARDO GALVÁN MOYA\*\***

## **PALABRAS CLAVES**

Nanohilo, superred, donadora, exciton, energía, semiconductor

## **RESUMÉN**

Dentro del marco de la aproximación de masa efectiva se realiza un estudio de la energía del estado base de donadoras ( $D^0$  y  $D^-$ ) y excitones ( $X$ ) confinados en una superred de nanohilos cilíndricos de  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ . Haciendo uso de la aproximación adiabática y utilizando el Método de Dimensión Fractal (MDF), se reduce del esquema tridimensional a un problema unidimensional. Se utiliza el método de barrido trigonométrico para resolver numéricamente la ecuación diferencial unidimensional a la que se reduce el problema. Se analiza el comportamiento de la energía del estado base de cada sistema en función del radio del hilo, de los anchos de los pozos y las barreras, y de la concentración de aluminio en las barreras, así mismo como la dependencia de la energía en función de la posición de la impureza para el caso de las donadoras. También se analiza el comportamiento de la distribución de carga en cada uno de los sistemas. Para el caso particular de la donadora cargada negativamente  $D^-$  se trabaja con el método variacional antes enunciado, sin embargo se usan funciones de prueba tipo Hylleraas para se calcula la energía del estado base.

Para complementar el trabajo, se analiza el comportamiento de una donadora neutra  $D^0$  en un nanohilo de  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$  con sección transversal circular y perfil periódicamente variable, con el fin de comprender las similitudes que llegan a tener estas heteroestructuras con las superredes de nanohilos las cuales son el tema fundamental del trabajo. Para mostrar la efectividad de los métodos utilizados se analizan las propiedades de las estructuras en los casos límites de su conformación geométrica, para modelos ampliamente conocidos en la literatura científica.

---

\* Proyecto de Investigación de Maestría

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

**TITLE**

FEW PARTICLES SYSTEMS IN NANOWIRE AND NANOWIRE SUPERLATTICE\*

**AUTHOR(S)**

JESÚS EDUARDO GALVÁN MOYA\*\*

**KEYWORDS**

Nanowire, superlattice, donor, exciton, energy, semiconductor

**ABSTRACT**

We work within the effective mass approximation framework, we make a study of the ground state energy for donors ( $D^0$  y  $D^-$ ) and excitons (X) confined in a cylindrical nanowire superlattice of GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As/Ga<sub>1-y</sub>Al<sub>y</sub>As. We use the adiabatic approximation and the Fractal Dimension Method (FDM) to reduce the three-dimensional scheme to a one-dimensional problem. We use the Trigonometric Sweep Method in order to solve numerically the one-dimensional differential equation. We analyze the behaviour of the ground state energy for each one of these system as function of the radius of the nanowire, the width of wells and barriers, and the Aluminium concentration in the barriers; equally the dependence of the energy as function of the donor position, for the cases when we consider only donors. At the same way, we study the behaviour of the charge distribution in the systems considered. For the particular case of the negatively charged donor  $D^-$  we use the FDM. However, the trial wave function that we used is type Hylleraas, in order to calculate the ground state energy.

In order to develop more complete work, we analyze the behaviour of a neutral donor  $D^0$  in a nanowire of GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As with circular cross section and profile periodically variable, to give us an understanding the similarities between these heterostructures and the nanowires superlattice, which are the main subject of the present work. To show the effectiveness of the methods purposed in this work, we analyze the properties of the structure in limit cases of its geometrical dimensions, for the models well known in the scientific literature.

---

\* Research Project of Master

\*\* Faculty of Sciences; Department of Physics; Director: PhD. Ilia D. Mikhailov



## **INTRODUCCIÓN**

En la actualidad las nuevas técnicas para crecer semiconductores con capas alternantes ultradelgadas, han permitido crear materiales con propiedades optoelectrónicas a gusto del consumidor. La progresiva miniaturización de estas estructuras recientemente ha abierto un nuevo campo de investigación conocido como nanotecnología. A raíz de las pequeñas distancias entre las junturas los efectos cuánticos son más notorios, de aquí nace la importancia de estudiar estos efectos y el comportamiento de partículas portadoras de carga dentro ellas.

Gracias al continuo avance de la tecnología, desde las primeras décadas de investigación sobre materiales semiconductores, se han implementado diversas técnicas para crecer heteroestructuras, tales como Deposición Molecular Epitaxial (MBE), Deposición Química Metal-Orgánica de la fase de Vapor (MOCVD) [1], Epitaxia por fase líquida [2], entre otras, a través de las cuales se han podido crecer estructuras con restricciones en sus grados de libertad, a estas estructuras se les identifica, dentro de los sistemas de baja dimensionalidad, según su forma como pozos (QWs), hilos (QWWs), superredes (SLs) y puntos cuánticos (QDs), compuestas por más de un material semiconductor. Esta nueva época de la nanotecnología tuvo su comienzo con el trabajo de Esaki y Tsu [3], quienes analizaron las propiedades de una superred fabricada a partir de dos semiconductores bases (A y B) con diferentes anchos de bandas prohibidas crecidos en forma alternadas (ABABA...) y estudiaron diferentes propiedades de estos tipos de estructuras.

Para crear una heterojuntura semiconductor con interfaces perfectas, se requiere que los materiales utilizados para formarla tengan una estructura cristalina similar y parámetros de red muy parecidos, de manera que para cumplir con este objetivo frecuentemente se utilizan los compuestos de los grupos III-V, sustituyendo parcialmente uno de los compuestos por otro átomo del mismo grupo. La diferencia de las bandas prohibidas produce un salto de

potencial en las interfaces y de esta manera se forma un pozo de potencial en el cual se pueden confinar los portadores de carga, tanto en estado libre como ligados.

Las heteroestructuras están formadas por varias junturas y por consiguiente existen innumerables posibilidades y formas para éstas. Su gran utilidad tecnológica hace de estas heteroestructuras un punto fuerte de investigación. Además, se ha encontrado experimentalmente que en los semiconductores existen dos bandas de energías distintas. La banda más baja esta casi totalmente llena de electrones, esta banda es originada por los electrones de valencia los cuales constituyen los enlaces covalentes que unen a los átomos en el cristal, por esto es llamada banda de valencia. La banda superior esta casi desprovista de electrones, esto representa potencialmente estados de electrones excitados, los cuales están ocupados por electrones promovidos desde la banda de valencia, cada electrón excitado en esta banda esta debidamente acelerado por un campo eléctrico aplicado y contribuye al flujo de corriente, esta banda es conocida como banda de conducción. Gracias a estas bandas se producen las diferencias en las alturas de potencial en las junturas de diferentes materiales, esto crea los pozos cuánticos que permiten confinar con mayor posibilidad las partículas que se encuentran dentro de la heteroestructura en un momento dado.

Los sistemas multiparticulares se pueden clasificar en dos grandes grupos: móviles e inmóviles. Los sistemas móviles están compuestos únicamente por electrones (e) de la banda de conducción y huecos (h) de la banda de valencia. La extrema pequeñez de las masas efectivas de estas partículas cuyos valores son como mínimo de un orden de magnitud menor que la masa del electrón libre, les garantiza una gran movilidad para desplazarse por todo el material. El complejo más simple de este tipo es el excitón (X) el cual está formado por un par e-h. Otros sistemas más complicados se forman cuando un excitón es capaz de ligar o enlazar un electrón o un hueco extra, formándose excitones cargados o ionizados que se conocen con el nombre de triones  $X^-(eeh)$  y  $X^+(ehh)$ , respectivamente. En caso de que la densidad de excitones sea muy grande se puede aumentar la interacción entre ellos y dar lugar a la formación de sistemas más complicados como la molécula excitónica o biexcitón (XX). Mientras que los sistemas inmóviles están formados por centros localizados

en posiciones fijas de la red, los cuales surgen debido a impurezas, tanto donadoras ( $D$ ) como aceptadoras ( $A$ ). Como consecuencia de la interacción Coulombiana, estos centros localizados pueden llegar a atrapar electrones, huecos o excitones.

Desde el punto de vista teórico, el interés por el análisis de impurezas confinadas en heteroestructuras semiconductoras se ha hecho cada vez mayor. El primero en tratar este problema, fue Bastard [4], considerando una  $D^0$  en un QW bajo la aproximación de la masa efectiva. Posteriormente, el modelo de Bastard fue extendido para analizar las propiedades de una  $D^-$  en un QW. Desde entonces, se ha seguido usando para calcular los niveles energéticos de donadoras en otros tipos de heteroestructuras, como QWWs y QDs. Hasta la fecha, son innumerables los trabajos teóricos que se han realizado para el análisis de impurezas en QDs utilizando diferentes métodos. Dentro de los trabajos importantes donde se utilizó el método variacional podemos citar el trabajo de Zhu y colaboradores [5], en el cual se obtienen los niveles de energía de una  $D^0$  y una  $D^-$  confinadas en QDs, el trabajo de Sandler y Proetto [6], en el cual se realiza un cálculo del estado base de una  $D^-$  en dos dimensiones usando funciones de prueba tipo Chandrasekhar; el trabajo de García y coinvestigadores [7], en el cual se calculan las energías del estado base para impurezas  $D^0$  y  $D^-$  centradas en un disco. En el trabajo de Marín y Cruz [8] se estudian sistemas atómicos de uno y dos electrones confinados por cajas penetrables esféricas usando una extensión del método variacional. Pang y Louis [9] analizaron una  $D^-$  en un pozo cuántico en presencia de un campo magnético por medio de una combinación del método variacional y Monte Carlo. El método de dimensión fractal elaborado en el grupo de Física Computacional de Materia Condensada de la UIS también ha sido utilizado para analizar  $D^0$  y  $D^-$  en diferentes situaciones [10-14]. Para el caso del método de diagonalización de matrices se tiene el trabajo de Xie [15] en el cual se encuentra el espectro de energía del segundo estado ligado para una  $D^-$  en un QD; y el trabajo de Ruan y coinvestigadores [16] donde se resuelve la ecuación de Schrödinger para una  $D^-$  en dos dimensiones. Para resolver este tipo de problemas también ha sido usada la teoría de perturbaciones, cálculos de este tipo fueron realizados por Büsser y Proetto [17] donde se ha hecho el análisis de una  $D^-$  en los límites casi cero y casi unidimensional

En el 2002, Gudixsen y colaboradores [18] mostraron los primeros resultados del crecimiento de superredes en nanohilos (NWSLs), estas estructuras de superredes son creadas dentro de los nanohilos por la repetida modulación de reactantes semiconductores en fase de vapor durante el crecimiento de los mismos, en la publicación se reporta la construcción de nanohilos de 2 y hasta 21 capas. En ese mismo año se conocieron otros resultados de crecimientos de estas estructuras como los publicados por Solanki y colaboradores [19], así como Wu, Fan y Yang [20], los cuales crearon estas estructuras por deposición de capas y bloques respectivamente, usando métodos de vapor-liquido-sólido y deposición química de vapor. Posteriormente Ristíc y colaboradores [21] caracterizaron discos cuánticos de GaN embebidos en nanocolumnas cuánticas de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ , crecidas utilizando el método MBE. En este trabajo se analizaron diversos comportamientos y propiedades físicas de este tipo de estructuras.

Sin embargo en 1991, años antes de la creación de las primeras NWSLs, ya se había publicado una primera aproximación teórica, fueron Wu y colaboradores [22] quienes utilizando el método de matriz de transferencia, caracterizaron las propiedades de conductividad y coeficientes de transmisión entre otras características de las, hasta entonces, hipotéticas NWSLs. Dos años después de la creación de las primeras NWSLs, Lin y colaboradores [23] publicaron un trabajo teórico basado en el potencial de Kronig-Penney analizando las propiedades de transporte electrónico en estas estructuras. Luego en el 2004 en publicaciones de Willatzen [24] y Galeriu [25], con sus respectivos colaboradores, se plantearon modelos matemáticos para el análisis de los fenómenos físicos en estas estructuras, este último realizó su trabajo dentro del esquema de diferencias finitas. Este mismo año Yuang-Ping y colaboradores [26] analizaron una NWSL con perfil variable de forma triangular (dentada) utilizando el método de funciones de Green, caracterizando propiedades de transporte. Más recientemente en el 2007 Klos [27] analizó una NWSL con confinamiento lateral débil dentro de la aproximación de masa efectiva utilizando ondas de Bloch para encontrar una aproximación de los estados electrónicos, en este mismo año Niquet [28] analizó propiedades electrónicas de estas estructuras utilizando el método de Tight-Binding.

Como se puede ver el trabajo acerca del análisis de las NWSLs apenas comienza, es mas, la gran mayoría de trabajos publicados acerca de estas estructuras hacen referencia a modelamientos teóricos de estados electrónicos en dichos sistemas. Pero dado que la bibliografía de trabajos de sistemas de pocas partículas en NWSL actualmente no cuenta con publicaciones relevantes, es necesario conocer primero acerca de los trabajos de sistemas de pocas partículas en superredes. Desde el descubrimiento de las superredes [3] estas han sido analizadas de diferentes formas pero el estudio de sistemas de pocas partículas en estas estructuras es más fuerte desde principios de los 90's, trabajos como los de Pereira [29], Dignam [30] y Chuu [31] con sus respectivos colaboradores analizaron energías de enlace de excitones en superredes utilizando métodos variacionales, y más recientemente en el 2002 Afif y colaboradores [32] analizaron excitones en superredes utilizando el método de Monte Carlo, mientras en el 2007 Tomassini y colaboradores [33] estudiaron la energía de enlace de un excitón un una superred dentro de la aproximación de función envolvente.

Una de las primeras aproximaciones de sistemas de pocas partículas en NWSLs fue la publicada en el 2005 por Zhang y colaboradores [34] que analizaron el espectro de absorción para un excitón en una superred de puntos cuánticos en nanohilos cilíndricos en presencia de campo eléctrico. Sin embargo de trabajos concretos acerca de donadoras  $D^0$  y  $D^-$  y excitones  $X$  y  $X^-$  en NWSL aun no se encuentran reportes, de ahí la pertinencia de este trabajo.

Como es posible observar el estudio de NWSL es actualmente un campo abierto en el que el análisis de sistemas de pocas partículas aun no muestra resultados o publicaciones importantes, por esta razón los trabajos que se adelanten en esta dirección aportarán información muy valiosa para aumentar nuestro entendimiento acerca de las propiedades de estas estructuras y facilitarán las potenciales aplicaciones de estos sistemas en la tecnología. El análisis de sistemas de pocas partículas más complejos como donadoras neutras ( $D^0$ ) y negativamente cargadas ( $D^-$ ), así como de excitones ( $X$ ) en heteroestructuras semiconductoras resulta más interesante que el problema de uno o dos electrones, por esto es importante plantear procedimientos sencillos y con un alto grado de precisión, con los cuales se obten-

gan resultados que estén en buena concordancia con los datos experimentales, así mismo el análisis del excitón y el trion son un poco más complejos y requieren de una pericia un poco más alta en el manejo de los cálculos.

En este trabajo se analiza el problema de sistemas de pocas partículas en NWSL de  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ , utilizando diferentes métodos para comparar y encontrar de qué forma se pueden obtener mejores resultados. También se analiza el comportamiento de algunos de estos sistemas de pocas partículas confinadas en nanohilos de  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$  con perfil no regular, ya que es muy común encontrar en la literatura ejemplos de crecimiento de estructuras en los que debido a lo delicado y complejo del proceso de formación los nanohilos no son perfectamente cilíndricos. Al mismo tiempo se analiza la relación entre los resultados obtenidos para la NWSL y el NW de perfil variable, para interpretar de forma correcta la implicación de las barreras, debidas a la diferencia de concentración de aluminio ( $x$ ), en el comportamiento del sistema de partículas en la NWSL. Estos estudios permitirán entender con más claridad las propiedades de estos sistemas de pocas partículas en una NWSL, cosa que hasta el momento es en gran parte desconocida por la comunidad científica.

La organización del presente trabajo esta distribuida de la siguiente manera, en la primera parte se analizarán las propiedades de confinamiento de la NWSL considerando el estudio del comportamiento del electrón dentro de la heteroestructura, en la segunda parte se estudiará el comportamiento de la  $D^0$  en una NWSL y en un hilo de perfil variable que tiene propiedades parecidas a las de la NWSL, además se estudiará al excitón confinado en la NWSL. En la tercera y última parte se estudiará el comportamiento de una  $D^-$  en la NWSL, y por ultimo se expondrán las conclusiones del presente trabajo de investigación. Sin embargo es de aclarar que, con el fin de resumir todo el trabajo realizado, para este escrito se ha decidido seleccionar el conjunto de resultados más relevantes para ser presentados a manera de resumen de los cálculos realizados durante mi estancia en el programa de maestría. Como resultado de los trabajos realizados en el estudio de las NWSL durante estos

meses en el programa de maestría, he realizado algunas ponencias de muchos de los resultados mostrados en este trabajo, es así como he participado en eventos

Participación como ponente en eventos nacionales:

- XXIII Congreso Nacional de Física (Santa Marta 2009)
- I workshop in topics on Physics: Nanotechnology (Bogotá 2009)

Participación como ponente en eventos internacionales:

- XIX Latin American Symposium on Solid State Physics (Puerto Iguazú – Argentina 2008)
- 11th International Conference on Optics of Excitons in Confined Systems (Madrid – España 2009)

Adicionalmente acerca de estos trabajos he realizado los siguientes artículos:

- Electric-field effect on shallow impurity ground state in nanowire superlattice, *Physica B* **404**, 180-183 (2009)
- Exciton binding energy in a nanowire superlattice with magnetic and electric fields. *Artículo sometido a Journal of Physics: Conference Series*
- Energy spectrum of excitons in single and double narrow well in a magnetic field. *Artículo sometido a Journal of Physics: Conference Series*
- Binding energies of shallow donors in axially symmetrical nanowire with non-uniform cross-sections in an electric field. *Artículo sometido a Revista Colombiana de Física.*

## **PRIMERA PARTE**

---

### **1. DESCRIPCIÓN DEL CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL EN SL Y NWSL**

Estudio y descripción de la forma del confinamiento para una partícula dentro de una superred y un superred de nanohilos. Cálculo de la función de onda y densidad de probabilidad de un electrón en estas estructuras, para entender el comportamiento de la partícula en el sistema y sus ubicaciones más probables.

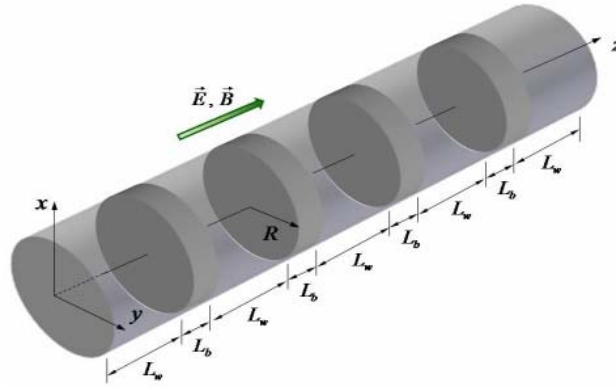
#### **1.1 GENERALIDADES**

Dado que el interés principal de este trabajo es conocer las propiedades que presentan diferentes sistemas de pocas partículas en una NWSL, es primordial conocer y comprender el comportamiento de una partícula libre en la heteroestructura, por esta razón en esta primera parte del trabajo se realiza una descripción y un análisis de las propiedades que presenta el electrón al estar confinado en una SL y una NWSL.

El análisis del electrón libre dentro de una heteroestructura es muy importante ya que permite, en principio, conocer los estados energéticos fundamentales del sistema, además de identificar las ubicaciones más probables de la partícula dentro de la estructura, haciendo que la comprensión de esta se haga más clara y de paso permite obtener información muy importante para posibles aplicaciones de la heteroestructura.

#### **1.2 PARAMETROS DE LA NWSL**

En el presente trabajo se considera un modelo de una NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  embebida en una matriz de  $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ . La NWSL tiene una sección transversal circular de radio  $R$  y con concentración de Aluminio  $c$  variable a lo largo del eje principal del nanohilo, dicha concentración es igual a cero dentro de los  $n$  pozos idénticos de ancho  $L_w$ , a  $x$  en las  $n-1$  barreras de anchos  $L_b$  y, a  $y$  por fuera de la NWSL, esta configuración es representada en la Fig. 1.



**Fig. 1** Modelo de la NWSL

La discontinuidad en las bandas de conducción y valencia entre las junturas, denominadas comúnmente como el gap de la unión, está dada por una función constante por segmentos y cuyo valor varía con la concentración de Aluminio  $c$  dentro y fuera de la NWSL a través de la relación  $\Delta E_g(c) = 1.36c + 0.22c^2$  (eV) [44], con una contribución de 60% a la discontinuidad en la banda de conducción y de 40% a la de la banda de valencia. En coordenadas cilíndricas los potenciales de confinamiento  $V_k(\rho, z)$  son iguales a cero en los pozos, a  $0.6\Delta E_g(x)$  si  $k = e$  (para el electrón) a  $0.4\Delta E_g(x)$  si  $k = h$  (para el hueco) en las barreras, y fuera de la NWSL igual a  $0.6\Delta E_g(y)$  o  $0.4\Delta E_g(y)$  para el electrón y el hueco, respectivamente. En la Fig. 2 se ilustra la forma del potencial que confina la partícula en la NWSL.

Para expresar las ecuaciones en términos de variables adimensionales es necesario definir parámetros de adimensionalización para las cantidades más básicas que se manipularán, así pues, en adelante se usará el radio de Bohr efectivo  $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$  y el Rydberg efectivo  $Ry = e^2 / 2\epsilon a_0^*$ , como las unidades adimensionales de la longitud y la energía, respectivamente. En todos los cálculos se despreciarán la variación de los parámetros del material, esto debido a que la corrección debida a ellos merece un trabajo más detallado y el propósito de este trabajo consiste solo en interpretar las propiedades básicas de los sistemas de pocas partículas en la NWSL. Los valores de la constante dieléctrica y la masa efectiva del electrón para el GaAs que serán utilizadas en los presentes cálculos son  $\epsilon = 12.5$  y

$m_e^* = 0.067m_0$ , mientras que las masas efectivas del hueco pesado son  $m_z^* = 0.45m_0$  y  $m_\rho^* = 0.10m_0$  respectivamente.

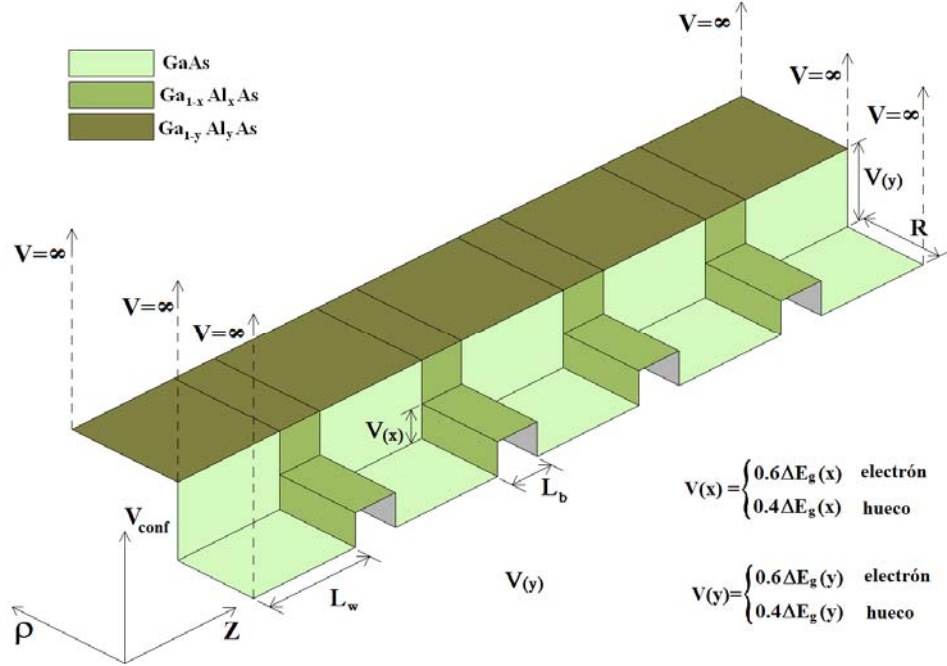


Fig. 2 Representación del potencial de confinamiento de la NWSL

### 1.3 MODELO MATEMATICO

Para el análisis de una partícula en la NWSL, se considerará un electrón libre moviéndose en presencia del potencial de confinamiento  $V_e(\rho, z)$  el cual es mucho más fuerte en dirección de  $\rho$  que a lo largo del eje  $z$ , esto es debido a que la NWSL que se considera en este trabajo es de sección transversal delgada, mientras que su longitud es bastante larga en comparación con el radio del nanohilo.

El hamiltoniano del electrón libre en el sistema está dado como:

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_e(\rho, z) \quad (1.1)$$

Debido a la forma del confinamiento las energías del electrón  $E_e$  y sus correspondientes funciones de onda  $f_e(\vec{r})$  pueden ser calculadas haciendo uso de la aproximación adiabática [39], en la cual la solución de la ecuación de Schrödinger uni-particular

$$\hat{H}_e f_e(\vec{r}) = E_e f_e(\vec{r}) \quad (1.2)$$

es presentada como un producto de dos funciones  $f_\rho(\rho, z)$  y  $f_z(z)$  las cuales describen el movimiento rápido del electrón en dirección radial y el lento a lo largo del eje principal de la NWSL, respectivamente.

$$f_e(\rho, z) = f_\rho(\rho, z) f_z(z) \quad (1.3)$$

La función  $f_\rho(\rho, z)$  es la solución de una versión simplificada de la ecuación (1.2) para el caso donde el movimiento del electrón a lo largo del eje está “congelado”, esto representa el análisis del movimiento radial de una sección transversal de radio R pero de espesor despreciable, es decir:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial f_\rho(\rho, z)}{\partial \rho} + V(\rho, z) f_\rho(\rho, z) = E_\rho(z) f_\rho(\rho, z) \quad (1.4)$$

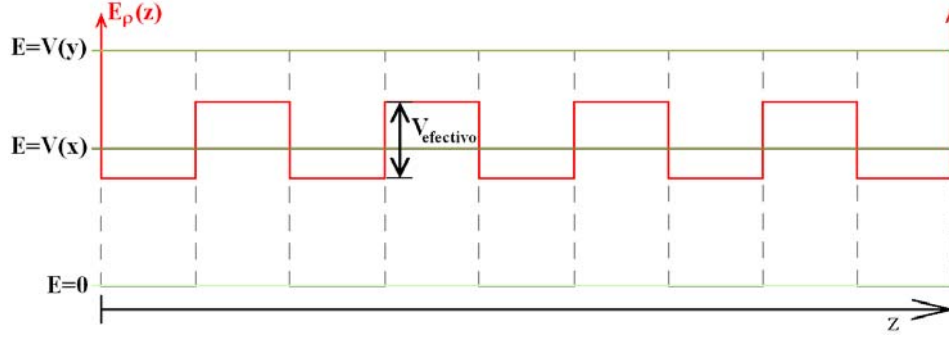
La solución de la ecuación (1.4) es la bien conocida función de onda de un electrón confinado in un pozo cuántico circular de barrera finita, la cual sabemos se puede expresar en términos de las funciones de Bessel, mientras la energía  $E_\rho(z)$  está definida como el valor más pequeño que satisface la ecuación trascendente, dada por la continuidad de la función de onda en el punto  $\rho = R$ , para diferentes secciones transversales a lo largo del eje.

En nuestro caso  $E_\rho(z)$  es una función periódica seccionalmente constante, en la cual el valor más bajo corresponde a la energía del estado base en un QW circular con las energías en el pozo de cero y en la barrera de  $0.6\Delta E_g(y)$ , mientras el valor más alto corresponde a la energía del estado base en un QW circular con las energías en el pozo y la barrera de  $0.6\Delta E_g(x)$  y  $0.6\Delta E_g(y)$  respectivamente. La diferencia entre estos dos valores define lo que se considerará en adelante la altura de la barrera efectiva para el movimiento del electrón a lo largo del eje  $z$ , este potencial efectivo es ilustrado en la Fig. 3.

Una vez que la ecuación (1.4) es resuelta y la función  $E_\rho(z)$  es hallada, se pueden encontrar la función  $f_z(z)$  y la energía  $E_e$  solucionando la ecuación (1.5) “descongelando” el movimiento lento en dirección axial

$$-\frac{\partial f_z(z)}{\partial z} + E_\rho(z)f_z(z) = E_0 f_z(z) \quad (1.5)$$

La función  $f_z(z)$  y la energía  $E_e$  son calculadas numéricamente haciendo uso del método de barrido trigonométrico (MBT) descrito en [10-14].

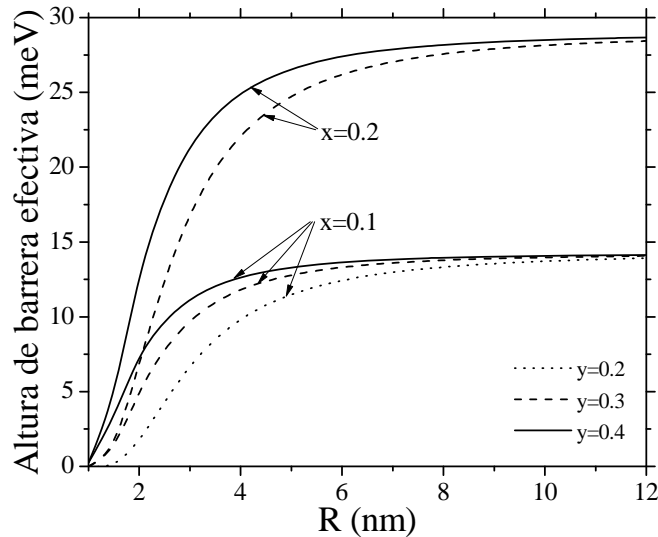


**Fig. 3** Potencial efectivo que confina al electrón en dirección del eje principal de la NWSL

El movimiento lento a lo largo del eje  $z$  descrito por  $f_z(z)$  corresponde al desplazamiento unidimensional del electrón bajo el potencial adimensional  $E_\rho(z)$ , similar a como se representa en la Fig. 3, la altura de esta barrera efectiva para este desplazamiento está dado por la diferencia entre el valor más bajo y más alto de la energía  $E_\rho(z)$ , entre más pequeño sea el valor del radio menor será la altura de la barrera efectiva. Para detallar el efecto del confinamiento lateral sobre la energía del electrón en la NWSL, en la Fig. 4 se muestra la variación de la altura de barrera efectiva en función del radio del NWSL.

En esta figura se puede ver que a medida que el radio de la NWSL disminuye, la altura de la barrera efectiva también lo hace para todas las concentraciones de Aluminio tanto en las barreras internas de la NWSL como en la matriz por fuera del nanohilo. Sin embargo al aumentar el radio este efecto llega a ser cada vez menos y menos pronunciado y para radios mayores que  $1a_0^* \approx 10nm$  la altura de la barrera efectiva prácticamente no depende de la variación del radio.

De la misma manera se puede observar que la altura de la barrera efectiva para el caso límite de radios muy grandes depende muy débilmente de la concentración de Aluminio en la matriz, y es prácticamente la misma barrera efectiva que para una superred (SL).



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

La mayoría de los problemas relacionados con sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras no pueden ser resueltos en forma exacta. Soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger existen solamente para unos pocos sistemas idealizados. Por esta razón, para resolver problemas generales se debe recurrir a métodos aproximados y numéricos. A continuación se presentan los métodos que se emplearon para desarrollar este trabajo de investigación.

### Método de Barrido Trigonométrico

La ecuación diferencial unidimensional de segundo orden (1.4) o (1.5) junto con un par de condiciones de frontera, constituyen lo que se denomina un problema de contorno. Existe variedad de métodos computacionales para resolver dichos problemas, dentro de los cuales se encuentran: el método de disparos y los métodos de barrido, entre otros. Debido a la complejidad del problema, como podemos ver en las ecuaciones antes mencionadas, es

preciso inducir al lector al manejo del método de barrido trigonométrico, que será el método utilizado en el presente trabajo para solucionar este tipo de problemas.

Dada una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \alpha(x) \frac{\partial}{\partial x} f(x) + \beta(x) f(x) = 0 \quad (1.6)$$

El método de barrido trigonométrico [45] utiliza coordenadas polares de Poincaré, para reducir la ecuación diferencial (1.6) de segundo orden a una ecuación diferencial de primer orden a través del siguiente cambio de variables:

$$f(x) = A(x) \cos \theta(x); \quad f'(x) = A(x) \operatorname{sen} \theta(x) \quad (1.7)$$

donde  $A(x)$  y  $\theta(x)$  representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré, respectivamente. Derivando la primera relación de (1.7), y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada  $f'(x)$  en la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(x) = A(x) \frac{\sin \theta(x)}{\cos \theta(x)} [\theta'(x) + 1] \quad (1.8)$$

Por otro lado sustituyendo la expresión (1.8) en la ecuación (1.7) y utilizando la relación (1.6), se obtiene la ecuación diferencial para la fase  $\theta(x)$ :

$$\theta'(x) = -[\sin^2 \theta(x) + \alpha(x) \cos^2 \theta(x) + \beta(x) \sin \theta \cos \theta] \quad (1.9)$$

Para encontrar la función  $A(x)$  hay que sustituir la expresión (1.8) para la derivada de  $\theta(x)$  en (1.7) y realizar la integración:

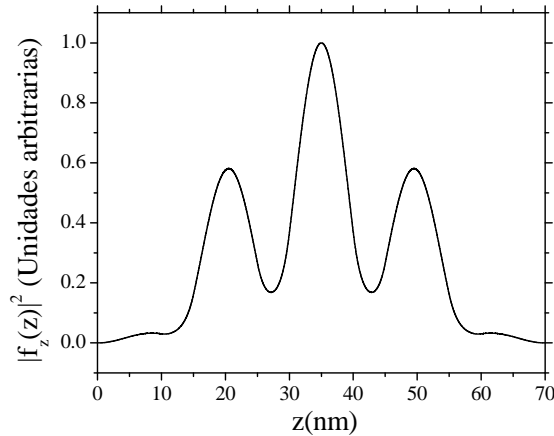
$$A(\varphi) = \exp \left\{ \int_0^\varphi [(1 - \alpha(x)) \sin \theta(x) \cos \theta(x) - \beta(x) \operatorname{sen}^2(\varphi)] d\varphi \right\}; \quad A(0) = 1 \quad (1.10)$$

Como se puede notar, la expresión (1.9) es una ecuación diferencial de primer grado que, con condiciones iniciales definidas, se transforma en un problema de Cauchy y como es bien sabido este problema puede solucionarse utilizando diferentes métodos numéricos como por ejemplo el método de Rounge-Kutta, el cual será utilizado en este trabajo.

#### **1.4 ANALISIS DE UN ELECTRÓN EN UNA SL Y UNA NWSL**

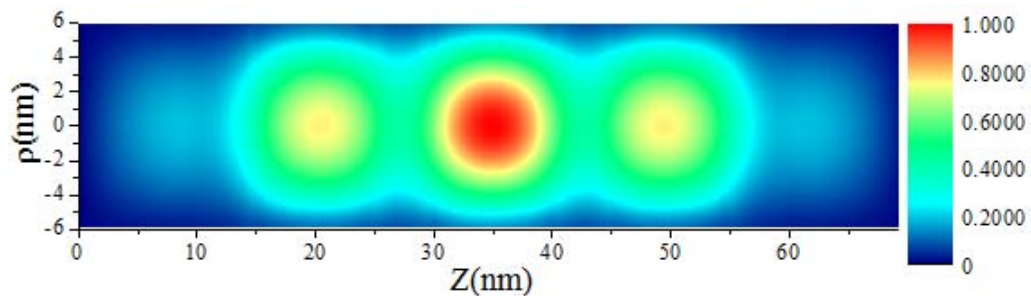
Para entender cómo se comporta el electrón dentro de la NWSL se hace importante conocer en principio el comportamiento del mismo en una estructura más elemental como lo es la

superred (SL), con este fin se muestra en la Fí. 5 la densidad de probabilidad para diferentes puntos sobre la SL de  $n=5$  pozos de ancho  $L_w=10nm$  cada uno y 4 barreras de ancho  $L_w=5nm$  cada una, formada por el potencial efectivo que confina al electrón en dirección del eje principal de la NWSL de GaAs/Ga<sub>0,9</sub>Al<sub>0,1</sub>As embebido en una matriz de Ga<sub>0,6</sub>Al<sub>0,4</sub>As .



**Fig. 5** Densidad de probabilidad del estado base del electrón en una SL de GaAs/Ga<sub>0,9</sub>Al<sub>0,1</sub>As con 5 pozos de 10nm y 4 barreras de 5nm cada una

De esta figura se puede notar que es más probable encontrar al electrón en el pozo central y que la probabilidad se reduce considerablemente en los pozos vecinos a este, esto ocurre porque la posibilidad que tiene la partícula de tunelar hacia ellos resulta muy pequeña debido a lo altas y anchas que son las barreras de potencial.



**Fig. 6** Distribución de probabilidad del electrón en una NWSL de GaAs/Ga<sub>0,9</sub>Al<sub>0,1</sub>As embebida en una matriz de Ga<sub>0,6</sub>Al<sub>0,4</sub>As

Sin embargo con todo y esto la probabilidad de encontrar al electrón en los pozos vecinos es un poco más de la mitad de la probabilidad encontrarlo en el pozo central, aún así el

electrón prefiere evitar los pozos extremos de la SL, donde el principio de incertidumbre de Heisenberg implica que su energía debe ser muy alta, por lo tanto la probabilidad de encontrar al electrón en estos pozos es casi completamente nula.

En la Fig. 6 se observan las curvas de nivel de la densidad de probabilidad de encontrar al electrón en alguna posición dentro de la NWSL de GaAs/Ga<sub>0,9</sub>Al<sub>0,1</sub>As embebida en una matriz de Ga<sub>0,6</sub>Al<sub>0,4</sub>As similar a la descrita arriba y con radio  $R = 5nm$ , como se puede notar, y como era de esperarse después de ver los resultados de la Fig 5, que la probabilidad de que el electrón se encuentre en el pozo central es mucho más grande que en el resto de la NWSL, esto se debe a que el confinamiento en dirección axial es muy bajo debido a lo ancho de las barreras y a lo largo del nanohilo como ya se explicó, por lo tanto, como el pozo también es ancho el electrón siente mayormente el confinamiento del pozo central y casi que no siente el resto, esto hace que él prefiera moverse en el pozo central con una energía baja a tener que aumentar considerablemente su energía para tunelar y llegar a los pozos vecino. Pero tal vez lo que más llame la atención de las curvas de esta figura, es que aún exista probabilidad de encontrar al electrón por fuera del radio de la NWSL, esto se debe al hecho de que el confinamiento radial resulta muy fuerte porque el radio es muy pequeño lo que hace que el electrón tenga una energía cinética transversal elevada y por lo tanto la función de onda se extienda de manera bastante notable en dirección radial, lo que provoca que la probabilidad de tunelar del electrón hacia la matriz se haga cada vez más y más grande, debido a esto es de esperarse que el electrón pueda comenzar a atravesar las paredes radiales del nanohilo de manera más y más probable para radios cada vez más pequeños.

## **SEGUNDA PARTE**

---

### **2. SISTEMAS DE DOS PARTICULAS EN NW Y NWSL**

Estudio de la energía de enlace, función de onda, distribución de carga de sistemas de dos partículas ( $D^0$  y X) confinados en una estructura con forma de una superred de nanohilos en presencia de un campo eléctrico y magnético externo. Se realiza una comparación de algunos de estos resultados con el comportamiento del sistema de partículas en un nanohilo de perfil variable.

#### **2.1 DONADORA NEUTRA ( $D^0$ ) CONFINADA EN UNA NWSL**

Los átomos de tipo hidrogenoide tienen sus análogos en la física del estado sólido; sistemas de dos partículas de carga opuesta (electrón-ión), como es el caso de una impureza donadora neutra  $D^0$ . Si en una red cristalina, por ejemplo de GaAs, se introduce un átomo del grupo IV de tal manera que reemplace a un átomo de Ga, uno de los electrones de este átomo introducido no participa en el enlace químico y queda casi libre en la banda de conducción. Este electrón se encuentra débilmente ligado en una “órbita” de radio muy grande alrededor del ión monovalente y por lo tanto puede ser fácilmente removido por excitaciones térmicas o eléctricas. Tales sistemas son conocidos como donadoras neutras. El espectro energético de una impureza donadora en el volumen de GaAs tiene una estructura tipo hidrogenoide, sin embargo la energía de ionización de una donadora en el GaAs es mucho menor que la del átomo de hidrogeno; esto se debe a que la atracción de Coulomb del ión se encuentra, en gran parte, apantallada por la naturaleza dieléctrica del cristal. Cuando una impureza es introducida dentro de una heteroestructura, la situación se hace considerablemente más compleja e interesante que en el bloque, debido principalmente a la presencia de un potencial de confinamiento. El confinamiento geométrico trae consigo algunos efectos interesantes: por un lado se tiene que la energía de enlace y la forma de la función de onda dependen notoriamente de la forma y las dimensiones de dicho confinamiento, y por otro lado, la energía de enlace y la función de onda son también función de la posición de la impureza dentro de la heteroestructura. Para el caso de la NWSL el estudio de la  $D^0$  dentro de la es-

estructura reviste un interés adicional, el cual es la posibilidad de comprender y analizar la capacidad de confinamiento de la estructura y la modificación de las propiedades físicas de atracción que trae consigo la donadora.

### Modelo matemático

Al considerar el problema de la  $D^0$  en una NWSL, se puede encontrar el hamiltoniano del sistema de la siguiente forma:

$$\hat{H}_{D^0}(\vec{r}, \vec{\xi}) = \hat{H}_0(\vec{r}) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} \quad (2.1)$$

A partir del cual se puede escribir la ecuación de Schrödinger para el sistema

$$\hat{H}_{D^0} \psi_{D^0}(\vec{r}) = E_{D^0} \psi_{D^0}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

donde  $\psi_{D^0}(\vec{r})$  representa la función de onda y  $E_{D^0}$  la energía de la  $D^0$  en la heteroestructura, cuya posición en la NWSL esta dada por el vector  $\vec{\xi}$ . En primera instancia se calculará la función de onda y la energía del estado base de la donadora neutra en la heteroestructura. Para resolver este problema se hace uso de un método variacional conocido como el Método de Dimensión Fractal [10], además haremos uso de la aproximación adiabática [14,46] debido a la relación entre las dimensiones de la heteroestructura.

### Método de Dimensión Fractal aplicado al problema de la $D^0$ en la NWSL

Como ya se dijo la mayoría de los problemas relacionados con sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras no pueden ser resueltos en forma exacta. Por esta razón, para resolver problemas generales se debe recurrir a métodos aproximados y numéricos. El Método de Dimensión Fractal resulta ser un método variacional muy refinado que ha mostrado ser muy útil y efectivo en su aplicación durante los últimos años [10-12], a continuación se describirá el método de una manera sencilla, sin embargo más adelante al tratar el problema del excitón en la NWSL, se hará un análisis más detallado, ya que este último caso resulta más complejo de analizar y por lo tanto la aplicación de este método al presente caso de la  $D^0$  resulta ser un caso particular de la aplicación del MDF al problema del excitón.

Para resolver la ecuación (2.2), utilizando el MDF se hace necesario proponer una función de onda solución de la siguiente forma:

$$\psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\vec{r})\Phi_{D^0}\left(|\vec{r} - \vec{\xi}|\right) \quad (2.3)$$

En la ecuación (2.3) la función envolvente  $\Phi_{D^0}$  depende solo de la distancia de separación entre el electrón y la donadora, esta función describe la modificación de la distribución de carga asociada a la atracción entre el electrón y el ión. Adicionalmente la función  $\Phi_{D^0}$  satisface el principio variacional de Schrödinger como ya se ha demostrado en [10], y se puede encontrar al minimizar el funcional

$$F[\Phi] = \left\langle f_0\Phi_{D^0} \left| H_0 - \frac{2}{r} - E_{D^0} \right| f_0\Phi_{D^0} \right\rangle \rightarrow \min \quad (2.4)$$

Al realizar el proceso de minimización, el cual se analizará con mayor detalle cuando se trate el problema del excitón, se encuentra una ecuación de onda similar a la ecuación de onda del átomo de Hidrogeno de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\Phi_{D^0}(r)}{dr^2} + \frac{1}{J(r)} \frac{dJ(r)}{dr} \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} - E_b\Phi_{D^0}(r) = 0 \quad (2.5)$$

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

$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi f_\rho^2 \left( \sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \xi_\rho^2 - 2r\xi_\rho \sin \theta \cos \varphi} \right) f_z^2(r \cos \theta - \xi_z) \sin \theta d\theta \quad (2.6)$$

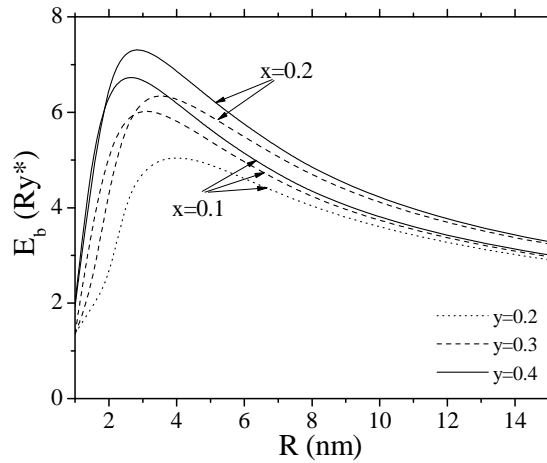
Conociendo la función de onda del estado base del electrón en la NWSL, el jacobiano puede ser hallado de forma sencilla a través de una estimación numérica de esta integral. Así pues la función envolvente  $\Phi_{D^0}$  y la energía  $E_b$ , pueden ser halladas como una solución del siguiente problema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

$$\begin{aligned} -\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) &= -E_b \Phi_{D^0}(r) \\ \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \Big|_{r=0} &= -\Phi_{D^0}(r) \Big|_{r=0}; \quad \Phi_{D^0}(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Para el resto del trabajo es necesario definir a la diferencia  $E_b = E_0 - E_{D^0}$  entre la energía del estado base del electrón y de la donadora, como la energía de enlace del sistema. La función envolvente  $\Phi_{D^0}(r)$  representa la modificación de la distribución de carga debida a la interacción electrón-ión, y solo depende de la distancia de separación entre ellos. Para resolver numéricamente la ecuación (2.5) se hace uso del método de barrido trigonométrico

### Resultados y discusión

En primer lugar es necesario establecer la relación que existe entre la energía de enlace de la  $D^0$  con el radio de la NWSL, con el fin de observar dicha relación se presenta el resultado de algunos cálculos realizados para varias NWSL compuestas por 5 pozos de ancho  $L_w=10nm$  cada uno y 4 barreras internas de ancho  $L_b=5nm$  cada una con diferentes concentraciones  $x$  de Aluminio y rodeada de una matriz con una concentración  $y$  de Aluminio.



**Fig. 7** Energía de enlace de una  $D^0$  ubicada sobre el eje del nanohilo y en el centro del pozo central, en función del radio de una NWSL de 5 pozos, para diferentes concentraciones de Aluminio  $x$  en las barreras y  $y$  en la matriz.

En la Fig. 7 se muestra el comportamiento de la energía de enlace, de una donadora localizada sobre el eje ( $\xi_\rho = 0$ ) y en el centro del pozo central ( $\xi_z = 0.5L$ ), donde  $L$  es la longitud total de la NWSL, en función del radio de la NWSL con concentraciones de Aluminio en la matriz  $y=0.2$  (líneas punteadas),  $y=0.3$  (líneas a trazos) y  $y=0.4$  (líneas sólidas) y con concentraciones de Aluminio en las barreras  $x=0.1$  y  $x=0.2$ . En todos los casos a medida que

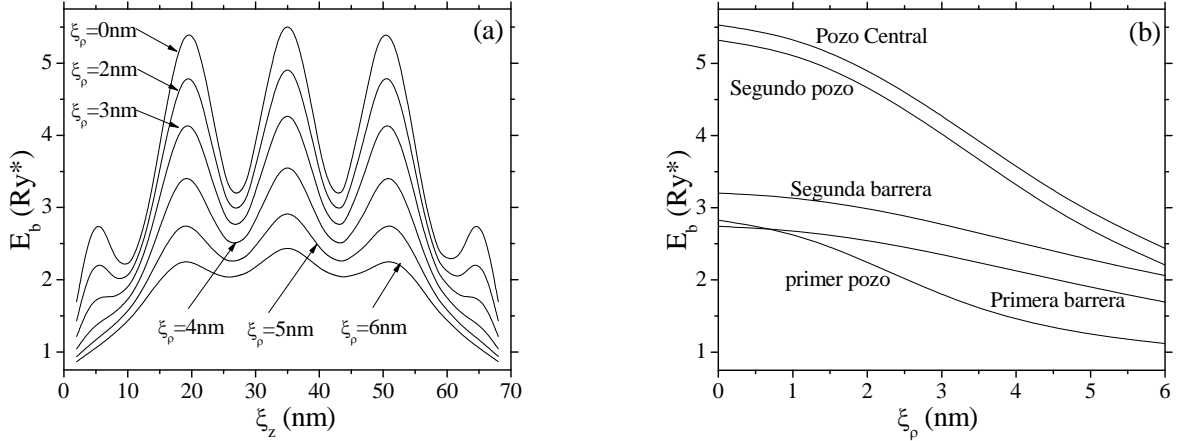
el radio  $R$  disminuye la función de onda dentro de la NWSL se comienza a extender de tal forma que el electrón puede comenzar a moverse cada vez con menos resistencia a lo largo del nanohilo, atravesando las barreras internas sin mayor dificultad, debido a esto la energía de enlace aumenta ya que la distancia media entre el electrón y el ión se hace cada vez más pequeña. Sin embargo para cierto valor del radio  $E_b$  alcanza su valor máximo, este máximo se encuentra cuando la función de onda está casi totalmente extendida sobre la superred interna, y a partir de este radio crítico la energía de enlace comienza a decrecer mientras decrece el radio como se puede observar en la Fig. 7, a partir de este momento la energía de enlace cae rápidamente acercándose a un valor de  $1Ry^*$  mientras que la función de onda de la donadora se transforma cada vez más en la del átomo de Hidrogeno tridimensional.

El valor del radio para el cual se alcanza el máximo de energía de enlace, representa las dimensiones para el límite del confinamiento máximo, en el cual el electrón se encuentra casi totalmente confinado dentro de la NWSL, de modo que para valores menores que dicho radio la función de onda del electrón comienza a desbordarse sobre el radio del nanohilo, aumentando las posibilidades de tunelamiento del electrón hacia la matriz en dirección lateral. Es interesante notar que el valor del radio crítico depende principalmente de la concentración de Aluminio en la matriz, en la Fig 7 se observa que para cuando la concentración en la matriz es  $y=0.4$  se alcanza el valor más pequeño del radio crítico debido a que, como es de esperarse, el confinamiento radial debe ser más fuerte para permitirle al electrón poder tunelar hacia la matriz.

En el presente trabajo también se ha calculado el valor de la energía de enlace para la  $D^0$  en diferentes posiciones dentro de una NWSL de radio  $R=5nm$ , en este caso se han considerado las concentraciones de Aluminio  $x=0.1$  en las barreras internas de la NWSL y  $y=0.4$  en la matriz.

En la Fig. 8(a) se presenta la dependencia de la energía de enlace en función de la posición de la donadora en dirección del eje principal de la NWSL para diferentes posiciones radiales de la misma. Se puede observar que la dependencia de la energía de enlace en todas las

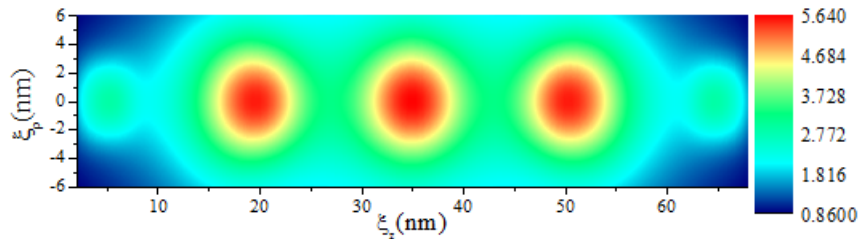
curvas es ondulada con un punto máximo correspondiente a la configuración donde la  $D^0$  está localizada en el centro del pozo central, también se puede apreciar que el comportamiento ondulado de estas curvas se hace cada vez más notorio para cuando la posición radial de la donadora se acerca al eje principal y se desvanece lentamente a medida que la posición radial de la donadora aumenta.



**Fig. 8** Energía de enlace de una  $D^0$  en una NWSL de  $GaAs/Ga_{0.9}Al_{0.1}As$  de radio  $5nm$ , embebida en una matriz de  $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ , como función de: a) la posición en  $z$ ,  $\xi_z$ , de la  $D^0$  y para varios valores de la distancia radial  $\xi_\rho$  medida desde el eje principal de la NWSL; b) la distancia desde el eje  $\xi_\rho$  de una  $D^0$  localizada en el centro de diferentes pozos y barreras.

Este comportamiento de la energía de enlace está asociado con la variación de la densidad de probabilidad de encontrar al electrón en diferentes partes de la NWSL. Cuanto mayor es la posibilidad de encontrar al electrón en el lugar donde se localiza la donadora mayor es la atracción entre el electrón y el ión y por lo tanto mayor es la energía de enlace. La mayor probabilidad de encontrar al electrón ocurre en el centro del pozo central, ya que este es el centro de la superred y, debido a esto, en esta posición la energía de enlace es máxima, al comenzar a alejar a la donadora de esta posición privilegiada, la energía de enlace  $E_b$  comienza a disminuir debido al incremento de la separación media entre el electrón y el ión, hasta que  $E_b$  alcanza un mínimo local en el centro de la primera barrera adyacente al pozo central donde la probabilidad de encontrar al electrón es sustancialmente más pequeña que en un pozo. A medida que la donadora se sigue moviendo hacia el extremo de la NWSL y

entra al pozo vecino la energía de enlace comienza a crecer hasta que la donadora alcanza el centro de este pozo, debido a que la densidad de probabilidad del electrón, bajo la acción del fuerte confinamiento en dirección radial, es solo ligeramente más pequeño que en el pozo central, el nuevo máximo local de  $E_b$  es solo un poco más bajo que el pico principal. Finalmente, cuando la donadora llega al final de la NWSL, la separación promedio entre el electrón y el ión llega a ser máxima y la energía de enlace llega a ser significativamente más pequeña que la de la donadora localizada en todo el centro de la NWSL.



**Fig. 9** Curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  en una NWSL de  $\text{GaAs/Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}$  embebida en una matriz de  $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$  para diferentes posiciones del ión

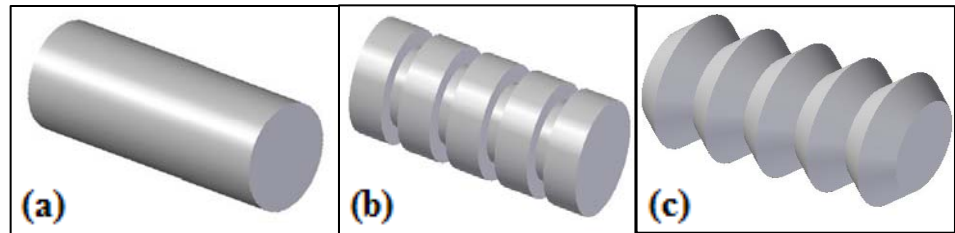
En la Fig 8(b) se presenta otra dependencia de la energía de enlace, pero esta vez en función de la posición de la donadora al eje de la NWSL  $\xi_\rho$ , para donadoras localizadas en el centro de los tres primeros pozos y las dos primeras barreras. Se puede observar una disminución notable y monótona de la energía de enlace a medida que la donadora se aleja del eje principal. Esto se debe al hecho de que el movimiento del electrón se restringe principalmente a la región cercana al eje, independientemente de la posición de la donadora. Además es posible interpretar esto debido a que la distancia promedio entre el electrón y el ión aumenta a medida que la donadora se aleja del eje, lo que hace que la energía de enlace disminuya. Adicionalmente se puede notar que la energía de enlace para cuando la donadora se encuentra en las barreras disminuye de forma considerablemente más lenta que cuando se encuentra en los pozos, esto ocurre debido a que la función de onda del electrón en las barreras es mucho más extendida que en los pozos, lo que hace que la densidad de probabilidad del electrón en las barreras sea muy baja y varíe muy poco a medida que se aumenta la distancia a partir del eje, así pues la distancia de separación media entre el electrón

y el ión tampoco aumenta mucho lo que permite que la energía de enlace disminuya levemente.

La Fig. 9 muestra la distribución de la energía de enlace para las diferentes posiciones de la donadora dentro de la NWSL, estas curvas de nivel muestran un aspecto un poco parecido a las de la Fig. 6 que representa la densidad de probabilidad del electrón dentro de la NWSL, sin embargo en la Fig. 9 se puede observar que en los tres pozos centrales la energía de enlace resulta siendo muy parecida, la explicación de este hecho esto ya fue analizada en la Fig 8(a), pero aún así hay algo muy interesante en el análisis de estas curvas de nivel, y es que permiten ver la gran capacidad de “arrastre” que tiene la donadora sobre el electrón, en otras palabras el electrón permanece ligado a la donadora casi igualmente en los tres pozos centrales. La explicación a este comportamiento viene dada por el hecho de que el confinamiento radial ofrecido por la NWSL es tan grande, debido a que su radio es tan pequeño  $R=5nm$  que el electrón puede tunelar fácilmente las barreras internas cercanas al pozo central de la superred, haciendo que sea presa fácil de la atracción coulombiana ofrecida por la donadora en los pozos centrales, con todo y esto la donadora pierde la capacidad de ligar al electrón cerca a los límites inicial y final del nanohilo, debido a que allí el confinamiento radial no es comparable con la barrera de potencial infinita que se encuentra en el límite axial del nanohilo.

## 2.2 D<sup>0</sup> CONFINADA EN UN NANOHILO CON PERFIL NO UNIFORME

Los resultados obtenidos hasta el momento son bastante interesantes ya que permiten localizar posiciones de la donadora en la NWSL en los que el electrón se ve muy confinado, esto naturalmente ocurre en los pozos, como ya se ha explicado anteriormente. Sin embargo es aún más interesante tratar de hacer una extrapolación para poder imaginar un sistema con características similares a las de la NWSL, es de esta forma que, como análisis adicional al planteado originalmente para este trabajo, se ha decidido estudiar las propiedades y características de una donadora neutra confinada en un nanohilo de perfil no uniforme, lo cual evita la existencia de barreras internas. En la Fig. 10 se ilustran algunas de las formas que se pueden configurar dentro del planteamiento que se hará en este trabajo.



**Fig. 10** Modelos de nanohilos de perfil variable periódicamente

### Modelo matemático

El modelo matemático utilizado para este análisis es similar al utilizado en el caso anterior cuando se consideró la  $D^0$  en una NWSL, pero con la diferencia de que ahora el radio variará para diferentes distancias sobre el eje principal del nanohilo  $R(z)$ , adicionalmente la concentración de Aluminio dentro del nanohilo será nula  $x=0$ , lo que indicará la no existencia de barreras internas debidas a las diferencia de composición entre los materiales ya que el material al interior del nanohilo será GaAs. Así pues el potencial de confinamiento estará dado como cero para  $\rho < R(z)$ , es decir dentro del nanohilo, y a  $V_c(y)$  para  $\rho > R(z)$ , ya que el material de la matriz que contiene el nanohilo es  $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ .

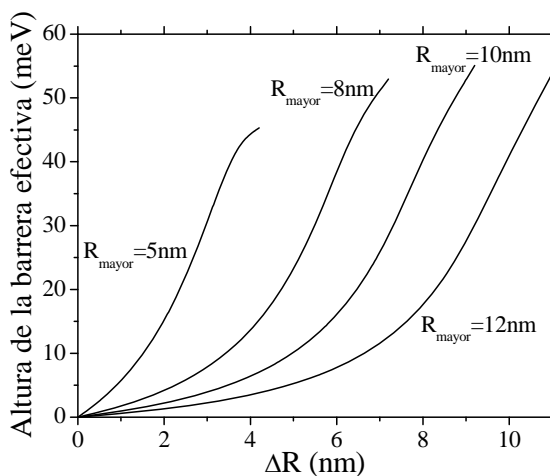
Sin embargo y a pesar de que el perfil del nanohilo es variable, es fácil notar que para cualquier valor de  $z$  la sección transversal del nanohilo es circular, lo que garantiza que el método utilizado para el análisis de la  $D^0$  en la NWSL es igualmente aplicable para estas estructuras, pero con las restricciones hechas arriba.

### Resultados y discusión

Para el presente análisis se considerará el caso de un nanohilo de perfil variable periódicamente de formas similares a las consideradas en la Figs. 10(b,c), antes de seguir con el análisis resulta importante analizar la relación que existe entre la altura de la barrera efectiva de potencial que se forma debido a la no uniformidad del perfil del nanohilo y la diferencia entre los radios máximo y mínimo, este potencial efectivo que confina a las partículas dentro del nanohilo que se plantea en esta parte del trabajo, es de una forma similar al repre-

sentado en la Fig. 3, pero en este caso el potencial efectivo tendrá una forma similar a la forma del perfil del nanohilo, donde la energía más alta del perfil del potencial efectivo, es decir la barrera, se encontrará en a las distancias, sobre el eje principal del nanohilo, en las cuales el radio sea el menor  $R(z) = R_{menor}$ , y de la misma manera la energía más baja del potencial efectivo, es decir los pozos, se encontrará para las distancias en  $z$  donde el radio sea el mayor  $R(z) = R_{mayor}$ .

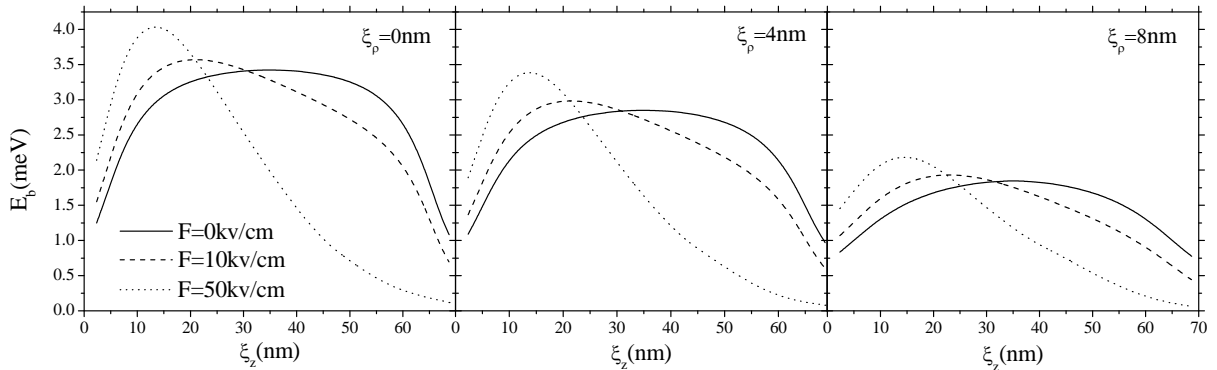
Para conocer la relación que existe entre la altura de barrera efectiva para el movimiento de la partícula en  $z$  y los radios  $R_{menor}$  y  $R_{mayor}$  del nanohilo, la Fig. 11 resulta explicativa, en la figura se presenta la altura de la barrera efectiva en función de la diferencia entre los radios del nanohilo  $\Delta R = R_{mayor} - R_{menor}$ , para diferentes valores de  $R_{mayor}$ . En la grafica se alcanza a notar que para cuando el radio externo es muy pequeño  $R_{mayor} = 5nm$  la altura de potencial efectivo crece muy rápido para  $R_{menor} < 3nm$ , esto ocurre claramente porque al estar tan confinadas radialmente las partículas, su energía cinética aumenta rápidamente así que la energía radial se dispara de forma casi abrupta como se puede notar en la primera curva de la Fig. 11.



**Fig. 11** Altura de la barrera efectiva que confina a las partículas dentro del nanohilo de perfil variable en función de la diferencia entre los radios  $\Delta R = R_{mayor} - R_{menor}$ , para diferentes valores de  $R_{mayor}$

A medida que  $R_{mayor}$  aumenta el crecimiento de la altura de barrera efectiva es cada vez más lento, hasta el punto que para cuando  $R_{mayor} = 12nm$  la altura de barrera efectiva casi permanece constante para  $R_{menor} < 6nm$ . Para los cálculos que se realizarán en esta parte del trabajo se considerarán nanohilos de perfil variable con 7 regiones de  $R_{mayor} = 8nm$  de ancho  $L_w = 7nm$ , que se interpretaran para nuestro caso como los pozos y 6 regiones de  $R_{menor} = 5nm$  de ancho  $L_b = 10nm$ , que se interpretarán como las barreras.

En la Fig. 12 se observa el comportamiento de la energía de enlace de un nanohilo de radio  $R = 8nm$  en función de la distancia sobre el eje central medida desde un extremo del nanohilo hasta la posición de la donadora, para diferentes posiciones radiales de la donadora, además se observa la modificación realizada por un campo eléctrico externo aplicado en la dirección de crecimiento del nanohilo.

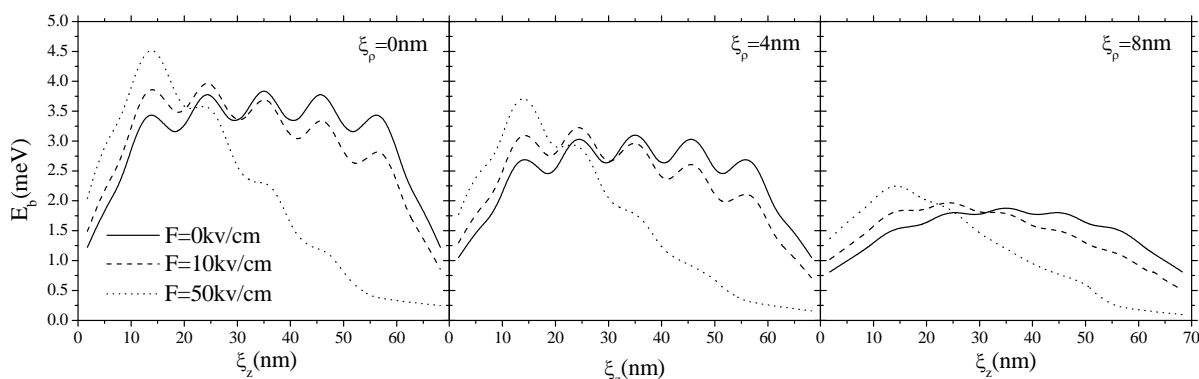


**Fig. 12** Energías de enlace para nanohilo cilíndrico de GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As con radio  $R = 8nm$

De la misma forma se observa en las Figs 13 y 14 las curvas de la energías de enlace para diferentes localizaciones de la donadora dentro del nanohilo, para un nanohilo con perfil variable periódicamente rectangular y triangular respectivamente; en ambos casos se utilizan los mismos anchos de pozos y barrera y radios máximos y mínimos mencionados anteriormente.

En ambas figuras se observa la ondulación en la energía de enlace, de forma similar a la que se obtuvo para la NWSL, lo que muestra que es posible modelar una NWSL de forma

similar a un nanohilo de perfil variable. En este caso se puede observar que en ambos casos, nanohilo con perfil rectangular y triangular, la energía de enlace más alta se encuentra cuando la donadora se localiza en el centro del pozo central para las diferentes posiciones en direcciones radial, sin embargo es posible notar que en los pozos vecinos la energía de enlace tiene un valor muy cercano a este valor máximo, lo que de nuevo muestra la gran capacidad de arrastre que tiene la donadora sobre el electrón para cuando el radio promedio del nanohilo es muy pequeño como el considerado en estos cálculos.

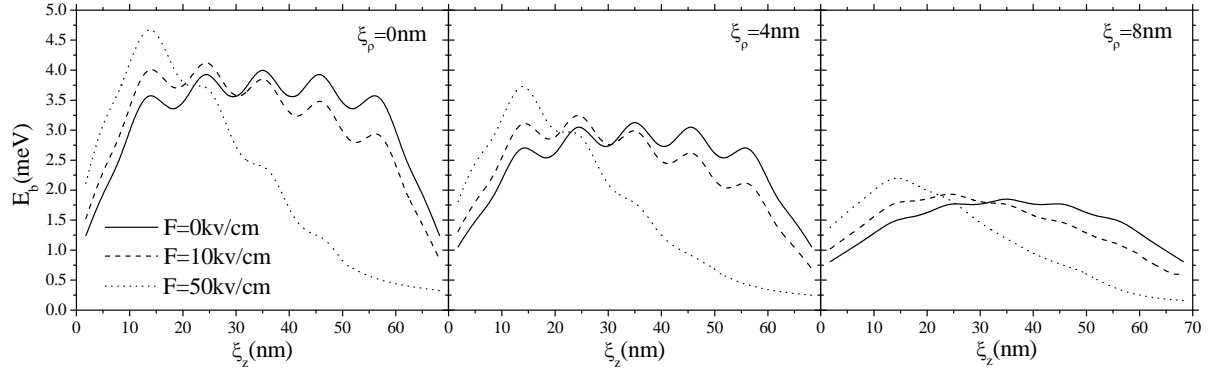


**Fig. 13** Energías de enlace para un nanohilo con perfil periódico rectangular (Fig 11b) de GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As con  $R_{menor} = 5nm$  y  $R_{mayor} = 8nm$ , para diferentes posiciones de la  $D^0$  y en presencia de diferentes valores de campos eléctricos.

De las Fig. 13 y 14 se puede observar que si bien los valores de las energías de enlace para el nanohilo de perfil triangular son mayores que las del nanohilo de perfil rectangular, dicha diferencia es muy pequeña. El hecho de que la energía de enlace para el nanohilo de perfil triangular sea mayor muestra que el confinamiento dentro de él es mayor que dentro del de perfil rectangular, es claro entender que esto se debe a que en el nanohilo de perfil triangular el volumen ocupado en la región que se ha considerado como el pozo, es menor que en la misma región del nanohilo de perfil rectangular, y debido a la relación establecida por el principio de incertidumbre de Heisenberg se sabe que al confinar más la partícula su energía cinética aumenta, lo que hace que su energía de enlace también aumente.

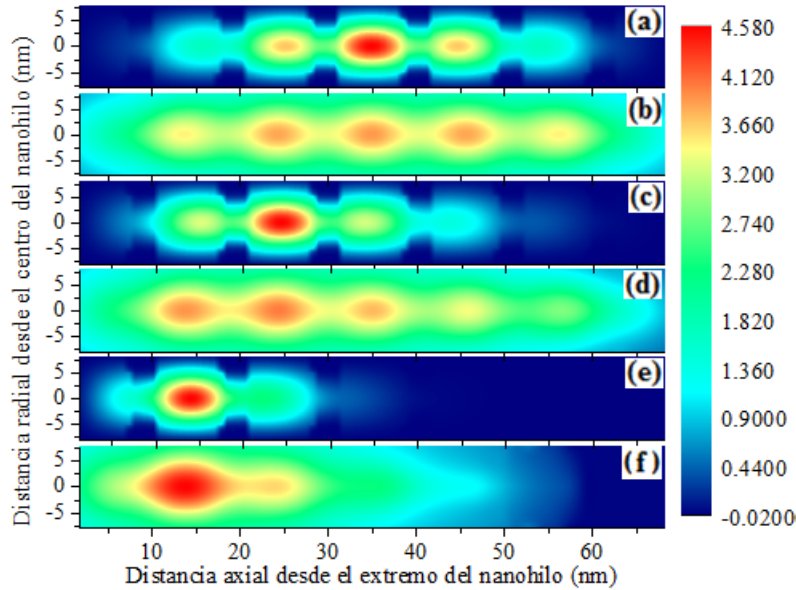
El efecto del campo eléctrico sobre la energía de enlace es evidenciable en las graficas a partir del desplazamiento del pico hacia la dirección opuesta a la dirección del campo, esto

ocurre porque como es ampliamente conocido el campo eléctrico ejerce sobre el electrón una fuerza de repulsión haciendo que este se mueva en dirección exactamente opuesta a la dirección del campo, debido a esto la donadora puede confinar con mayor facilidad al electrón en el lado del nanohilo opuesto a la dirección del campo, lo que hace que la energía de ligadura de la donadora sobre el electrón en este punto sea mayor y por lo tanto la energía de enlace también lo sea.



**Fig. 14** Energías de enlace para un nanohilo con perfil periódico triangular (Fig. 11c) de GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As con  $R_{menor} = 5nm$  y  $R_{mayor} = 8nm$ , para diferentes posiciones de la  $D^0$  y en presencia de diferentes valores de

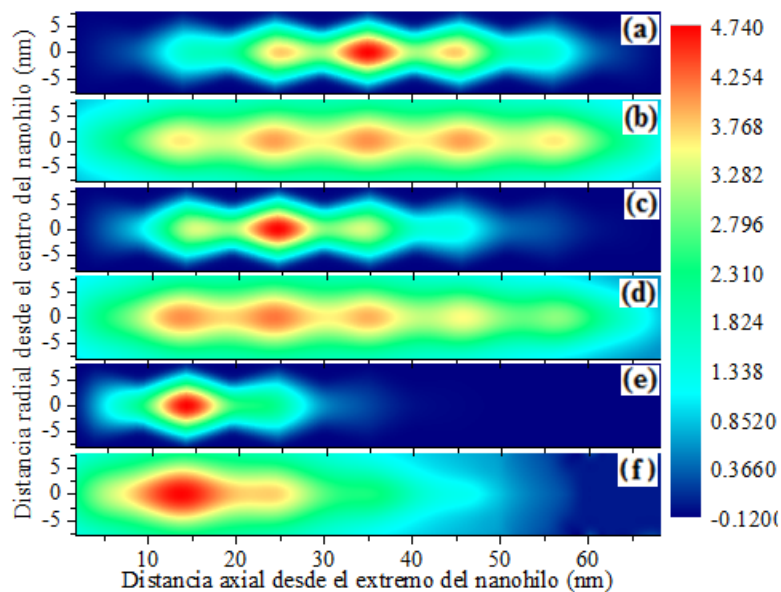
campos eléctricos.



**Fig. 15** Modificación de la distribución del electrón y las curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  para campos eléctricos de: (a,b)  $F=0$ kv/cm, (c,d)  $F=10$ kv/cm y (e,f)  $F=50$ kv/cm, respectivamente, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico rectangular de GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As .

En las Figs. 15 y 16, se pueden observar las modificaciones generadas por el campo eléctrico sobre la distribución del electrón libre y las energías de enlace de la  $D^0$  dentro de un nanohilo de perfil rectangular y triangular, respectivamente. Como es de esperarse la modificación hecha por el campo eléctrico, como ya se dijo está dada en el corrimiento de la probabilidad del electrón en dirección opuesta a la dirección del campo y por lo tanto el pico de la energía de enlace también se desplaza en esta dirección, sin embargo tal vez lo más interesante de estos resultados es que permiten ver que las curvas de nivel de la probabilidad de encontrar al electrón dentro del nanohilo, conservan la forma del perfil, al igual que sucede con las curvas de nivel de la energía de enlace.

Aún así el aumento de la intensidad del campo eléctrico elimina de a poco el parecido de las curvas de nivel de la energía de enlace con el perfil del nanohilo, esto se da gracias a que a medida que aumenta el campo eléctrico el electrón se refugia con mayor fuerza a un extremo del nanohilo perdiendo casi totalmente la interacción con las barreras internas creadas por los radios menores del nanohilo y por lo tanto se convierte en presa fácil de la donadora que se encuentra en este mismo extremo.



**Fig. 16** Modificación de la distribución del electrón y las curvas de nivel de la energía de enlace de una  $D^0$  para campos eléctricos de: (a,b)  $F=0\text{kv/cm}$ , (c,d)  $F=10\text{kv/cm}$  y (e,f)  $F=50\text{kv/cm}$ , respectivamente, en función de la posición de la donadora en un nanohilo de perfil periódico triangular de  $\text{GaAs/Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ .

Debido a esto, y como es de esperarse, para campos eléctricos grandes las curvas de nivel de la energía de enlace casi no dependen de la forma del perfil del nanohilo, esto se puede observar al comparar la similitud que existe entre las curvas de la Fig. 15(f) y la Fig 16(f), que muestran que para un campo de  $F=50\text{kv/cm}$ , la distribución de la energía de enlace es casi idéntica en ambos casos, a pesar de que los perfiles de los nanohilos sean diferentes.

### **2.3 EXCITÓN (X) CONFINADO EN UNA NWSL**

El excitón es una cuasi-partícula formada por un electrón que ha abandonado la banda de valencia por absorción de fotones, que inciden sobre la estructura con una energía comparable a la de la brecha de energía prohibida del material que conforma la misma, y ha pasado a la banda de conducción dejando un hueco, que se comporta como una partícula cargada positivamente, con el cual interactúa a través del potencial de Coulomb. Dicha cuasi-partícula ha mostrado ser responsable de importantes efectos ópticos en heteroestructuras semiconductoras, ya que su energía de enlace aumenta de manera bastante significativa cuando se ve confinada a distancias del orden de su radio de Bohr.

En un excitón la masa del hueco es generalmente mucho mayor que la masa del electrón por tal razón este sistema de dos cuerpos se asemeja a un átomo de Hidrógeno, con el electrón de carga negativa orbitando alrededor del hueco con carga positiva. El excitón es una partícula completamente estable y puede tener tiempos de vida relativamente largos, del orden de cientos de picosegundos o nanosegundos [40]. La recombinación del excitón a bajas temperaturas es una característica importante de la fotoluminiscencia, debido a que su energía de enlace es relativamente baja, unos pocos milielectronvoltios (meV), y tiende a disociarse a altas temperaturas. La energía total del excitón es claramente una función de la dependencia estructural de las energías de confinamiento. Además es de esperarse que la energía del potencial colombiano también dependa del tipo de heteroestructura, este último efecto es debido a que la separación electrón-hueco puede variar considerablemente entre heteroestructuras, ya que como es fácil imaginar esta separación es mucho más pequeña en heteroestructuras de gap directo que en las de gap indirecto. [41]

En esta sección se hará un análisis de la modificación de las propiedades físicas que presenta el excitón al ser confinado dentro de una NWSL, y se analizará la distribución más probable de las partículas dentro de la heteroestructura, para entender cómo y de qué manera siente cada una el confinamiento de la estructura.

### Modelo matemático

Para el presente modelo, se considera un excitón en una NWSL como la mostrada en la Fig. 1, en presencia de campos eléctricos y magnéticos aplicados en dirección axial, así pues el hamiltoniano del sistema está dado como

$$\begin{aligned} H_e &= -\Delta_{\rho_e} - \Delta_{\varphi_e} - \Delta_{z_e} + V_{e_{eff}}(\rho_e, z_e) \\ H_h &= -\eta_{\rho}(\Delta_{\rho_h} + \Delta_{\varphi_h}) - \eta_z \Delta_{z_h} + V_{h_{eff}}(\rho_h, z_h) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Donde  $\eta$  representa el cociente entre la masa del electrón y la masa del hueco en dirección radial y axial, así pues:  $\eta_{\rho} = m_e / m_{\rho}$  y  $\eta_z = m_e / m_z$ .

Donde el potencial efectivo está definido como.

$$V_{i_{eff}}(\rho_i, z_i) = V_i(\rho_i, z_i) + \frac{\gamma^2 \rho_i^2}{4} + (-1)^i \alpha F z_i; \quad i = 0, 1 \quad (2.9)$$

Donde  $\alpha = e a_0^* / R y^*$  es el parámetro adimensional que modula la intensidad del campo eléctrico. Cuando  $i = 0$  representa el potencial efectivo para el electrón, mientras que  $i = 1$  hace referencia al potencial efectivo del hueco. Estos hamiltonianos cumplen las ecuaciones de Schrödinger

$$\begin{aligned} H_e f_e &= E_e f_e \\ H_h f_h &= E_h f_h \end{aligned} \quad (2.10)$$

Así pues el hamiltoniano total del sistema está dado como:

$$H\Psi = H_e\Psi + H_h\Psi - \frac{2}{r_{eh}}\Psi = E_x\Psi \quad (2.11)$$

Para la solución del problema de nuevo se hace necesario, utilizar un método variacional, por lo cual se utilizará de nuevo el Método de Dimensión Fractal [10].

### Método de Dimensión Fractal aplicado al problema del X en la NWSL

En este caso se propone una función de onda solución, como un producto de la siguiente forma:

$$\Psi = f_e(\rho_e, z_e) f_h(\rho_h, z_h) \Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|) \quad (2.12)$$

Para encontrar la función envolvente de nuevo se hace necesario minimizar el siguiente funcional.

$$F[\Phi] = \left\langle f_e f_h \Phi \left| H_e + H_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right| f_e f_h \Phi \right\rangle \rightarrow \min \quad (2.13)$$

Que se puede reescribir como

$$F[\Phi] = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h H_e (f_e \Phi) + f_e H_h (f_h \Phi) - \left( \frac{2}{r_{eh}} + E_x \right) f_e f_h \Phi \right. \right\rangle = I_e + I_h + A$$

Donde

$$I_e = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h H_e (f_e \Phi) \right. \right\rangle \quad I_h = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_e H_h (f_h \Phi) \right. \right\rangle$$

$$A = - \left\langle f_e f_h \Phi \left| \left( \frac{2}{r_{eh}} + E_x \right) f_e f_h \Phi \right. \right\rangle$$

Ahora se analizará solo la integral para el electrón, es decir la primera integral, luego se generalizará el resultado para hallar la integral para el hueco.

$$I_e = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h \left[ -\Delta_{\rho_e} - \Delta_{\varphi_e} - \Delta_{z_e} + V_e(\rho_e, z_e) + \frac{\gamma^2 \rho_e^2}{4} - Fz_e \right] (f_e \Phi) \right. \right\rangle$$

$$= \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h \left[ \underbrace{-\Delta_{\rho_e} (f_e \Phi) - \Delta_{\varphi_e} (f_e \Phi) - \Delta_{z_e} (f_e \Phi)}_{V_{\text{eff}}(\rho_e, z_e)} + \left( V_e(\rho_e, z_e) + \frac{\gamma^2 \rho_e^2}{4} - Fz_e \right) f_e \Phi \right] \right. \right\rangle$$

Utilizando la propiedad de Leibniz

$$\Delta_{x_e} (f(x_e) g(x_e)) = g \Delta_{x_e} f + f \Delta_{x_e} g + 2 \nabla_{x_e} f \cdot \nabla_{x_e} g,$$

se puede encontrar que:

$$I_e = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h \begin{bmatrix} -(\Phi \Delta_{\rho_e} f_e + f_e \Delta_{\rho_e} \Phi + 2 \nabla_{\rho_e} f_e \cdot \nabla_{\rho_e} \Phi) \\ -(\Phi \Delta_{\varphi_e} f_e + f_e \Delta_{\varphi_e} \Phi + 2 \nabla_{\varphi_e} f_e \cdot \nabla_{\varphi_e} \Phi) \\ -(\Phi \Delta_{z_e} f_e + f_e \Delta_{z_e} \Phi + 2 \nabla_{z_e} f_e \cdot \nabla_{z_e} \Phi) \\ + V_{e_{\text{eff}}}(\rho_e, z_e) f_e \Phi \end{bmatrix} \right\rangle$$

Lo cual al reorganizar los términos se muestra de una manera más práctica de la siguiente forma

$$I_e = \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h \begin{bmatrix} -(f_e \Delta_{\rho_e} \Phi + 2 \nabla_{\rho_e} f_e \cdot \nabla_{\rho_e} \Phi) \\ -(f_e \Delta_{\varphi_e} \Phi + 2 \nabla_{\varphi_e} f_e \cdot \nabla_{\varphi_e} \Phi) \\ -(f_e \Delta_{z_e} \Phi + 2 \nabla_{z_e} f_e \cdot \nabla_{z_e} \Phi) \\ + \underbrace{\Phi (-\Delta_{\rho_e} f_e - \Delta_{\varphi_e} f_e - \Delta_{z_e} f_e + V_{e_{\text{eff}}}(\rho_e, z_e) f_e)}_{H_e f_e = E_e f_e} \end{bmatrix} \right\rangle$$

En esta ecuación se pueden factorizar las expresiones de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} f_e \Delta_{\rho_e} \Phi + 2 \nabla_{\rho_e} f_e \cdot \nabla_{\rho_e} \Phi &= \frac{1}{f_e} \nabla_{\rho_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\rho_e} \Phi) \\ f_e \Delta_{\varphi_e} \Phi + 2 \nabla_{\varphi_e} f_e \cdot \nabla_{\varphi_e} \Phi &= \frac{1}{f_e} \nabla_{\varphi_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\varphi_e} \Phi) \\ f_e \Delta_{z_e} \Phi + 2 \nabla_{z_e} f_e \cdot \nabla_{z_e} \Phi &= \frac{1}{f_e} \nabla_{z_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{z_e} \Phi) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Al reemplazar estos resultados en la integral se obtiene:

$$\begin{aligned} I_e &= \left\langle f_e f_h \Phi \left| f_h \begin{bmatrix} -\frac{1}{f_e} \nabla_{\rho_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\rho_e} \Phi) - \frac{1}{f_e} \nabla_{\varphi_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\varphi_e} \Phi) \\ -\frac{1}{f_e} \nabla_{z_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{z_e} \Phi) + E_e f_e \Phi \end{bmatrix} \right\rangle \\ I_e &= \left\langle -f_h^2 \Phi \left[ \nabla_{\rho_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\rho_e} \Phi) + \nabla_{\varphi_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\varphi_e} \Phi) + \nabla_{z_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{z_e} \Phi) \right] \right. \\ &\quad \left. + E_e f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \right\rangle \end{aligned}$$

Sumando los términos agrupados en la ecuación

$$\begin{aligned}
 f_h^2 \Phi \nabla_{\rho_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\rho_e} \Phi) &= \nabla_{\rho_e} \cdot (f_e^2 f_h^2 \Phi \nabla_{\rho_e} \Phi) - f_e^2 f_h^2 (\nabla_{\rho_e} \Phi)^2 \\
 f_h^2 \Phi \nabla_{\varphi_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{\varphi_e} \Phi) &= \nabla_{\varphi_e} \cdot (f_e^2 f_h^2 \Phi \nabla_{\varphi_e} \Phi) - f_e^2 f_h^2 (\nabla_{\varphi_e} \Phi)^2 \\
 f_h^2 \Phi \nabla_{z_e} \cdot (f_e^2 \nabla_{z_e} \Phi) &= \nabla_{z_e} \cdot (f_e^2 f_h^2 \Phi \nabla_{z_e} \Phi) - f_e^2 f_h^2 (\nabla_{z_e} \Phi)^2 \\
 \hline
 f_h^2 \Phi \nabla_e \cdot (f_e^2 \nabla_e \Phi) &= \nabla_e \cdot (f_e^2 f_h^2 \Phi \nabla_e \Phi) - f_e^2 f_h^2 (\nabla_e \Phi)^2
 \end{aligned}$$

Y utilizando el teorema de Gauss, se ve que  $\langle \nabla_e \cdot (f_e^2 f_h^2 \Phi \nabla_e \Phi) \rangle = 0$ , ya que

$f_e(|\vec{r}_e| \rightarrow \infty) = 0$  entonces:

$$\langle f_h^2 \Phi \nabla_e \cdot (f_e^2 \nabla_e \Phi) \rangle = - \langle f_e^2 f_h^2 (\nabla_e \Phi)^2 \rangle \quad (2.15)$$

Así pues:

$$I_e = \langle f_e^2 f_h^2 (\nabla_e \Phi)^2 \rangle + \langle E_e f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \rangle$$

donde

$$(\nabla_e \Phi)^2 = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \rho_e} \right)^2 + \frac{1}{\rho_e^2} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_e} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial z_e} \right)^2$$

De la misma forma se puede encontrar que:

$$I_h = \langle f_e^2 f_h^2 (\nabla_h \Phi)^2 \rangle + \langle E_h f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \rangle$$

Donde

$$(\nabla_h \Phi)^2 = \eta_\rho \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \rho_h} \right)^2 + \frac{\eta_\rho}{\rho_h^2} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_h} \right)^2 + \eta_z \left( \frac{\partial \Phi}{\partial z_h} \right)^2$$

En resumen el funcional quedará:

$$F[\Phi] = \langle f_e^2 f_h^2 ((\nabla_e \Phi)^2 + (\nabla_h \Phi)^2) \rangle + \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left( E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right) \right\rangle \quad (2.16)$$

Ahora es necesario expresar  $(\nabla_e \Phi)^2$  y  $(\nabla_h \Phi)^2$  en términos de  $r_{eh}$

$$\begin{aligned}
 r_{eh}^2 = r^2 &= \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2 \\
 \left(\frac{\partial r}{\partial \rho_e}\right)^2 &= \frac{\rho_e^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + \rho_h^2 \cos^2(\varphi_e - \varphi_h)}{r^2} \\
 \left(\frac{\partial r}{\partial \rho_h}\right)^2 &= \frac{\rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + \rho_e^2 \cos^2(\varphi_e - \varphi_h)}{r^2} \\
 \left(\frac{\partial r}{\partial z_e}\right)^2 &= \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \quad \left(\frac{\partial r}{\partial z_h}\right)^2 = \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \\
 \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi_e}\right)^2 &= \frac{\rho_e^2 \rho_h^2 \sin^2(\varphi_e - \varphi_h)}{r^2} \quad \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi_h}\right)^2 = \frac{\rho_e^2 \rho_h^2 \sin^2(\varphi_e - \varphi_h)}{r^2}
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Utilizando la definición que se obtuvo arriba para  $(\nabla_e \Phi)^2$  y  $(\nabla_h \Phi)^2$  se encuentra:

$$\begin{aligned}
 (\nabla_e \Phi)^2 &= \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 \left[ \left(\frac{\partial r}{\partial \rho_e}\right)^2 + \frac{1}{\rho_e^2} \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi_e}\right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial z_e}\right)^2 \right] \\
 (\nabla_h \Phi)^2 &= \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 \left[ \eta_\rho \left(\frac{\partial r}{\partial \rho_e}\right)^2 + \frac{\eta_\rho}{\rho_e^2} \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi_e}\right)^2 + \eta_z \left(\frac{\partial r}{\partial z_e}\right)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Lo cual se puede resumir en:

$$\begin{aligned}
 (\nabla_e \Phi)^2 &= \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 \\
 (\nabla_h \Phi)^2 &= \eta_\rho \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 + (\eta_z - \eta_\rho) \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

Luego, al sumar se encuentra:

$$(\nabla_e \Phi)^2 + (\nabla_h \Phi)^2 = (1 + \eta_\rho) \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 + (\eta_z - \eta_\rho) \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \left(\frac{d\Phi}{dr}\right)^2 \tag{2.20}$$

Ahora se puede reescribir de forma más adecuada como:

$$\begin{aligned}
 F[\Phi] &= \left\langle f_e^2 f_h^2 \left( (1+\eta_\rho) + (\eta_z - \eta_\rho) \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \right) \left( \frac{d\Phi}{dr} \right)^2 \right\rangle \\
 &\quad + \left\langle f_e^2 f_h^2 \Phi^2 \left( E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right) \right\rangle \\
 F[\Phi] &= \left\langle f_e^2 f_h^2 \left[ \left( (1+\eta_\rho) + (\eta_z - \eta_\rho) \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \right) \Phi'^2 + \left( E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right) \Phi^2 \right] \right\rangle
 \end{aligned}$$

Reescribiendo esta expresión en forma integral tenemos:

$$\begin{aligned}
 F[\Phi] &= \left[ \underbrace{(1+\eta_\rho) \int f_e^2 f_h^2 d\vec{r}}_{J_0(r)} + \underbrace{(\eta_z - \eta_\rho) \int f_e^2 f_h^2 \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} d\vec{r}}_{J_1(r)} \right] \Phi'^2 \\
 &\quad + \left[ \left( E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right) \underbrace{\int f_e^2 f_h^2 d\vec{r}}_{J_0(r)} \right] \Phi^2
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Sin embargo, es necesario recordar que esta ecuación solo es cierta para cuando se cumple que:

$$r = \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2} \tag{2.22}$$

Por esto las integrales de los Jacobianos  $J_0(r)$  y  $J_1(r)$  se pueden escribir explícitamente así:

$$\begin{aligned}
 J_0(r) &= \int_0^L dz_e \int_0^L dz_h \int_0^\infty \rho_e d\rho_e \int_0^\infty \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} d\varphi_e \int_0^{2\pi} d\varphi_h f_e^2(\rho_e, z_e) f_h^2(\rho_h, z_h) \times \\
 &\quad \times \delta\left(r - \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2}\right)
 \end{aligned} \tag{2.23a}$$

$$\begin{aligned}
 J_1(r) = & \int_0^L dz_e \int_0^L dz_h \int_0^\infty \rho_e d\rho_e \int_0^\infty \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} d\varphi_e \int_0^{2\pi} d\varphi_h f_e^2(\rho_e, z_e)^2 f_h^2(\rho_h, z_h) \times \\
 & \times \frac{(z_e - z_h)^2}{r^2} \delta\left(r - \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2}\right)
 \end{aligned} \quad (2.23b)$$

Así pues:

$$F[\Phi] = \left[ (1 + \eta_\rho) J_0(r) + (\eta_z - \eta_\rho) J_1(r) \right] \Phi'^2 + \left( E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \right) J_0(r) \Phi^2 \quad (2.24)$$

Para mayor simplificación, es adecuado reescribir esta ecuación como:

$$F[\Phi] = J(r) \Phi'^2 + E J_0(r) \Phi^2 \quad (2.25)$$

Donde:

$$J(r) = (1 + \eta_\rho) J_0(r) + (\eta_z - \eta_\rho) J_1(r) \quad E = E_e + E_h - \frac{2}{r_{eh}} - E_x \quad (2.26)$$

Para minimizar el funcional  $F[\Phi]$  se puede utilizar la ecuación de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} - \frac{d}{dr} \left( \frac{\partial F}{\partial \Phi'} \right) = 0 \quad (2.27)$$

De donde se encuentra

$$\frac{1}{J_0} \frac{d}{dr} \left[ J \frac{d\Phi}{dr} \right] - E \Phi^2 = 0 \quad (2.28)$$

Aplicando las derivadas, se obtiene la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} + \frac{d[\ln(J(r))]}{dr} \frac{d\Phi}{dr} - \frac{J_0(r)}{J(r)} E \Phi = 0 \quad (2.29)$$

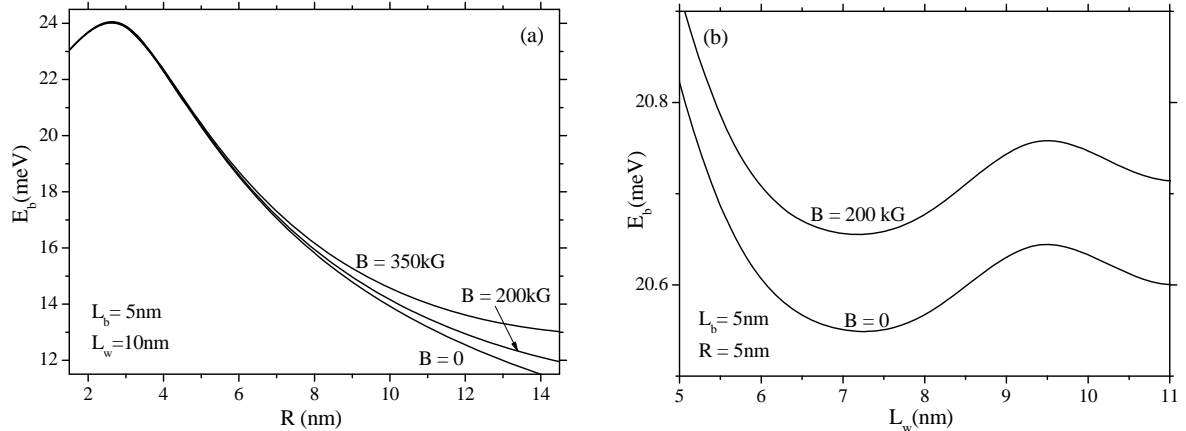
así que, para encontrar la función envolvente que soluciona el problema original, es necesario solucionar la anterior ecuación diferencial (2.29), lo cual se hace utilizando el Método de Barrido Trigonométrico.

## Resultados y discusión

Para esta parte se usaron los mismos parámetros utilizados para el análisis de la  $D^0$  en la NWSL realizado anteriormente. Se considera un modelo de una NWSL de GaAs/Ga<sub>0.9</sub>Al<sub>0.1</sub>As embebida en una matriz de Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As, con 5 pozos de ancho  $L_w = 10nm$  y

cuatro pozos de  $L_b=5nm$  con radio  $R=5nm$ . Los resultados que se presentan a continuación corresponden al análisis de un excitón con hueco pesado.

En la Fig. 17(a) se muestra la variación de la energía de enlace del excitón  $E_b$  en función del radio  $R$  del hilo para varios valores del campo magnético. Para un valor dado del campo magnético la energía de enlace aumenta desde su valor para una SL de GaAs/Ga<sub>0.9</sub>Al<sub>0.1</sub>As a medida que el radio del hilo disminuye, la energía alcanza un valor máximo y luego disminuye al valor característico de la energía de la  $D^0$  en el bulk para cuando el electrón túnela hacia la matriz, lo cual ocurre en el caso limite cuando el radio del hilo llega a ser cero.

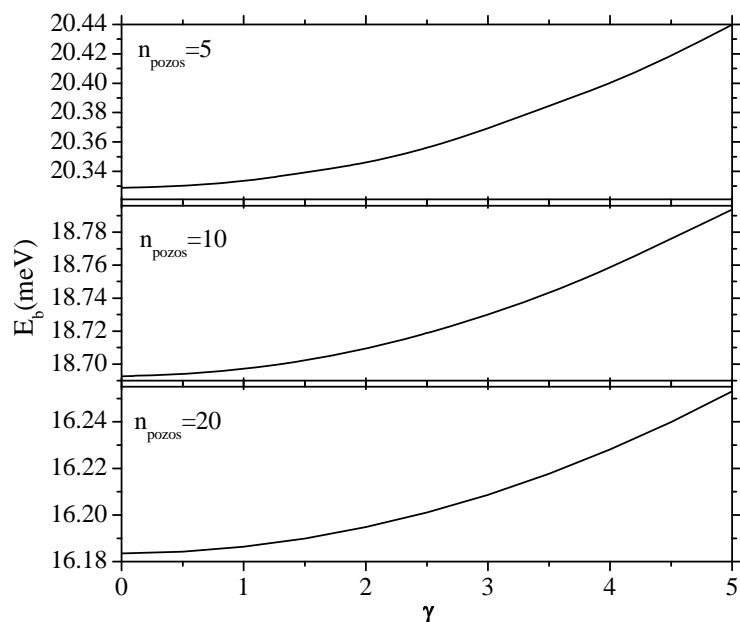


**Fig. 17** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del radio (a) y el ancho del pozo (b) para varios valores del campo magnético aplicado en una NWSL de GaAs/Ga<sub>0.9</sub>Al<sub>0.1</sub>As/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As.

Esto se debe al hecho que a medida que el radio del hilo disminuye la función de onda del electrón se comprime haciendo que la energía de enlace aumente, sin embargo para cierto valor de  $R$  la función de onda se extiende mucho en dirección radial lo que permite que el electrón pueda tunelar más fácilmente hacia la región de la barrera dentro de la matriz lo que provoca el decrecimiento de la energía de enlace.

Para valores pequeños del radio del hilo ( $R < 10nm$ ) la energía de enlace del excitón es indiferente a la variación del campo magnético, por lo tanto el efecto del confinamiento debido a la presencia de la barrera de potencial es más significativo que el producido por el campo

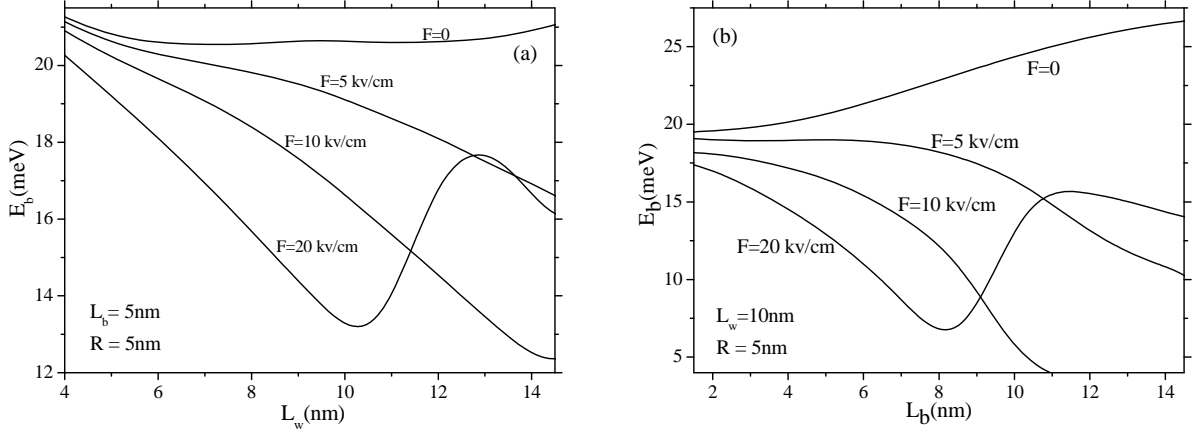
magnético. En la Fig. 17(b) se observa la variación de la energía de enlace  $E_b$  del excitón con hueco pesado en función del ancho del pozo  $L_w$ , el electrón y el hueco están principalmente localizados en los pozos vecinos por lo tanto la separación entre el electrón y el hueco aumenta y la energía de enlace decrece inicialmente con el aumento del ancho del pozo. Pero cuando el ancho del pozo aumenta mucho y llega a ser comparable con la distancia de separación entre el electrón y el hueco, la configuración del excitón con el electrón y el hueco en el mismo pozo se hace cada vez más y más probable.



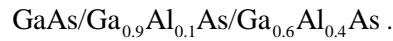
**Fig. 18** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del campo magnético aplicado en dirección del eje z de una NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ , para diferentes números de pozos internos.

Como resultado de lo anterior, la separación entre el electrón y el hueco disminuye, mientras la energía de enlace comienza a crecer. Finalmente como las partículas están principalmente localizadas en el mismo pozo el incremento sucesivo del ancho del pozo conduce al aumento de la separación y la energía de enlace empieza a caer de nuevo. Adicionalmente se puede observar en la Fig, 18 que el efecto del campo magnético sobre la energía de enlace del excitón es, como se espera, el aumento de la energía de forma cuadrática, sin embargo este incremento es apenas apreciable ya que a pesar de aplicarse campos magnéti-

cos grandes, el confinamiento adicional generado por ellos es, como ya se ha dicho antes, despreciable en comparación a el confinamiento de la heteroestructura, lo que hace que la corrección del campo magnético sea casi imperceptible para el excitón.

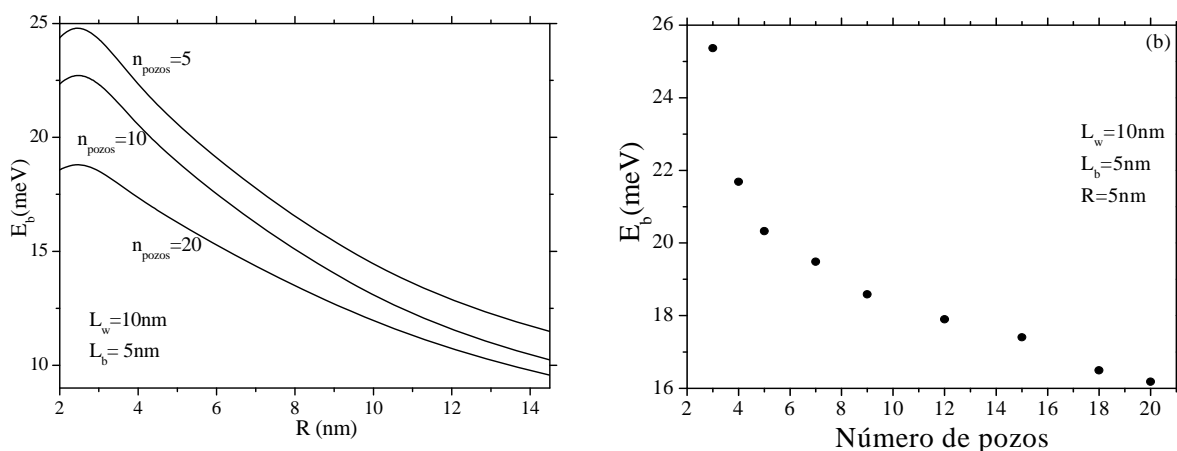


**Fig. 19** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función del ancho del pozo (a) y de la barrera (b) para varios valores del campo eléctrico en dirección del eje  $z$  de una NWSL de



En la Fig. 19 se muestra la variación de la energía de enlace del excitón en función de los anchos de los pozos (a) y de las barreras (b), para varios valores del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje  $z$ . En pro de entender el comportamiento de la energía de enlace, uno puede tomar en cuenta que las alturas de las barreras entre pozos en la SL de GaAs/Ga<sub>0.9</sub>Al<sub>0.1</sub>As son muy pequeñas y las funciones de onda del estado base del electrón y el hueco están extendidas. Cuando el ancho del pozo o de la barrera son muy pequeñas, las partículas túnelan relativamente fácil a lo largo del eje. A medida que el ancho de la celda unidad (ancho de pozo más ancho de barrera) aumenta, la distancia de separación entre el electrón y el hueco crece bajo la acción del campo eléctrico aplicado debido al alargamiento del hilo. Entre mayor es la intensidad del campo eléctrico más grande es la separación y más fácilmente cae la energía de enlace. Al mismo tiempo el incremento de la dimensión de la celda unitaria conduce a la disminución de las energías uni-particulares y al decrecimiento de la probabilidad de tunelamiento. Como resultado, la partícula más pesada (en este caso el hueco) comienza a cambiar su estado de débilmente extendido a fuertemente localizado dentro de un pozo a medida que la celda unitaria aumenta. Así pues la dimen-

sión de la celda unitaria provoca que el estado del electrón llegue a ser cada vez más y más localizado dentro de la misma celda unitaria, debido a esto, la separación electrón-hueco comienza a decrecer mientras que el descenso de la energía de enlace se transforma en ascenso. Finalmente, cuando la celda unitaria llega a ser más grande que la dimensión del excitón la energía de enlace decrece de nuevo.

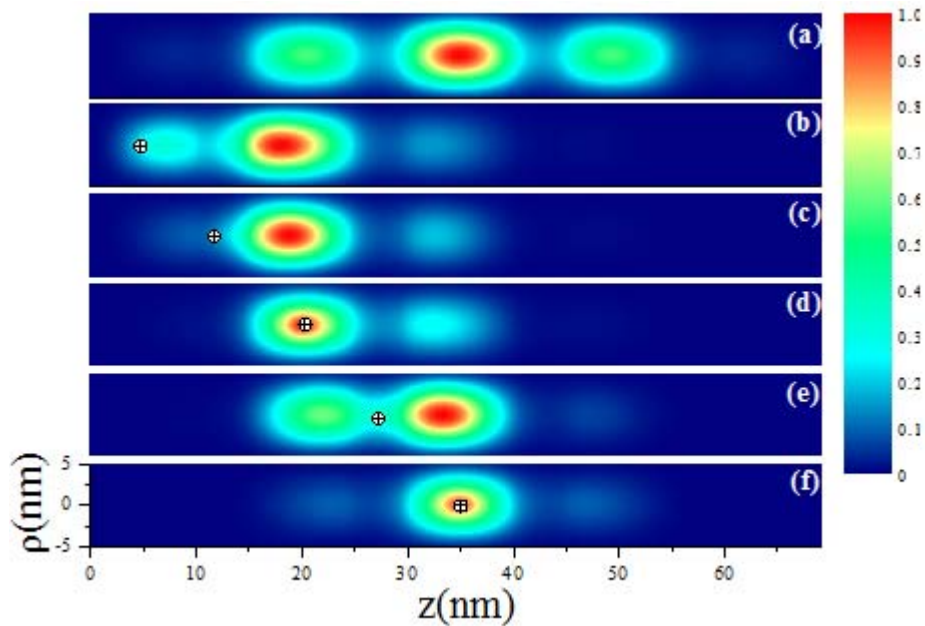


**Fig. 20** Energía de enlace de un excitón con hueco pesado como función: del radio de la NWSL para varios números de pozos (a) y del número de pozos internos de la NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.9}\text{Al}_{0.1}\text{As}/\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$

En la Fig.20 se presentan las curvas de las energías de enlace en función de radio (a) y el número de pozos en NWSL. La dependencia de las energías de enlace en función de la radio tienen el comportamiento típico para hilos y puntos cuánticos de forma cilíndrica: inicialmente con la disminución del radio  $E_b$  se incrementa, después pasa por un máximo y empieza a caer [10-12]. En las referencias anteriores se demostró que el valor máximo en las curvas para hilos cuánticos y discos cuánticos es diferente. En el primer caso este valor es del orden de 4-6  $\text{Ry}^*$  y en el segundo caso es de 7-10 $\text{Ry}^*$ , es decir que al pasar del hilo al disco el valor máximo de la energía de enlace se incrementa alrededor 50% debido al confinamiento adicional en la dirección axial [10-12]. Al disminuir el número de pozos internos en la NWSL la geometría se transforma y se hace más parecida a la geometría de un disco y por esta razón la energía de enlace de una donadora confinada en esta heterojuntura varía en concordancia con el cambio de la simetría de la estructura desde una simetría típica para un hilo hasta una simetría típica para un disco. Tanto el valor máximo de la

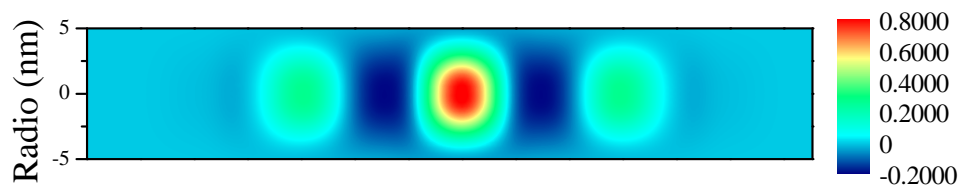
energía de enlace en las curvas en Fig20(a) como la energía de enlace en Fig. 20(b) se incrementa aproximadamente en 50% cuando el número de pozos en la NWSL se disminuye desde  $n_{\text{pozos}} = 20$  hasta  $n_{\text{pozos}} = 5$ .

La Fig. 21 muestra la evolución de las curvas de nivel correspondientes a la distribución de la densidad de probabilidades condicional de encontrar electrón en diferentes partes del plano resultado de un corte a lo largo de eje de la NWSL, debido al desplazamiento de la posición del hueco a lo largo de eje. En la Fig. 21(a) se muestran las isolíneas de niveles correspondientes a la distribución de la densidad de probabilidad de encontrar electrón en ausencia del hueco. Se ve que en este caso el electrón se localiza con mayor probabilidad en el pozo central. La probabilidad de encontrar electrón en los dos pozos vecinos es un poco menor pero también es notable y la probabilidad es casi cero en el resto de la NWSL.



**Fig. 21** Densidad de probabilidades condicionales del electrón; (a) libre en la NWSL, (b-f) para diferentes posiciones del hueco sobre el eje de la NWSL de GaAs/Ga<sub>0,9</sub>Al<sub>0,1</sub>As embebida en una matriz de GaAs/Ga<sub>0,6</sub>Al<sub>0,4</sub>As, con 5 pozos de 10nm y 4 barreras de 5nm y de Radio 5nm. Las posiciones del hueco están señaladas con cruces.

Cuando el hueco está localizado en el primer pozo al lado izquierdo, el máximo de la densidad de probabilidad se ubica en el pozo vecino al pozo donde se encuentra el hueco como se muestra en la Fig 21(b).. Para esto hay dos razones: La primera, está relacionada con el hecho de que hay competencia entre la atracción hacia el hueco y el confinamiento que lo obliga a mantenerse más cerca al pozo central. La segunda razón, es que la separación entre Cuando el hueco está localizado en el primer pozo al lado izquierdo, el máximo de la densidad de probabilidad se ubica en el pozo vecino al pozo donde se encuentra el hueco como se muestra en la Fig 21(b).. Para esto hay dos razones: La primera, está relacionada con el hecho de que hay competencia entre la atracción hacia el hueco y el confinamiento que lo obliga a mantenerse más cerca al pozo central. La segunda razón, es que la separación entre el electrón y el hueco más probable es del orden de un radio de Bohr efectivo (aproximadamente  $10nm$ ), mientras que cuando el hueco se encuentra en esta posición, dicha distancia más probable se configura en el inicio del segundo pozo. Luego, cuando el hueco se desplaza hacia el centro de NWSL como se ve en las Figs 21(c-f), el máximo de la densidad de probabilidad del electrón sigue desplazándose en concordancia con el movimiento del hueco.



**Fig. 22** Distribución de carga del excitón dentro de la NWSL de GaAs/Ga<sub>0.9</sub>Al<sub>0.1</sub>As/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As

En la Fig, 22, se muestra la distribución de carga generada por el excitón dentro de la NWSL, es posible ver que en los pozos la carga predominante es la positiva lo que muestra que en estas regiones es mucho más probable encontrar al hueco, mientras la ubicación más probable del electrón se localiza en las barreras, lo cual se entiende del hecho que debido a la relación entre las masa de las partículas, el electrón pueda moverse más fácilmente que el hueco quien por ser más pesado tiene menos posibilidades de aumentar su energía cinética, lo que permite localizar al hueco de manera más fácil en los pozos ya que allí su energía es menor, por esta razón el electrón, para no colapsar con el hueco, debe mantener su distancia

promedio a él en alrededor de  $10nm$  como ya se ha explicado antes, por lo tanto el electrón elegirá moverse más lento en las barreras que en los pozos, lo que permite ubicar al electrón más fácilmente en las barreras, haciendo que estas se carguen negativamente.

## TERCERA PARTE

---

### 3. SISTEMA DE TRES PARTICULAS EN NWSL

---

Estudio de la energía y la distribución de carga de sistemas de un sistema compuesto por un ión positivo y dos electrones ligados a este ( $D$ ) confinados en una estructura con forma de una superred de nanohilos. Se realiza una comparación de estos resultados con el comportamiento de una  $D^0$  en una superred de nanohilo.

#### 3.1 DONADORA NEGATIVAMENTE CARGADA ( $D^-$ ) CONFINADA EN NWSL

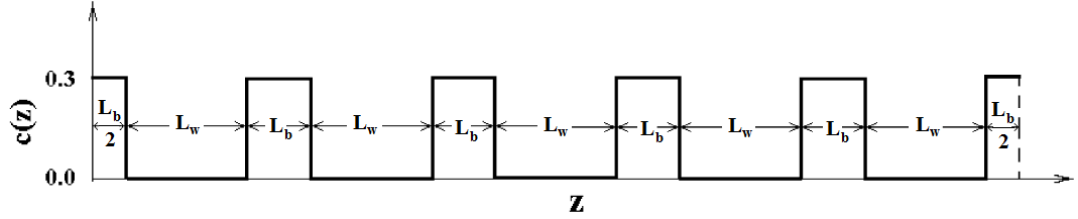
Una impureza donadora neutra ( $D^0$ ), inmersa en un semiconductor, puede capturar un electrón extra para formar una impureza cargada negativamente ( $D^-$ ). Una  $D^-$  es uno de los más simples sistemas electrónicos de “pocas partículas”, y se considera como el sistema de estado sólido análogo al ión  $H^-$  de la física atómica, el cual, hasta la fecha, no ha podido resolverse en forma exacta. Existe una descripción detallada de estudios realizados entre los años 30's y 50's para sistemas atómicos de dos electrones [42] en los cuales se demostró que entre menor carga nuclear tenga el sistema, el efecto de la correlación electrónica se hace más importante. Por tal razón, este sistema se hace interesante y puede usarse como modelo de prueba para verificar la eficiencia y la exactitud de los diferentes métodos de la teoría cuántica de pocas partículas. Como ya se ha mencionado, los recientes avances en lo que se refiere a técnicas de fabricación de heteroestructuras semiconductoras, han hecho posible confinar estos sistemas de pocas partículas en estructuras de dimensionalidad reducida, como pozos, hilos, puntos o anillos cuánticos. Para el caso de los NWs, al confinar en su interior una  $D^-$ , llegan a ser los análogos artificiales del ión  $H^-$ . En este sentido, si la estructura fuese un NW delgado, se tendrá que la  $D^-$  confinada de esta manera, podrá ser considerada como un ión  $H^-$  casi-unidimensional. A primera vista, el problema de una  $D^-$  confinada en una heteroestructura semiconductoras, no parece ser muy diferente del de una  $D^-$  en el bloque, o del de su análogo atómico, el ión  $H^-$  en tres dimensiones, no obstante, se tienen diferencias notables, debido al potencial de confinamiento adicional al potencial

Coulombiano. Una de las diferencias más importantes es la posibilidad de tener más de un estado ligado, lo que es imposible para una  $D^-$  en el bloque, la cual sólo soporta un estado ligado singlete, como fue demostrado por Hill [35] para el ión  $H^-$ . Lo anterior se debe a la competencia que existe entre la atracción del núcleo sobre los electrones y la repulsión entre estos. Otro aspecto que se debe tener en cuenta es el hecho de que en tales sistemas, no se puede asumir que los portadores se comporten como un sistema débilmente correlacionado. En este sentido, el interés por estudiar la estructura de una  $D^-$  en NWs está relacionado con la existencia de estados excitados ligados, los cuales son posibles, gracias al confinamiento de los electrones en la nanoestructura. El confinamiento cuántico produce un incremento significativo en la energía de enlace de la  $D^-$ , y como consecuencia aparecen otros estados ligados, para los cuales los electrones están en un estado triplete [36]. Algunos trabajos importantes, que se han realizado con relación al análisis de  $D^-$  confinadas en heteroestructuras, son dados en la referencia [37,39]. Con base en los aspectos más importantes mencionados anteriormente, se puede entrever que el estudio de una  $D^-$  confinada en heteroestructuras semiconductoras resulta ser un tema de gran interés debido a la rica variedad de propiedades electrónicas que tales sistemas despliegan, adicionalmente el interés se aumenta si se tiene en cuenta que el análisis de una  $D^-$  en una NWSL aún no se ha realizado de forma detallada o descriptiva, este capítulo reviste un interés importante ya que permite hacer una primera aproximación al complejo análisis de las propiedades de una donadora negativamente cargada confinada en una NWSL.

### **Modelo Matemático**

Para el siguiente análisis se considera un modelo de una NWSL de sección transversal circular de radio  $R$  y con concentración de Aluminio variable a lo largo de la dirección de crecimiento  $z$ , la cual es igual a cero dentro de los  $n$  pozos idénticos de ancho  $L_w$  y  $x$  dentro de las  $n+1$  barreras que conforman esta estructura, el ancho de las  $n-1$  barreras entre pozos es de  $L_b$  y el ancho de las barreras en los extremos de la NWSL es  $L_b/2$ . La forma de la distribución de la concentración a lo largo del eje principal de la NWSL es mostrada en la Fíg. 23. El potencial de confinamiento por fuera de la heteroestructura es infinito, esto se hace para simplificar un poco los cálculos, ya que como se mostrará en seguida, el modelo ma-

temático resulta más complejo que los análisis realizados hasta ahora para la donadora neutra y el excitón.



**Fig. 23** distribución de la concentración de aluminio a lo largo del eje  $z$  de la NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$

El hamiltoniano de la donadora cargada negativamente  $D^-$ , se puede escribir en coordenadas cilíndricas de la siguiente forma:

$$H = H_0(\vec{r}_1) + H_0(\vec{r}_2) + \frac{2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (3.1)$$

Donde  $H_0(\vec{r})$  representa el hamiltoniano de una  $D^0$  en el sistema

$$H_0(\vec{r}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} \quad (3.2)$$

Cuando el ultimo termino de la ecuación (3.2) se ignora se tiene el hamiltoniano de un electrón libre en la NWSL, que es completamente separable, y la función de onda de su estado base  $f_0(\vec{r})$  y energía  $E_0$  están dados por

$$f_0(\vec{r}) = f_z(z) f_\rho(\rho) \quad \text{y} \quad E_0 = E_z + E_\rho \quad (3.3)$$

Donde  $f_z(z)$  y  $E_z$  representan la función de onda y la energía del electrón en el potencial periódico unidimensional corresponde al nivel de energía más bajo, el cual describe el movimiento del electrón a lo largo de la dirección de crecimiento del cristal. Mientras que

$$f_\rho(\rho) = J_0(2.4048\rho/R) \quad \text{y} \quad E_\rho = (2.4048/R)^2 \quad (3.4)$$

Son las, bien conocidas, función de onda y energías de un electrón en un pozo de potencial circular bidimensional de barrera infinita, siendo  $J_0(x)$  la función de Bessel. La función  $f_z(z)$  y la energía  $E_z$  han sido calculadas a través del uso del Método de Matriz de Transferencia [41]

La ecuación de Schrödinger a solucionar para el caso de la  $D^-$  como sabemos es

$$H\psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_{D^-}\psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.5)$$

Para encontrar la función de onda del estado base  $\psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  de una donadora cargada negativamente en una NWSL correspondiente a la energía  $E_{D^-}$ , se hace uso de una función de prueba de tipo Hyleraas [42]

$$\psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0(\vec{r}_1)f_0(\vec{r}_2)\Phi_{D^-}(|\vec{r}_1 - \vec{\xi}|, |\vec{r}_2 - \vec{\xi}|, |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \quad (3.6)$$

Aquí la función envolvente  $\Phi_{D^-}$  tiene en cuenta la modificación de la correspondiente función de onda de los dos electrones asociada con la atracción ión-electrón y la repulsión electrón-electrón. Esta solución se desprende de la aplicación del Método de Dimensión Fractal al problema. Así pues la función envolvente  $\Phi_{D^-}$  es solución de la ecuación de onda modificada para el ión negativamente cargado  $H^-$ , en un espacio homogéneo en el cual la parte radial del jacobiano tridimensional  $r^2$  es reemplazada debido al confinamiento por la expresión

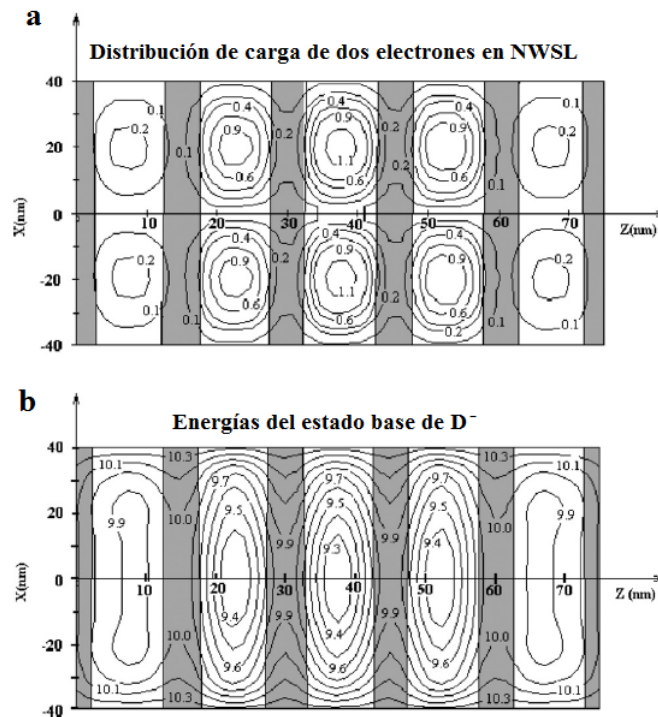
$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} J_0^2 \left( \frac{2.4048 \sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \xi_\rho^2} + 2r\xi_\rho \sin \theta \cos \theta}{R} \right) f_z^2(r \cos \theta + \xi_z) \sin \theta d\theta \quad (3.7)$$

Donde  $\xi_\rho$  y  $\xi_z$  son las componentes del vector posición de la donadora en dirección radial y axial respectivamente. En el presente trabajo se utilizan algunos procedimientos numéricos descritos en [3], y se encuentra la función envolvente  $\Phi_{D^-}$  y su correspondiente energía del estado base, utilizando una función de prueba de tipo Hyleraas [42].

## Resultados y discusión

Para el caso que ocupa nuestra atención en este momento, se considera una NWSL de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As de radio  $R=40nm$  y anchos de pozo  $L_w=10nm$  y barrera  $L_b=5nm$ , de  $n=5$  pozos idénticos. Se ignorarán las diferencias entre los parámetros del material, y serán de la misma manera que los considerados en los análisis hechos para la  $D^0$  y el X.

En la Fig. 24(a) se muestran los resultados de la distribución espacial de carga en la NWSL causada por la presencia de los electrones no ligados, para establecer la relación que existe entre esta y las distribuciones de los valores de las energías del estado base de la donadora confinada en la estructura. También se muestra en la Fig 24(b), las curvas de nivel de la energía del estado base de la  $D^-$  localizada en diferentes puntos dentro de la NWSL a lo largo de la sección transversal, por el eje de simetría del nanohilo perpendicular a la dirección de  $y$ .

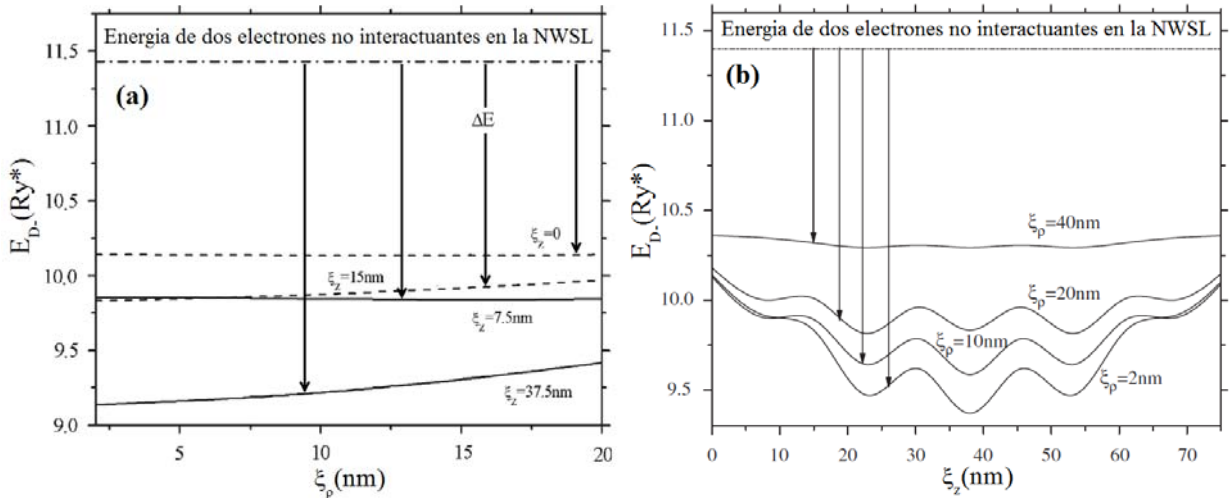


**Fig. 24** Curvas de nivel de (a) la distribución de carga en el estado base de los dos electrones en una NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  y (b) las energías del estado base de la donadora cargada negativamente dada en ( $Ry^*$ ) en diferentes posiciones dentro de la NWSL de radio 40nm, con 5 pozos de 10nm separados por las barreras de 5nm de ancho. Las franjas sombreadas representan las barreras internas de la NWSL.

Para hallar la distribución de carga de los dos electrones en la NWSL, es necesario encontrar la función de onda del estado base lo cual se puede hacer por medio de un modelo simple de estructura simétrica [43], esto se muestra en la Fig. 24(a) donde se puede ver que la distribución de carga de los dos electrones en la NWSL dentro de los pozos difiere conside-

blemente de la que uno encuentra para un solo electrón en la NWSL. La repulsión entre electrones los lleva más lejos unos de otros y por lo tanto los máximos de la distribución de carga de los dos electrones dentro de los pozos son desplazados desde el eje hacia la región periférica. En consecuencia las curvas de la donadora cargada negativamente  $D^-$  de la Fig. 24(b) son más extendidas en cada pozo, abriéndose bastante en dirección radial, de cómo resultan las mismas energías para una  $D^0$  en la estructura.

Uno puede imaginar el proceso de formación de la  $D^-$  como si se insertará un ión cargado positivamente en alguna ubicación dentro de la configuración de los dos electrones en la NWSL. El descenso de energía en este proceso debe ser fuerte para cuando la donadora se ubica donde la densidad de carga es más alta, de aquí la similitud entre las curvas de nivel de la distribución de carga de dos electrones en la NWSL y las curvas de nivel de las energías de la donadora negativamente cargadas localizadas en diferentes partes de la heteroestructura que se observa en las Fig. 24 (a y b).



**Fig. 25** Energías del estado base de la  $D^-$  en función de su distancia (a) desde el eje de la NWSL para diferentes posiciones a lo largo del eje  $z$  y (b) desde el extremo de la NWSL para diferentes valores de su posición radial, para NWSL de  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ .

En la Fig. 25 se presenta la energía de la  $D^-$  en función de la posición de la donadora en dirección radial (a) y axial (b), para diferentes posiciones de la donadora dentro de la NWSL. Las flechas en esta grafica indican el descenso estimado de la energía del estado

base de los dos electrones debida a las interacciones entre los electrones y entre estos y el ión. Se puede notar que estas curvas de energía también son onduladas y en general son similares a las de la  $D^0$ , pero para el caso de la  $D^-$  la variación de energía no es tan pronunciada como para la  $D^0$ , esto se debe al hecho de que la repulsión entre electrones, para el caso de los dos electrones en la NWSL, presenta una distribución de carga más homogénea dentro de los pozos en comparación con el caso de un solo electrón en la estructura.

En estos cálculos se ha utilizado una función de prueba tipo Hyleraas, los resultados obtenidos muestran que la separación espacial entre los dos electrones alrededor de la ubicación de la donadora en los pozos es similar a la de un ión de Hidrogeno negativo donde uno de los electrones esta fuertemente ligado a la donadora, mientras que el otro se encuentra más alejado debido a la fuerte correlación. En ese caso, ambos electrones estarán principalmente localizados junto al ión dentro del mismo pozo, mientras que cuando la donadora se encuentra en la barrera ligará a los dos electrones localizándolos principalmente en los pozos adyacentes a ellas, pero cada electrón en un pozo distinto.

## **CONCLUSIONES**

---

Luego de la realización de este trabajo es posible establecer que el análisis de los sistemas de pocas partículas confinadas en una superred de nanohilos, aún sigue siendo un tema abierto y con grandes posibilidades de aplicaciones, además podemos concluir concretamente que:

- ✓ En este trabajo se ha presentado una forma simple para el cálculo de la energía del estado base de algunos sistemas de pocas partículas confinadas en una superred de nanohilos y un nanohilo de perfil periódicamente variable en presencia de campos eléctricos y magnéticos, haciendo uso de la aproximación adiabática y basado en el Método de Dimensión Fractal, lo que permite reducir la dimensionalidad del problema y establecer las correlaciones de modificación de distribución de probabilidad debido a la interacción entre las diferentes partículas interactuantes.
- ✓ Se mostró la eficiencia de los métodos usados en los cálculos, al encontrar la concordancia de nuestros resultados con los resultados ampliamente conocidos en la literatura, para los casos límites en que la configuración de la heteroestructura se asemeja a una superred, a un hilo sin defectos y a un punto cuántico en forma de disco,
- ✓ Se determinaron e interpretaron los efectos más sobresalientes que aparecen al variar la posición de las donadoras en las heteroestructuras analizadas, así como los efectos causados por la aplicación de campos eléctricos y magnéticos, encontrándose las localizaciones más probables de las cargas dentro de las estructuras para varias configuraciones específicas.
- ✓ Se analizó el efecto del confinamiento estructural debido a la morfología y composición del nanohilo, sobre la energía de enlace y la distribución de carga de algunos sistemas de pocas partículas, lo que podría permitir una caracterización a futuro de posibles aplicaciones de estas estructuras en la nanotecnología.

- ✓ Se analizaron, por primera vez, las características básicas de los sistemas de pocas partículas en las superredes de nanohilos, dejando abierta la posibilidad de encontrar potenciales aplicaciones tecnológicas que permitan utilizar estos estudios como base para la creación de algún tipo modelo experimental relacionado con estas heteroestructuras.

## **REFERENCIAS**

---

- [1] J. H. Davis, *The physics of low dimensional semiconductors an introduction*, Cambridge University Press. 1998, p. 80
- [2] W. Hornischer, P. Grambow, T. Demel, E. Bauser, C. Heitmann, K. Von Klitzing and K. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* 60 2998 (1998)
- [3] L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* 14 21 (1970)
- [4] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 4714 (1981)
- [5] J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong, *Phys. Rev. B* 50, 1832 (1994)
- [6] N. P. Sandler and C. R. Proetto, *Phys. Rev. B.* 46, 7707 (1992)
- [7] F. García, F. J. Betancur, R. Robayo, W. Gutiérrez, J. H. Marín and I. D. Mikhailov, *Phys. Stat. Sol. (c)* 2, 3626 (2005)
- [8] J. L. Marin and S. A. Cruz, *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* 25, 4365 (1992)
- [9] T. Pang and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* 65, 1635 (1990)
- [10] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Rev. B.* 67, 115317 (2003)
- [11] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 234, 590 (2002)
- [12] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* 240, 747 (2003)
- [13] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur and L. F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* 224, 757 (2001)
- [14] I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* 242, 1636 (2005)
- [15] W. Xie, *Physica B.* 315 117 (2002)
- [16] W. Y. Ruan, K. S. Chan and E. Y. B. Pun, *J. Phys: Condens. Matter.* 13, 1329 (2001)
- [17] C. Busser and C. R. Proetto, *J. Phys: Condens. Matter.* 8, L131 (1996)
- [18] M. S. Gudiksen, J. L. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith and C. M. Lieber, *Nature* 415 617-620 (2002)
- [19] R. Solanki, J. Huo, J. L. Freeouf and B. Miner, *Appl. Phys. Lett.* 81, 3864 (2002)
- [20] Y. Wu, R. Fan and P. Yang, *Nano Lett.* 2, 83 (2002)

- [21] J. Ristic, E. Calleja, M. A. Sánchez-García, J. M. Ulloa, J. Sánchez-Páramo, J. M. Calleja, U. Jahn, A. Trampert and K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **68** 125305 (2003)
- [22] H. Wu, D. W. L. Sprung, J. Martorell and S. Klarsfeld, *Phys. Rev. B* **68**, 44, 6351 (1991)
- [23] Y. M. Lin and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **68**, 075304 (2003)
- [24] M. Willatzen, R. V. N. Melnik, C. Galeriu and L. C. Lew Yan Voon, *Math. Comput. Sim.* **65**, 385 (2004)
- [25] C. Galeriu, L. C. Lew Yan Voon, R. Melnik and M. Willatzen, *Comput. Phys. Comm.* **157**, 147 (2004)
- [26] C. Yuan-Ping, Y. Xiao-hong, L. Mao-Wang and D. Yu-Xiang, *Chin. Phys.* **13**, 1537 (2004)
- [27] J. Klos, *Physica E* **36**, 153 (2007)
- [28] Y. M. Niquet, *Physica E* **37**, 204 (2007)
- [29] M. F. Pereira Jr, I. Galbraith, S. W. Koch and G. Duggan, *Phys. Rev. B* **42**, 7084 (1990)
- [30] M. M. Dignam and J. E. Sipe, *Phys. Rev. B* **41**, 2865 (1990)
- [31] D. S. Chuu and Y. C. Lou, *Phys. Rev. B* **43**, 14504 (1991)
- [32] K. Afif, A. Benyoussef and J. Diouri, *Chin. Phys. Lett.* **19**, 1164 (2002)
- [33] N. Tomassini, D. Schiumarini, L. Piloizzi and A. D'Andrea, *Phys. Rev. B* **75**, 085317 (2007)
- [34] T. Y. Zhang, W. Zhao, J. C. Cao and G. Qasim, *J. appl. Phys* **98**, 094311
- [35] R. N. Hill, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 643 (1977)
- [36] B. Szafran, J. Adamowski and B. Stébé, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** 7575 (1998)
- [37] J-L. Zhu, J-H. Zhao, W. H. Duan and B. L. Gu, *Phys. Rev. B* **46** 7546 (1992)
- [38] W. Xie, *Phys. Lett. A* **263** 127 (1999)
- [39] J. H. Marín, F. J. Betancur and I. D. Mikhailov, *J. Phys.: Condens. Matter* **18** 1005 (2006)
- [40] D. Gershoni, M. Katz, W. Wegscheider, L.F. Pfeiffer, R.A. Logan and K. West, *Phys. Rev. B* **50** 8930 (1994)

- [41] P. Harrison, *Quantum well, wires and dots*, Wiley Interscience, England, Ed. 2 (2005) pp. 10-20, 51-60
- [42] H. A. Bethe and e.E. Salpeter, *Quantum mechanics of One- and Two- electron atoms* , Springer, Berlin, (1957), pp. 154-157
- [43] J. F. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marín and L.E. Olivera, J. Phys.: Condens. Matter **10** 7283 (1998)
- [44] J. Cen and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **46**, 13280 (1992)
- [45] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. D **31**, 3391 (1998)
- [46] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996)