1. SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN EL LÍMITE ADIBÁTICO

Los sistemas de pocas partículas más simples que se pueden obtener en nanoestructuras semiconductoras están compuesto por dos electrones, un par electrón-hueco (excitón X), un electrón y un par de huecos (trión X^+) o un hueco con un par de electrones (trión X). El conocimiento del espectro energético de estos sistemas confinados en un QD, determinada por la interrelación entre el confinamiento estructural y la interacción Coulombiana, permite clarificar características esenciales relacionadas con los efectos de correlación de los sistemas de pocos cuerpos [102-103] y a la vez profundizar en el entendimiento de los efectos de confinamiento relacionados con el tamaño y geometría de las nanoestructuras. Este conocimiento también constituye un paso clave hacia el control de los dispositivos de pocas partículas [104-105]. Por estas razones, en las últimas dos décadas se han realizado muchas investigaciones sobre dos y tres partículas en QDs [8,62,71,73,100,106], las cuales buscan desarrollar métodos confiables para calcular su estructura electrónica, ya que ésta define las propiedades físicas de los QDs y sus potenciales aplicaciones.

Una de las técnicas que se ha usado para analizar el espectro de un conjunto de pocas partículas en las heterojunturas de baja dimensionalidad es la AA. Para explicar la idea principal de este método consideremos el Hamiltoniano de dos partículas con cargas $\tau_1 e$ y $\tau_2 e$ en presencia de un campo magnético uniforme y paralelo a la dirección de crecimiento del QD:

$$H = H_1(\mathbf{r}_1) + H_2(\mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2);$$

$$H_j(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{2m_j^*}\left(\mathbf{P}_j - \frac{\tau_j e\,\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)}{c}\right)^2 + V_j(\mathbf{r}_j);\ j = 1,2 \qquad (1.1)$$

$$U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{\tau_1 \tau_2 e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

donde m_j^* y ε son la masa efectiva de la j-partícula y la constante dieléctrica del medio respectivamente. Con el propósito de tener en cuenta dos tipos diferentes de partículas, se ha introducido un parámetro artificial τ_j, el cual es igual a +1 para un hueco y -1 para un electrón. $V_j(\mathbf{r}_j)$ es el potencial de confinamiento y $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)$ es el potencial vectorial de la j-ésima partícula cuya posición está definida por el vector $\mathbf{r}_j$. En el desarrollo de esta tesis, se considerará el caso cuando el campo magnético es homogéneo y

está aplicado a lo largo de eje z, lo que permite escoger $\mathbf{A}(\mathbf{r}_j)=\frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}_j$ y escribir el Hamiltoniano (1.1) en coordenadas cilíndricas como:

$$H=\sum_{j=1}^{2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_j^*}\nabla_j^2+\frac{e^2B^2\rho_j^2}{8m_j^*c^2}+\frac{\tau_j i\hbar eB}{2m_j^*c}\frac{\partial}{\partial\varphi_j}+V_j(\mathbf{r}_j)\right)+\frac{\tau_1\tau_2 e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} \qquad (1.2)$$

Para simplificar los cálculos y análisis futuros, se usa el radio de Bohr efectivo $a_0^*=\varepsilon\hbar^2/\tilde{m}e^2$, el Rydberg efectivo $R_y^*=\hbar^2/2\tilde{m}a_0^{*2}$ y el primer nivel de Landau expresado en R_y^*, $\gamma=e\hbar B/2\tilde{m}cR_y^*$ como unidades de longitud, energía e intensidad del campo magnético adimensionales. El valor que tome la masa $\tilde{m}$ depende del sistema que se analice. Por ejemplo, si se tienen dos partículas idénticas, $\tilde{m}=m_1^*=m_2^*$, pero si las partículas tienen masas diferentes, $\tilde{m}=\mu=m_1^*m_2^*/(m_1^*+m_2^*)$. En estas unidades el Hamiltoniano (1.2) es:

$$H=\sum_{j=1}^{2}\eta_j\left(-\nabla_j^2+i\tau_j\gamma\frac{\partial}{\partial\varphi_j}+\frac{\gamma^2}{4}\rho_j^2+V_j(\mathbf{r}_j)\right)+\frac{2\tau_1\tau_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|};\ \eta_j=\tilde{m}/m_j^* \qquad (1.3)$$

La presencia simultánea de los términos de interacción Coulombiana y del potencial de confinamiento en (1.3), no permiten separar las variables en la ecuación de onda correspondiente. No obstante, existen al menos dos modelos para los cuales el Hamiltoniano (1.3) se hace separable. Estos corresponden a los casos de dos partículas con las masas iguales confinadas dentro un disco con potencial parabólico [7,62,68-71,107] o en un anillo unidimensional [74]. En ambos casos la posibilidad de encontrar las soluciones exactas de la ecuación de onda está relacionada con el uso de las coordenadas relativas y de centro de masa. En el primer caso, se utiliza la posibilidad de transformar una suma de dos potenciales parabólicos $V_1(\mathbf{r}_1)+V_2(\mathbf{r}_2)$ en otra suma de dos potenciales, uno para el movimiento de centro de masa y otro para el movimiento relativo $\tilde{V}_1(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)+\tilde{V}_2(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$. El caso más simple corresponde al movimiento de dos partículas a lo largo de un anillo homogéneo y unidimensional, donde el potencial de confinamiento se considera como una constante ($V_1(\mathbf{r}_1)=V_2(\mathbf{r}_2)=0$). Recientemente Zhu, Dai, y Hu [74] demostraron que el problema de dos electrones en un QR unidimensional (1D) de radio R e inmerso en un campo magnético uniforme $\mathbf{B}=B\mathbf{z}$ perpendicular plano del anillo, resulta ser exactamente soluble.

Para evitar singularidades, debido a que la energía cinética del sistema en límite $R \to 0$ es proporcional a $1/R^2$, es conveniente usar un Hamiltoniano renormalizado $\tilde{H} = R^2 H$, que de acuerdo con (1.3) puede escribirse como:

$$\tilde{H} = \sum_{i=1}^{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2} - i\gamma R^2 \frac{\partial}{\partial\varphi_i}\right] + \frac{\gamma^2 R^4}{2} + U\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) \tag{1.4}$$

con

$$U(\varphi_1 - \varphi_2) = 2R \Big/ \left| sen\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right)\right| \tag{1.5}$$

Los autovalores del Hamiltoniano (1.4) correspondientes a la energía bi-electrónica normalizada, $\tilde{E} = ER^2$ se pueden encontrar exactamente usando coordenadas relativas $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ y de centro de masa $\theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$. En estas coordenadas el Hamiltoniano (1.4) se hace separable:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_c + \tilde{H}_r + \gamma^2 R^4/2; \quad \tilde{H}_c = -0.5\frac{d^2}{d\theta^2} - i\gamma R^2 \frac{d}{d\theta}; \quad \tilde{H}_r = -2\frac{d^2}{d\varphi^2} + U(\varphi) \tag{1.6}$$

y la energía normalizada se hace igual a $\tilde{E} = \tilde{E}_c + \tilde{E}_r$, siendo $\tilde{E}_c$ y $\tilde{E}_r$ los autovalores $\tilde{H}_c$ y $\tilde{H}_r$, respectivamente. Mediante el uso de una función de onda de la forma: $\Psi = e^{iM\theta} f(\varphi)$, se puede determinar los autovalores de $\tilde{H}_c$, los cuales están dados por:

$\tilde{E}_c(M) = 0.5M^2 + \gamma MR^2$ donde $M = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$ es el momentum angular del centro de masa, en tanto que los autovalores del operador $\tilde{H}_r$ se obtienen solucionando la ecuación

$$-2\frac{d^2 f_{ms}(\varphi)}{d\varphi^2} + U(\varphi) f_{ms}(\varphi) = \tilde{E}_r(m,s) f_{ms}(\varphi) \tag{1.7}$$

en la región $[-2\pi, 2\pi]$, con condiciones de frontera periódicas $f_{ms}(0) = (-1)^m f_{ms}(2\pi)$ y mediante la expansión en series de potencias del potencial $U(\varphi)$. Los números cuánticos $m = 0, \pm 1, \pm 2$ y $s = (\pm)$ definen el movimiento angular relativo del par e-e y la paridad s de la correspondiente autofunción, donde las soluciones pares $(s = +)$ corresponden a los estados singlete y las soluciones impares $(s = -)$ corresponden a los estados triplete. El espectro electrónico del sistema estará dado por las energías $\tilde{E}(M, m, s)$ siendo M, m, s los tres números cuánticos con que se etiqueta esta energía

Los resultados obtenidos a partir de este modelo simplificado demuestran la existencia del efecto Aharanov-Bohm [108], el cual está asociado con la oscilación de la energía del estado base del sistema conforme la intensidad del campo magnético aumenta. Adicionalmente se puede establecer la existencia de una fuerte competencia entre la energía cinética y la potencial en dependencia del tamaño del QR. Por ejemplo, si el radio es pequeño prima la energía cinética sobre la potencial y el sistema tiene un comportamiento semejante al de un gas. Pero al aumentar el radio, la energía potencial se impone sobre la cinética, obligando lentamente a los electrones localizarse con mayor probabilidad en lados opuestos del anillo. En el caso límite de fuerte correlación, los electrones adquieran una configuración muy similar a un rotor rígido conocida como cristalización de Wigner [34].

Ambos modelos, tanto el del disco con potencial parabólico, como el del anillo 1D, sirven como punto de partida en el análisis de propiedades fundamentales de los QDs, en relación con el efecto que tienen su tamaño y la interacción Coulombiana sobre el espectro energético. Sin embargo, cada uno de estos modelos tiene sus propias limitaciones. Por ejemplo, el modelo de anillo 1D no es lo suficientemente flexible como para permitir un gran acercamiento entre los electrones ni para permitir el análisis de partículas con diferente tipo de carga, pues esto haría que el sistema colapse. En ambos modelos se supone que el potencial de confinamiento tiene una barrera infinita que no permite el desbordamiento de las partículas fuera del pozo, lo que impide el estudio de los fenómenos de tunelamiento. Por otro lado, es evidente que en el límite cuando el grosor del disco o del anillo tiende a cero, la separación entre los niveles energéticos se incrementa y puede llegar a tener valores comparables con la brecha de energía entre las bandas de conducción de los materiales que conforman la heterostructura. Esto implicaría que el modelo de barrera infinita resulta ser inapropiado y en su lugar se debería usar un modelo con barrera finita [9] u otro con barrera suave [100,109-110]. Por esta razón, nosotros consideramos importante desarrollar una técnica que permita encontrar la solución correspondiente para los modelos con grosores angostos pero finitos a partir de los modelos exactamente solubles, considerándolos como un límite adiabático. Además, nosotros observamos que este modelo se puede ampliar, de tal manera que permita analizar diversos sistemas compuestos por dos anillos de tamaño diferente, tanto concéntricos como acoplados verticalmente, los cuales albergan cargas de igual o de diferente signo. La ventaja fundamental de esta generalización es que se preserva el carácter de modelo exactamente soluble. La extensión de los modelos exactos y la utilización de ellos como punto de partida para la aproximación adiabática, constituye el contenido del presente capítulo.

1.1 DOS ELECTRONES EN ANILLOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE

Los puntos cuánticos de InAs apilados verticalmente y fabricados recientemente [111-112], ofrecen mayores oportunidades para mejorar el rendimiento de los dispositivos ópticos en comparación con un punto cuántico solitario, debido al acoplamiento entre QDs. En este contexto, nosotros consideramos relevante buscar modelos exactamente solubles para explorar la nueva física relacionada con los QDs acoplados, de tal manera que nos permitan comprender los efectos que tienen el acoplamiento sobre el espectro energético de dos partículas.

En esta sección, se considerará un modelo simple formado por dos anillos 1D idénticos de radio R, verticalmente acoplados y coaxiales, los cuales contienen cada uno un único electrón y se hallan inmersos en un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$. Si el cociente entre la separación entre anillos d y el radio R tiende a cero $(\beta = d/R \to 0)$, es decir, cuando los anillos se fusionen en un uno solo, los resultados de cálculos para este modelo se pueden comparar con los de la Referencia [74] que han sido obtenidos anteriormente para un sólo anillo. Nótese que los Hamiltonianos correspondientes a estos dos problemas, sólo se diferencian en el término que describe la interacción Coulombiana, que en nuestro caso toma la siguiente forma:

$$U(\varphi_1 - \varphi_2) = 2R \Big/ \sqrt{4sen^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) + \beta^2} \tag{1.8}$$

Para obtener los autovalores del problema (1.7) con potencial (1.8) y con las condiciones de fronteras establecidas anteriormente, nosotros hemos utilizado el método de barrido trigonométrico [80]. Cálculos numéricos de la energía bi-electrónica $\widetilde{E}(M,m,s)$ en función del radio R fueron realizados para diferentes valores de β.

En la Tabla 1.1 se comparan nuestros resultados para el caso en que la separación entre anillos es muy pequeña ($\beta = 0.001$) con la energía exacta $\widetilde{E}(M,m,s)$ obtenida en la Referencia [74] para dos electrones en un solo anillo. En el análisis de las energías del conjunto de niveles más bajos, se ha usado una notación corta para los diferentes números cuánticos y de espín en un orden creciente: a, b, c, etc. La comparación permite concluir que existe una excelente concordancia entre ambos grupos de resultados, lo que pone de manifiesto la eficacia de método de barrido trigonométrico que [illegible] empleado.

		$R = 1a_0$ *		$R = 4a_0$ *	
		Resultados Tesis	Referencia [74]	Resultados Tesis	Referencia [74]
a	$\tilde{E}(0,0,0)$	1.72	1.73	5.18	5.18
b	$\tilde{E}(1,1,1)$	2.23	2.23	5.68	5.68
c	$\tilde{E}(0,2,1)$	3.61	3.62	7.92	7.92
d	$\tilde{E}(2,0,0)$	3.72	3.73	7.18	7.18
e	$\tilde{E}(1,1,0)$	4.06	4.12	8.41	8.42
f	$\tilde{E}(2,2,1)$	5.62	5.62	9.92	9.92
g	$\tilde{E}(0,2,0)$	6.22	6.23	11.40	11.40
h	$\tilde{E}(3,1,1)$	6.33	6.38	9.68	9.68
i	$\tilde{E}(1,3,1)$	6.88	6.88	11.90	11.90
j	$\tilde{E}(3,1,0)$	8.06	8.11	12.41	12.41
k	$\tilde{E}(2,2,0)$	8.22	8.38	13.40	13.40
l	$\tilde{E}(0,4,1)$	10.08	10.08	15.71	15.71
m	$\tilde{E}(4,0,0)$	9.72	9.73	13.18	13.18
n	$\tilde{E}(1,3,0)$	10.24	10.57	16.19	16.21
o	$\tilde{E}(3,3,1)$	10.88	10.88	15.90	15.90
p	$\tilde{E}(4,2,1)$	11.62	11.62	15.92	15.92

Tabla 1.1. Comparación entre la energía exacta $\tilde{E}(M,m,s)$ dos electrones en anillos acoplados verticalmente tomando $\beta = 0.001$ con dos electrones en un sólo anillo según la Referencia [74]

En la figura 1.1 se muestra la forma como el conjunto de niveles más bajos de energía cambia con el radio del anillo, a medida que la separación entre éstos crece desde 0.01 hasta 10.

Para entender esta evolución se deben comparar los aportes realizados por las energías cinética y potencial al Hamiltoniano (1.4) y analizar quien gana en la competencia entre ellos. Cuando el radio de los anillos es muy pequeño o la distancia entre ellos es muy grande, la contribución de la energía Coulombiana (la cual es proporcional al radio R e inverso proporcional a la separación β), se hace despreciable y los valores propios del Hamiltoniano (1.4), corresponden a las energías normalizadas de dos rotores rígidos desacoplados con valores dados por la siguiente expresión:

$$\tilde{E}(M,m,s) = 0.5(M^2 + m^2) \qquad (1.9)$$

En la Figura 1.1 se puede notar como las energías satisfacen esta expresión cuando $R \to 0$, independiente del valor de β y para ambos estados singlete y triplete.

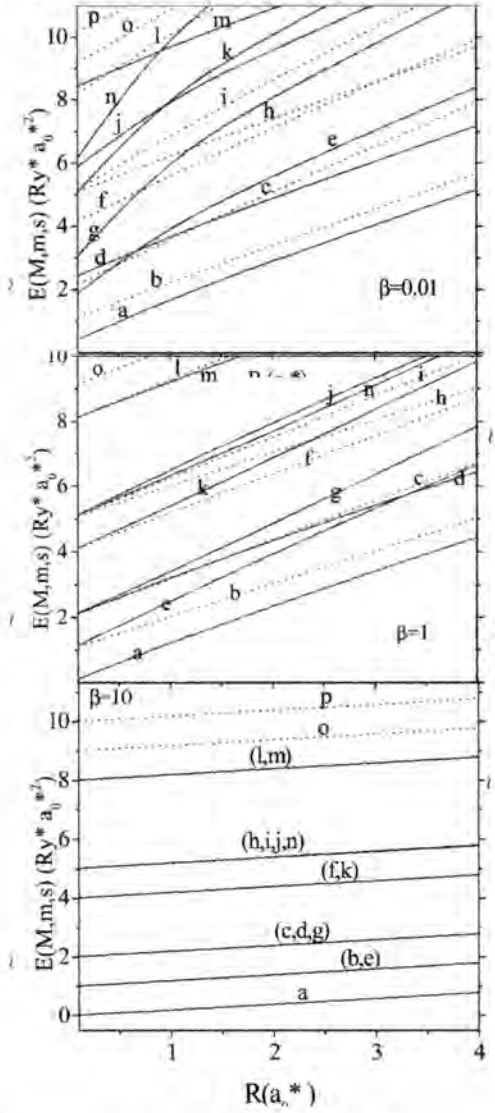

Figura 1.1. Energías totales normalizadas $\widetilde{E}(M,m,s)$ de dos electrones en función del radio R de los anillos cuánticos verticalmente acoplados. Las curvas se hacen para tres diferentes valores de la razón β entre la distancia y el radio de los anillos: 0.001, 1 y 10. Las líneas continuas son estados singlete y las líneas interrumpidas son estados triplete.

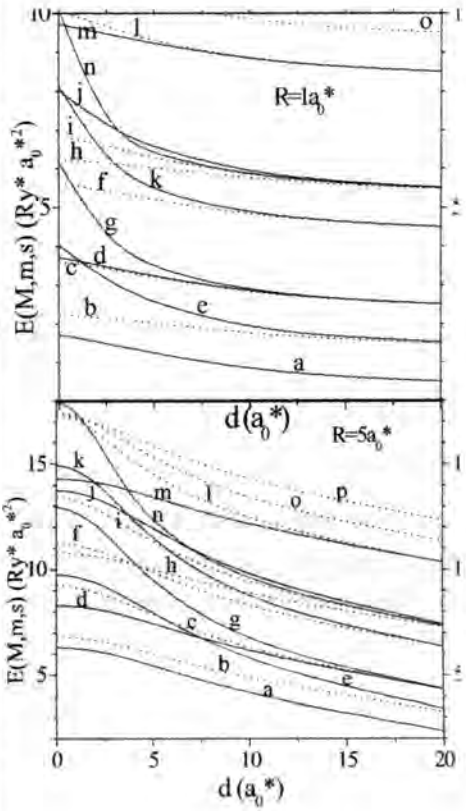

Figura 1.2. Energías totales normalizadas $\widetilde{E}(M,m,s)$ de dos electrones en función de la distancia d entre los anillos acoplados verticalmente. Las curvas se hacen para dos radios diferentes $R = 1a_0^*$ (curvas superiores) y $R = 5a_0^*$ (curvas inferiores)

Cuando el radio del anillo se aumenta, la energía Coulombiana crece, y como consecuencia de este aumento de la energía potencial se producen intersecciones entre los niveles más altos. Estas intersecciones decrecen notablemente a medida que razón β aumenta, de tal manera cuando β es muy grande, todas las curvas de energía se vuelven casi horizontales, haciendo que todos los niveles se vuelvan degenerados con respecto a la orientación de los espines.

Dependencias similares para la energía bi-electrónica en función de la separación entre anillos se presenta en la figura 1.2. Se puede observar como el espectro de energía se transforma desde un sistema caracterizado por una fuerte interacción Coulombiana (cuando la distancia entre anillos es pequeña) a otro sistema de rotores rígidos independientes (cuando la distancia entre anillos es grande) cuyas energías están dadas por (1.9). Esta evolución del espectro es responsable de las intersecciones entre las diferentes curvas observadas en la figura 1.2.

En la figura 1.3 se muestra la energía $\tilde{E}(M,m,s)$ con $|M| \leq 2$ en función del campo magnético para los radios $R = 1a_0^*$ y separación entre anillos $d = 0.1a_0^*$. Se puede ver que la existencia del campo magnético origina la división de los niveles de energía cuyo momentum angular M tiene signos diferentes, en un modo tal que cuanto más grande es la intensidad del campo, más significativa es la división inducida por el término paramagnético del Hamiltoniano (1.4).

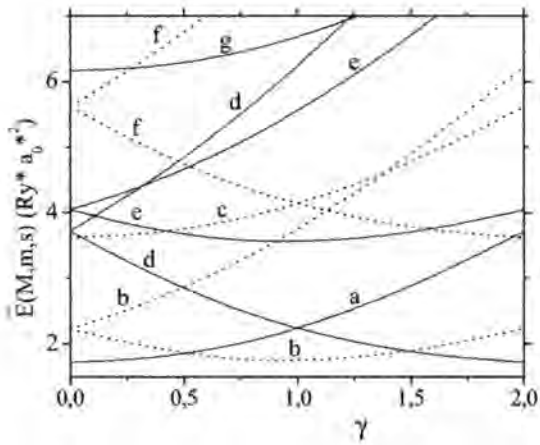

Figura 1.3. Energías normlizadas $\tilde{E}(M,m,s)$ en función del campo magnético γ para dos electrones verticalmente acoplados en anillos uni-dimensionales de radio $R = 1a_0^*$ y separación $d = 0.1a_0^*$

El comportamiento de estas curvas está controlado por la fuerte competencia entre los términos paramagnético y diamagnético presentes en el Hamiltoniano (1.4). Mientras la dependencia del término paramagnético con el campo es lineal, la del diamagnético es cuadrática. Por lo tanto, cuando el campo magnético es pequeño el término paramagnético es predominante mientras que para grandes campos magnéticos el término diamagnético se hace más significativo. Por esta razón, al inicio todas las

curvas son cuasi-lineales con pendiente positiva para $M \geq 0$ o negativa para $M \leq 0$ y adoptan la forma parabólica para grandes campos magnéticos. Adicionalmente se puede observar que el nivel de energía más bajo exhibe un comportamiento oscilatorio con el campo magnético, cuyo periodo es $\gamma = 1.0$. Para campos magnéticos menores que 0.5 el estado básico corresponde al estado singlete $\tilde{E}(0,0,0)$. Cuando la intensidad del campo es mayor que 0.5 el estado base se transforma en el estado triplete $\tilde{E}(-1,1,1)$ y este carácter de estado base lo conserva dentro del intervalo $1 < \gamma < 1.5$, pero a partir de 1.5 el estado base es asumido por el nivel $\tilde{E}(-2,0,0)$. Este comportamiento oscilatorio se mantiene para diferentes valores de los radios de los anillos y separación entre ellos. Es evidente que el número cuántico M del nivel del estado base, sube con el incremento de la intensidad del campo magnético, haciendo que las posiciones de los mínimos en las curvas correspondan a valores $\gamma = M/R^2$ con periodo de oscilación igual a $1/R^2$. Es necesario advertir que las oscilaciones no cambian al modificar el radio, debido a que la interacción Coulombiana entre el par e-e en un anillo 1-D es responsable de los efectos de tamaño cuántico.

1.2 DOS PARTÍCULAS EN ANILLOS CUÁNTICOS CONCÉNTRICOS

Uno estaría tentado a suponer que la solución exacta encontrada para dos electrones en la Referencia [74], también se podría extender al caso de dos partículas de carga diferente con sólo reemplazar la repulsión Coulombiana por la atracción. Pero es bien conocido que cualquier sistema biparticular 1D con atracción de Coulomb resulta ser inestable con respecto a la fusión. Por esta razón, nosotros consideramos un modelo en el cual dos partículas con cargas de signos iguales u opuestos, se localizan en dos anillos concéntricos 1D, de tal manera que siempre queden separados. Aunque la solución exacta se podría obtener para el caso de dos partículas con masas diferentes, acá solo consideramos un modelo simplificado para dos partículas con masas efectivas iguales $m_1^* = m_2^* = m^*$, lo cual a su vez facilitará la comparación de los resultados con los obtenidos en [74]. En este modelo la primera partícula esta localizada en el anillo interno de radio $R_1 = \beta R \ (0 < \beta \leq 1)$ y la otra está dentro del anillo exterior de radio R.

A partir de (1.3) y (1.4), el Hamiltoniano 1D renormalizado para las dos partículas en coordenadas polares, es:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} + 2\tau R \Big/ \sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta\, sen^2 \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}} \ ; \ \tau = \pm 1 \qquad (1.10)$$

Signo positivo del parámetro $\tau = \tau_1 \tau_2$ corresponde al caso de dos electrones y el menos al par electrón-hueco. Nótese que cuando en (1.10) la razón β es igual a 1, se obtiene el Hamiltoniano (1.4) para dos electrones en un anillo. Esto nos indica que para obtener los autovalores del operador $\tilde{H}$ se puede seguir el mismo procedimiento descrito en la sección anterior. En este nuevo caso, los términos $\tilde{H}_c$ y $\tilde{H}_r$, en los cuales se separa el operador $\tilde{H}$ están dados por:

$$\tilde{H}_c = -\frac{1}{1+\beta^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2};\quad \tilde{H}_r = -\frac{1+\beta^2}{\beta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{2\tau R}{\sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta\, sen^2\,\varphi/2}} \qquad (1.11)$$

Los autovalores del operador $\tilde{H}_c$ son iguales a $\tilde{E}_c(M) = M^2/(1+\beta^2)$, mientras los autovalores $\tilde{E}_r(m,s)$ $\tilde{H}_r$ se pueden encontrar numéricamente resolviendo la ecuación de onda 1D:

$$-\frac{1+\beta^2}{\beta^2}\frac{\partial^2 f_{ms}(\varphi)}{\partial\varphi^2} + \frac{2\tau R}{\sqrt{(1-\beta)^2 + 4\beta\, sen^2\,\varphi/2}} f_{ms}(\varphi) = \tilde{E}_r(m,s) f_{ms}(\varphi) \qquad (1.12)$$

en la región $[0, 2\pi]$ con condiciones de frontera periódicas $f_{ms}(0) = (-1)^m f_{ms}(2\pi)$. Los números cuánticos (M, m, s) tienen el mismo significado físico establecido anteriormente en el estudio del par e-e en un anillo.

Los resultados de nuestro cálculo numérico, obtenidos mediante la técnica de barrido trigonométrico [80] para el estado singlete $(0,0,+)$ y el estado triplete $(0,2,-)$ y para dos diferentes valores de β muy cercanos a la unidad: 0.8 y 0.95, se muestran en la figura 1.4. Se puede ver como nuestros resultados consistentemente se acercan al valor reportado en la referencia [74], a medida que el valor de β se tiende a uno.

También se puede ver que las energías de ambos niveles en anillos concéntricos, siempre está por encima de la energía obtenida para un sólo anillo. Esto se debe a que la mayor separación posible de dos electrones en anillos concéntricos, $(1+\beta)R$, siempre es menor que el valor de $2R$ correspondiente al caso de dos electrones en un sólo anillo.

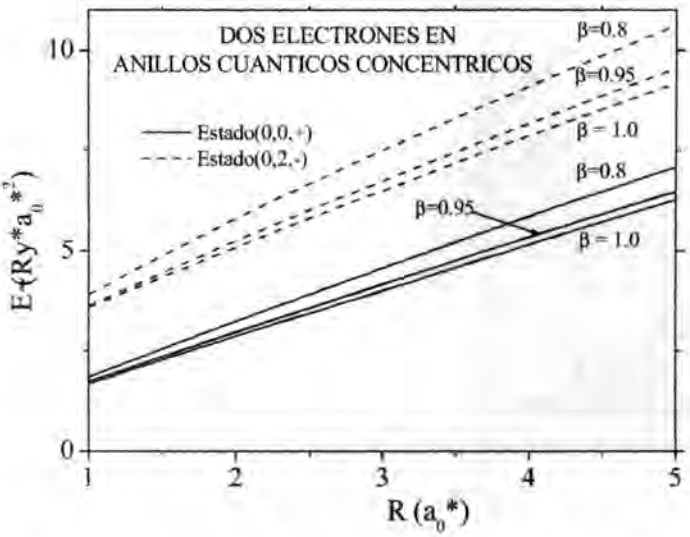

Figura 1. 4. Energías normalizadas $\tilde{E}(0,0,+)$ *y* $\tilde{E}(0,2,-)$ *en función del radio, para dos electrones en dos anillos cuánticos coaxiales con diferentes razones* β *entre los radios interior y exterior. Las líneas para* $\beta = 1$ *corresponden a la referencia [74] y las líneas para* $\beta = 0.8$ *y* $\beta = 0.95$ *son los resultados obtenidos en esta tesis.*

En la figura 1.5 se muestra la variación con el radio R de los niveles de energía correspondientes a los estados singlete más bajos, tanto para el electrón-hueco (parte izquierda) como del para el electrón-electrón (parte derecha), calculados tomando un valor de $\beta = 0.95$. Cuando el radio exterior se incrementa desde cero hasta $10\,a_0^*$ los efectos de tamaño cuántico modifican el ordenamiento de los niveles produciendo cruces de algunos niveles. En la figura 1.5 se ve que la interacción Coulombiana es importante cuando el confinamiento es pequeño $(R \to \infty)$ donde los niveles forman grupos que son muy diferentes a los grupos típicos para fuerte confinamiento $(R \to 0)$. En el primer caso, el término dominante en el Hamiltoniano (1.10) es el Coulombiano y por lo tanto, los grupos están formados por los niveles con los mismos valores del momentum angular relativo m, mientras en el segundo caso, el término de interacción Coulombiana se hace despreciable y los estados de energía normalizados tienden al valor $M^2/(1+\beta^2)+(1+\beta^2)m^2/\beta^2$.

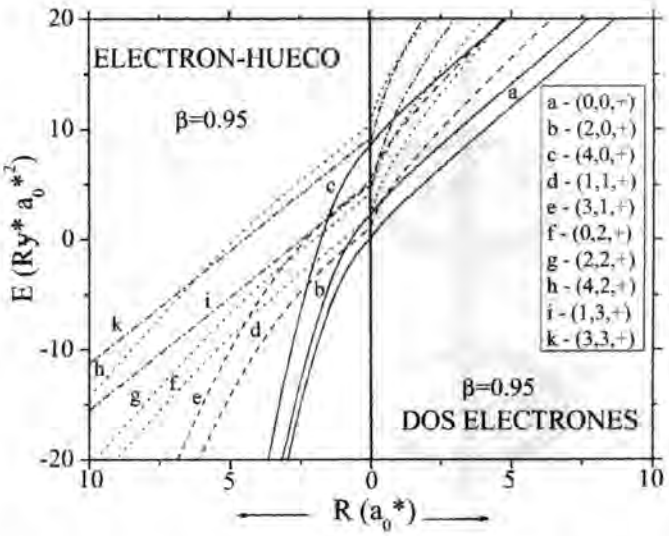

Figura 1.5. Dependencia con el radio R de los estados pares de energía más bajos del par electrón-hueco (lado izquierdo) y del par electrón-electrón (lado derecho) en anillos cuánticos coaxiales con razón $\beta = 0.95$

1.3 TRIONES X^- Y X^+ EN ESTRUCTURAS UNI DIMENSIONALES AXIALMENTE SIMÉTRICAS

Los modelos bi-particulares en anillos cuánticos concéntricos y acoplados verticalmente que hemos estudiado en las últimas dos secciones, se pueden ampliar para incluir una tercera partícula sin que se pierda el carácter de separabilidad del nuevo Hamiltoniano tri-particular. Estos nuevos modelos consisten de dos electrones (o dos huecos) que están rotando dentro de dos anillos coaxiales idénticos y verticalmente acoplados. La tercera partícula es un hueco (o electrón) que se mueve dentro de un hilo muy estrecho dirigido a lo largo del eje común, tal como se muestra esquemáticamente en la figura 1.6.

Dado que desde el punto de vista matemático y computacional el análisis es el mismo para ambos sistemas, nosotros sólo describiremos el caso del trión X^-, sistema compuesto por dos electrones de masas m_e^* y un hueco de masa m_h^*. El análisis del trión X^+ también se realizó y los resultados de este trabajo se encuentran publicados en la referencia [98].

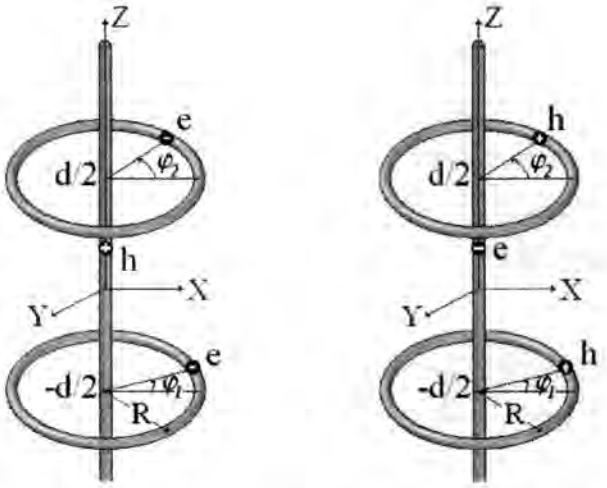

Figura 1.6 Representación esquemática de dos sistemas uni-dimensionales formados por dos electrones y un hueco (trión X^-) y dos huecos y un electrón (trión X^+)

El Hamiltoniano renormalizado para este sistema se puede escribir como:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_h(z) + \tilde{H}_{ee}(\varphi_1, \varphi_2);\ \tilde{H}_h = -\eta\partial^2/\partial\tilde{z}^2 - 2R/\tilde{r}_+ - 2R/\tilde{r}_-;$$
$$\tilde{r}_\pm = \sqrt{1+(\beta/2 \pm \tilde{z})^2}; \qquad (1.13)$$
$$\tilde{H}_{ee} = -\partial^2/\partial\varphi_1^2 - \partial^2/\partial\varphi_2^2 + 2R/\tilde{r}_{12};\ \tilde{r}_{12} = \sqrt{\beta^2 + 4sen^2\left((\varphi_1 - \varphi_2)/2\right)}$$

donde $\beta = d/R$, $\tilde{z} = z/R$ y $\eta = m_e^*/m_h^*$. Nótese que el Hamiltoniano (1.13) se separa en dos términos. El primero de ellos corresponde al Hamiltoniano del par e-e en anillos acoplados verticalmente y cuyos autovalores de energía, $\tilde{E}_c(M)$ y $\tilde{E}_r(m,s)$, ya se obtuvieron en la sección 1.1. El segundo término describe el movimiento del hueco a lo largo del hilo y sus autovalores deben obtenerse a partir de la solución de la ecuación de onda unidimensional

$$-\eta\frac{d^2 g_{n,p}(\tilde{z})}{d\tilde{z}^2} - V_z(\tilde{z})\,g_{n,p}(\tilde{z}) = \tilde{E}_z(n,p);$$
$$V_z(z) = \frac{2R}{\sqrt{1+(\beta/2+\tilde{z})^2}} + \frac{2R}{\sqrt{1+(\beta/2-\tilde{z})^2}} \qquad (1.14)$$

Dado que tanto el potencial (1.8) como el potencial $V_z(z)$ presente en (1.14) son pares, entonces las autofunciones

$\psi_{M,m,s,n,p}(\varphi_1,\varphi_2,z)=\exp(iM\theta)f_{m,s}(\varphi)g_{n,p}(z)$ del Hamiltoniano (1.13) tienen una paridad definida. El conjunto de soluciones pares de $f_{m,s}(\varphi)$ corresponden al estado singlete $(s=0)$ y el conjunto de soluciones impares $f_{m,s}(\varphi)$ corresponden al estado triplete $(s=1)$. Las funciones de onda del electrón, $g_{n,p}(z)$ son pares si $p=+$ e impares si $p=-$. La ecuación (1.14) se solucionó numéricamente usando el el método de barrido trigonométrico [80].

A fin de facilitar la interpretación de los resultados de cálculo, en la figura 1.7 se ha graficado el potencial $V_z(\tilde{z})$ para anillos de $R=4a_0^*$ y diferentes separaciones d. En esta figura se puede ver que para pequeñas separaciones, las curvas de potencial tienen un solo mínimo en el punto medio de separación entre los anillos, mientras para separaciones más grandes que $2R$ el potencial tiene dos mínimos, lo cuales se localizan en el plano de cada anillo. Por lo tanto, se podría esperar una transición del estado base con simetría $(p=+)$, con hueco localizado alrededor de $z=0$ a otro estado antisimétrico $(p=-)$, cuando el hueco se localiza cerca del plano de cada anillo. En la Tabla 1.2 se muestra el conjunto de números cuánticos (M,m,s,n,p) para los cuales se ha calculado la energía $\tilde{E}(M,m,s,n,p)$ del sistema tri-particular.

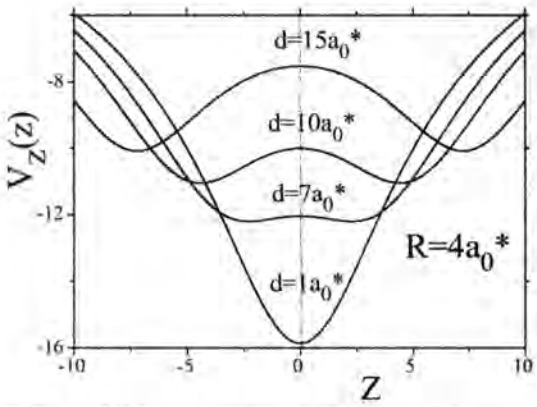

Figura 1. 7. Curvas de potencial $V_z(\tilde{z})$ para diferentes separaciones entre anillos

	(M,m,s,n,p)		(M,m,s, n,p)
a	(0,0,0,0,+)	e	(0,0,0,0, -)
b	(1,1,1,0,+)	f	(1,1,1,1, -)
c	(0,2,1,0,+)	g	(0,2,1,1, -)

Tabla 1.2 Notación usada para los diferentes niveles

En la figura 1.8 se muestran los resultados de cálculo de los 6 niveles de energía normalizados más bajos, en función del radio R para una distancia entre anillos de $d = 20a_0^*$.

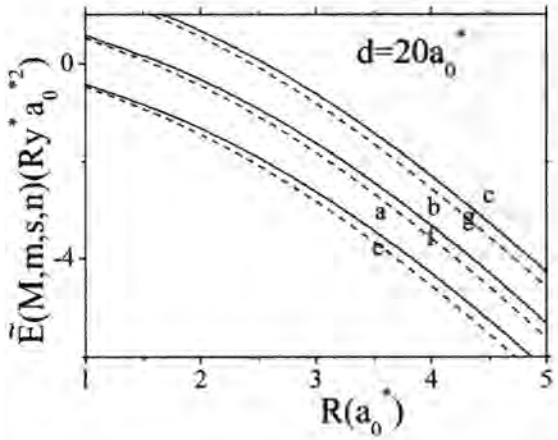

Figura 1.8. Energía normalizada $\tilde{E}(M,m,s,n,p)$ en función del radio de los anillos

Para esta gran separación, la curva $V_z(\tilde{z})$ tiene dos mínimos y por tanto, los niveles con $(p=-)$, correspondientes a estados antisimétricos no ligados (líneas punteadas) tienen niveles de energía más bajos que los correspondientes a estados simétricos ($p=+$, líneas continuas). Para explicar el comportamiento de estas curvas, se debe tener en cuenta que el término de energía cinética no incluye al radio como parámetro, mientras que la energía potencial es proporcional a R. Por lo tanto, cuando el radio es muy pequeño, el movimiento relativo está débilmente correlacionado y ellos se comportan de manera similar a un sistema de muchas partículas en fase gaseosa. Cuando el radio del anillo aumenta, la pendiente de la curva de energía crece lentamente hasta llegar a ser constante, haciendo que el movimiento de las partículas lleguen a estar fuertemente correlacionado. La última parte de la curva con pendiente constante, corresponde al caso del movimiento de partículas casi congeladas, las cuales adoptan una configuración similar a un cristal de Wigner [34].

En la figura 1.9 se presenta la energía normalizada en función de la separación d entre los anillos de radios $R = 4a_0^*$. Se ve que cuando la separación entre anillos es pequeña los estados simétricos ligados tienen energías más bajas que los correspondientes estados antisimétricos no ligados, pero este orden se invierte para $d > 10a_0^*$. En este punto de inflexión la pendiente de la curva se cambia, hecho que indica la existencia de una variación brusca en la simetría del cristal de Wigner.

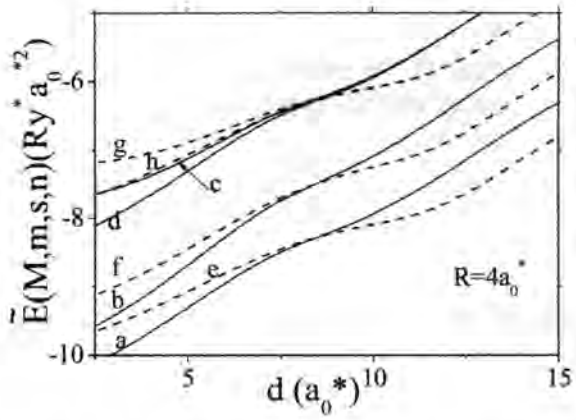

Figura 1.9. Energía normalizada $\tilde{E}(M,m,s,n,p)$ en función de la separación entre anillos

1.4 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

En las secciones anteriores se estudiaron modelos exactamente solubles sobre la base de una expansión en series y del barrido trigonométrico, los cuales permitieron analizar el espectro energético de dos electrones en un anillo [74], en anillos concéntricos [93] y verticalmente acoplados [91], y también se pudo extender estos modelos al caso de tres partículas [98].

Estudios estructurales sobre puntos cuánticos auto-ensamblados con topología de anillo, han demostrado que el radio exterior de estos QR oscila entre 30 y 70nm y el interior tiene un valor de 10nm mientras que su altura varía entre 2 y 4nm [50]. Esta evidencia experimental deja claro que los modelos de QR 1D con barrera de potencial infinita e infinita razón entre el radio y el ancho del QD, sólo sirven como punto de partida para analizar el espectro energético de sistemas de pocas partículas en QR más reales, que tengan en cuenta el tamaño de éste y el carácter finito del potencial de confinamiento, el cual está intrínsicamente determinado por las brechas de energía de los materiales que forman el QR.

Una manera adecuada de calcular el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en SAQDs, sin dejar de lado la incidencia de la morfología y el tamaño del QD, se basa en el uso de la Aproximación Adiabática, la cual ha sido amplia y exitosamente usada en el análisis de muchas problemas de mecánica cuántica [113]. Un análisis breve de la ecuación Schrödinger, nos ayudará a convencernos de la validez de esta aproximación en el análisis del espectro de pocas partículas en QDs con espesores muy pequeños. Sin pérdida de generalidad, consideremos el caso de una

donadora neutra D^0 confinada dentro de un QD con simetría axial, de altura máxima d_0 y radio de la base R_e, así como los mostrados en la figura I.5.

El Hamiltoniano adimensional uniparticular en la aproximación de masa efectiva para esta donadora neutra se puede escribir como:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = -\nabla^2 + V(\rho, z) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \xi|} \tag{1.15}$$

Los vectores $\xi = (\xi_\rho, \xi_z)$ y $\mathbf{r} = (\rho, z)$ describen las posiciones del ion y del electrón. El potencial de confinamiento $V(\rho, z)$, que surge de la discontinuidad en la banda de conducción de los dos materiales que forman la heterojuntura del QD, es igual a:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0, \; si \;\; 0 < z < d(\rho) \; y \;\; 0 < \rho < R_e \;\; (Dentro \; del \; QD) \\ V_0, \; si \; z < 0 \;\; y \;\; z > d(\rho) \;\; y \;\; \rho > R_e \;\; (Fuera \; del \; QD) \end{cases} \tag{1.16}$$

La ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano (1.16) no es completamente separable, pues la presencia del potencial de confinamiento y del potencial Coulombiano no lo permiten. Por lo tanto, no se conoce una solución exacta, aun ni para la situación más simple, la cual corresponde al estado base de un electrón no sujeto a la interacción Coulombiana. No obstante, para encontrar los autovalores de la energía se puede sacar provecho de las características experimentales de los SAQDs que demuestran que el espesor es mayor que el radio $(d_0 >> R_e)$, pues bajo esta condición será posible hacer uso de la AA. Para iniciar se realizará un "rescalamiento" de las coordenadas que aparecen en la ecuación de onda con Hamiltoniano (1.15) de tal manera que los desplazamientos en dirección radial ρ y a lo largo del eje Z lleguen a ser del mismo orden, para ello se hará la siguiente sustitución:

$$z = d_0 \tilde{z} \;\; y \;\; \rho = R_e \tilde{\rho} \tag{1.17}$$

Bajo esta transformación se puede ver que el movimiento electrónico se limita a la región $0 < \tilde{\rho}, \tilde{z} < 1$. En las nuevas coordenadas, la ecuación de Schrödinger para el D^0 con Hamiltonia (1.15) se puede escribir de la siguiente forma:

NC 525348

$$-\frac{1}{d_0^2}\frac{d^2 f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})}{dz^2}-\frac{1}{R_e^2}\nabla_{\tilde{\rho}}^2 f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})+V_{eff}(\rho,z,\xi)f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})=E_0 f_0(\tilde{\rho},\tilde{z}) \tag{1.18}$$

$$V_{eff}(\rho,z,\xi)=\tilde{V}(\tilde{\rho},\tilde{z})-\frac{2}{|\mathbf{r}-\xi|}$$

La ecuación de Schrödinger (1.18) con función de onda monoelectrónica $f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})$ tiene un aspecto similar a la ecuación que describe un átomo hidrógeno libre [113]. En nuestro caso, la ecuación (1.18) se puede interpretar como si describiera dos partículas que interactúan a través del potencial $V_{eff}(\rho,z,\xi)$, donde una de ellas, la que fungiría como electrón en el caso de la comparación con el átomo de hidrógeno, tiene un movimiento unidimensional y se desplaza a lo largo del eje Z con una masa d_0^2 y su energía cinética está dada por el primer término de la ecuación (1.18), mientras la segunda de masa R_e^2 , la cual haría las veces del núcleo, está restringida a moverse en el plano X-Y y su energía cinética corresponde al segundo término de la ecuación (1.18). Al ser $R_e >> d_0$, resulta obvio que estamos frente al caso de dos partículas, una ligera con energía cinética $\frac{1}{d_0^2}\frac{d^2 f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})}{dz^2}$ mucho mayor que la energía cinética de la partícula pesada $\frac{1}{R_e^2}\nabla_{\tilde{\rho}}^2 f_0(\tilde{\rho},\tilde{z})$. Para este tipo de situación, en la teoría de la mecánica cuántica se ha establecido un proceso de solución conocido como *aproximación adiabática* [113] cuyos resultados están acordes con la experimentación.

El proceso consiste en congelar momentáneamente el movimiento de la partícula masiva para analizar el movimiento de la partícula ligera a lo largo del eje Z, manteniendo a la variable ρ en el plano X-Y como un parámetro del cual dependerá la energía. La ecuación de Schrödinger para esta partícula ligera puede escribirse como:

$$-\frac{d^2 f_z(\rho,z)}{dz^2}+V(\rho,z)f_z(\rho,z)-\frac{2}{|\mathbf{r}-\xi|}=E_z(\rho)f_z(\rho,z) \tag{1.19}$$

Una vez se obtenga el autovalor de la energía $E_z(\rho)$, bien sea de manera analítica, si fuera posible, o numéricamente, se reemplaza en la ecuación de Schrödinger que describe el movimiento de la partícula pesada, es decir, se descongela su movimiento para determinar cual es el aporte que hace a la energía total del sistema. La ecuación que se obtiene es:

$$-\nabla_{\rho}^{2} f_{\rho}(\rho) + E_z(\rho) f_{\rho}(\rho) = E_0 f_{\rho}(\rho) \qquad (1.20)$$

donde es claro que la función de onda completa es $f_0(\mathbf{r}) = f_{\rho}(\rho) f_z(\rho, z)$. Nótese que al escribir las ecuaciones (1.19) y (1.20) se regresó a las coordenadas originales, pues las coordenadas (1.17) sirvieron sólo temporalmente para hacer una interpretación y justificar la validez de la AA. Esta aproximación será usada a lo largo de la presente tesis en el análisis de diferentes tipos de sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en QDs, iniciando nuestro estudio con dos electrones en un QR, ya que las mediciones sobre estos sistemas garantizan que su radio exterior es mucho mayor que la altura.

1.5 EFECTO DEL TAMAÑO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS ELECTRONES EN ANILLO CUÁNTICO.

En el análisis del espectro energético de dos electrones en un QR de $In_{0.55}Al_{0.45}As$-$Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, altura d_0 y radio interior y exterior, R_i y R_e respectivamente, se asume que estos parámetros geométricos satisfacen la condición experimental definida a través de la desigualdad $d_0/R_e << 1$. En la figura 1.10 se ha hecho una representación esquemática del anillo y del potencial de confinamiento al cual están sometidos los dos electrones. Las posiciones de los electrones $\mathbf{r}_1 = (\boldsymbol{\rho}_1, z_1)$ y $\mathbf{r}_2 = (\boldsymbol{\rho}_2, z_2)$ se miden respecto del centro del QR y los vectores $\boldsymbol{\rho}_1$ y $\boldsymbol{\rho}_2$ se localizan en el plano X-Y.

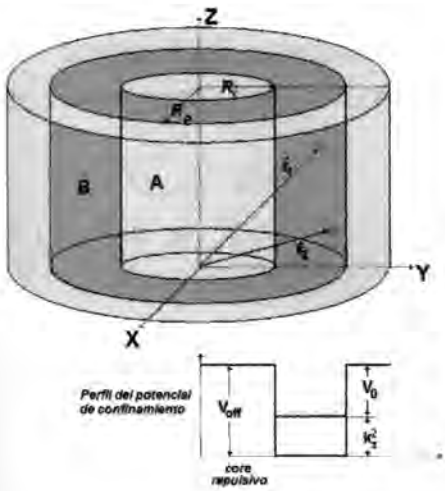

Figura 1.10. Geometría para dos electrones confinados en un QR donde el material A es $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ y el material B es $In_{0.55}Al_{0.45}As$. En la parte inferior se puede observar el perfil de la BC de estos dos materiales.

La región central del anillo, conocida como núcleo o "core" repulsivo, es responsable de la existencia de modificaciones sustanciales del espectro energético en comparación con el disco cuántico. Para el sistema específico bajo estudio, la discontinuidad en el fondo de la BC de los dos materiales que constituyen el QR, da lugar a una diferencia de potencial de, V_{off} de 258 meV. Ya que las mediciones experimentales realizadas sobre QRs garantizan que se satisface la condición $d/R_e << 1$, entonces de acuerdo a lo estudiado en la sección 1.4 se puede usar la AA para desacoplar el movimiento transversal del paralelo a Z. Adicionalmente, Price, Zhu y Das Sarma [114], demostraron que el problema 3D para dos electrones confinados en un QD, se puede aproximar, con un alto grado de confiabilidad, a un problema 2D, en donde la energía potencial de interacción electrón-electrón adimensional se puede reemplazar por el término $2/\sqrt{0.04d^2+\rho_{12}{}^2}$ de tal manera que el nuevo potencial V_0 se puede escribir como: $V_0 = V_{off} - k_z^2(d, V_{off})$, donde $k_z^2(d, V_{off})$ es el nivel energético más bajo que se puede formar en el pozo rectangular de altura d y barrera de potencial V_{off}.

El Hamiltoniano adimensional resultante en 2D, en la aproximación de masa efectiva y usando coordenadas polares, está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\boldsymbol{\rho}_1) + \hat{H}_0(\boldsymbol{\rho}_2) + \frac{2}{\sqrt{0.04d^2 + |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|^2}}$$
$$\hat{H}_0(\rho) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + V(\rho) \qquad (1.21)$$

El potencial de confinamiento renormalizado, $V(\rho)$ es una función seccionalmente constante definida como:

$$V(\rho) = \begin{cases} V_0, & si \quad \rho < R_i \\ 0, & si \quad R_i < \rho < R_e \\ V_0, & si \quad \rho > R_e \end{cases} \qquad (1.22)$$

Si bien existen efectos de anisotropía y de discontinuidad de la masa efectiva entre los dos materiales que se utilizan para fabricar el QD, éstos no serán tenidos en cuenta, pues su efecto sobre el espectro energético es relativamente bajo en comparación con el aporte generado por la interacción Coulombiana. Por lo dicho anteriormente y por simplicidad matemática, se asumirá que las masas efectivas del electrón, tanto en el pozo como en la barrera son iguales. El valor que se adopte en los cálculos será el que ellos

tomen en el sistema de $In_{0.55}Al_{0.45}As$, para el cual la masa efectiva es $0.076 m_0$ y la permitividad de 12.71. Con estos valores el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo son $8.86 nm$ y $6.40 meV$, respectivamente.

Antes de embarcarnos en la solución de la ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano (1.21), obtengamos la solución de esta ecuación para el caso de un electrón:

$$\hat{H}_0(\vec{\rho}) f_{n,m}(\vec{\rho}) = E_0(n,m) f_{n,m}(\vec{\rho}); \quad f_{n,m}(\vec{\rho}) = e^{im\varphi} R_{n,m}(\rho) \tag{1.23}$$

Donde n y m representan los números cuánticos radial y orbital. La función de prueba es el producto de dos funciones, una que contiene la parte angular y la otra que depende de la coordenada radial, lo cual puede obtenerse en forma analítica a partir de una combinación de diferentes funciones de Bessel. El espectro energético para el electrón se presenta en la figura 1.11.

Como puede observarse, los niveles correspondientes al mismo número cuántico radial (n =1,2) y diferente momentum angular, están agrupados en una serie de conjuntos de subniveles. Nótese como los subniveles pertenecientes al mismo conjunto (n=1 o n=2) están muy cerca y las diferencias energéticas entre ellos no son mayores de $0.03 R_y^*$, mientras que la diferencia entre los conjuntos n = 1 y n = 2 es realmente grande, pues la separación llega a alcanzar un valor del orden de $2.5 R_y^*$.

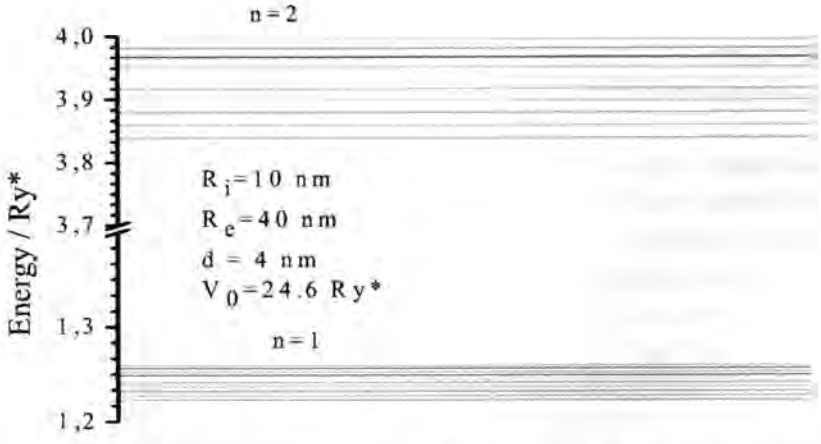

Figura 1.11 Niveles de energía para un electrón con número radial n = 1 y diferentes valores del número cuántico orbital.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLIN
DEPTO. DE BIBLIOTECA
BIBLIOTECA "LEO"

En la figura 1.12 se han graficado algunas funciones de onda para n = 1 y 8 diferentes valores de m. Se puede observar como la función de onda tunela más la región $\rho > R_e$ que en la región asociada al núcleo repulsivo $(0 < \rho < R_i)$.

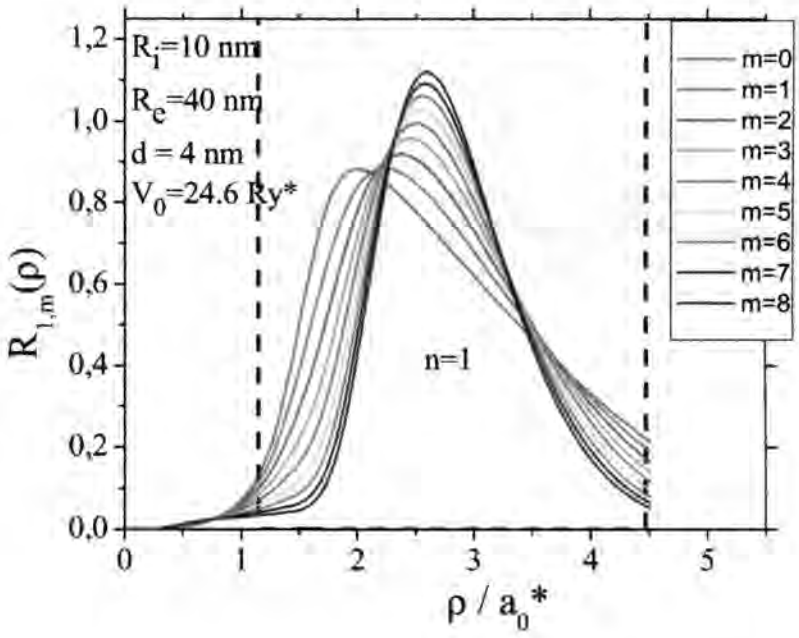

Figura 1.12 Funciones de onda para los estados con número radial n = 1 y número cuántico orbital entre 1 y 8.

Aun cuando no se muestra en la gráfica, es necesario manifestar que este efecto es fuertemente dependiente de la altura de disco, encontrándose que a menor d mayor es el confinamiento y mayor es la probabilidad de desbordamiento de la función de onda a través de la barrera de potencial.

Al introducir el segundo electrón en el QR, la interacción electrón-electrón hace que se produzca una mezcla de los estados uni-electrónicos del mismo conjunto, pero la mezcla entre subniveles de grupos diferentes es despreciable. Esto pone de manifiesto que los estados más bajos para el sistema de dos electrones se forma a partir de la mezcla entre los subniveles con el mismo número cuántico radial n = 1. Lo anterior se hace más evidente en la medida que el radio interior sea más grande y más pequeño llegue a ser el espesor del QR, pues la separación entre conjuntos de subniveles es más grande. A partir de la figura 1.12 también se puede ver que la parte radial de la función de onda uni-particular, $R_{1,m}(\rho)$ para los diferentes números cuánticos m, tienen una forma similar, de tal manera que al momento de realizar los cálculos variacionales para el sistema de dos electrones confinados en el QR, todas ellas se puedan aproximar a la misma

parte radial de la función de onda con m = 0 $\left(R_{1,0}(\rho)\right)$. Por esta razón, para calcular los estados más bajos del sistema bi-electrónico se propone una función de prueba del tipo:

$$\psi(\boldsymbol{\rho}_1,\boldsymbol{\rho}_2)=R_{1,0}(\rho_1)R_{1,0}(\rho_2)\Phi(\varphi_1,\varphi_2) \tag{1.24}$$

La función variacional $\Phi(\varphi_1,\varphi_2)$ describe el movimiento angular del sistema bi-electrónico correspondiente a un momentum angular diferente. Esta función que se determinará numéricamente, satisface una ecuación diferencial de segundo orden que para ser establecida se utilizará el principio variacional de Schrödinger, el cual establece que la autofunción del Hamiltoniano debe minimizar la funcional siguiente:

$$F[\Phi]=\langle\psi|H-E|\psi\rangle \tag{1.25}$$

Teniendo presente que $H_0(\rho_i)R_{1,0}(\rho_i)=E_0(1,0)R_{1,0}(\rho_i)$, al sustituir (1.21) y (1.24) en (1.25) y después de integrar por partes se obtiene la siguiente expresión para la funcional:

$$\begin{aligned}F[\Phi]=&2E_0(1,0)\left\langle R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)\right\rangle+\\&\left\langle R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\left(\nabla_1\Phi(\varphi_1,\varphi_2)\right)^2\right\rangle+\\&\left\langle R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\left(\nabla_2\Phi(\varphi_1,\varphi_2)\right)^2\right\rangle+\left\langle\frac{2R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)}{\sqrt{0.04d^2+\rho_1^2+\rho_2^2-2\rho_1\rho_2\cos(\varphi_1-\varphi_2}}\right\rangle-\\&\left\langle R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)\right\rangle E=I_1+I_2+I_3\end{aligned} \tag{1.26}$$

donde

$$I_1=\left\langle\left(2E_0(1,0)-E\right)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)\right\rangle$$

$$I_2=\left\langle\frac{2R_{1,0}^2(\rho_1)R_{1,0}^2(\rho_2)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)}{\sqrt{0.04d^2+\rho_1^2+\rho_2^2-2\rho_1\rho_2\cos(\varphi_1-\varphi_2}}\right\rangle=\left\langle\tilde{V}(\varphi_1-\varphi_2)\Phi^2(\varphi_1,\varphi_2)\right\rangle$$

$$\tilde{V}(\varphi_1-\varphi_2)=8\pi^2\int_0^\infty\rho_1R_{1,0}^2(\rho_1)d\rho_1\int_0^\infty\frac{\rho_2R_{1,0}^2(\rho_2)}{\sqrt{0.04d^2+\rho_1^2+\rho_2^2-2\rho_1\rho_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)}}d\rho_2 \tag{1.27}$$

$$I_3=\frac{1}{I}\left\langle\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_1}\right)^2+\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_2}\right)^2\right\rangle;\ \frac{1}{I}=2\pi\int_0^\infty\rho R_{1,0}^2(\rho)d\rho$$

Luego la funcional puede escribirse de manera compacta así:

$$F[\Phi]=\left\langle \left[\left\{2E_0(1,0)-E\right\}+\tilde{V}(\varphi_1-\varphi_2)\right]\Phi^2(\varphi_1-\varphi_2)+\frac{1}{I}\left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_1}\right)^2+\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_2}\right)^2\right]\right\rangle \quad (1.28)$$

La Lagrangiana para nuestro sistema es:

$$L=\left[\left\{2E_0(1,0)-E\right\}+\tilde{V}(\varphi_1-\varphi_2)\right]\Phi^2(\varphi_1-\varphi_2)+\frac{1}{I}\left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_1}\right)^2+\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_2}\right)^2\right] \quad (1.29)$$

A partir de la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial\Phi}-\sum_{i=1}^{2}\frac{d}{d\varphi_i}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{\Phi}_i}\right)=0 \;\; con \;\; \dot{\Phi}_i=\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_i} \quad (1.30)$$

se obtiene la ecuación para $\Phi(\varphi_1-\varphi_2)$:

$$-\frac{1}{I}\left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_1}\right)^2+\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi_2}\right)^2\right]+\tilde{V}(\varphi_1-\varphi_2)\Phi(\varphi_1-\varphi_2)=\left\{E-2E_0(1,0)\right\}\Phi(\varphi_1-\varphi_2) \quad (1.31)$$

Esta última ecuación se puede separar usando coordenadas de movimiento de centro de masa y relativas:

$$\vartheta=(\varphi_1+\varphi_2)/2 \;\; y \;\; \varphi=(\varphi_1-\varphi_2) \quad (1.32)$$

de tal manera que la función de onda

$$\Phi(\vartheta,\varphi)=e^{jM\vartheta}u(\varphi); \quad (1.33)$$

nos permite re-escribir la ecuación (1.31) de la siguiente manera:

$$u''(\varphi)+\left\{ I\left[\frac{E}{2}-E_0(1,0)-\frac{\tilde{V}(\varphi)}{2}\right]-\frac{M^2}{4}\right\}u(\varphi)=0 \quad (1.34)$$

$$con \;\; -2\pi<\varphi<2\pi \;\; y \;\; 0<\vartheta<2\pi$$

Nótese que el potencial de la ecuación (1.31) es par, por lo tanto, existen dos grupos de soluciones, una par con $u(-\varphi)=u(\varphi)$, la cual corresponde a los estados singletes y otra impar con $u(-\varphi)=-u(\varphi)$correspondiente a los estados tripletes. De acá en adelante sólo se considerarán los estados

singletes, para los cuales también podría agregarse la siguiente condición periódica [74] $u(\varphi \pm 2\pi) = (-1)^M u(\varphi)$ que permite considerar el problema de autovalores (1.13) únicamente dentro de la región $0 < \varphi < 2\pi$ con la condición de frontera $u'(0) = u'(2\pi) = 0$. Las soluciones de este problema, son las funciones de onda $u(\varphi) = u_{M,m}(\varphi)$ y las energías, $E = E(M,m)$ que dependen de dos números cuánticos, el momentum angular del centro de masa M y momentum angular relativo m. La solución de este problema se realizó mediante el método numérico de barrido trigonométrico [80].

Con el propósito de establecer la precisión del procedimiento numérico utilizado, lo primero que se hizo fue obtener las energías de los estados más bajos en el caso límite en que la altura del QR tiende a cero y la barrera de potencial se hace tender a infinito. En todos los casos se encontró una muy buena concordancia con los resultados presentados en la referencia [74].

Los resultados de cálculo para la energía se presentan en las figuras 1.13 y 1.14, las cuales han sido obtenidas para los niveles de energía correspondientes a los estados singletes $E(M,m)$ de los dos electrones en el QR de $In_{0.55}Al_{0.45}As$-$Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con diferentes valores del radio interior, R_i , del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d. De la misma manera que se hizo en las secciones anteriores, se graficó una energía normalizada que se define como:
$\tilde{E}(M,m) = \left[E(M,m) - 2E_0(1,0)\right] R_0^2$ con $R_0 = (R_i + R_e)/2$.

En la figura 1.13 se muestran las energías de algunos de los estados más bajos en función del radio interior, para valores fijos de la altura y del espesor. En el primer caso (Fig. 1.13*a*) estas dos cantidades se toman de valor 2nm y en el segundo caso (Fig. 1.13*b*) se hacen iguales a 4nm y 5 nm, respectivamente. Como se puede apreciar en ambas figuras, el nivel correspondiente al estado base $\tilde{E}(0,0)$, siempre se encuentra separado de los otros niveles, independientemente del valor que tome el radio interior de QR. Para los otros niveles, a consecuencia de la fuerte interacción electrón-electrón, se pueden observar cruces entre las curvas, lo que da lugar a un cambio en el orden en que se distribuyen los niveles. Esta situación es más evidente cuando los electrones fuertemente confinados, como es el caso del QR con altura y espesor pequeño. Adicionalmente, a partir de la figura 1.13*a* se puede observar que para pequeños valores del radio interior, los estados correspondientes al mismo valor de M y diferente m son degenerados, debido a que en estos casos la rotación relativa no hace ninguna contribución a la energía total del sistema bi-electrónico.

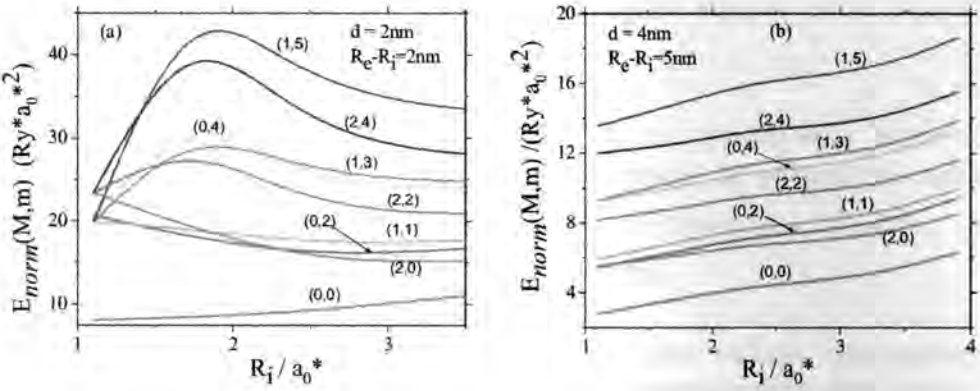

Figura 1.13 Energías normalizadas para algunos estados singletes de dos electrones en un QR en función del radio interior R_i. Las curvas se construyen para dos valores diferentes del espesor, $R_e - R_i$ y de la altura d. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía E(M,m).

Una situación bien diferente ocurre para grandes valores del radio interior, donde la contribución debida a la rotación del centro de masa es insignificante y por lo tanto, los niveles con los diferentes valores de M e iguales valores de m tienden a los mismos valores de la energía total, así como lo muestran los cruces de las curvas en la figura 1.13*a*. Como se puede apreciar en la figura 1.13*b*, cuando el espesor y la altura del QR aumentan los cruces disminuyen y casi desaparecen por completo. La mayor diferencia entre estas dos curvas se debe a los valores que toman las alturas de las barreras de potencial renormalizadas, pues en el primer caso es $12.6\,R_y^*$, mientras que para el segundo caso es casi del doble ($24.6\,R_y^*$). Como consecuencia de este hecho, los efectos asociados al desbordamiento de la función de onda en las regiones de la barrera, es más grande en el primero de los casos $(d = 2nm)$ debido al fuerte confinamiento, mientras que llega a ser insignificante para el QR con $d = 4nm$. Para este último caso las curvas se hacen muy similares a las obtenidas en el modelo 1D con barrera de potencial de altura infinita.

En general, las curvas de la figura 1.13*a* se pueden dividir en dos grupos, el primero corresponde a los niveles más bajos, los cuales se caracterizan por poseer un mínimo y el segundo grupo corresponde a los niveles más altos, los cuales tienen tanto un mínimo como un máximo. La posición mínima se debe al efecto de desbordamiento de la función de onda dentro de la región del núcleo repulsivo $(0 < \rho < R_i)$, mientras que el máximo se debe al

desbordamiento de la función dentro de la región exterior de la barrera $(\rho > R_e)$.

En la figura 1.14 se presentan las energías de los estados más bajos en función del espesor del QR, $R_e - R_i$, para dos grupos de valores del radio interior y del espesor: $R_i = 10nm$ *y* $d = 2nm$ (fig. 1.14*a*) y $R_i = 20nm$ *y* $d = 4nm$ (fig. 1.14*b*), respectivamente.

Se puede ver a partir de ambas figuras, que para valores del espesor mayores de $8nm$ todas las curvas tienen un comportamiento muy similar, pero éste sufre una modificación notoria para valores pequeños del espesor y prueba de ello son los múltiples cruces que se logran apreciar en la figura 1.14*a*, mientras que las curvas de la figura 1.14*b* son casi paralelas. Se puede observar que para espesores mayores de $8nm$, las energías crecen monótonamente con el espesor, debido al crecimiento de la probabilidad de encontrar a los dos electrones al mismo lado del QR. Cuando el espesor del QR se hace menor que $8nm$, el comportamiento de las curvas de energía cambia drásticamente debido al incremento de la probabilidad de tunelamiento de los electrones en la región del núcleo repulsivo.

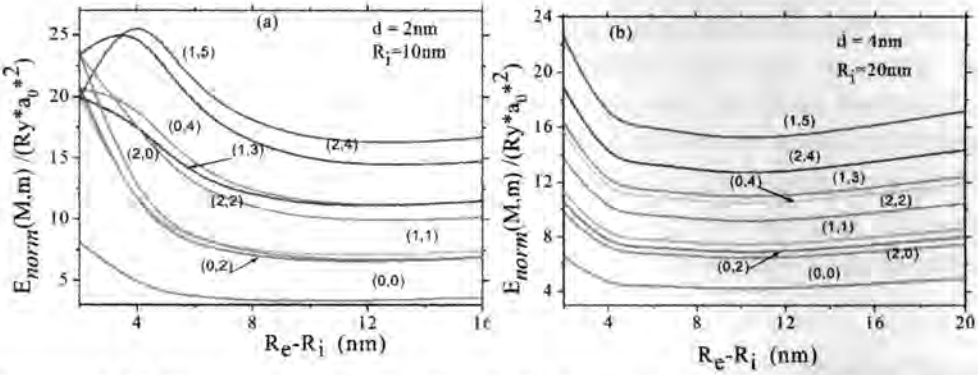

Figura 1.14 Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función del espesor del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y de la altura. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.

Cuanto más estrecho es el QR y más alto es el nivel energético de los electrones, mayor es la probabilidad de tunelamiento y más fuerte llega a ser la repulsión entre los electrones. Los picos asociados a las curvas $\tilde{E}(2,4)$ y $\tilde{E}(1,5)$) para un anillo de 4nm de espesor aproximadamente, deben estar asociados al desbordamiento de la función de onda hacia el exterior de la barrera.

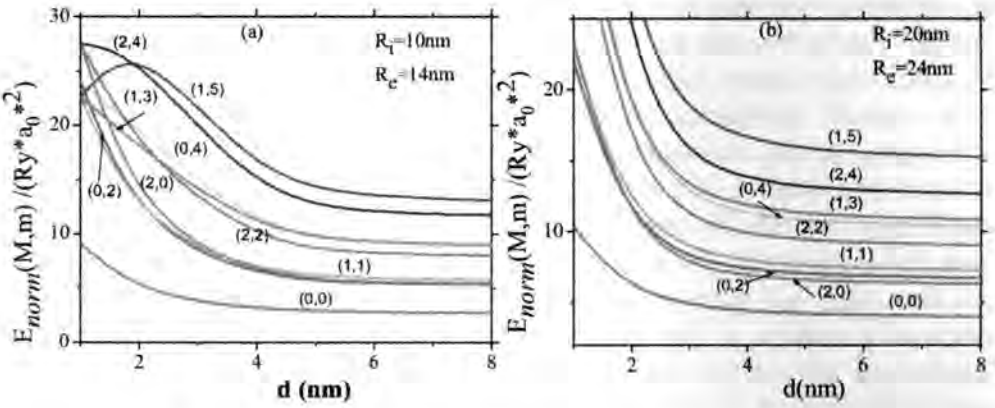

Figura 1.15 Energías normalizadas de la interacción electrón-electrón en función de la altura del QR para dos diferentes grupos de valores del radio interior y exterior. La notación (M,m) se ha utilizado para representar los niveles de energía $\tilde{E}(M,m)$.

Para finalizar esta sección, en la figura 1.15 se exhiben las curvas que describen el comportamiento de la energía del sistema bi-electrónico con la altura del QR para dos grupos de valores del radio interior y exterior: $R_i = 10nm$ y $R_e = 14nm$ (figura 1.15*a*) y $R_i = 20nm$ y $R_e = 24nm$ (figura 1.15*b*). Para la gran mayoría de las curvas se observa que la disminución del la altura produce un incremento de la energía del sistema bi-electrónico a consecuencia del fuerte confinamiento. Esto hace que aumente la probabilidad de tunelamiento de los electrones hacia la parte central del núcleo repulsivo, con lo cual se disminuiría la distancia promedio entre los electrones. En el caso particular de la energía $\tilde{E}(1,5)$ se presenta un pico de energía correspondiente a una altura aproximada del QR de $2nm$, lo cual viene a ser a una confirmación adicional del desbordamiento de la función de onda hacia el exterior.

1.6 EFECTO DEL TAMAÑO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN EXCITÓN EN UN PUNTO CUÁNTICO.

El estudio de las propiedades experimentales del par electrón-hueco en materiales semiconductores en el volumen, entraña una gran dificultad por que son muy inestables frente a la disociación, lo cual se debe a que tienen tiempos de vida muy cortos. No obstante, con el advenimiento de los sistemas de baja dimensionalidad esta dificultad se ha podido superar, gracias a que en condiciones de fuerte confinamiento, la energía de enlace se incrementa fuertemente a consecuencia de un mayor acercamiento entre el electrón y el hueco, lo cual conlleva a que el tiempo de vida de este sistema aumente bruscamente.

En el análisis del efecto de confinamiento sobre el espectro energético de los excitones confinados en QDs, se ha dedicado un gran esfuerzo e ingenio, en donde se han utilizado diferentes métodos, tales como variacional [5-115-116], diagonalización matricial [117-118], elementos finitos [119], dimensión fraccionaria [78] y otros métodos numéricos que se basan en la solución directa de las ecuaciones más relevantes [66]. Hasta ahora se han considerado entre otros modelos de confinamiento los de tipo: parabólico [118], Gaussiano [115], infinito [120], finito [5, 116]. La mayoría de estas técnicas se caracterizan porque es necesario realizar un gran esfuerzo computacional con el fin de obtener resultados que se ajusten a los datos experimentales, pero su precisión, como es el caso del método variacional, depende en gran medida de la correcta elección de la función de prueba. Adicionalmente, estos métodos parten del supuesto de que los QDs son de naturaleza bidimensional; es decir, dejan de lado los efectos relacionados con la altura del QD, lo cual no es cierto, ya que en la sección anterior se demostró que el tamaño influye notoriamente en espectro energético del par e-e y es de esperarse que lo mismo suceda con el par e-h. El objetivo fundamental en esta sección, será demostrar mediante el método de dimension fractal [79] y en el marco de la AA , que el potencial de confinamiento y el espectro energético del par e-h confinado en un QD con simetría axial, está fuertemente influenciado por el perfil y de la altura de éste. Por lo tanto, el QD que se adopte en el análisis debe ser muy flexible, de tal manera que al variar algunos parámetros geométricos se pueda obtener otros QDs que sean topológicamente equivalentes. Por esta razón, se utilizará un QD de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ -$Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ en forma de pirámide truncada, cuya forma se muestra en la figura 1.16. Los factores geométricos que describen este punto cuántico piramidal (QP) son el radio de la base, R_e, el radio de la parte superior, R_i, y la altura máxima d_o, donde la razón R_i/R_e es menor que la unidad. Esta razón puede tomar valores diferentes que nos sirven para describir otros tipos de puntos, por ejemplo, si $R_i/R_e = 1$ se tendrá un disco cuántico, mientras que si $R_i/R_e = 0$ se tiene un cono.

En los cálculos realizados se considera un modelo con discontinuidades en la BC de valor $V_e = 258meV$ y en BV de valor $V_h = 172meV$, pero con los mismos parámetros físicos en la barrera y en el pozo. En el sistema ternario de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ la constante dieléctrica es: $\varepsilon = 12.71$ y masas efectivas $m_e^* = 0.076m_0$, y $m_h^* = 0.45m_0$. El radio de Bohr y el Rydberg efectivo son iguales a $a_0^* = \hbar^2\varepsilon/\mu e^2 \approx 10.36nm$ y $R_y^* = e^2/2\varepsilon a_0^* \approx 5.47meV$, donde $\mu = m_e^* m_h^*/(m_e^* + m_h^*) \approx 0.065m_0$ representa la masa efctiva.

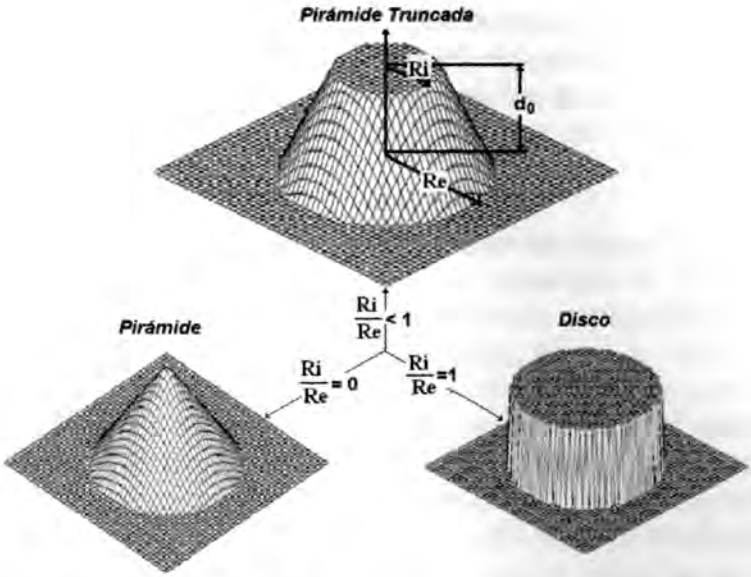

Figura 1.16. Tipos de puntos cuánticos axialmente simétricos que contienen un par electrón-hueco.

Una característica general de los QP de AlGaAs-InAlAs, es que la razón entre la altura máxima y el radio de la base es mucho menor que la unidad $(d_0/R_e << 1)$. Esta condición permite aplicar la AA a fin de desacoplar el movimiento longitudinal y transverso. Adicionalmente, el problema 3D para las partículas interactuantes en el QP, en un alto grado de precisión se aproxima a un problema 2D [57], en donde el potencial de confinamiento lateral se renormaliza tomando la siguiente forma:

$$V_i(\rho) = \begin{cases} V_i \ , \ para \ \rho > R_e \ \ (i = e,h) \\ E_z(\rho) \ , \ en \ cualquier \ otro \ caso \end{cases} \tag{1.35}$$

en donde $E_z(\rho)$ es la energía del nivel más bajo en el pozo cuántico con barrera de potencial V_i y altura $d(\rho)$ en el punto cuya distancia desde el eje de simetría es ρ.
El perfil que describe al QP es:

$$d(\rho) = \begin{cases} d_0, \ para \ \rho < R_i \\ d_0\left(1 - \dfrac{\rho - R_i}{R_e - R_i}\right), \ para \ R_i < \rho < R_e \\ 0, \ para \ \rho > R_e \end{cases} \tag{1.36}$$

Resulta evidente que cuánto más pequeña sea la altura de la pirámide, más baja se hace la altura de la barrera de potencial renormalizada, tanto para el electrón como para el hueco, lo cual pone de manifiesto que este modelo no es estrictamente bidimensional, pues en él se toma en cuenta el espesor transversal del punto.

Para calcular la energía del excitón, vamos a tener en cuenta el hecho bien conocido de que la masa efectiva del hueco en materiales de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ es mayor que la masa del electrón. Esta diferencia es significativamente importante en condiciones de fuerte confinamiento, ya que la mayor inercia del hueco lo torna más lento, mientras que el electrón por se más liviano puede orbitar alrededor del hueco. Esta circunstancia, permite usar la AA como punto de partida en nuestro análisis del espectro energía del excitón. El uso de la AA se requiere hacerlo en dos pasos. El primero, consiste en congelar el movimiento del hueco en un punto cuya posición en el plano del QP está dado por $\boldsymbol{\rho}_h$ y dejar temporalmente de lado el aporte de su energía cinética a la energía total del sistema. Bajo esta consideración, el problema del excitón se reduce al caso de una impureza donadora D^0 descentrada en un QP cuya energía $E_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_h)$ es función del parámetro $\boldsymbol{\rho}_h$. En el segundo paso, se calcula la energía del hueco, asumiendo que éste se encuentra confinado por un potencial de energía $E_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_h)$. Para realizar este cálculo, se requiere conocer las funciones de onda uni-particulares del electrón y del hueco, así como sus respectivas energías. Las funciones de onda para este par de partículas satisfacen la siguiente ecuación:

$$H_{0i}(\rho_i)\varphi_i(\rho_i) = E_i\varphi_i(\rho_i);\ i = e,\ h;$$
$$H_{0i}(\rho_i) = -\frac{\eta_i}{\rho_i}\frac{d}{d\rho_i}\rho_i\frac{d}{d\rho_i} + V_i(\rho_i) = -\eta_i\nabla_i^2 + V_i(\rho_i) \qquad (1.37)$$

donde $\eta_i = \mu/m_i^*$. Como el potencial de estas ecuaciones de onda unidimensionales para el electrón y para el hueco son seccionalmente constantes, sus soluciones exactas, $\varphi_e(\boldsymbol{\rho}_e)$ y $\varphi_h(\boldsymbol{\rho}_h)$, se pueden encontrar de manera analítica, mientras que las energías del estado base, E_e y E_h, respectivamente, se pueden calcular resolviendo las correspondientes ecuaciones trascendentes.

El Hamiltoniano adimensional para el D^0 en un QP en la aproximación de masa efectiva es:

$$H_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = H_{0e}(\boldsymbol{\rho}_e) - \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|} = -\eta_e\nabla_e^2 + V_e + U_{eh} \qquad (1.38)$$

donde $U_{eh} = -2/|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|$, describe la interacción Coulombiana entre el electrón y el hueco. La ecuación de Schrödinger para el D^0 es:

$$H_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h)\Psi_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = E_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_h)\Psi_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) \tag{1.39}$$

donde la función de onda $\Psi_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h)$ se tomará de la siguiente manera:

$$\Psi_{D^0}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = \varphi_e(\boldsymbol{\rho}_e)\Phi(|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|) \tag{1.40}$$

El primer término del lado derecho de esta ecuación es la función de onda para un electrón libre, mientras que la segunda es la función envolvente que sirve para describir la probabilidad de distribución electrónica producida por la atracción Coulombiana y sólo depende de la distancia electrón-ión. De acuerdo a lo estudiado en la seccion anterior, la función variacional $\Phi(|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|)$ se puede obtener a partir del principio variacional de Schrödinger, el cual establece que la autofunción del Hamiltoniano (1.39) debe minimizar la funcional (1.25), de tal manera que ésta se puede escribir así:

$$\begin{aligned} &F[\Phi] = \langle \varphi_e\Phi | H - E | \varphi_e\Phi \rangle = \\ &\langle \varphi_e\Phi | -\eta_e \nabla_e^2 + \bar{V}_e + U_{eh} - E | \varphi_e\Phi \rangle = I_0 + I_1 \rightarrow \min \end{aligned} \tag{1.41}$$

Donde por economía en la escritura se han dejado de lado los argumentos de las funciones, pero en el análisis que a continuación se describe siempre se tuvieron en cuenta. Las integrales I_0 e I_1 se definen de la siguiente manera:

$$I_0 = \langle (U_{eh} - E)\varphi_e^2\Phi^2 \rangle \tag{1.42}$$

$$I_1 = \langle \varphi_e\Phi | -\eta_e \nabla_e^2 + V_e | \varphi_e\Phi \rangle \tag{1.43}$$

Esta última integral se puede transformar notoriamente. Para ello se va a tener en cuenta que:

$$-\eta_e \nabla_e^2(\varphi_e\Phi) = -\eta_e\varphi_e\nabla_e^2\Phi - \eta_e\Phi\nabla_e^2\varphi_e - 2\eta_e\nabla\varphi_e.\nabla\Phi \tag{1.44}$$

al reemplazar (1.37) y (1.44) en (1.43) se obtiene:

$$\begin{aligned} I_1 = &\langle -\eta_e\varphi_e^2\Phi\nabla_e^2\Phi + E_e\varphi_e^2\Phi^2 - 2\eta_e\varphi_e\Phi\nabla\varphi_e.\nabla\Phi \rangle = \\ &E_e\langle \varphi_e^2\Phi^2 \rangle - \eta_e\langle \varphi_e^2\Phi\nabla_e.\nabla_e\Phi \rangle - 2\eta_e\langle \varphi_e\Phi\nabla\varphi_e.\nabla\Phi \rangle \end{aligned} \tag{1.45}$$

El segundo término de esta ecuación se puede expresar como:

$$\left\langle \varphi_e^2 \Phi \nabla_e . \nabla_e \Phi \right\rangle = -\left\langle \nabla_e \Phi . \nabla_e \left(\varphi_e^2 \Phi \right) \right\rangle = -\left\langle \nabla_e \Phi . \left(\varphi_e^2 \nabla_e \Phi + 2\varphi_e \Phi \nabla \varphi_e . \nabla \Phi \right) \right\rangle \quad (1.46)$$

lo que permite escribir la integral I_1 de una manera muy simple y compacta, así:

$$I_1 = E_e \left\langle \varphi_e^2 \Phi^2 \right\rangle + \eta_e \left\langle \varphi_e^2 \left(\nabla_e \Phi \right)^2 \right\rangle \quad (1.47)$$

Finalmente, a partir de (1.42) y (1.47) la funcional (1.41) será igual a:

$$F[\Phi] = \left\langle \varphi_e^2 \left\{ \Phi^2 \left(-\frac{2}{|\vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h|} - E + E_e \right) + \eta_e \left(\nabla_e \Phi \right)^2 \right\} \right\rangle =$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \left(\int_0^{\infty} \rho_e d\rho_e \varphi_e^2 \left\{ \eta_e \left(\frac{d\Phi}{d\rho_e} \right)^2 + \left(E_e - E - \frac{2}{\sqrt{\rho_h^2 + \rho_e^2 + 2\rho_e \rho_h \cos\phi}} \right) \Phi^2 \right\} \right) \quad (1.48)$$

Si hacemos $J_0(\rho, \rho_h) = \rho \int_0^{2\pi} \varphi_e^2 \left(\sqrt{\rho_h^2 + \rho^2 + 2\rho\rho_h \cos\varphi} \right) d\phi$ el funcional (1.48) puede escribirse como:

$$F[\Phi] = \int_0^{\infty} J_0(\rho, \rho_h) \left\{ \eta_e \left(\frac{d\Phi}{d\rho} \right)^2 + \left(E_e - E - \frac{2}{\rho} \right) \Phi^2 \right\} d\rho \quad (1.49)$$

Nótese que el integrando depende tanto de la función envolvente como de su derivada. De la ecuación de Euler-Lagrange se obtiene la ecuación para Φ:

$$-\frac{\eta_e}{J_0} \frac{d}{d\rho} \left(J_0 \frac{d\Phi}{d\rho} \right) - \frac{2}{\rho} \Phi = (E - E_e) \Phi \quad (1.50)$$

Esta ecuación es similar a la parte radial de un átomo hidrogenoide en un espacio isotrópico donde la parte radial del Jacobiano está descrito por $J_0(\rho, \rho_h)$. Las propiedades del espacio, en lo que se refiere a la geometría y dimensionalidad de la heterostructura, generalmente estarán relacionados con $J_0(\rho, \rho_h)$; es decir, si se considera que $J_0(\rho, \rho_h)$ es proporcional a una potencia de ρ, ésta debe ser de acuerdo con la teoría de Dimensional Scaling [121] de la forma:

$$J_0(\rho,\rho_h)=c\rho^{D-1} \tag{1.51}$$

donde el parámetro D define la dimensión efectiva del espacio. Por lo tanto, la ecuación (1.50) tendría que coincidir con el problema de autovalores para un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo D-dimensional, donde D solo tomar valores enteros o fraccionarios. Por esta razón, a lo largo de esta tesis nos referimos a este método con el nombre de dimensión fractal, pero es de advertirse que la ecuación (1.51) sólo se verifica para un espacio homogéneo. Para el caso particular que se está tratando, se puede ver que $D=2$ ya que $J_0(\rho,\rho_h)$ es proporcional a ρ. En el eventual caso en que la dependencia del Jacobiano con ρ no pudiese realizarse por medio de una ley de potencias como el descrito por la ecuación (1.51), entonces sería necesario definir una dimensión local en un espacio isotrópico efectivo usando el concepto de fractales de Mandenbrot [122].

Para calcular la energía del excitón y siguiendo el proceso estándar de la AA, ahora debemos descongelar el movimiento del hueco y para ello debemos regresar a la ecuación de onda del sistema, es decir:

$$H_X\Psi(\mathbf{\rho}_e,\mathbf{\rho}_h)=\sum_{i=e,h}\left(-\frac{\eta_i}{\rho_i}\frac{d}{d\rho_i}\rho_i\frac{d}{d\rho_i}+\tilde{V}_i(\rho_i)\right)\Psi(\mathbf{\rho}_e,\mathbf{\rho}_h)-$$

$$\frac{2}{|\vec{\rho}_e-\vec{\rho}_h|}\Psi(\mathbf{\rho}_e,\mathbf{\rho}_h) \tag{1.52}$$

$$\Psi(\mathbf{\rho}_e,\mathbf{\rho}_h)=\Psi_{D^0}(\mathbf{\rho}_e,\mathbf{\rho}_h)\Phi_X(\rho_h)$$

Nótese que en este Hamiltoniano se ha incluido el término de energía cinética del hueco. Siguiendo los mismos pasos descritos en la sección anterior, es posible mostrar que la función envolvente $\Phi_X(\rho_h)$ satisface la siguiente ecuación:

$$-\frac{\eta_h}{\rho_h}\frac{d}{d\rho_h}\left(\rho_h\frac{d\Phi_X(\rho_h)}{d\rho_h}\right)+\left[\tilde{V}_h+E_{D^0}(\rho_h)\right]\Phi_X(\rho_h)=E_X\Phi_X(\rho_h) \tag{1.53}$$

Para resolver el problema de autovalores (1.53) y encontrar la energia del excitón E_X se utiliza nuevamente el método de barrido trigonométrico [80].

Con el propósito de facilitar la interpretación de los resultados correspondientes a la energía del excitón, se presenta en la figura 1.17 las curvas que describen el confinamiento lateral y las respectivas funciones de

onda para un electrón no ligado en QDs con tres diferentes morfologías y cada uno de ellos con altura $d_0 = 4nm$.

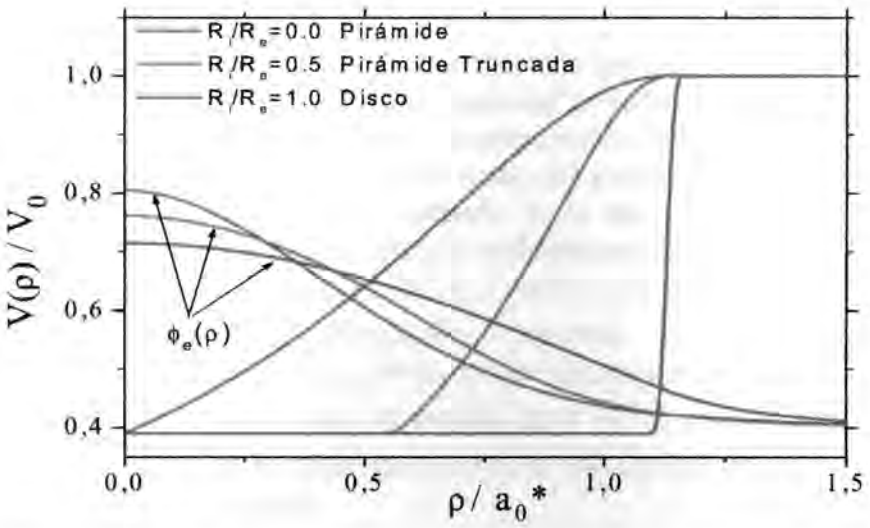

Figura 1.17. Formas del potencial de confinamiento y las correspondientes funciones de onda para el movimiento lateral de un electrón en un QD de forma piramidal, pirámide truncada y disco.

En esta figura se puede apreciar como la altura de la barrera para un electrón confinado en un QD decrece hasta un 40% debido al confinamiento en dirección Z, siendo este comportamiento independiente de la morfología del QD. Adicionalmente se puede apreciar como la forma del potencial de confinamiento presenta una variación suave, desde casi triangular hasta casi rectangular a medida que la morfología del punto se modifica desde una pirámide hasta un disco, donde el caso de la pirámide truncada constituye un paso intermedio entre estos dos límites. En este proceso la función de onda para el electrón no ligado se va volviendo más y más extendido, indicando con esto que la nanoestructura en forma de pirámide produce el mayor confinamiento electrónico, lo que tendrá una gran implicación en los valores que alcance la energía del par e-h.

En las figuras 1.18 y 1.19 se exhiben los resultados de cálculo de las energías de correlación, $E_c(X)$, para el excitón en función del radio de la base del QD de $In_{0.55}Al_{0.45}As$-$Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ para cinco diferentes razones, R_i/R_e, comprendidas entre los valores límites 0 y 1 y para diferentes alturas d_0. Este abanico de posibilidades y valores permiten tener un mayor control de cómo la morfología y los factores geométricos afectan el espectro energético del excitón. La energía $E_c(X)$ se define

como la diferencia de energías entre el par e-h libre y la de los estados acoplados, así:

$$E_c(X) = E_e + E_h - E(X) \tag{1.54}$$

A partir de la figura 1.18 se puede ver que las curvas presentan un comportamiento muy similar, ya que al disminuir el radio de la base, la energía de correlación excitónica crece a consecuencia del incremento del solapamiento espacial entre la función de onda del electrón y del hueco. Este hecho se traduce en un fuerte aumento de la energía atractiva de Coulomb, lo cual va a ser determinante en los valores que alcance la energía de correlación para valores pequeños de R_e. Ahora si el radio de la base incrementa, la energía de correlación comienza a disminuir y paulatinamente converge al valor asintótico propio de grandes radios igual a $4R_y^*$, el cual es característico para un excitón libre en un sistema 2D. A simple vista se observa que la convergencia resulta más rápida para aquellos QD con razones R_i/R_e mayores.

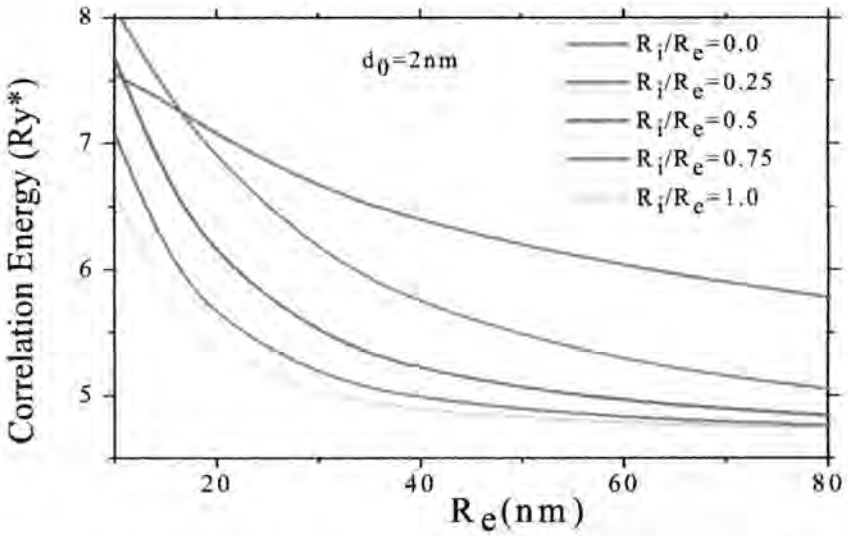

Figura 1.18 Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QD para tres valores diferentes de la razón R_i/R_e

Adicionalmente se puede ver como la morfología es un factor determinante en la energía de correlación del excitón, pues estas curvas toman diferentes valores dependiendo de la forma del QD que se analiza. Nótese también que cuanto más grande es la razón R_i/R_e más pequeño es el confinamiento en el QD y menor es la energía de correlación; por lo tanto, menor es la posibilidad de encontrar el par e-h en QD porque las funciones de onda llegan a ser más extendidas. Si el radio de la base se hace más grande que el

radio de Bohr efectivo, las diferencias más sensibles en las energías de correlación excitónicas aparecen entre los QDs en forma de disco y de pirámide, las cuales están asociadas con los confinamientos más pequeño y más grande, respectivamente.

Por último, se puede observar que al disminuir el radio de la base, aparece un cruce entre las curvas que describen la morfología piramidal y las truncadas de razón R_i/R_e igual a 0.25 y 0.5. Esto se debe a que el confinamiento produce un desbordamiento de la función de onda del electrón hacia la barrera del QD, lo que da lugar a un aumento de la separación entre el electrón y el hueco, y por consiguiente una disminución de la energía atractiva, lo que obligatoriamente producirá una disminución de la energía atractiva.

En la figura 1.19 se muestra la forma como evoluciona la energía de correlación del par e-h con el radio de la base de un QP $(R_i = 0)$ para diferentes valores de la altura del QP. Esto permitirá observar diferencias notorias para la energía de correlación excitónica entre QDs de igual morfología pero diferente tamaño o volumen.

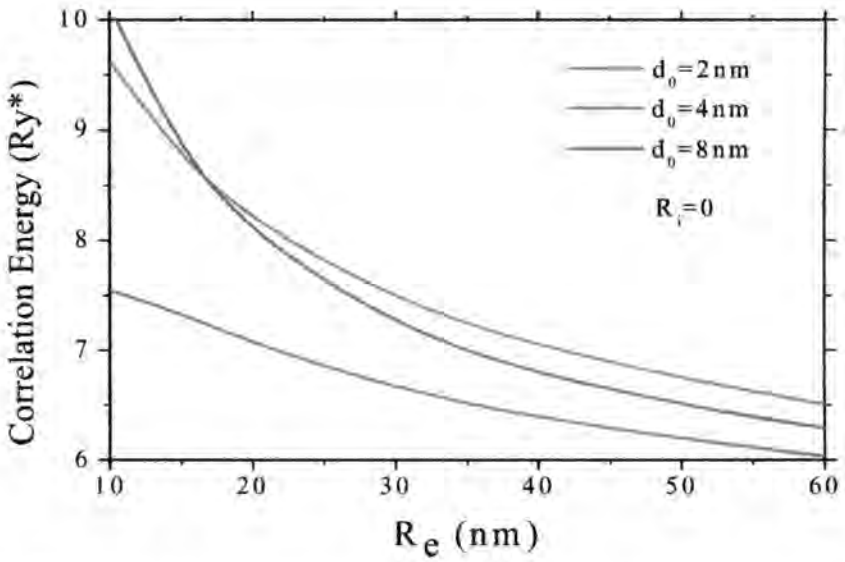

Figura 1. 19 Energía de correlación para un excitón en función del radio de la base del QP para tres valores diferentes de la altura: $d_0 = 2nm$, $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$.

En esta figura se puede ver como una disminución en la altura del QP hace que el sistema esté más confinado produciendo un incremento en la energía de correlación. Es de advertir que para el caso $d_0 = 2nm$ y de acuerdo con

lo que se acaba de manifestar, la energía debería estar por encima de las diferentes curvas. Esto no ocurre de este modo debido a que se ha producido el desbordamiento de la función de onda, lo que genera una disminución de la energía con relación a las otras situaciones analizadas en la figura. Esta apreciación puede confirmarse al observar las dos curvas: $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 8nm$. Cuando se tienen condiciones de confinamiento moderado correspondientes a R_e mayores de $15nm$ y donde todavía no se presentan los efectos de desbordamiento de la función de onda electrónica, la curva con $d_0 = 8nm$ está por debajo de su análoga con $d_0 = 4nm$, pues esta última se encuentra más confinada y la función de onda no está muy extendida. Pero alrededor de $R_e = 15nm$ se presenta una coincidencia de valores de energía y para R_e por debajo de este valor, se presenta una inversión de las curvas, debido a que el confinamiento en el QP de altura $d_0 = 4nm$ es tan grande que se produce el desbordamiento de la función de onda hacia la barrera, haciendo que se produzca una disminución en la energía de correlación.

En conclusión, se podría decir que el espectro energético para un par e-h confinado en un QD es fuertemente dependiente de su morfología y del tamaño del mismo. Esta situación permite prever que el espectro energético del excitón puede modelarse y manipularse a voluntad del experimentador y dependiendo de la aplicación que se le quiera dar.

Para finalizar este primer capítulo, debo manifestar que el procedimiento implementado en estas dos últimas secciones, también se utilizó para analizar otros sistemas de pocas partículas, como es el caso de una donadora cargada negativamente, D^- y un trión X^- confinados en un disco cuántico. Los resultados de este trabajo se encuentran publicados en la referencia [84].