

DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA Y
ELECTROMAGNETISMO

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y PROPIEDADES ÓPTICAS
DE PUNTOS CUÁNTICOS AUTO-ORGANIZADOS

JOSÉ MANUEL LLORENS MONTOLÍO

UNIVERSITAT DE VALENCIA
Servei de Publicacions
2007

Aquesta Tesi Doctoral va ser presentada a València el dia 9 de Març de 2007 davant un tribunal format per:

- D. Carlos Tejedor de Paz
- D. Juan Martínez Pastor
- D. Jesús María Pérez Conde
- D. Josep Hilari Planelles Fuster
- D. Andrés Cantarero Sáez

Va ser dirigida per:

D. Alberto García Cristóbal

©Copyright: Servei de Publicacions
José Manuel Llorens Montolío

Depòsit legal:

I.S.B.N.:978-84-370-6822-0

Edita: Universitat de València
Servei de Publicacions
C/ Artes Gráficas, 13 bajo
46010 València
Spain
Telèfon: 963864115

UNIVERSIDAD DE VALENCIA
Departamento de Física Aplicada y Electromagnetismo



VNIVERSITAT
ID VALÈNCIA

Estructura Electrónica y Propiedades Ópticas de Puntos Cuánticos Auto-Organizados

por

José Manuel Llorens Montolio

Director: Alberto García Cristóbal

VALENCIA
Septiembre de 2006

*A Raquel y a
mi familia por
su apoyo*

*La página escrita nunca recuerda
todo lo que se ha intentado, sino
lo poco que se ha conseguido.*

Antonio Machado

Agradecimientos

Ha llegado el momento de saldar cuentas y poner nombre a todas aquellas personas y entidades que han hecho una realidad de lo que en su día fue un mero proyecto de Tesis. Es preciso reconocer el esfuerzo, la dedicación y la fe que ha mostrado durante todos estos años mi tutor, Alberto García. Quisiera agradecerle en primer lugar la impronta que ha dejado en mi manera de enfocar y organizar el trabajo. También quisiera agradecer las largas discusiones que hemos mantenidos, unas se disfrutaron relajadamente, y otras se sufrieron acaloradamente, aunque siempre fueron necesarias.

Otro lugar destacado está reservado para el director del grupo de investigación, Andrés Cantarero, ya que sin su apoyo en los primeros momentos el proyecto de Tesis no hubiese fructificado. Gran parte de devoción hacia el sistema operativo Linux, y en general, al mundo del código abierto vino motivada por él. También quiero agradecer a la Dra. Ana Cros que me permitiese colaborar con ella en el proyecto de los apilamientos de puntos cuánticos. Que ha significado un punto de inflexión en el papel del estudio de la distribución de deformaciones en el presente trabajo de Tesis. Confío en que las largas discusiones mantenidas le resultasen tan agradables, casi lúdicas, como lo fueron para mí. Convendrá conmigo en que sólo el tiempo es testigo de las miles de vueltas que dimos entorno a cinco espectros de dispersión Raman.

Compartir despacho con Nuria Garro ha resultado ser una de las partes más dulces de mi periodo como doctorando. Su particular sentido del humor y capacidad de análisis han convertido una estancia gris en un espacio donde el trabajo, el diálogo y las bromas se repartían por igual. A ello se añade haber podido participar en el estudio de la muestra S1303 por dispersión Raman resonante, que tan diligentemente condujo. No quiero dejar de mencionar a los antiguos “habitantes” del despacho y agradecerles los buenos ratos: Juana Camacho y Joe Trodahl.

También es preciso mencionar al resto de los miembros del grupo, tanto actuales como antiguos. Aunque la lista es larga cabe destacar la Dra. Gemma Martínez, el Dr. Gianluca Di Marzi, W.H.A. Thijssen (Robert), el Dr. Daniel Olguín, Óscar

Sancho, Jorge Budagosky, Todora Angelova, y más recientemente Jaime Segura y Juan Fresneda. Es preciso agradecer al Dr. Juan Martínez y a su grupo de investigación (UMDO) que me haya permitido presenciar la realización de diferentes experimentos en los que puntos cuánticos de InAs/GaAs han sido objeto de investigación. Una mención especial es para el Dr. Benito Alén con el que he tenido oportunidad de compartir ideas, proyectos, conocimientos y alguna que otra *Moretti* en los alrededores del Lago de Como.

Al Ministerio de Educación y Ciencia quiero agradecerle la financiación a través del programa FPU y subvencionase mi estancia en Cork, junto al Dr. Eoin P. O'Reilly.

Al margen de la gente vinculada al mundo académico es preciso agradecer a Raquel el apoyo diario y actitud abnegada desde que decidimos embarcarnos en este proyecto, del que ella es también partícipe. En los mismo términos, quisiera agradecer a mis padres y hermana que hayan animado a iniciar esta carrera académica. A ellos les pediría que me disculparan por no haber podido prestarles más ayuda en sus respectivas tareas o haberles dedicado más atención.

Finalmente romper una lanza en favor de organizaciones como la FSF que hacen posible el acceso a todo el mundo a un *software* de calidad. Especialmente a los desarrolladores de gvim, gentoo, pdflatex, gnuplot, inkscape, xmgrace, python, LAPACK y tantos otros proyectos sin los esta Tesis no podría haber sido publicada.

Índice general

Prefacio	XV
1. Introducción a los puntos cuánticos semiconductores	1
1.1. Puntos cuánticos semiconductores	1
1.2. Puntos cuánticos de InAs/GaAs	4
1.2.1. Propiedades estructurales	5
1.2.2. Propiedades ópticas	7
1.3. Puntos cuánticos de GaN/AlN	11
1.3.1. Estructura cristalina de la wurtzita	12
1.3.2. Crecimiento de puntos cuánticos de GaN/AlN	14
1.3.3. Propiedades estructurales y ópticas	17
1.4. Estudio teórico de puntos cuánticos auto-ensamblados	22
1.4.1. Planteamiento general del problema	22
1.4.2. Modelos atomísticos y modelos continuos	24
1.4.3. Estudio de la deformación y campos internos	26
1.4.4. Estudio de la estructura electrónica	28
1.5. Método $k \cdot p$	31
1.5.1. Formulación general del método $k \cdot p$	31
1.5.2. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo zincblenda sin deformación	34
1.5.3. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo zincblenda con deformación	41

1.5.4.	Formulación del método $k\cdot p$ para semiconductores tipo wurtzita sin deformación	45
1.5.5.	Formulación del método $k\cdot p$ para semiconductores tipo wurtzita con deformación	53
1.6.	Aproximación de la masa efectiva	55
1.6.1.	Formulación general de la aproximación de la masa efectiva	56
1.6.2.	Aproximación de la masa efectiva aplicada a heteroestructuras	57
1.7.	Propiedades ópticas: Hamiltoniano de interacción radiación-materia	60
1.7.1.	Elemento de matriz óptico en un semiconductor masivo	63
1.7.2.	Elemento de matriz óptico en una heteroestructura	65
2.	Deformación y campos internos.	71
2.1.	Formulación y resolución del problema de la distribución de deformaciones	72
2.1.1.	Método de Eshelby	73
2.1.2.	Resolución del problema de la relajación elástica por el método de la transformada de Fourier	76
2.2.	Inclusión coherente axisimétrica	79
2.2.1.	Material transversalmente isótropo	83
2.2.2.	Material isótropo	86
2.3.	Estado de deformación en un punto cuántico aislado	88
2.3.1.	Influencia de la forma del QD	96
2.3.2.	Influencia de la ratio $R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}}$	99
2.4.	Estado de deformación en una superred de puntos cuánticos	100
2.4.1.	Estado de deformación de la matriz	105
2.4.2.	Estudio de la deformación en una superred vertical de puntos cuánticos	110
2.4.3.	Estudio de la deformación en una superred bidimensional de puntos cuánticos	113

2.4.4.	Estudio de la deformación en una superred tridimensional de puntos cuánticos	115
2.5.	Comparación con resultados experimentales	122
2.5.1.	Análisis de medidas de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución	123
2.5.2.	Análisis de medidas de difracción de rayos-X	126
2.5.3.	Análisis de medidas de dispersión de iones de energía media	130
2.6.	Formulación y resolución del potencial interno	140
2.6.1.	Polarización en semiconductores tipo zincblenda y wurtzita	140
2.6.2.	Polarización en un punto cuántico	143
2.6.3.	Potencial interno en un punto cuántico axisimétrico	145
2.7.	Potencial interno en un punto cuántico aislado	149
3.	Estructura electrónica	157
3.1.	Modelo de una única banda	158
3.1.1.	Formulación del problema	159
3.1.2.	Resolución del problema	161
3.1.3.	Criterio de elección de los parámetros numéricos	165
3.1.4.	Análisis en función de la geometría de la nanoestructura	167
3.1.5.	Resultados numéricos para el sistema InAs/GaAs	172
3.1.6.	Resultados numéricos para el sistema GaN/AlN	185
3.2.	Modelo multibanda	201
3.2.1.	Formulación del problema	201
3.2.2.	Resolución del Problema	206
3.2.3.	Resultados para el sistema InAs/GaAs	208
3.2.4.	Resultados para el sistema GaN/AlN	219
3.3.	Efecto de la deformación y campos internos	230
3.3.1.	Resultados para el sistema InAs/GaAs	232
3.3.2.	Resultados para el sistema GaN/AlN	258

4. Complejos Excitónicos	279
4.1. Formulación y resolución del problema	282
4.1.1. Representación de electrones y huecos	282
4.1.2. Descripción del formalismo de segunda cuantización	283
4.1.3. Resolución del problema	285
4.1.4. Momento angular total del complejo excitónico	287
4.1.5. Cálculo de las propiedades ópticas de complejos excitónicos .	289
4.2. Estructura electrónica de los complejos excitónicos neutros	290
4.2.1. Estructura electrónica del complejo X^0	291
4.2.2. Estructura electrónica de los complejos $2X^0$ y $3X^0$	301
4.3. Estructura electrónica de los complejos excitónicos cargados	314
4.3.1. Estructura electrónica de los complejos X^{1-} y X^{2-}	316
5. Conclusiones	331
A. Parámetros de los materiales	335
A.1. Parámetros del sistema InAs/GaAs	335
A.2. Parámetros del sistema GaN/AlN	337
B. Hamiltoniano	339
C. Funciones auxiliares de la deformación	345
D. Elementos de matriz	347
D.1. Elementos de matriz del modelo de una única banda	347
D.2. Elementos de matriz multibanda	348
E. Elementos de matriz de H para varios cuerpos	351
E.1. Elementos del matriz de H	351
E.2. Expresión para el cálculo de V_{k_1, k_2, k_3, k_4}	354
Bibliografía	357

Prefacio

Entre los múltiples avances acaecidos en la última década dentro de la física del estado sólido se encuentra la realización de puntos cuánticos auto-ensamblados basados en semiconductores: islas de tamaño nanométrico inmersas en una matriz también semiconductor [1]. Entre otras cosas, estas estructuras son capaces de confinar un número finito de electrones en su interior. En tal situación su estructura electrónica resulta ser similar a la de un átomo. Sin embargo, el hecho de estar embebido en el seno de otro material semiconductor hace que el sistema en su conjunto exhiba propiedades diferentes a las del átomo, constituyendo un estimulante objeto de investigación en el que buscar nuevos fenómenos físicos. En efecto, desde que a mediados de los noventa se publicaran una serie de trabajos pioneros en los que se demostraba experimentalmente la emisión de luz por estas nanoestructuras [2, 3, 4], ha aparecido un gran número de trabajos científicos en los que estas nanoestructuras han sido objeto de investigación, generándose así una gran cantidad de conocimiento.

La intención de profundizar en el estudio teórico de los puntos cuánticos auto-ensamblados motivó la realización de un modelo que permitiese describir las principales propiedades de estas nanoestructuras. La principal característica que debía cumplir el modelo es que fuese *realista*, i.e. que incorporase las particularidades de la estructura electrónica de los materiales semiconductores constituyentes, la presencia de la distribución de deformaciones característica de estos sistemas y de eventuales campos electrostáticos internos, como el campo piezoeléctrico. Dada la orientación experimental del grupo de investigación al que está adscrito el doctorando (*GES*, Grupo de Espectroscopía de Sólidos), se decidió que el modelo fuese sencillo de implementar y de utilizar. Ello llevó a que se apostará por conferirle una mayor analiticidad a expensas de minimizar la complejidad de los métodos numéricos empleados en la resolución de las ecuaciones, y por exigir unos recursos de computación moderados en su ejecución (tiempos de cálculo, número de procesadores, memoria, almacenaje, etc...). Teniendo estas consideraciones presentes se optó por describir el campo de deformaciones, los campos electrostáticos

electrostáticos y funciones de onda mediante campos continuos. En el Capítulo 1 desarrollaremos los detalles de los métodos escogidos y en el Capítulo 3 describiremos su implementación para el estudio de la estructura electrónica de los puntos cuánticos auto-ensamblados.

La investigación realizada se ha planteado de forma que tenga un carácter general, esto es, buscando una descripción lo más completa posible de las propiedades de los puntos cuánticos. En concreto hemos descrito el campo de deformaciones en los puntos cuánticos originados en la fase de crecimiento, la distribución del potencial electrostático interno debida a la polarización espontánea y piezoelectrica, la estructura electrónica en la aproximación de una única partícula y en la aproximación de varios cuerpos (complejos excitónicos). Para ilustrar los resultados numéricos obtenidos con nuestro modelo nos hemos fijado en los sistemas prototípicos de puntos cuánticos basados en materiales con estructura cristalina tipo zincblenda y wurtzita: InAs/GaAs y GaN/AlN. Como veremos en el Capítulo 1 ambos sistemas presentan diferencias de carácter fundamental. Sin embargo, en la literatura especializada con frecuencia se hace uso de las propiedades de los puntos cuánticos de InAs/GaAs para explicar las propiedades de los puntos cuánticos de GaN/AlN. Esta forma de actuar tiene su origen en la gran cantidad de conocimiento generado entorno al sistema InAs/GaAs, y aunque en ocasiones resulta de gran utilidad, en otras conduce a confusiones y malos entendidos. En todos los apartados de este trabajo de Tesis hemos estudiado los dos sistemas conjuntamente, lo cual permite enfatizar las diferencias entre estos dos sistemas.

A continuación pasaremos a describir la estructura del trabajo:

- En el Capítulo 1 hemos incluido un breve resumen de las propiedades de los puntos cuánticos semiconductores. Haciendo un especial énfasis en la descripción de las propiedades estructurales y ópticas de los puntos cuánticos de InAs/GaAs y GaN/AlN. Seguidamente hemos abordado el problema de la modelización de estas nanoestructuras desde un punto de vista general, describiendo las estrategias que con mayor frecuencia se implementan en la bibliografía. Una parte de este capítulo ha sido dedicada a describir los elementos que constituyen el modelo empleado para determinar la estructura electrónica y las propiedades ópticas: método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y la aproximación de la masa efectiva. De forma que en el Capítulo 3 únicamente trataremos su implementación para la descripción del punto cuántico.
- El Capítulo 2 ha sido dedicado al estudio de la distribución de la deformación y del potencial electrostático interno que caracteriza a estos puntos cuánticos. El problema elástico ha sido planteado haciendo uso del método de las

inclusiones de Eshelby, que además de elegante resulta ser muy intuitivo. Tras realizar un análisis de la distribución de la deformación en función de diferentes parámetros que describen el punto cuántico, hemos abordado el estudio de superredes de estas nanoestructuras. Este análisis nos ha permitido estudiar diferentes resultados experimentales en los que se han determinado los parámetros de red del material que constituye el punto cuántico. En una segunda parte se ha cubierto la descripción de los campos internos en SAQDs aislados a través de un modelo desarrollado con este fin.

- En el Capítulo 3 hemos abordado el estudio de la estructura electrónica. La estructura del capítulo se ha planteado de forma permita analizar los diferentes grados de aproximación que el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ admite. En esta parte del trabajo hemos analizado diferentes resultados experimentales de los puntos cuánticos, lo que nos ha permitido probar la bondad del modelo desarrollado y a su vez, profundizar en el estudio de las propiedades de los diferentes sistemas.
- Finalmente hemos dedicado el Capítulo 4 al estudio del problema de varios cuerpos confinados en el interior de la nanoestructura. En esta parte del trabajo hemos optado por emplear el formalismo de segunda cuantización. Aunque el modelo desarrollado permite estudiar un punto cuántico que contenga un número arbitrario de electrones y huecos, debido a la exigencia del cálculo hemos restringido el estudio a un cierto número de complejos excitónicos neutros y cargados, en los que el número de cuerpos no excede de seis.

Es preciso admitir que el texto ha adquirido un volumen ciertamente extenso. La principal razón obedece a la voluntad de imprimir al trabajo un carácter pedagógico, todo lo que un trabajo de esta naturaleza puede aceptar. Además hemos hecho un especial énfasis en proporcionar, siempre que ha sido posible, la formulación e información necesaria para poder reproducir los cálculos que aparecen a lo largo de la Tesis, lo que ha motivado una proliferación de apéndices que de otra forma no hubiesen sido incluidos.

Capítulo 1

Introducción a los puntos cuánticos semiconductores y su estudio teórico

Con el presente Capítulo pretendemos cubrir dos objetivos fundamentalmente. Por una parte, queremos introducir las propiedades más características de los puntos cuánticos semiconductores. Ello permite una primera familiarización con la física de estos sistemas. Por otra parte, también queremos presentar el marco teórico que emplearemos en el estudio de estos sistemas. En esta segunda parte incluiremos la descripción de las diferentes herramientas empleadas en el desarrollo de los modelos teóricos y formalizaremos la notación que será empleada a lo largo de todo el trabajo.

1.1. Puntos cuánticos semiconductores

Los progresos realizados en las técnicas crecimiento dirigidas a la fabricación de dispositivos semiconductores han permitido obtener heteroestructuras en las que es posible conseguir el confinamiento de electrones en las tres dimensiones del espacio en una región de dimensiones nanométricas [1]. Estos sistemas reciben el nombre de puntos cuánticos (en inglés, “quantum dots”, QDs), y sus propiedades son análogas a las del átomo, por lo que, con frecuencia se hace referencia a estas nanoestructuras como átomos artificiales. Sin embargo, el principio por el que los núcleos atómicos confinan a los electrones difiere cualitativamente del que rige en los puntos cuánticos semiconductores. Mientras que en el primer caso el potencial de Coulomb es responsable de que los electrones no puedan propagarse libremente, en el segundo el potencial de confinamiento surge de la diferencia existente entre las estructuras electrónicas de los semiconductores que forman la heteroestructura.

Es bien sabido que todo semiconductor posee una banda de energía prohibida (en inglés “energy band gap” o simplemente “gap”), en la que los electrones no pueden ocupar ningún estado. Ésta es responsable de las particulares propiedades que exhiben estos materiales. Cuando se unen dos capas de semiconductores de forma que sus bandas prohibidas quedan alineadas convenientemente, puede suceder que un electrón que ocupa un estado en un material tenga *prohibido* su paso al otro material. Esta limitación de la propagación unidimensional de electrones en uniones de semiconductores se puede extender a un confinamiento *total* del electrón si la superficie de unión define un volumen cerrado, es decir, si tenemos una porción de semiconductor de dimensiones nanométricas rodeada totalmente por otro tipo de semiconductor (u otro material), como es el caso de los QDs. Vemos, por tanto, que la imagen de una caja encerrando una partícula ofrece una descripción intuitiva más aproximada al problema de un punto cuántico que el modelo del átomo.

El interés en este tipo de estructuras es doble, por una parte, el punto cuántico representa un banco de pruebas más controlable que el átomo en el que estudiar propiedades de los electrones confinados. Por otra parte, se persigue diseñar una nueva serie de dispositivos que aprovechen las propiedades de estas nanoestructuras. Entre los campos en los que estos sistemas están siendo objeto de estudio encontramos la óptica y la optoelectrónica [1], la criptografía cuántica [5], y la computación cuántica [5].

Las técnicas de crecimiento empleadas con mayor frecuencia para la obtención de puntos cuánticos son la litografía, la química coloidal y la epitaxia. No se puede decir que ninguna de ellas sea superior o inferior a las demás. Las muestras obtenidas por las diferentes técnicas presentan una serie de ventajas e inconvenientes que condiciona el uso o aplicación que se derive de ellas. En este trabajo únicamente estudiaremos sistemas obtenidos por la técnica de epitaxia y es por ello que a continuación dedicaremos unas líneas a la descripción de este procedimiento. Información sobre las otras técnicas anteriormente mencionadas es posible encontrarla en las Referencias [1, 6].

El desarrollo de las técnicas de crecimiento por epitaxia tuvo como principal motivación la obtención de cristales semiconductores de alta calidad. Su empleo permitió la realización de pozos cuánticos con propiedades ópticas de excepcional calidad y, además, profundizar en el estudio de las condiciones de crecimiento de heteroestructuras. Entre las técnicas de epitaxia podemos encontrar diferentes métodos:

- Epitaxia en fase líquida (en inglés, “Liquid Phase Epitaxy” LPE): un líquido en régimen de saturación está en contacto con el sustrato, de forma que el

crecimiento se realiza capa a capa.

- Epitaxia en fase vapor (en inglés, “Vapour Phase Epitaxy” VPE): el crecimiento se produce a partir de la reacción en la superficie de compuestos orgánicos con hidruros metálicos que contienen las especies químicas requeridas por la estructura que será crecida. Dentro de esta categoría se haya la técnica de deposición química de metalorgánicos en fase vapor (en inglés, “Metalorganic Epitaxial Chemical Vapor Deposition”, MOCVD), que juega un papel destacado en el crecimiento de puntos cuánticos.
- Epitaxia de haces moleculares (en inglés, “Molecular Beam Epitaxy” MBE): en condiciones de ultra alto vacío los compuestos que contienen las especies químicas son evaporados en unas celdas orientadas hacia el sustrato. Controlando el tiempo que las celdas están abiertas, entre otros parámetros, se puede llegar a conseguir un compuesto que presente una estequiometría dada.

El crecimiento epitaxial procede siguiendo unas pautas generales que se conocen como modos de crecimiento. Durante la epitaxia de un determinado sistema el modo de crecimiento viene determinado, principalmente, por las condiciones en las que dicho crecimiento se realiza (temperatura del sustrato, velocidad de deposición de los materiales, etc...) y las propiedades de los materiales (constantes de red, constantes elásticas, etc...). En efecto, un factor importante que condiciona el crecimiento de capas epitaxiales es el desacuerdo de las constantes de red entre el material depositado y el sustrato. Cuando éste es pequeño, alrededor de un 1% de la constante de red, el material depositado se acomoda a la periodicidad de la red del sustrato, de forma que la nueva capa formada es pseudomórfica al sustrato y presenta una deformación. El aumento del espesor de esta capa va acompañado de un incremento de la energía elástica de deformación acumulada. Puede llegar un momento en que este proceso de crecimiento resulte inestable y se produzca una relajación del sistema a través de una deformación plástica, creándose entonces dislocaciones. La probabilidad de que la nueva capa aumente su espesor pseudomórficamente, o que incorpore una dislocación se puede determinar a través de un balance energético. En general, se puede esperar que el sistema presente un espesor crítico, por encima del cual, la probabilidad de aparición de dislocaciones sea dominante. Este modo de crecimiento fue estudiado por F. C. Frank y J. H. van der Merwe [7] y se suele conocer como modo de crecimiento Frank-van der Merwe (FVM). Cuando el desacuerdo de red es grande, el sistema con frecuencia presenta un mecanismo alternativo a la formación de dislocaciones para relajar parte de la energía elástica de deformación. Tras la deposición de una primera capa de material, denominada capa mojante (en inglés, “Wetting Layer” WL), de

menor espesor que el espesor crítico, tiene lugar una reorganización del material depositado en forma de islas tridimensionales de dimensiones nanométricas. Este modo de crecimiento recibe el nombre de Stranski-Krastanov (SK) [8]. Aunque la aparición de estas islas ciertamente dificulta la obtención de una capa de espesor uniforme, recientemente se ha comprobado que es una forma eficiente de obtener puntos cuánticos semiconductores libres de defectos. Debido al carácter espontáneo que tiene la formación de estas islas, estos puntos cuánticos son denominados como auto-organizados o auto-ensamblados (en inglés, “Self-Assembled Quantum Dots” SAQD). Estas nanoestructuras se caracterizan por presentar una alta calidad cristalina y confinar eficientemente a los electrones. A lo largo de este trabajo nos centraremos en el estudio de este tipo de nanoestructuras. Salvo que se indique lo contrario, la nomenclatura QD y SAQD será equivalente.

La realización experimental de SAQDs se ha conseguido en diferentes sistemas semiconductores, entre los que podemos encontrar compuestos del grupo IV (Si/Ge), II-VI (ZnCdSe/ZnSe), y III-V (InGaAs/GaAs, InGaN/AlGaN). Estas heteroestructuras pseudomórficas pueden adoptar diversas estructuras cristalinas, entre las que cabe destacar el diamante (Ge/Si), la zincblenda (InGaAs/AlGaAs), la wurtzita (GaN/AlN) y la halita (PbSe/PbTe). En este trabajo únicamente vamos estudiar puntos cuánticos basados en InGaAs/GaAs y GaN/AlN, por lo que tan sólo las estructuras cristalinas zincblenda y wurtzita serán relevantes para nosotros.

1.2. Puntos cuánticos de InAs/GaAs

De los múltiples sistemas existentes con los que se han conseguido obtener puntos cuánticos, aquél que ha sido estudiado más extensivamente es, posiblemente, el InAs/GaAs y sus aleaciones. El desacuerdo de red existente entre el InAs y el GaAs, $\sim 7\%$, hace de este sistema un candidato ideal para el estudio de las condiciones de crecimiento que resultan en la formación de puntos cuánticos siguiendo el modo de crecimiento de Stranski-Krastanov (SK). Además, las propiedades electrónicas del InAs resultan ser idóneas para el desarrollo de dispositivos electroópticos que trabajen en el infrarrojo medio [9]. Muestra de la atención que han recibido los puntos cuánticos basados en InAs es que al introducir los términos “InAs” y “quantum dot*” en el buscador del ISI Web of Knowledge, éste devuelve más de 3000 referencias. Repitiendo el mismo proceso para el Si/Ge, el número de referencias se reduce a 800 y para el GaN, a 500. El número de trabajos científicos en los que este sistema ha sido objeto de investigación es tan grande, que resulta muy complicado establecer qué propiedades son características de estas nanoestructuras.

Autor	Entradas	%	Autor	Entradas	%
Bimberg, D.	191	5.6	Hopkinson, M.	62	2.2
Ustinov, V. M.	179	5.2	Main, P. C.	59	1.8
Ledentsov, N. N.	115	4.4	Egorov, A. Y.	57	1.7
Zhukov, A. E.	112	3.4	Heitz, R.	57	1.7
Petroff, P. M.	99	3.3	Sklonick, M. S.	54	1.7
Wang, Z. G.	95	2.9	Garcia, J. M.	54	1.6
Alferov, Z. I.	92	2.8	Lee, J. I.	54	1.6
Henini, M.	88	2.7	Tsatsul'nikov, A. F.	54	1.6
Kovsh, A. R.	78	2.6	Nakata, Y.	53	1.5
Eaves, L.	78	2.3	Wolter, J. H.	53	1.5
Xu, B.	69	2.3	Volovik, B. V.	50	1.5
Gerard, J. M.	68	2.0	Kop'ev, P. S.	49	1.4
Arakawa, Y.	67	2.0			

Tabla 1.1: Lista con los 25 primeros autores ordenados según el número de publicaciones más citadas que aparecen en los resultados de la búsqueda de los términos “InAs” y “quantum dot*” en el motor de búsqueda del ISI Web of Knowledge.

El criterio seguido para determinar esas propiedades ha consistido en identificar los grupos de investigación que más activamente han trabajado con este sistema. Para ello hemos procedido a ordenar los autores según el número de publicaciones más citadas. En la Tabla 1.1 hemos reproducido las primeras 25 entradas. Los tres primeros autores pertenecen a los grupos de investigación vinculados a las entidades *Ioffe Physico-Technical Institute* y *Technischen Universität Berlin, Institut für Festkörperphysik*. En el resto de la lista es posible identificar tanto antiguos como actuales colaboradores de estos autores. También merece una atención especial el grupo de P. M. Petroff, pues en este trabajo de tesis hemos analizado diferentes experimentos efectuados sobre muestras procesadas en su laboratorio.

A continuación procederemos a realizar una descripción de las propiedades estructurales y ópticas de los QDs de InAs/GaAs, para lo que nos fijaremos, fundamentalmente, en aquellos resultados experimentales presentados por los autores de la Tabla 1.1.

1.2.1. Propiedades estructurales

La configuración final de los SAQDs depende críticamente de las condiciones de crecimiento. Es por ello que diferentes grupos de investigación obtienen SAQDs con formas, tamaños, composición y densidad diferentes. A ello hay que añadir las peculiaridades del post-procesado al que suelen estar sometidas las muestras para modificar algunas de sus propiedades, como por ejemplo, un recocido que permita

un intercambio de In y Ga entre el SAQD y la barrera. Todo ello hace que en la actualidad no sea posible hablar de un modelo “estándar” para el SAQD.

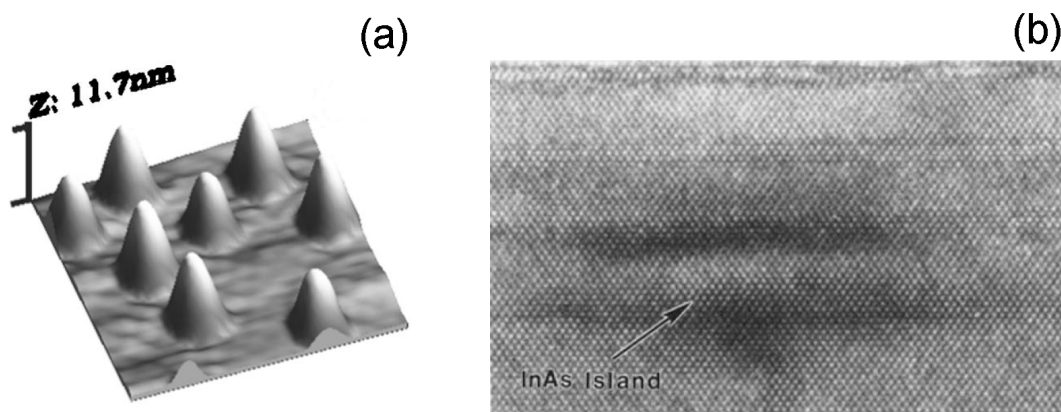


Figura 1.1: (a) Imagen de topografía superficial de $250 \text{ nm} \times 250 \text{ nm}$, registrada por microscopía de fuerza atómica. Reproducida de D. Granados *et al.* [10]. (b) Imagen trasversal de dos SAQD apilados obtenida por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución. Extraída de Q. Xie *et al.* [11].

En la gran mayoría de los estudios realizados sobre SAQDs se han empleado sustratos cuya superficie libre corresponde a una superficie (001). Los SAQDs formados en estas condiciones presentan una geometría con una base de gran simetría. Por el contrario, en los estudios de crecimiento realizados sobre superficies del sustrato de alto índice de Miller se ha observado que, con frecuencia, los SAQD tiende a presentar geometrías con una fuerte anisotropía. En este trabajo consideraremos en todo momento que la dirección de crecimiento de los SAQD es paralela a la dirección cristalográfica [001]. En la Figura 1.1 hemos reproducido dos imágenes en las que se puede apreciar el aspecto de este tipo de nanoestructuras. La Figura 1.1(a) contiene una imagen de microscopía de fuerza atómica (en inglés, “Atomic Force Microscopy” AFM) en la que la superficie de la muestra se ha conseguido reproducir con gran detalle. En este caso, aunque no resulta fácil de apreciar en la Figura debido a la elección de diferentes escalas para representar las dimensiones en el plano y la dimensión vertical, los SAQDs presentan una geometría de casquete esférico o “lente”. La Figura 1.1(b) muestra una imagen de un corte trasversal de dos SAQDs obtenida por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (en inglés, “High Resolution Transmission Electron Microscopy” HRTEM) tras el proceso de recubrimiento. Esta técnica resulta menos indicada para la caracterización morfológica de los SAQDs que la microscopía de AFM, aunque permite estudiar la estructura cristalina del sistema para detectar defectos, gradientes de composición, etc

Densidad (cm ⁻²)	R_{QD}^a (nm)	h_{QD} (nm)	Morfología	Métodos	Ref.
2×10^{10}	14	5	Pirámide	MBE, 480°C, TEM	[12]
10^{10} - 10^{11}	8.5	5-6	Pirámide	MBE, 480°C, TEM	[13]
max. 4×10^{10}	10	6-7	Lente	MBE, 530°C, AFM	[3, 14]
	13	5	Pirámide truncada	MBE, 512°C, X-STM ^b	[15]
10^9 - 5×10^{10}	10.5-13	3.5-8.5	Pirámide truncada	MBE, 500°C, TEM	[16]
1.7×10^{10}	17	8.4	Lente	MOCVD, 500°C, AFM	[17]
10^{10}	10	1	Anillo	MBE, 520°C, TEM	[10, 18]

^aEn SAQD con morfología piramidal $R_{\text{QD}} = b/\sqrt{2}$, siendo b la longitud de la base.

^bMicroscopía de barrido por efecto túnel de una sección transversal, *Cross-Sectional Scanning-Tunneling Microscopy*

Tabla 1.2: Propiedades estructurales y condiciones de crecimiento de diferentes muestras de SAQDs estudiadas en la literatura. R_{QD} indica el radio y h_{QD} la altura del SAQD. En la cuarta columna hemos incluido el método de crecimiento, la temperatura del sustrato y la técnica de caracterización estructural empleada.

En la Tabla 1.2 hemos recogido los datos estructurales de una serie de SAQDs obtenidos por los grupos de investigación liderados o vinculados a los autores de la Tabla 1.1. A la vista del conjunto de datos mostrados, se puede considerar que el tamaño típico de los SAQDs vendrá definido por un radio, en adelante R_{QD} , comprendido entre ~ 10 y 15 nm y una altura, en adelante h_{QD} , comprendida entre ~ 5 y 8 nm. En general, la morfología exacta del SAQD es difícil de determinar. Como hemos visto en la Figura 1.1(a), por técnicas de AFM es posible conseguir su reproducción cuando la muestra está descubierta. Sin embargo, tras el proceso de recubrimiento ya no se tiene acceso directo a la superficie de la nanoestructura y su caracterización pasa por emplear la microscopía HRTEM, ver Figura 1.1(b). Las geometrías observadas más frecuentemente en este sistema son aquellas de tipo lente y de pirámide de base cuadrada truncada y sin truncar.

Otro aspecto importante sobre el que se han realizado numerosos estudios es la concentración de indio en el interior del SAQD. Tras un análisis por difracción de rayos X de muestras crecidas en diferentes condiciones, se ha comprobado que al depositar $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre GaAs el contenido de indio en el SAQD es mayor que cuando se deposita únicamente InAs. La razón de este particular comportamiento tiene su origen en la reorganización de material de la WL en el proceso de formación de la isla [19].

1.2.2. Propiedades ópticas

El estudio de las propiedades ópticas de los SAQDs tiene una doble motivación. Por una parte, la caracterización óptica se ha revelado como una herramienta in-

dispensable en el estudio de la estructura electrónica de estas estructuras. Por otra parte, se persigue poder controlarlas para desarrollar nuevos dispositivos optoelectrónicos basados en SAQDs. Entre las técnicas que se emplean con mayor frecuencia cabe destacar la absorción, la fotoluminiscencia (en inglés “Photoluminescence” PL) y la fotoluminiscencia de excitación (en inglés “Photoluminescence of Excitation” PLE) [20]. En la primera de ellas se analiza la radiación absorbida al excitar un electrón que ocupa un estado de la banda de valencia a un estado de la banda de conducción. Esta técnica permite conocer tanto la energía de la transición fundamental como la energía de transiciones entre estados excitados. Además, se puede demostrar que la intensidad de la absorción entre los correspondientes estados es proporcional a la probabilidad de transición [21], proporcionando una información adicional relacionada con las funciones de onda de los estados confinados. En la Figura 1.2 hemos reproducido un espectro de absorción de SAQDs con forma de lente [22]. Los diferentes picos que aparecen en el espectro tiene su origen en la absorción entre los estados confinados del SAQD. Aunque la técnica ofrece una valiosa información sobre la estructura electrónica de los SAQDs, su realización experimental presenta una limitación debido a la baja eficiencia del proceso de absorción. En una única capa de SAQD la señal de absorción es, en primera aproximación, la de un único pozo cuántico (QW) corregida por el factor de cubrimiento de los QD, típicamente $\sim 5\%$. Es por ello, que pese a la potencia de la técnica, su realización presente serias dificultades experimentales.

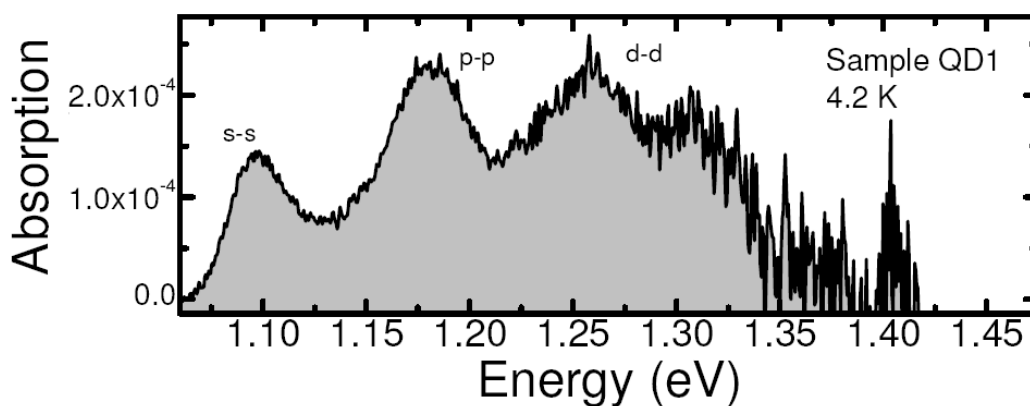


Figura 1.2: Espectro de absorción de SAQDs con morfología tipo lente. La cola de absorción correspondiente a la WL ha sido sustraída. Reproducida de [22].

En las técnicas de luminiscencia, por el contrario, se analiza el proceso de emisión tras excitar la muestra por absorción de radiación. La técnica de PL presenta principalmente dos inconvenientes para el estudio de la estructura electrónica: los estados excitados pueden ser observados únicamente en condiciones de alta

ocupación, lo que puede conducir a que las energías de los estados se vean perturbadas por la interacción de Coulomb entre portadores; las intensidades relativas de las transiciones no pueden ser relacionadas directamente con la fuerza de oscilador pues, en general, la intensidad de la emisión depende tanto de la probabilidad de la transición como de la ocupación de los estados. En la Figura 1.3 hemos reproducido varios espectros de PL en los que se han empleado diferentes potencias de excitación¹. Estas curvas muestran la dependencia existente entre la señal de PL y la potencia, ilustrando el inconveniente antes mencionado de esta técnica, pues la intensidad de los picos de más alta energía varía para los diferentes espectros. No obstante, es posible extraer información relativa a las transiciones entre estados excitados.

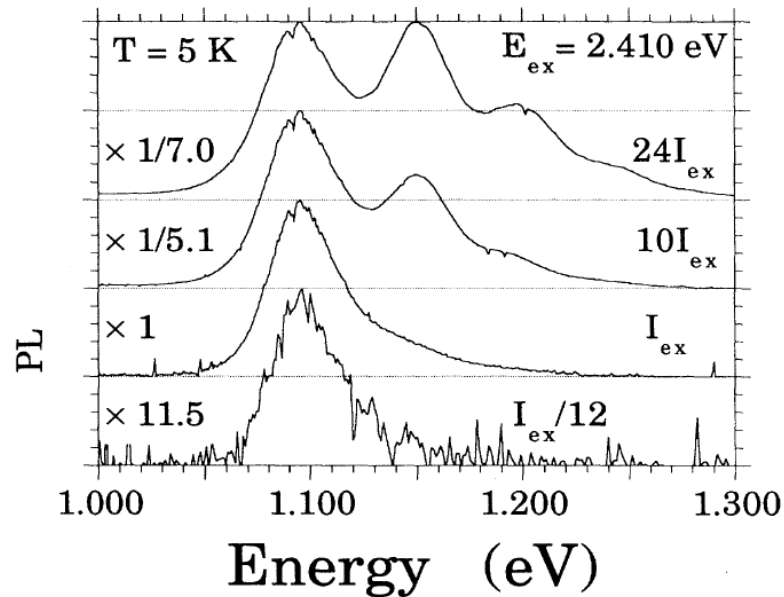


Figura 1.3: Espectro de PL en función de la potencia de excitación para muestras similares a las caracterizadas en la Fig.1.2. Reproducida de [23].

La técnica de PLE permite, sin embargo, reconstruir la señal de absorción de forma indirecta. En esta técnica se mide la emisión, por ejemplo, de la transición fundamental, para diferentes valores de la energía de excitación. Cuando la excitación es resonante con una transición entre estados excitados, se produce la absorción y tras termalizar los portadores fotogenerados, se registra un aumento en la emisión de la transición fundamental. En la Figura 1.4 hemos reproducido un espectro de PL, junto con el de PLE, pudiendo apreciarse el aumento de emisión conforme la excitación es resonante con transiciones entre estados excitados. Una

¹Potencia por unidad de área. En general se suele expresar en W/cm^2 .

descripción más detallada de estas técnicas junto con numerosos resultados experimentales se pueden encontrar en la siguientes Referencias [1, 6, 24, 25].

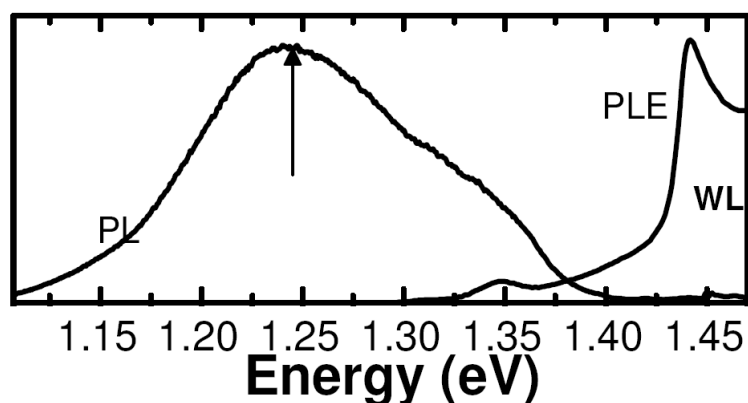


Figura 1.4: Espectro de PL junto con el de PLE. La flecha indica la energía de detección empleada en la medida de PLE. Reproducida de [22, 26].

Todos los espectros mostrados hasta ahora presentan unas resonancias cuya anchura a media altura (en inglés, “Full Width at Half Maximum” FWHM) es mayor de 20 meV, lo que enmascara cualquier tipo de proceso que ocurra a escalas de energía del orden de unos pocos meV, o por debajo. El principal origen de estas anchuras espectrales está en la inhomogeneidad del tamaño de los SAQDs que presentan las muestras. En la Tabla 1.2 hemos visto que la densidad de SAQDs es típicamente 10^{10} cm^{-2} . Suponiendo que la excitación se realiza utilizando un láser con un área de iluminación $\sim 100 \mu\text{m}^2$, resulta fácil comprobar que el número de SAQDs excitados será igual a $\sim 10^4$. Por lo que numerosos SAQDs, que emiten en un espectro ancho de energías, serán excitados dando lugar al ensanchamiento inhomogéneo del espectro. Esto ha motivado el desarrollo de técnicas experimentales que buscan, en la medida de lo posible, aislar la respuesta de un único SAQD. Estas técnicas se conocen en la bibliografía como técnicas de espectroscopía de un único QD [25] y pueden ser agrupadas en dos categorías: (a) espectroscopía de alta resolución espacial sobre la muestra sin modificar y (b) espectroscopía sobre muestras que han sido sometidas a algún tipo de procesado para reducir la densidad de SAQDs. Dentro de la categoría (a) encontramos la microscopía óptica de barrido de campo cercano (en inglés, “Near-field scanning optical microscopy” NSOM) [27] y la microscopía confocal [22, 28, 29]. En la categoría (b) la muestra es procesada de forma que se colocan unas máscaras metálicas que sólo dejan al descubierto la zona efectivamente excitada [30], o bien se ataca químicamente la superficie de la muestra de forma que se generan una serie de estructuras aisladas tipo *mesa* sobre las que se localizan los SAQDs que serán excitados ópticamente

[31]. En la Figura 1.5 hemos reproducido una serie de espectros correspondientes a muestras con *mesas* de diferentes tamaños. La secuencia muestra claramente la reducción progresiva del ensanchamiento inhomogéneo, finalizando en la detección de un único SAQD.

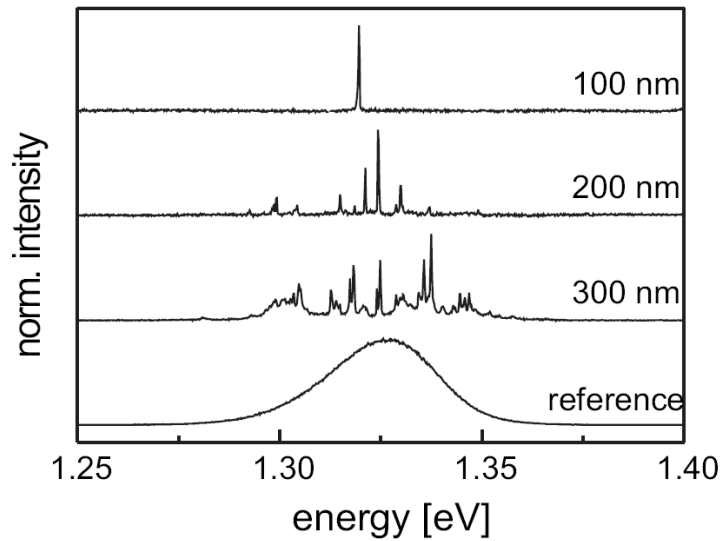


Figura 1.5: Espectro de PL correspondientes a SAQDs de $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$ para diferentes dimensiones de la *mesa* sobre la que están localizados (100, 200 y 300 nm) y para la muestra sin post-procesado. Extraída de [31].

Estas técnicas han permitido acceder a las propiedades ópticas de SAQDs aislados en los que el número de portadores confinados excede de un único par electrón-hueco, posibilitando el estudio de la interacción de Coulomb entre los portadores, y aportando una información muy valiosa sobre la estructura electrónica de los SAQDs. En el Capítulo 4 mostraremos evidencias experimentales relativas a esta fenomenología y desarrollaremos un modelo teórico capaz de describirla correctamente.

1.3. Puntos cuánticos de GaN/AlN

Los nitruros semiconductores del grupo III (GaN, AlN, e InN) y sus aleaciones han despertado un gran interés para la realización de dispositivos optoelectrónicos que operan en el rango de longitudes de onda corta [32]. Esto se debe a la magnitud de la banda prohibida que exhiben algunos de ellos, e.g. 3.5 eV en el GaN y 6.3 eV en el AlN. El objetivo de este apartado no es revisar los logros conseguidos en este campo, ni describir el estado actual de la tecnología basada en estos materiales.

Únicamente nos centraremos en las propiedades fundamentales de los QDs basados en el sistema GaN/AlN.

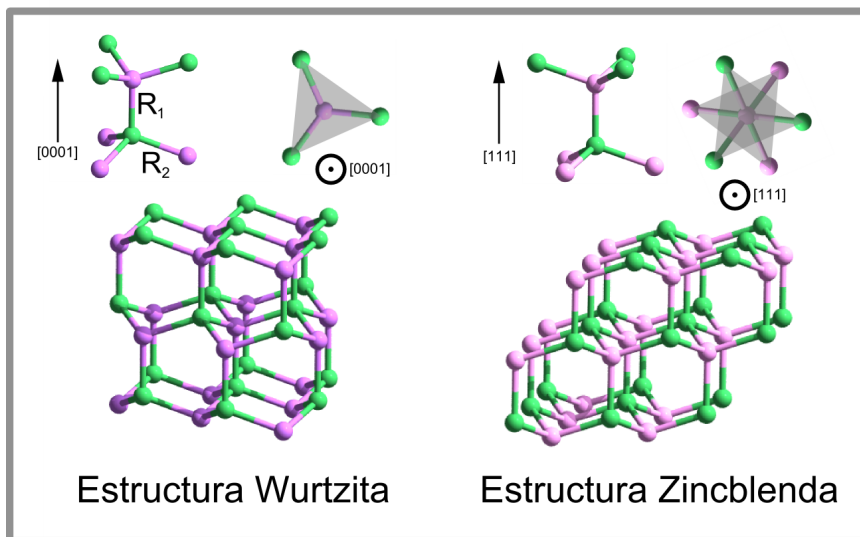


Figura 1.6: Esquema del GaN en sus fases wurtzita y zincblenda.

Los nitruros del grupo III cristalizan, en condiciones normales de presión y temperatura, en dos fases cristalográficas: la wurtzita (fase α) y la zincblenda (fase β)². La primera de ellas es termodinámicamente estable. Sin embargo, pese a la metaestabilidad de la fase β , es posible el crecimiento epitaxial de nitruros en dicha fase utilizando un sustrato cúbico como 3H-SiC [33] ó GaAs [34, 35]. En la Figura 1.6 mostramos una representación gráfica de las dos estructuras cristalinas. Por ser la wurtzita una estructura menos conocida que la zincblenda, dentro del campo de los semiconductores, dedicaremos unas líneas a su descripción.

1.3.1. Estructura cristalina de la wurtzita

El grupo espacial de la estructura cristalina de la wurtzita es $P6_3mc$. La estructura consiste en dos subredes de empaquetamiento hexagonal compacto desplazadas una respecto de la otra una distancia $u_{ideal} = 3/8c$ a lo largo del eje [0001] (ver Figura 1.6). Cada una de las dos subredes está ocupada por una única

²A altas presiones es posible encontrarlos en una fase diferente, e.g. la estructura cristalina del GaN se transforma en halita a 22.9 GPa

especie atómica, resultando una celda unidad que contiene cuatro átomos. En el caso de los nitruros el valor del parámetro interno u se desvía del valor ideal antes definido. La perturbación de las subredes respecto del empaquetamiento hexagonal compacto ideal puede ser parametrizada definiendo dos enlaces de longitudes diferentes [36] (ver Figura 1.6):

$$R_1 = u \quad R_2 = a \sqrt{\frac{1}{3} + \left(\frac{1}{2} - \frac{u}{c}\right)^2 \left(\frac{c}{a}\right)^2}. \quad (1.1)$$

Es fácil comprobar que $R_1 = R_2$ cuando $u = 3/8c$. La wurtzita pertenece al grupo puntual o clase cristalina $6mm$. Ésta es una de las veinte clases que carece de centro de simetría (no-centrosimétrica) y que exhibe propiedades piezoeléctricas³. Además pertenece al conjunto de las diez clases polares, conocidas como piroeléctricas⁴, por lo que puede presentar un eje polar y, en consecuencia, generar una polarización espontánea [37]. Es por ello que las heteroestructuras basadas en nitruros del grupo III exhiben una polarización espontánea y, en presencia de una deformación, una polarización piezoeléctrica. El campo eléctrico creado por estas polarizaciones es conocido como campo interno y al potencial asociado a este campo, potencial interno. En el Capítulo 2 profundizaremos en el estudio de estas propiedades al desarrollar el modelo teórico que nos permitirá describir los potenciales internos en los SAQDs de GaN/AlN.

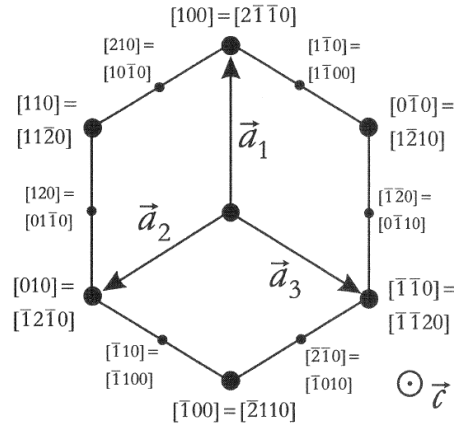


Figura 1.7: Orientaciones cristalográficas en el sistema hexagonal indicadas mediante los índices de Miller $[hkl]$ y los de Miller-Bravais $[hkil]$, notese que $j = -(h+k)$. El sistema de Miller utiliza tres vectores base $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{c})$ y el de Bravais cuatro $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c})$.

³Clases cristalinas piezoeléctricas: 1, 2, m, 222, mm2, 4, -4, 422, 4mm, -42m, 3, 32, 3m, 6, -6, 622, 6mm, -62m, 23, -43m

⁴Clases cristalinas piroeléctricas: 1, 2, m, mm2, 4, 4mm, 3, 3m, 6, 6mm

A lo largo de todo el texto emplearemos los índices de Miller-Bravais en lugar de los de Miller para indicar direcciones y planos cristalográficos en la estructura wurtzita [38], como suele ser habitual en la bibliografía. En estructuras con simetría hexagonal el sistema de Miller-Bravais permite obtener las familias de planos y direcciones equivalentes a partir de la permutación de los índices. En la Figura 1.7 hemos representado la correspondencia entre ambos sistemas.

1.3.2. Crecimiento de puntos cuánticos de GaN/AlN

El crecimiento de cristales masivos de nitruros del grupo III por técnicas epitaxiales se consigue recurriendo a los métodos MBE y MOCVD. Los sustratos que se utilizan con mayor frecuencia en el crecimiento de este tipo de materiales son el zafiro (Al_2O_3) (0001) y el 6H-SiC (0001). Otro sustrato sobre el que se ha efectuado el crecimiento ha sido el Si (111), debido a su bajo coste y a las posibilidades de integración en los dispositivos convencionales que ofrece el uso del silicio. Lamentablemente, no es posible obtener cristales de nitruros del grupo III suficientemente grandes como para que constituyan una alternativa real a la utilización de los sustratos anteriormente mencionados. Los experimentos realizados en GaN masivo y heteroestructuras de GaN/AlGaIn crecidas por epitaxia sobre un sustrato de GaN crecimiento (homoepitaxial), han demostrado una reducción considerable de la densidad de defectos y por ende, la mejora de las propiedades ópticas y de transporte [39].

Otro problema que presenta el crecimiento de estos semiconductores es la estabilidad de la molécula de nitrógeno N_2 . Su energía del enlace es superior a 5 eV, lo que supone que, aún realizando el crecimiento a alta temperatura ($\sim 700^\circ\text{C}$ en MBE y $\sim 1000^\circ\text{C}$ en MOCVD), la eficiencia de la disociación sea baja y por consiguiente el crecimiento se realice muy lentamente. Para solventar esta limitación se suele recurrir a los siguientes métodos:

- Utilización de una celda de plasma de nitrógeno. La molécula de N_2 se disocia mediante el uso de microondas o radio-frecuencia (RF) antes de que alcance el sustrato. Este método se utiliza en el crecimiento por MBE.
- Empleo de fuentes diferentes del N_2 . La alternativa más prometedora es el amoníaco, NH_3 . Tanto en el crecimiento por MBE como por MOCVD se puede utilizar este método.

Información más detallada sobre el crecimiento de los nitruros del grupo III se puede encontrar en las Refs. [40, 41].

Tras realizar estas consideraciones generales sobre el crecimiento de los nitruros pasaremos a describir el caso de los SAQDs basados en estos materiales. El crecimiento de este tipo de nanoestructuras por el modo SK ha sido conseguido por diferentes grupos de investigación utilizando el método MBE [42, 43, 44, 45] y el MOCVD [46]. Existen procedimientos alternativos para formar QDs de GaN/AlN que no siguen el modo SK, como son, por ejemplo, la utilización de átomos de Si como antisurfactantes [47], la ablación láser [48] y la utilización del mecanismo VLS, *Vapor-Liquid-Solid*, utilizado en el crecimiento de estructuras columnares, o *whiskers* [49].

De los diferentes trabajos en los que se describe el proceso de crecimiento de SAQDs, debemos destacar el realizado por C. Adelmann *et al.* [50] por la calidad de los resultados y la claridad de la exposición. Para una temperatura de crecimiento de 730 °C y una velocidad de crecimiento de 0.15 ML/s⁵ es posible identificar una serie de etapas durante la deposición de GaN que conducen a la formación de los SAQDs:

1. El crecimiento de las primeras 2 ML de GaN se realiza capa a capa presentando la superficie una morfología prácticamente inalterada respecto a la del sustrato de AlN.
2. Al seguir incrementando la deposición de GaN, se forman unas plaquetas con un tamaño aproximado de 2 ML de alto y ~ 10 nm de dimensión lateral. Cuando la cantidad de material depositado es ~ 2.4 ML, las plaquetas se transforman en islas piramidales con una altura de 3-4 ML ($\sim 0.7-1.0$ nm) y una relación (ratio) radio/altura de $r_{\text{QD}} \approx 8.34$. Esta transición de plaquetas a pirámides se identifica con la transición 2D-3D del modo SK.
3. El crecimiento de estas islas continua a medida que se deposita más material sobre la superficie. Adicionalmente, también se observa la nucleación de nuevas islas piramidales.
4. Al alcanzar una deposición igual a 2.8 ML la densidad de islas deja de aumentar y permanece constante, $\sim 10^{11}$ cm². Las islas alcanzan entonces una altura de 1.6 nm, preservando la ratio $r_{\text{QD}} \approx 8.34$.
5. Estas islas se transforman sucesivamente en otras de mayor altura con una ratio $r_{\text{QD}} \approx 5.0$. El crecimiento finaliza en una distribución bimodal de tamaños, pues no todas las islas experimentan esta transformación.

⁵ML representa una monocapa, del inglés “monolayer” y equivale a media celda unidad. En el caso de la zincblenda una monocapa en el plano (001) equivale a $(a/2)$ y en el caso de la wurtzita (0001) una monocapa es $(c/2)$

La transformación de los SAQDs de 1.6 nm de altura en otros de mayor tamaño depende críticamente de la temperatura del sustrato. A una temperatura de ~ 750 °C el paso 5 se produce inmediatamente después de la transición 2D-3D. Por otra parte, a ~ 700 °C esta transición puede ser suprimida totalmente. Para optimizar la uniformidad de tamaños se puede aprovechar la ventana de temperaturas del sustrato comprendida entre 680 °C y 720 °C. Para temperaturas inferiores, el modo FVM prevalece sobre el SK. Por otra parte, para temperaturas superiores se observa una distribución bimodal de tamaños, como ya hemos dicho.

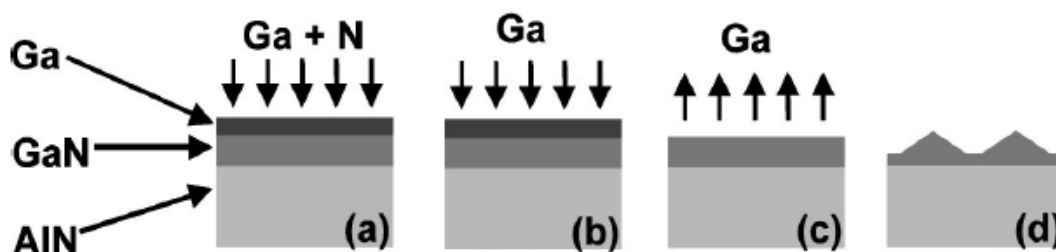


Figura 1.8: Esquema del procedimiento experimental seguido en el modo de crecimiento Stranski-Krastanov modificado. (a) Crecimiento de GaN bajo condiciones ricas en Ga con una capa adsorbida de exceso de Ga sobre la superficie de crecimiento. (b) Al cesar el crecimiento manteniendo un flujo de Ga, la superficie se mantiene 2D y la capa de Ga se regenera. (c) En condiciones de vacío la capa de Ga es desorbida en unos pocos segundos. (d) La superficie de GaN sufre la transición 3D característica del modo SK. Reproducida de [51].

Un procedimiento alternativo al descrito en las líneas anteriores se puede conseguir utilizando el Ga como surfactante. Este modo de crecimiento se ha denominado Stranski-Krastanov modificado [51]. En la Figura 1.8 se representan las diferentes etapas que caracterizan este modo de crecimiento. Las muestras obtenidas presentan una densidad $\sim 10^{10}$ cm $^{-2}$, esto es, un orden de magnitud menor que sin el empleo del surfactante. La altura de los SAQDs depende de la temperatura del sustrato, llegando a alcanzar los 10 nm para ~ 730 °C.

Por otro lado, la obtención de SAQDs realizada por M. Miyamura *et al.* sigue un proceso muy diferente a los descritos hasta ahora [52]. El método empleado en el crecimiento es el MOCVD, siguiendo el modo de crecimiento de SK. El sustrato empleado es el 6H-SiC y el crecimiento se lleva a cabo a una temperatura comprendida entre 960-990 °C. En la Figura 1.9 hemos reproducido tres imágenes de AFM que ilustran el resultado del crecimiento empleando tres temperaturas del sustrato diferentes. La transición se produce tras realizar una deposición de ~ 4 ML, por lo que el espesor crítico para estas condiciones de crecimiento debe estar localizado en torno a ese valor. Los QDs crecidos a 960 °C exhiben un tamaño de 2/10 nm, expresado éste como altura/radio, y una densidad de $\sim 5 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$

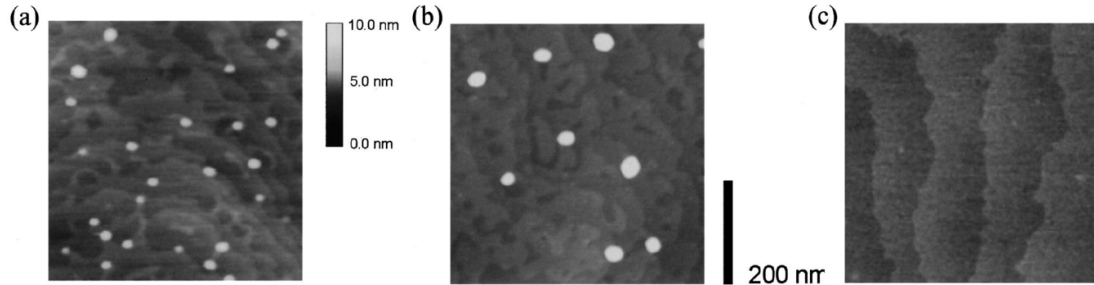


Figura 1.9: Imágenes de AFM de SAQDs crecidos a una temperatura de sustrato igual a (a) 960 °C, (b) 975 °C y (c) 990 °C por MOCVD. Extraídas de la Ref. [52].

(ver Fig. 1.9(a)). Al aumentar la temperatura, el tamaño de los QDs aumenta y su densidad disminuye. Los QDs formados a 975 °C tiene un tamaño de 5/17.5 nm y una densidad de $\sim 4 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ (ver Fig. 1.9(b)). Sin embargo, cuando la temperatura alcanza los 990 °C, no se forma ningún QD sobre la capa mojante (ver Fig. 1.9(c)). Esto se atribuye a una alta migración y evaporación de los átomos de Ga. Por lo tanto, al variar la temperatura 15 °C la formación de los SAQDs dejan de ser observada. Este comportamiento revela el delicado balance entre la concentración de Ga, N, y la temperatura de crecimiento, que gobierna el crecimiento por MOCVD.

1.3.3. Propiedades estructurales y ópticas

En el apartado anterior hemos descrito los aspectos más relevantes del crecimiento de SAQDs de GaN/AlN, de lo expuesto es posible apreciar que existe una gran dispersión de tamaños dependiendo de las condiciones de crecimiento. Sin embargo, existe una gran unanimidad en que la forma exhibida por estos SAQDs es de **pirámide de base hexagonal truncada** [42]. En la Tabla 1.3 hemos recogido los valores de la energía de emisión medidos en experimentos de fotoluminiscencia de muestras de SAQDs caracterizadas por varios grupos de investigación. En cada entrada de la Tabla hemos indicado las dimensiones de los SAQDs, en los casos que ha sido posible. Además, hemos incluido diferentes parámetros que describen las condiciones de crecimiento empleadas. Con esta tabla pretendemos evidenciar la dispersión de tamaños que se encuentra en la bibliografía y su relación con las propiedades ópticas.

En la Figura 1.10 hemos representado gráficamente la distribución de tamaños de los SAQD incluidos en la Tabla 1.3. A la vista de este resultado no resulta fácil establecer un prototipo de GaN/AlN SAQD. Es por ello que hemos buscado

E_{PL} (eV)	$FWHM^a$ (meV)	T_{PL} (K)	Sustrato	T_{Subs} (°C)	Tec.	Tamaño ^b (nm)	n_{QD} (cm ⁻²)	Nº Capas	Ref.
2.95	335	2	Zafiro	700	MBE	4.1/8.5	$\sim 10^{11}$	20	[53]
3.75	255	2	Zafiro	700	MBE	2.3/4	$\sim 10^{11}$	20	[53]
3.75	275	2,300	GaN	700	MBE	3.25/8.5	$\sim 10^{11}$	1	[54]
2.95	300	300	Zafiro	700	MBE	4/8	$\sim 10^{11}$	20	[55]
4.18	480	5	6H-SiC	960	MOCVD	2/10	5×10^{10}	1	[52]
3.59	560	5	6H-SiC	975	MOCVD	5/17.5	4×10^9	1	[52]
4.20	420	3.5	6H-SiC	960	MOCVD	2/5	5×10^{10}	1	[56]
3.60	560	3.5	6H-SiC	975	MOCVD	5/12.5	3×10^9	1	[56]
3.22 ^c	6	3.5	6H-SiC	-	MOVCD	4/10	6×10^9	1	[57]
2.15	-	300	Si(111)	800	MBE	12 MLs ^d	-	1	[58]
2.50	-	300	Si(111)	800	MBE	10 MLs ^d	-	1	[58]
2.80	-	300	Si(111)	800	MBE	7 MLs ^d	-	1	[58]
2.30	480	300	Si(111)	800	MBE	5/7-10	2×10^{11}	40	[59]
3.00	191	300	Si(111)	800	MBE	4/10	$1-3 \times 10^{11}$	86	[60]
2.93	375	300	Zafiro	800	MBE	4/10	$1-3 \times 10^{11}$	40	[60]
2.35 ^e	450	300	Si(111) ^f	800	MBE	5 ^g	1×10^{10}	10	[61]
2.55	300	300	Si(111)	800	MBE	4.3 ^g	5×10^{11}	40	[61]
2.75	600	300	Si(111)	800	MBE	3.7 ^g	5×10^{11}	86	[61]
3.70	280	30-300	Zafiro	1125	MBE	5/25	3×10^{10}	20	[44]
2.76	600	8.5-300	Zafiro	750	MBE	3/15	-	10	[43]

^a Anchura inhomogénea.

^b Tamaño expresado como h_{QD}/R_{QD} .

^c PL de un único QD

^d Tamaño expresado en Monocapas depositadas

^e Medida a baja potencia ~ 1 W/cm²

^f Sustrato inclinado en la dirección (110). Reduce la densidad de QDs.

^g Altura promedio en nm

Tabla 1.3: Resumen de los valores publicados sobre las condiciones de crecimiento, el tamaño y propiedades de la emisión de SAQDs tipo GaN/AlN.

una distribución de tamaños que sea representativa de una mayoría de los SAQDs contemplados en la gráfica. Dicha distribución ha sido representada por un línea sólida sobre la Figura y representa a una familia de nanoestructuras con ratio radio/altura constante $r_{\text{QD}} = 2.3$. Fijaremos este valor para realizar los estudios teóricos de los Capítulos 3 y 4.

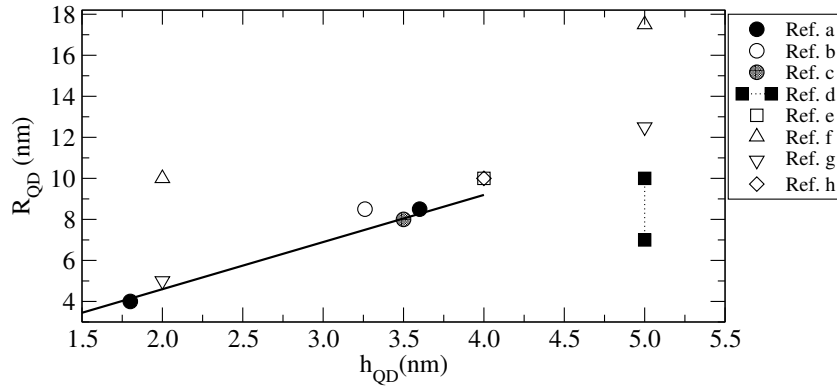


Figura 1.10: Representación gráfica de la dispersión de tamaños de los QDs incluidos en la Tabla 1.3. La línea continua indica la distribución de tamaños elegida en el estudio teórico que presentaremos en el Capítulo 3, i.e. una ratio $r_{\text{QD}} = 2.3$. Referencias: a [53], b [54], c [55], d [59], e [60], f [52], g [56], h [57].

Como se ve en la Tabla 1.3, la energía de emisión de estas nanoestructuras cubre un rango entre 2.15 eV y 4.18 eV. Sorprende que, en lugar de observar una emisión por encima del valor de la banda prohibida del GaN (~ 3.5 eV), encontramos que la emisión se puede producir tanto a mayor como a menor energía. El origen de este comportamiento radica en la polarización espontánea y en la polarización piezoeléctrica características de estas heteroestructuras. Esta polarización crea en el interior del punto cuántico un campo interno de ~ 5.0 MV/cm, por lo que la estructura electrónica es muy sensible a las dimensiones del SAQD, en particular a la altura. En el Capítulo 2 estudiaremos en detalle el potencial interno y en el Capítulo 3 su impacto sobre la estructura electrónica y las propiedades ópticas desde el punto de vista teórico. El hecho de que los SAQDs puedan emitir en 2.0 eV, lejos de suponer un problema, le confiere una gran versatilidad a la tecnología basada en ellos. En la Figura 1.11 hemos reproducido una imagen policromática de la emisión de diferentes muestras de con SAQDs de GaN/AlN excitados ópticamente [58]. Lamentablemente, la eficiencia óptica se reduce exponencialmente al aumentar la altura de los SAQDs, aspecto que será estudiado en el Capítulo 3. Ello es debido a la separación espacial de los electrones y huecos inducida por

el potencial interno. Entonces, para obtener un diodo emisor de luz, LED⁶, que cubra el espectro del visible se deberá pagar un precio muy alto en términos de rendimiento.

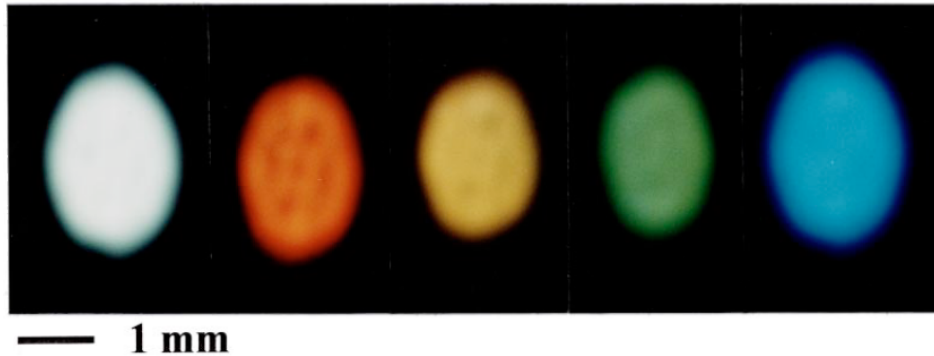


Figura 1.11: Fotografía de la emisión de SAQDs de GaN/AlN a temperatura ambiente. Cada color corresponde a nanoestructuras de diferente tamaño. La emisión de luz blanca se ha conseguido a través de un apilamiento de planos de SAQD de diferentes tamaños. Extraída de [58].

La dependencia tan crítica entre el tamaño de la nanoestructura y la energía de la emisión también se ve reflejada en el valor de la anchura inhomogénea, que, como hemos dicho, se atribuye generalmente a la dispersión de tamaños. En efecto, en la Tabla 1.3 es posible comprobar que la anchura nunca es menor de 200 meV y presenta un valor promedio de 380 meV. En el sistema InAs/GaAs la dispersión de las energías de emisión es significativamente menor, ~ 350 meV. Asimismo los valores de la anchura inhomogénea son mucho menores, típicamente $\sim 20 - 100$ meV. Esta comparación pone de manifiesto, las diferencias existentes entre las propiedades ópticas de ambos sistemas.

Las propiedades ópticas de los SAQDs de GaN/AlN no han sido estudiadas tan extensivamente como en otros sistemas, debido principalmente a la dificultad de encontrar fuentes de luz coherente capaces de trabajar a energías superiores a 3 eV. Es por ello que en muchos de los experimentos se ha empleado la catodoluminiscencia (CL) como técnica de caracterización. En esta técnica, la luminiscencia se produce tras excitar la muestra mediante un haz de electrones. Ello provoca una fuerte perturbación en el sistema, ya que el potencial interno es sensible a la carga de electrones incidentes, que hace que los resultados de las técnicas CL y PL no sean comparables. En la Figura 1.12 mostramos un ejemplo que ilustra esta discrepancia. Al comparar los espectros de emisión correspondientes a la PL y a la CL se observa que en este último caso la emisión está desplazada hacia el azul

⁶ *Light Emitting Diode*

como consecuencia del apantallamiento del campo interno inducido por la alta concentración de los electrones incidentes. En este trabajo hemos excluido de nuestro estudio los resultados cuantitativos que se desprenden de los espectros de CL.

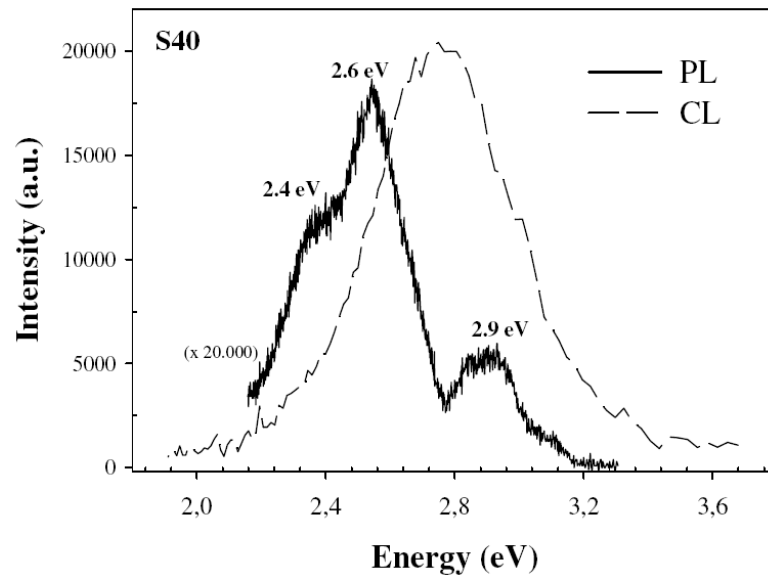


Figura 1.12: Comparación de un espectro de CL y otro de PL obtenido de la misma muestra a temperatura ambiente. Reproducida de [62].

En los resultados experimentales discutidos hasta este punto, únicamente se ha obtenido información de la energía de la transición fundamental. Por otro lado, en la Sección anterior vimos que al analizar la PL en función de la densidad de excitación era posible obtener información de las transiciones ópticas entre estados excitados (ver Fig. 1.3). Sin embargo, en experimentos análogos realizados sobre SAQDs de GaN/AlN los resultados no ofrecen el mismo aspecto que los obtenidos para el sistema InAs/GaAs. En la Figura 1.13 mostramos tres espectros de PL registrados con diferentes densidades de excitación. Por un lado, se aprecia un corrimiento hacia el azul con el aumento de la potencia. Éste tiene su origen en el apantallamiento del campo interno por los portadores fotogenerados que se acumulan en los estados de la banda de valencia y conducción. En el Capítulo 4 estudiaremos más profundamente la interacción Coulombiana entre los portadores confinados en el SAQD. Por otro lado, no es posible distinguir las transiciones entre estados excitados con la misma claridad que en los SAQDs de InAs/GaAs. Esto se debe principalmente a la anchura característica de los espectros de PL que, como dijimos, excedía los 200 meV, enmascarando con ello las transiciones entre estados excitados.

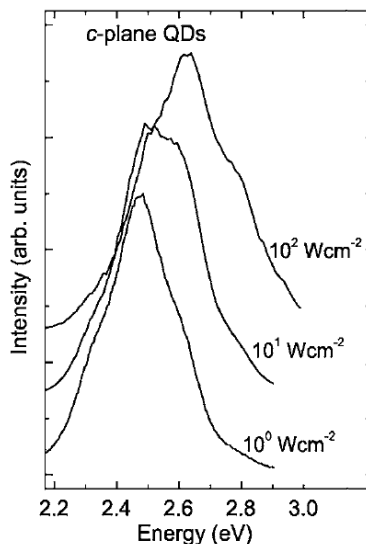


Figura 1.13: Desplazamiento hacia el azul del máximo de la emisión de GaN/AlN SAQD al aumentar la potencia de excitación. Extraída de [63].

1.4. Estudio teórico de puntos cuánticos auto-ensamblados

Al igual que sucede en otras disciplinas, en la práctica no es posible desarrollar un tratamiento teórico que sea capaz de describir todas las evidencias experimentales que se tienen sobre puntos cuánticos auto-ensamblados. En consecuencia, es preciso identificar qué aspectos son más relevantes para los objetivos de la investigación y centrar el estudio teórico sobre ellos. En esta Sección presentaremos el planteamiento general utilizado habitualmente para el estudio de las propiedades electrónicas y ópticas de SAQDs. A continuación, realizaremos una descripción general de las dos grandes familias de modelos teóricos desarrollados para el estudio de nanoestructuras: modelos atomísticos y modelos continuos. Finalmente, comentaremos brevemente las opciones existentes en la literatura para el estudio teórico tanto de la estructura electrónica como de la deformación y de los campos internos.

1.4.1. Planteamiento general del problema

En la Figura 1.14 hemos representado gráficamente un esquema en el que se pueden identificar los diferentes bloques en los que se suele dividir el estudio de los SAQDs. Este esquema configura el planteamiento general del problema, el cual

ha sido empleado en numerosos trabajos científicos, resultando ser muy efectivo y útil. A continuación describiremos brevemente cada uno de los bloques.

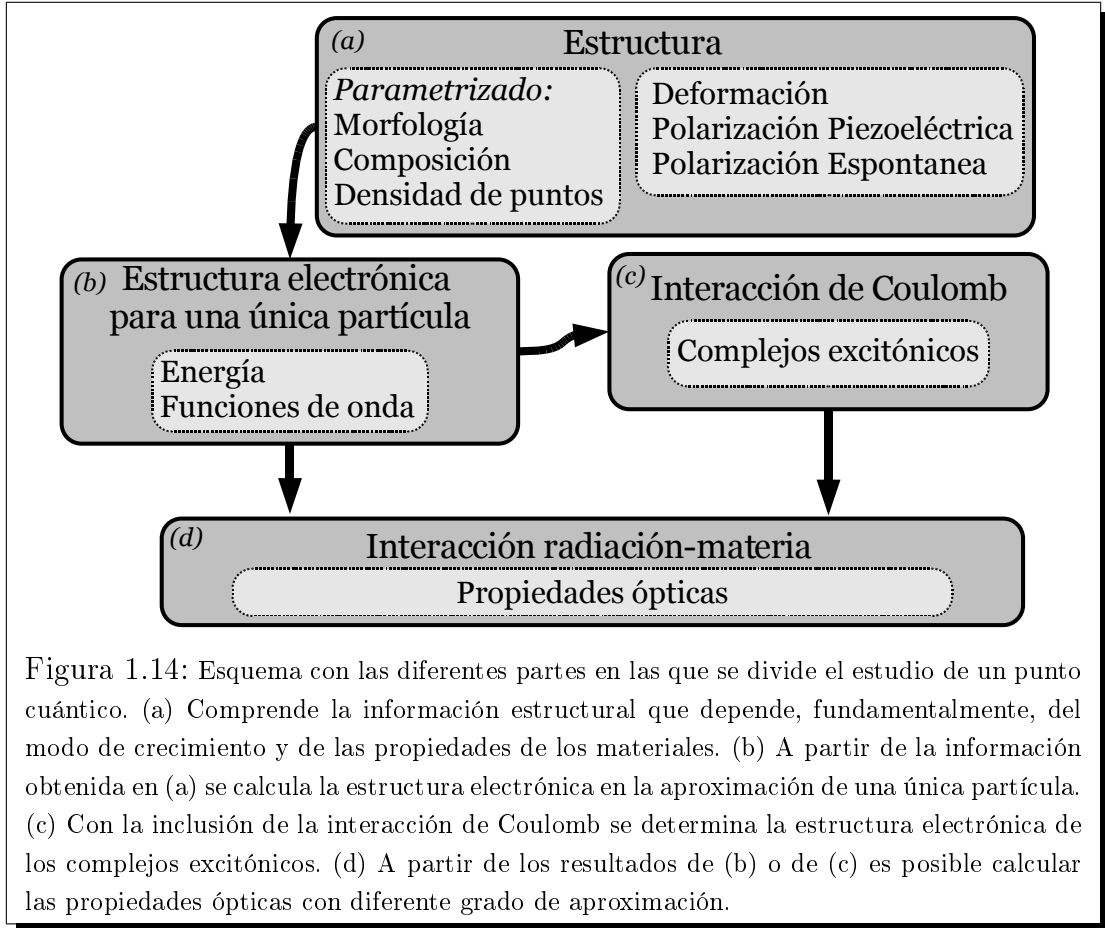


Figura 1.14: Esquema con las diferentes partes en las que se divide el estudio de un punto cuántico. (a) Comprende la información estructural que depende, fundamentalmente, del modo de crecimiento y de las propiedades de los materiales. (b) A partir de la información obtenida en (a) se calcula la estructura electrónica en la aproximación de una única partícula. (c) Con la inclusión de la interacción de Coulomb se determina la estructura electrónica de los complejos excitónicos. (d) A partir de los resultados de (b) o de (c) es posible calcular las propiedades ópticas con diferente grado de aproximación.

- (a) En esta parte se debe recabar toda la información posible relativa a las propiedades estructurales de los SAQDs, como pueden ser la forma, el tamaño y la composición. Además, en los SAQDs también resulta relevante conocer el estado de deformación de la nanoestructura y del material que lo rodea. Así mismo, también es importante determinar la presencia de los campos internos. Por último, si el SAQD está contenido en un dispositivo es importante conocer si el sistema está sometido a algún campo externo.
- (b) El objetivo de este bloque es el desarrollo de un modelo que permita describir la estructura electrónica de un SAQD en la aproximación de una única partícula. Para ello se deberán tener presentes los resultados obtenidos en el bloque (a).
- (c) Tratamiento general de la interacción Coulombiana entre los portadores confinados en el SAQD. En este bloque se utilizan los resultados obtenidos en el bloque (b) para la descripción de la estructura electrónica de los complejos

excitónicos, es decir, los complejos formados por la interacción de un número arbitrario de electrones y huecos presente en el SAQD.

- (d) En el estudio de las propiedades ópticas es preciso desarrollar un modelo que describa la interacción entre un campo de radiación y la estructura electrónica del SAQD. Dependiendo de la fenomenología que se pretenda estudiar y del grado de aproximación que se desee, se podrá hacer uso de los resultados del bloque (b) o del bloque (c).

En este trabajo hemos desarrollado modelos realistas para la descripción de la deformación y de los campos internos y para el cálculo de la estructura electrónica en la aproximación de una única partícula. Con el objeto de situar nuestros modelos en un contexto más amplio. En los apartados siguientes presentaremos una panorámica general de los modelos que se suelen emplear en la bibliografía para el estudio de estos aspectos de los SAQDs.

1.4.2. Modelos atomísticos y modelos continuos

Los modelos que se utilizan para abordar el estudio de los bloques (a) y (b) esquematizados en la Figura 1.14 se pueden dividir en dos familias: modelos atomísticos y modelos continuos. En los primeros, se define una estructura ensamblando diferentes especies atómicas y modelizando la interacción entre los átomos. En los segundos, se parte de las propiedades de los materiales masivos (en inglés “bulk”) y se propone una estructura idealizada del punto cuántico definiendo dominios a los que se les asignan esas propiedades. Según lo expuesto, se puede establecer una analogía con las estrategias utilizadas en la fabricación de nanoestructuras: “*bottom-up*” y “*top-down*”⁷. En la estrategia *bottom-up* la nanoestructura se construye átomo a átomo o molécula a molécula, e.g. la técnica de epitaxia. En la *top-down* se obtiene la nanoestructura a partir de una muestra macroscópica por sustracción del material siguiendo un proceso industrial, e.g. las técnicas de litografía [64]. A modo de ejemplo, en la Figura 1.15 hemos representado esquemáticamente el planteamiento del problema de la estructura electrónica mediante una estrategia *bottom-up* y *top-down*.

Los modelos atomísticos se consideran, en general, más exactos que los modelos continuos por partir de principios más fundamentales. Esto, a su vez, les confiere una mayor capacidad predictiva. Sin embargo, tanto la implementación como la interpretación de los resultados es más complicada. Una diferencia importante entre las dos familias de modelos radica en los recursos de computación necesarios para

⁷Se ha adoptado la terminología inglesa por estar muy extendida en la bibliografía. Una posible traducción al español sería “de arriba hacia abajo” y de “abajo hacia arriba”, respectivamente.

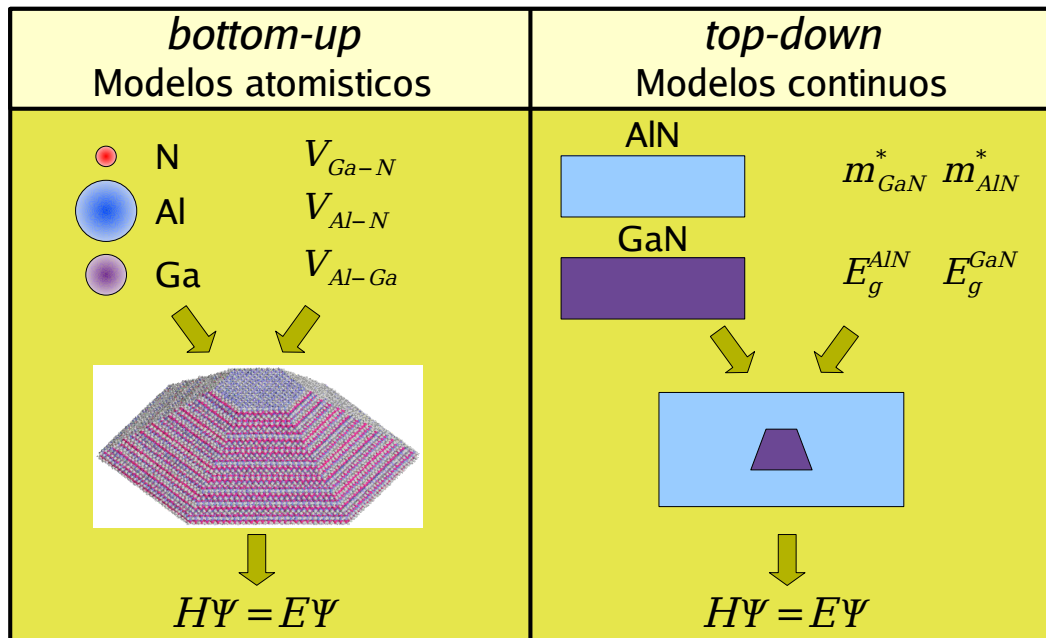


Figura 1.15: Estrategias alternativas para plantear el problema de la estructura electrónica de un SAQD. En un modelo atomístico o *bottom-up* (panel izquierdo) los parámetros son las propiedades de los átomos y su interacción. Tras ensamblar las especies atómicas se obtiene la ecuación de Schrödinger a resolver. En un modelo continuo o *top-down* (panel derecho) se parte de las propiedades de los materiales masivos y tras definir los dominios que representan la nanoestructura y su entorno, se obtiene una ecuación de Schrödinger efectiva que describe el sistema.

la ejecución de las simulaciones. Sabemos que las dimensiones de los SAQD cubren el rango comprendido entre los pocos nanómetros hasta ~ 100 nm, i.e. lo que se conoce como escala nanométrica. Esto significa que el SAQD y su entorno están compuestos, típicamente, por 10^3 - 10^9 átomos. En los modelos atomísticos los recursos crecen, en la mayoría de los casos, como N^3 , siendo N el número de átomos, ello los convierte en prohibitivos para realizar estudios exhaustivos de SAQDs de dimensiones típicas. Es este sentido, la implementación de los métodos continuos resulta ser más atractiva pues la resolución no está relacionada directamente con el tamaño de la estructura. Por otro lado, con frecuencia es más deseable entender el problema de forma intuitiva que situar el énfasis en la precisión de los resultados cuantitativos. Mientras que los modelos atomísticos pueden ser considerados en muchos casos como una “caja negra”, los modelos continuos admiten, con frecuencia, soluciones analíticas elegantes de estructuras altamente idealizadas que estimulan la intuición para la comprensión de estructuras más complicadas.

1.4.3. Estudio de la deformación y campos internos

Vimos en la Sección 1.1 que los SAQDs presentan un estado de deformación como resultado del modo de crecimiento SK. Esta perturbación de la red cristalina de los materiales que constituyen el SAQD introduce importantes modificaciones en las propiedades electrónicas y, en consecuencia, en las propiedades ópticas del sistema. Es por ello que resulta imprescindible conocer el estado de deformación para la correcta descripción de las propiedades de la nanoestructura. Además, la deformación también tiene un interés en sí misma, ya que, al ser accesible experimentalmente, e.g. a través de difracción de rayos-X, microscopía electrónica, dispersión Raman etc... [65], proporciona una importante información sobre las propiedades estructurales del sistema. Al realizar la comparación de los resultados experimentales con un modelo teórico se consigue un conocimiento más preciso del estado del sistema, que puede redundar en una mejor control de las condiciones de crecimiento.

En los modelos atomísticos no se obtiene directamente la deformación del sistema, sino la configuración final de las posiciones atómicas. Resulta preciso entonces, transformar la perturbación de las posiciones atómicas en las componentes del tensor de deformaciones. Para ello se suele seguir el proceso planteado por C. Pryor *et al.* [66], estableciéndose así una correspondencia entre el dominio atomístico y el continuo. Existe una gran variedad de modelos para la descripción atomística de la deformación. En la práctica totalidad de los modelos empleados en el estudio de los SAQDs se describe la interacción entre los átomos del material

mediante un potencial clásico, e.g. el campo de fuerzas de valencia [67], el potencial de Keating [68], entre otros muchos de los empleados en mecánica y dinámica molecular [69]. La configuración final del sistema se calcula a través de una minimización de la energía elástica descrita a través del potencial empleado. También es posible abordar el problema cuánticamente a través de métodos *ab-initio*. Sin embargo, no conocemos ningún trabajo en el que hayan sido implementados para el estudio de SAQD, debido a los recursos de cálculo que necesitan. En general, los modelos de campos de fuerzas se consideran suficientemente exactos.

Los modelos continuos, por contra, se basan en la teoría del continuo elástico [70]. En la teoría del continuo elástico existe una relación directa entre la deformación y los esfuerzos (o tensiones) internas del material. Como se verá en detalle en el Capítulo 2, el método de las inclusiones de Eshelby [71, 72] permite representar el problema de las deformaciones presentes en los SAQDs como un problema de equilibrio en un medio continuo elástico.

La deformación se define a través de nueve componentes tensoriales e_{ij} (tensor de deformaciones) que representan la variación con la posición x_i del desplazamiento u_i :

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.2)$$

En virtud de la ley de Hooke generalizada, la tensión se puede considerar proporcional a la deformación del sólido:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl}, \quad (1.3)$$

donde σ_{ij} son las componentes del tensor de tensiones, y C_{ijkl} representa el tensor de rigidez y nos referiremos a sus elementos como *constantes elásticas*. El aspecto más importante de los modelos continuos consiste en encontrar un método que permita plantear un problema de origen atomístico mediante el uso de campos continuos. El método de las inclusiones de Eshelby ha resultado ser apropiado para abordar el problema de un SAQD. En este método, el impacto del SAQD es representado a través de una distribución de tensiones y la deformación final del sistema se obtiene resolviendo la ecuación de equilibrio elástica.

Otra magnitud que debe ser convenientemente descrita es el campo interno, el cual tiene una especial relevancia en el sistema GaN/AlN, como se comentó en la Sección 1.3. Este campo tiene su origen en la polarización presente en la heteroestructura. Aunque el enfoque más fundamental de la polarización en un sólido se obtiene también por métodos atomísticos [73], su tratamiento en el campo de los SAQDs se realiza habitualmente a través de la teoría clásica del electromagnetismo

aplicada a medios materiales continuos [70]. En general, se considera que la polarización del material (\mathbf{P}^{Tot}) está compuesta por dos contribuciones: la polarización espontánea (\mathbf{P}^{SP}) y la polarización piezoeléctrica (\mathbf{P}^{PZ}):

$$\mathbf{P}^{\text{Tot}} = \mathbf{P}^{\text{SP}} + \mathbf{P}^{\text{PZ}}. \quad (1.4)$$

La contribución espontánea es una propiedad intrínseca de los materiales que constituyen la heteroestructura, razón por la que se suele considerar como un parámetro del modelo. Por el contrario, la contribución piezoeléctrica, se considera proporcional a la deformación:

$$P_i^{\text{PZ}} = \epsilon_{ikl} e_{kl}, \quad (1.5)$$

donde los elementos del tensor ϵ_{ikl} son las constantes piezoeléctricas. La polarización induce una densidad de carga volumétrica $\rho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P}^{\text{Tot}}$ y una carga superficial $\sigma_p = \mathbf{P}^{\text{Tot}} \cdot \mathbf{n}$ en las intercaras de la nanoestructura. Para el cálculo del campo y del potencial electrostático interno se utilizan las ecuaciones de Maxwell para medios materiales. En ausencia de cargas libres se verifica que

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1.6)$$

donde el vector desplazamiento eléctrico está definido como

$$\mathbf{D} = \overleftrightarrow{\epsilon} \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (1.7)$$

siendo $\overleftrightarrow{\epsilon}$ el tensor dieléctrico que, por simplicidad, consideraremos en adelante como isótropo, i.e. $\epsilon_{ij} = \epsilon_r \epsilon_0 \delta_{ij}$. La ecuación (1.6) se puede expresar finalmente en función del campo eléctrico interno:

$$\epsilon_r \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \mathbf{P} = \rho_p, \quad (1.8)$$

o bien, del potencial interno:

$$\epsilon_r \epsilon_0 \nabla^2 \varphi = \nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_p. \quad (1.9)$$

1.4.4. Estudio de la estructura electrónica

En el estudio de la estructura electrónica de los SAQDs en la aproximación de una única partícula, el objetivo principal es la resolución de la ecuación de

Schrödinger:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.10)$$

donde \mathbf{p} es el operador momento, m_0 es la masa del electrón libre, $V(\mathbf{r})$ es el potencial cristalino, $\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda del electrón y E su energía. En el problema del SAQD $V(\mathbf{r})$ ya no es periódico, debido a la presencia de las intercaras de la nanoestructura. Los modelos atomísticos que se encuentran en la literatura para resolver la ecuación (1.10) pueden ser divididos en dos categorías, los métodos ab-initio y los métodos empíricos. En los métodos ab-initio se parte de los orbitales atómicos, i.e. de las funciones de onda de los electrones en los átomos, y se resuelve la ecuación de Schrödinger del sistema agregado. En la bibliografía se puede encontrar una gran variedad de métodos que caen dentro de esta categoría [73] aunque no tenemos constancia de ningún trabajo en el que se haya abordado el estudio de SAQDs utilizando este tipo de métodos. La principal razón es la gran cantidad de átomos que es preciso incluir en la simulación de un SAQD y su entorno. En los métodos empíricos, por contra, el acoplamiento entre los orbitales atómicos se describe a través de una serie de parámetros. Los ejemplos más representativos son: el método de combinación lineal de orbitales atómicos (en inglés “Linear Combination of Atomic Orbitals”, LCAO) [74], el modelo de orbitales de enlace efectivos (en inglés “Effective Bond Orbital Model”, EBOM) [75, 76], y el método de los pseudopotenciales (PSP) [77]. Todos ellos han sido utilizados en el estudio de SAQDs. El método empírico de PSP fue empleado por primera vez por M. V. Rama Krisna y R. A. Friesner al estudio de pequeños puntos cuánticos [78], aunque en la actualidad el grupo liderado por A. Zunger es el único que hace un uso extensivo de él en la descripción de SAQDs [79]. Por otra parte, el uso del método LCAO está más extendido pues ofrece un buen compromiso entre precisión y sencillez de implementación [80, 81, 82, 83, 84, 85, 86].

Por otro lado, en los modelos continuos la ecuación de (1.10) se resuelve recurriendo a la aproximación de la masa efectiva (en inglés “effective mass approximation”, EMA), o, como también se conoce en la bibliografía especializada, teoría de la función envolvente. En el marco de esta aproximación se considera que los materiales que constituyen el punto cuántico y la barrera tienen las mismas propiedades electrónicas que en su configuración masiva. Por consiguiente, las propiedades de los materiales se pueden describir con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. La teoría de la función envolvente permite entonces transformar la Ec. (1.10) en una ecuación de Schrödinger para la función envolvente en la que la diferencia entre los parámetros de la estructura de bandas de ambos materiales (especialmente el gap) determina la energía de los estados (ver Sección 1.6).

En este trabajo hemos adoptado diferentes modelos continuos para describir los diferentes bloques descritos en la Figura 1.14.

- En primer lugar, hemos adoptado el método de las inclusiones de Eshelby para el cálculo de la deformación en el material. La descripción del método, junto con la técnica empleada en la resolución de la ecuación de equilibrio elástica será tratada en el Capítulo 2.
- El cálculo del potencial interno se tratará en el mismo Capítulo, debido a la estrecha relación que tiene con el problema de la deformación.
- Para la resolución de la estructura electrónica del SAQD, hemos adoptado la aproximación de la masa efectiva en combinación con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Los aspectos generales del método se exponen en las Secciones siguientes 1.5 y 1.6, y los resultados numéricos en el Capítulo 3.
- La interacción Coulombiana entre los electrones y los huecos confinados será abordada sirviéndonos del formalismo de segunda cuantización de la mecánica cuántica. Es por ello que hemos trasladado al Capítulo 4, tanto la formulación del problema, como su resolución.
- Finalmente, hemos abordado el tratamiento de las propiedades ópticas recurriendo a la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. En la Sección 1.7 cubriremos los aspectos generales de la interacción de la radiación con la materia. Como se mostró en la Figura 1.14, las propiedades ópticas se pueden describir desde los resultados del bloque (b), o desde los correspondientes al bloque (c). Es por ello, que la resolución específica del problema se ha tratado en los Capítulos 3 y 4, dependiendo de los estados electrónicos que se utilicen.

Como indica el esquema de la Figura 1.14, hemos considerado que el tamaño, la forma y la composición del SAQD son parámetros de nuestro modelo. Es importante advertir en este punto que a lo largo de todo este trabajo consideraremos que la geometría del SAQD es **axialmente simétrica**. Esta aproximación nos permitirá describir un problema tridimensional a través de una formulación que únicamente dependerá de dos coordenadas. Su implementación está justificada, en tanto en cuanto, las geometrías de los SAQDs que vayan a ser estudiados presenten una base de geometría poligonal susceptible de ser circunscrita por una una circunferencia. Atendiendo a las geometrías descritas para los SAQDs de InAs/GaAs y GaN/AlN en las Secciones 1.2 y 1.3 se puede decir que es una buena aproximación.

1.5. Método $k \cdot p$

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ fue concebido originalmente como una herramienta para el estudio de las bandas de energía y las funciones de onda en el entorno de puntos especiales de la zona de Brioullin. Así, el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ofrece un procedimiento sistemático para obtener la estructura de bandas para cualquier valor de \mathbf{k} a partir de las energías y las funciones de onda de un único punto \mathbf{k}_0 . Al trabajar con materiales semiconductores de banda prohibida directa, como es nuestro caso, se suele escoger el punto $\mathbf{k}_0 = 0$.

En esta Sección haremos una descripción general del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, para después mostrar la formulación adecuada a semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda y wurtzita.

1.5.1. Formulación general del método $k \cdot p$

El punto de partida para estudiar la estructura electrónica de un sólido cristalino caracterizado por el potencial periódico $V(\mathbf{r})$, es la ecuación de Schrödinger:

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.11)$$

donde $\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda del electrón y E su energía. En virtud del teorema de Bloch, las soluciones de (1.11) (funciones de Bloch) se pueden escribir como

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) &\rightarrow \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ E &\rightarrow E_n(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

donde \mathbf{k} está contenido dentro de la primera zona de Brillouin y n es el índice de banda. La función $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la misma periodicidad que $V(\mathbf{r})$. Sustituyendo (1.12) en (1.11) se obtiene una ecuación para la amplitud de la función de Bloch:

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.13)$$

En el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se expresa esta ecuación en una representación en la que sólo aparezcan las soluciones en un único punto del espacio \mathbf{k} . Para ello se expresa $u_{n\mathbf{k}}$ en términos de la base de funciones periódicas $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ donde \mathbf{k}_0 es un punto fijo

de la zona de Brillouin que eventualmente se toma $\mathbf{k}_0 = 0$.

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{nn'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (1.14)$$

La ecuación (1.13) se puede reducir entonces a un problema matricial de autovalores sustituyendo (1.14), multiplicando por $u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})$ por la izquierda e integrando en el volumen de la celda unidad Ω :

$$\sum_{n'} \left[\left(E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2) \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}, \quad (1.15)$$

donde

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv \langle n\mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | n'\mathbf{k}_0 \rangle. \quad (1.16)$$

En la formulación anterior no se ha contemplado el spin de los electrones. Al hacerlo, hay que añadir a la ecuación (1.11) el término de interacción spin-órbita

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \sum_{i=x,y,z} H_{so,i} \sigma_i, \quad (1.17)$$

siendo $\boldsymbol{\sigma}$ (σ_x, σ_y y σ_z) las matrices de spin de Pauli. Aparece entonces un término nuevo en la ecuación (1.15) además del descrito por la ecuación (1.17):

$$H_{kso} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.18)$$

Este último es, en general, mucho menor que H_{so} y es una buena aproximación considerarlo despreciable. La interacción spin-órbita es muy pequeña para átomos ligeros pero aumenta a medida que nos desplazamos hacia abajo o hacia la derecha en la tabla periódica de los elementos. Para no recargar la notación empleada, asumiremos que el índice de banda n distingue entre bandas con diferente spin, de forma que no sea necesario incluir un nuevo número cuántico. Al incluir la interacción spin-órbita, la ecuación (1.15) queda expresada como:

$$\sum_{n'} \left[\left(E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2) \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} + \Delta_{nn'} \right] c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}, \quad (1.19)$$

donde los nuevos elementos de matriz no diagonales $\Delta_{nn'}$ están definidos por:

$$\Delta_{nn'} = \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) H_{so} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv \langle n\mathbf{k}_0 | H_{so} | n'\mathbf{k}_0 \rangle. \quad (1.20)$$

La ecuación (1.19) se puede escribir de forma matricial compacta como:

$$\sum_{n'} H_{nn'}(\mathbf{k}) c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}. \quad (1.21)$$

La ecuación (1.19) proporciona la estructura de bandas en toda la zona de Brillouin, aunque su resolución requiere de un número infinito de parámetros: $E_n(\mathbf{k}_0)$, $\mathbf{p}_{nn'}$ y $\Delta_{nn'}$. En la práctica es necesario fijar un criterio que nos permita truncar el desarrollo de la ecuación (1.14).

En el estudio de semiconductores directos, en general, la zona de interés se localiza en el entorno del mínimo de la banda prohibida o gap fundamental. En consecuencia, únicamente un reducido número de funciones del conjunto $\{u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ aquéllas cuya energía $E_n(\mathbf{k}_0)$ esté localizada alrededor del gap fundamental jugarán un papel destacado en la descripción de la estructura de bandas en la zona de interés. Para implementar esta aproximación se recurre a la teoría de perturbaciones de Löwdin [87]. En esta teoría, el desarrollo (1.14) se divide en dos términos definidos por dos tipos de funciones, denominadas A y B :

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n' \in A}^{N_A} c_{nn'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) + \sum_{m' \in B}^{\infty} c_{nm'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{m'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (1.22)$$

donde las N_A funciones tipo A representan el conjunto de funciones relevantes antes mencionado. Entonces, mediante la formulación desarrollada por Löwdin, la ecuación (1.19) se reduce a un problema matricial finito en el que intervienen explícitamente las funciones tipo A y los parámetros que allí aparecen sufren una renormalización por haber sido contemplada la influencia de las funciones tipo B por teoría de perturbaciones. Dependiendo del número de funciones N_A considerado, el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dará lugar a un modelo diferente, como veremos en el resto de la Sección en el caso de la estructura electrónica de semiconductores tipo zincblenda y wurtzita. En la práctica, el valor de los parámetros se obtiene a través de un ajuste de datos experimentales o de un cálculo más sofisticado, lo que le confiere un carácter empírico. Por otro lado, el número efectivo de parámetros puede ser reducido aprovechando las propiedades de simetría de las funciones $u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$, las cuales se pueden conocer *a priori* recurriendo a la teoría de grupos.

De acuerdo con lo dicho anteriormente, la estructura electrónica de un semiconductor en el entorno de un punto de la zona de Brillouin viene descrita por una matriz que dependerá de \mathbf{k} y cuyo rango será igual a la dimensión N_A del conjunto de funciones A .

Para contemplar el efecto de una deformación uniforme, representada a través

del tensor de deformaciones e_{ij} sobre la estructura de bandas de un cristal, se suele adoptar el procedimiento propuesto por G. L. Bir y G. E. Pikus [88]. La hipótesis de partida de esta aproximación se sustenta en que la deformación preserva las propiedades de periodicidad del semiconductor, de forma que el teorema de Bloch continúa siendo aplicable. Tras realizar un análisis perturbativo se demuestra que para tener en cuenta la influencia de pequeñas deformaciones basta con añadir un término que depende linealmente con la deformación al Hamiltoniano obtenido por el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Este nuevo término se conoce en la bibliografía como Hamiltoniano de Bir y Pikus [89]. Los parámetros que ponderan el impacto de cada componente de la deformación en la estructura electrónica son los potenciales de deformación. En el caso de un QD la deformación no es uniforme en general. Sin embargo, se ha demostrado que este procedimiento también resulta ser una buena aproximación en presencia de una deformación inhomogénea [90].

1.5.2. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo zincblenda sin deformación

La formulación que presentaremos a continuación es válida para cualquier semiconductor con estructura cristalina tipo zincblenda. No obstante, dado el interés que tiene el InAs en este trabajo, referiremos los ejemplos numéricos a este material. Los valores de los parámetros involucrados en los cálculos se pueden encontrar en el Apéndice A. En la Figura 1.16 mostramos una representación de la estructura de bandas del InAs calculada por el método de los pseudopotenciales. En esta Figura se comprueba que la anchura mínima de la banda prohibida o gap fundamental (E_g) está en el punto Γ ($\mathbf{k} = 0$).

También es posible apreciar que en el entorno del punto Γ encontramos un grupo reducido de bandas significativamente alejadas en energía del resto. Concretamente son ocho bandas, dos de conducción y seis de valencia, teniendo en cuenta el spin del electrón. Las bandas de valencia se puede dividir en tres pares que reciben el nombre de hueco pesado, hueco ligero y spin-órbita, en orden decreciente de energía. Más adelante justificaremos esta nomenclatura a partir de sus propiedades. El aislamiento de este conjunto de bandas, justifica tomarlas como funciones A en la teoría de perturbaciones de Löwdin, por tanto $N_A = 8$. El resto de funciones de Bloch asociadas a bandas “remotas” constituyen el grupo de funciones B . Mediante el método LCAO se puede comprobar que las bandas del semiconductor masivo tienen su origen en los orbitales atómicos de los electrones de valencia de los átomos constituyentes. La banda de conducción tiene un carácter de orbital atómico s y las bandas de valencia son de tipo p_x , p_y y p_z . Por esta razón

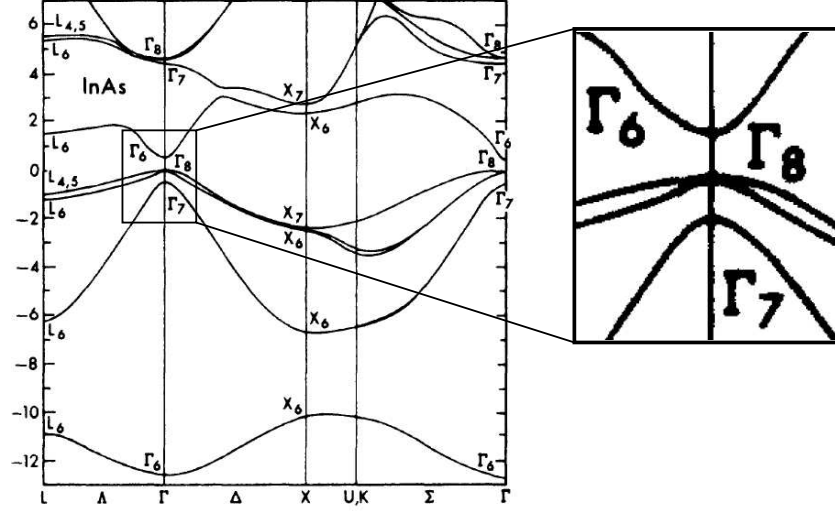


Figura 1.16: Estructura de bandas del InAs en la primera zona de Brillouin calculada por el método de los pseudopotenciales. La figura insertada representa la región del gap fundamental, alrededor del punto Γ . Extraída de J. R. Chelikowsky y M. L. Cohen [91].

se suelen designar las funciones de Bloch $u_{n,0}(\mathbf{r})$ como: $|S \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, |X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle$ y $|Z \downarrow\rangle$, donde S, X, Y , y Z indica el carácter del orbital atómico, y \uparrow y \downarrow la orientación del spin electrónico. Sin embargo, debido a la presencia de la interacción spin-órbita H_{so} , ver Ec. (1.17), el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en $\mathbf{k} = 0$ no es diagonal en esta representación [89]. Una representación alternativa, que permite diagonalizar a H_{so} , se puede obtener siguiendo formalmente los procedimientos de la física atómica [20]. Es bien sabido que los orbitales atómicos tipo p tienen un momento angular orbital $l = 1$ y que además están triplemente degenerados. Los tres estados degenerados se pueden escoger de forma que sean autoestados de \hat{l}_z , la componente z del operador momento angular $\hat{\mathbf{l}}$. Los autovalores de \hat{l}_z con frecuencia se expresan como m_l , y en este caso toman los valores $m_l = 1, 0, -1$. Las funciones de onda angulares de estos orbitales atómicos son los armónicos esféricos, que se pueden representar como:

$$|l, m_l\rangle = \begin{cases} |1, +1\rangle & = -(p_x + ip_y)/\sqrt{2}, \\ |1, 0\rangle & = p_z, \\ |1, -1\rangle & = (p_x - ip_y)/\sqrt{2}. \end{cases} \quad (1.23)$$

Las autofunciones del Hamiltoniano incluyendo la interacción spin-órbita, también lo han de ser del momento angular total $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ (siendo $\hat{\mathbf{s}}$ el operador de spin) y de su componente z , \hat{j}_z . Conocida la representación en la base $|m_l\rangle, |s_z\rangle$, resulta inmediato obtener la representación en la base $|j, j_z\rangle$ con ayuda de los coeficientes

Zincblenda

u_k	$ \lambda, j, j_z\rangle$	S, X, Y, Z
u_1	$ c, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ S \uparrow\rangle$
u_2	$ c, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ S \downarrow\rangle$
u_3	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$
u_4	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}} (-(X + iY) \downarrow\rangle + 2 Z \uparrow\rangle)$
u_5	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}} ((X - iY) \uparrow\rangle + 2 Z \downarrow\rangle)$
u_6	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \downarrow\rangle$
u_7	$ v, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} ((X + iY) \downarrow\rangle + Z \uparrow\rangle)$
u_8	$ v, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} ((X - iY) \uparrow\rangle - Z \downarrow\rangle)$

Tabla 1.4: Funciones de Bloch del centro de la zona de Brillouin expresadas utilizando diferentes representaciones.

de Clebsch-Gordan [92], en la cual el Hamiltoniano H_{so} es diagonal. Estableciendo una analogía formal entre los orbitales atómicos p_x , p_y y p_z y las funciones de onda $|X\rangle$, $|Y\rangle$ y $|Z\rangle$, podemos definir los estados:

$$|l, m_l\rangle = \begin{cases} |1, +1\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} |X + iY\rangle, \\ |1, 0\rangle &= |Z\rangle, \\ |1, -1\rangle &= \frac{+1}{\sqrt{2}} |X - iY\rangle, \end{cases} \quad (1.24)$$

y en función de ellos, la representación de la base $|j, j_z\rangle$ que diagonaliza el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en $\bar{=}$ 0. Esta representación ha sido reproducida en la Tabla 1.4, donde hemos introducido la etiqueta auxiliar $\lambda = c, v$ dependiendo de si el estado pertenece al banda de conducción, o a la banda de valencia, respectivamente.

En la Ec. (B.2) del Apéndice B se puede encontrar el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ que emplearemos a lo largo de todo el trabajo, escrito explícitamente en la base de la Tabla 1.4. En todo momento hemos adoptado la notación empleada por H. R. Trebin *et al.* [93].

Vemos que para realizar el cálculo de la estructura de bandas del cristal no deformado es necesario fijar los siguientes parámetros:

- E_c : el borde de la banda de conducción.
- E_v : el borde de la banda de valencia.
- Δ_0 : el término de interacción spin-órbita, definido como:

$$\Delta_0 = -3i\langle X|H_{so,y}|Z\rangle = -3i\langle Z|H_{so,x}|Y\rangle = -3i\langle Y|H_{so,z}|X\rangle. \quad (1.25)$$

- P : el elemento de matriz del momento definido según:

$$P = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_x|X \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_y|Y \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_z|Z \rangle, \quad (1.26)$$

el cual resulta ser un número imaginario puro [94]. Una energía auxiliar relacionada con P que resultará útil más adelante es la energía de Kane:

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} |P|^2. \quad (1.27)$$

- $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$: los parámetros de Luttinger reducidos. Éstos están definidos en términos de los parámetros $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$, introducidos originalmente por Luttinger [20], como:

$$\gamma'_1 = \gamma_1 - \frac{2 E_p}{3 E_g}, \quad (1.28)$$

$$\gamma'_2 = \gamma_2 - \frac{1 E_p}{3 E_g}, \quad (1.29)$$

$$\gamma'_3 = \gamma_3 - \frac{1 E_p}{3 E_g}. \quad (1.30)$$

Los parámetros originales fueron derivados considerando como funciones de tipo A las correspondientes a las bandas de valencia. Al haber incluido la banda de conducción en el conjunto de funciones tipo A , se hace necesaria la renormalización de los parámetros.

- m' : masa efectiva de la banda de conducción reducida

$$\frac{m_0}{m'} = \frac{m_0}{m_e} - \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_0} \right). \quad (1.31)$$

Análogamente a lo que sucede con los parámetros de Luttinger, la masa efectiva del electrón m_e corresponde al caso en que la banda de conducción es la única de tipo A , y, por consiguiente, en el modelo que utilizaremos es precisa su renormalización.

En el trabajo de H. R. Trebin *et al.* [93] también aparecen una serie de términos cuya influencia viene determinada por dos parámetros adicionales: B y C . Estos términos tienen su origen en la ausencia de centro de simetría de la zincblenda y en el término H_{kso} definido en la Ec. (1.18). En este trabajo han sido despreciados por tener muy poco impacto sobre la estructura electrónica.

Se puede comprobar que al hacer $\mathbf{k} = 0$ el Hamiltoniano es diagonal con los siguientes autovalores y autofunciones:

$$E_e \equiv E_c = E_v + E_g, \rightarrow u_1, u_2, \quad (1.32a)$$

$$E_{hh} \equiv E_v, \quad \rightarrow u_5, u_6, \quad (1.32b)$$

$$E_{lh} \equiv E_v, \quad \rightarrow u_4, u_5, \quad (1.32c)$$

$$E_{so} \equiv E_v - \Delta_0, \quad \rightarrow u_7, u_8, \quad (1.32d)$$

donde los subíndices indican las etiquetas con las que serán identificadas las diferentes bandas: e la banda de conducción, hh la banda de huecos pesados, lh la banda de huecos ligeros y so la banda de huecos spin-órbita. El parámetro E_g representa el gap fundamental. Estas energías determinan los bordes de banda en los materiales tipo zincblenda en ausencia de deformación.

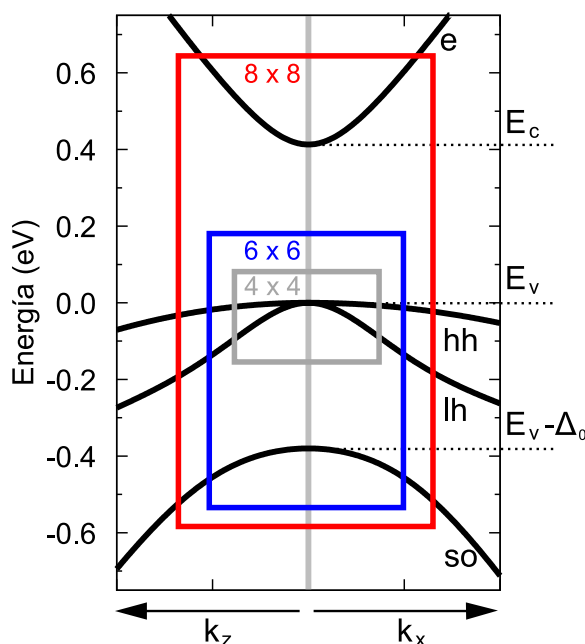


Figura 1.17: Estructura de bandas del InAs en el entorno del punto Γ obtenida mediante el Hamiltoniano de la Ec. (B.2). Los recuadros indican las bandas que se consideran acopladas por el término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (ver Ec. (1.19)) en los diferentes modelos simplificados que estudiaremos en este trabajo (ver texto). El origen de energías se ha escogido de forma que $E_v = 0$.

En la Figura 1.17 hemos representado la dispersión del InAs resolviendo la ecuación de Schrödinger definida por el Hamiltoniano (B.2) a lo largo de k_z y k_x , que en este caso representan dos direcciones equivalentes. En el margen derecho de la Figura hemos indicado gráficamente los bordes de banda definidos en la Ec.

(1.32). Junto a cada una de las bandas hemos indicado las etiquetas con las que son identificadas. En las proximidades del punto Γ la dispersión de energía de las diferentes bandas es aproximadamente parabólica. Sin embargo, conforme el punto k considerado se aleja del centro de la zona de Brillouin la dispersión comienza a ser no parabólica.

El modelo más completo que emplearemos en la descripción de la estructura electrónica de los semiconductores InAs y GaAs es el definido por el Hamiltoniano de la Ec. (B.2), en el que se ha considerado un total de ocho funciones de Bloch acopladas a través del término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (ver Ec. (1.19)). En adelante nos referiremos a él como modelo “ 8×8 ”. Dependiendo de la estructura electrónica del material estudiado, es posible reducir el número de funciones que se consideran acopladas. Cada uno de los recuadros mostrados en la Figura 1.17 representa un modelo alternativo. A continuación describiremos los diferentes casos que serán contemplados.

- “ 6×6 ”: Esta aproximación está justificada cuando E_g es muy grande, típicamente > 1 eV. El Hamiltoniano para este modelo se puede obtener a partir de la Ec. (B.2) haciendo $P = 0$. Con ello se anulan todos los términos del Hamiltoniano 8×8 que conectan estados de la banda de conducción con estados de la banda de valencia. Los parámetros de Luttinger reducidos coinciden en este modelo con los parámetros de Luttinger originales. Al haber considerado en este modelo que la banda e está desacoplada del resto, su descripción se realiza en la aproximación de una única banda (descrita más adelante). En esta aproximación la dispersión de energía de la banda se considera parabólica, coincidiendo m' con m_e :

$$E_e = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (1.33)$$

- “ 4×4 ”: En este modelo tanto la banda e como la banda so se consideran desacopladas de las bandas hh y lh . Esta aproximación únicamente está justificada en materiales para los que E_g y Δ_0 son muy grandes. Aquí se desprecian los términos del Hamiltoniano 6×6 que conectan estados de las bandas hh y lh con estados de la banda so . Al igual que sucedía en el modelo 6×6 con la banda e , aquí la banda so vendrá descrita por una relación de dispersión parabólica:

$$E_{so} = E_v - \Delta_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}}, \quad (1.34)$$

donde la masa efectiva m_{so} está relacionada con el resto de parámetros a través de la expresión [89]

$$\frac{1}{m_{so}} = \gamma_1 - \frac{E_p}{3} \left(\frac{\Delta_0}{3 E_g (E_g + \Delta_0)} \right). \quad (1.35)$$

- “ 1×1 ” o aproximación de una única banda: En esta aproximación todas las bandas del semiconductor se consideran desacopladas. Su implementación puede estar justificada en el estudio de materiales que no presenten bandas degeneradas. El Hamiltoniano correspondiente se obtiene de forma trivial, anulando los términos de fuera de la diagonal del Hamiltoniano 4×4 . En esta aproximación la dispersión parabólica de las bandas hh y lh queda expresada como:

$$E_{hh} = E_v - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{hh,z}} - \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_{hh,\perp}}, \quad (1.36a)$$

$$E_{lh} = E_v - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{lh,z}} - \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_{lh,\perp}}, \quad (1.36b)$$

donde las masas efectivas se pueden expresar en función de los parámetros de Luttinger:

$$\frac{1}{m_{hh,z}} = \gamma_1 - 2\gamma_2, \quad \frac{1}{m_{hh,\perp}} = \gamma_1 + \gamma_2, \quad (1.37a)$$

$$\frac{1}{m_{lh,z}} = \gamma_1 + 2\gamma_2, \quad \frac{1}{m_{lh,\perp}} = \gamma_1 - \gamma_2. \quad (1.37b)$$

Al sustituir los valores de los parámetros de Luttinger en estas expresiones, se verifica que $m_{lh,z} < m_{hh,z}$, lo que da origen a la nomenclatura de hueco ligero y hueco pesado para identificar las bandas.

Para ilustrar la bondad de las diferentes aproximaciones hemos representado en la Figura 1.18 la dispersión de la energía para los diferentes modelos que acaban de ser descritos. Con línea discontinua hemos representado el resultado para el modelo 8×8 y con línea continua los modelos 6×6 , 4×4 y 1×1 . El modelo 6×6 refleja el impacto que tiene la supresión del acoplamiento de la banda e con el resto de bandas. Por una parte, se observa que las bandas hh y lh continúan estando bien descritas, y que la banda so experimenta un cambio importante. Por otra parte, también es apreciable la desviación respecto al comportamiento parabólico de la dispersión de la banda e obtenida por el modelo 8×8 . En base a los resultados obtenidos por el modelo 4×4 , es posible analizar el impacto que la

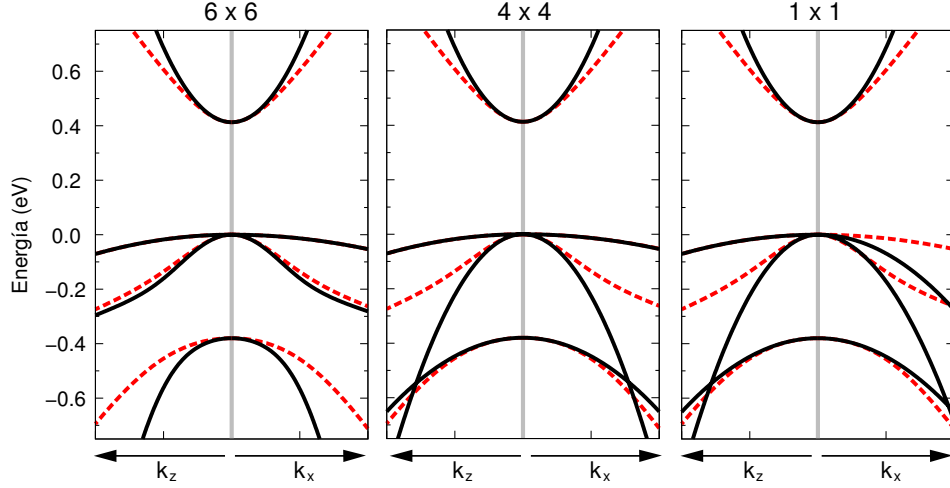


Figura 1.18: Dispersión de energía del InAs obtenida mediante los diferentes modelos discutidos en el texto. Con línea discontinua hemos representado el resultado correspondiente al modelo 8×8 y con línea continua el correspondiente a cada caso.

banda so tiene sobre las bandas hh y lh . En primer lugar se observa que la banda hh no experimenta un cambio apreciable respecto a la dispersión obtenida por el modelo 8×8 . En segundo lugar la banda lh sí que muestra un comportamiento muy diferente para valores de k alejados del punto Γ , puesto que ya no se produce el anticruce entre las bandas lh y so . Por último, vemos que la dispersión parabólica de la banda so describe bastante bien la dispersión obtenida por el modelo 8×8 . En el modelo 1×1 se consideran todas las bandas desacopladas, y por tanto la dispersión también resulta ser parabólica para las bandas hh y lh . Al comparar las curvas a lo largo de los ejes k_x y k_z , se observa que la dispersión no es simétrica, y por ende, que las direcciones no son equivalentes, como se puede entender a partir de las expresiones de las masas efectivas (ver Ecs. (1.37)). Esta descripción de las bandas hh y lh es claramente incorrecta en este caso y tiene su origen en haber considerado desacopladas dos bandas degeneradas.

1.5.3. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo zincblenda con deformación

En la Ec. (B.3) del Apéndice B se puede encontrar el Hamiltoniano de Bir y Pikus utilizado en este trabajo para semiconductores tipo zincblenda. Aunque la forma explícita de este operador ha sido adoptada del trabajo de H.-R. Trebin *et al.* [93], hemos realizado diferentes aproximaciones para simplificar su aspecto final. Por una parte, hemos eliminado los términos proporcionales a la deformación de

cizalla (i.e. componentes no diagonales del tensor de deformaciones, e_{ij} con $i \neq j$) que acoplan la banda de conducción con la banda de valencia. Esta aproximación está justificada para los materiales con los que vamos a trabajar por ser el potencial de deformación correspondiente muy pequeño. Por otra parte, la teoría también introduce en los elementos de matriz que acoplan las bandas de conducción y valencia otra serie de términos proporcionales a $P e_{ij} k_j$. Estos términos también han sido desestimados por ser mucho menores que $P k_j$, ya que la deformación tiene una magnitud típicamente del orden de la deformación originada por desacuerdo de red ($\ll 1$) [93].

Obsérvese que el Hamiltoniano de Bir y Pikus se puede obtener formalmente del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de la Ec. (B.2) siguiendo la siguiente prescripción [89]:

$$\begin{aligned} k_i k_j &\rightarrow e_{ij}, \\ \frac{\hbar^2}{2m'} &\rightarrow C_1, \quad \equiv \quad a_c, \\ \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} &\rightarrow -D_d^v \quad \equiv \quad -a_v, \\ \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} &\rightarrow \frac{D_u}{3} \quad \equiv \quad -\frac{b}{2}, \\ \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} &\rightarrow \frac{D'_u}{3} \quad \equiv \quad -\frac{d}{2\sqrt{3}}, \end{aligned}$$

La notación de los potenciales de deformación de la segunda columna es la empleada por H.-R. Trebin *et al.* [93]. Los mostrados en la tercera columna fueron definidos por G. L. Bir y G. E. Pikus y presentan un uso más extendido en la literatura. Si bien hemos expresado el Hamiltoniano de Bir y Pikus en la Ec. (B.3) en función de $[C_1, D_v, D_u, D'_u]$, las medidas experimentales de los potenciales de deformación se suelen dar en función de $[a_c, a_v, b, d]$, (ver Apéndice A). Es por ello que hemos mostrado la equivalencia entre ambas notaciones. En este trabajo el potencial de deformación hidrostática de la banda prohibida (a_g) se relaciona con el de las bandas de conducción (a_c) y valencia (a_v) a través de la siguiente expresión: $a_g = a_c - a_v$. Este criterio, aunque es el más extendido, no es único [95].

Para ilustrar el efecto de la deformación sobre la estructura electrónica de un semiconductor tipo zincblenda vamos a representar gráficamente la dispersión de energía de las bandas del InAs en las proximidades del punto Γ . Consideraremos que el material está sometido a un estado de deformación “biaxial”, esto es, el estado de deformación característico de un pozo cuántico de InAs crecido sobre

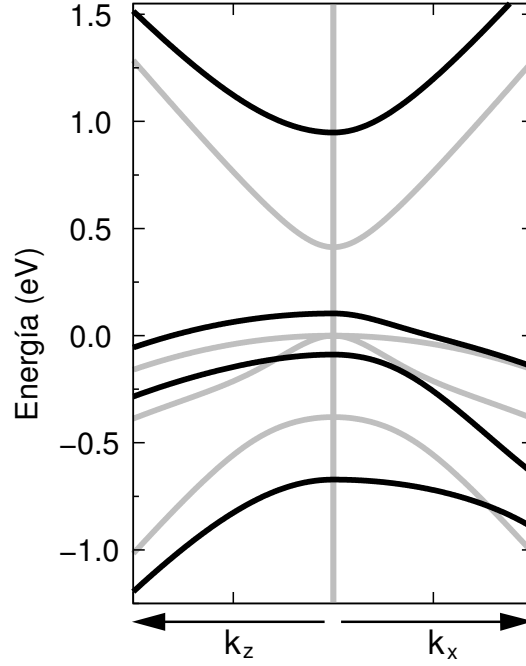


Figura 1.19: Dispersión de energía del InAs obtenida por el modelo 8×8 en presencia de una deformación biaxial (línea negra) y en ausencia de la misma (línea gris).

(100) GaAs. En este caso, el tensor de deformaciones toma los siguientes valores:

$$e_{xx} = e_{yy} = \frac{a^{\text{GaAs}} - a^{\text{InAs}}}{a^{\text{InAs}}}, \quad (1.38a)$$

$$e_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} e_{xx}, \quad (1.38b)$$

$$e_{xy} = e_{yz} = e_{zx} = 0, \quad (1.38c)$$

donde a^{InAs} y a^{GaAs} son las constantes de red de los materiales que constituyen la estructura y, C_{12} y C_{11} son las constantes elásticas del InAs. Los valores de los diferentes parámetros se pueden encontrar en el Apéndice A. En la Figura 1.19 mostramos los resultados para la estructura de bandas conjuntamente con los obtenidos en ausencia de deformación. Las diferencias entre los dos casos son apreciables. Por una parte, se observa un desplazamiento de los bordes de banda que se traduce en (i) un incremento del gap fundamental, (ii) una rotura de la degeneración de las bandas hh y lh en el punto Γ y (iii) un alejamiento de la banda so respecto a las otras bandas de valencia. Por otro lado, es posible comprobar que las direcciones k_x y k_z ya no son equivalentes como consecuencia de la presencia de esta deformación.

Al igual que hicimos antes, en la Figura 1.20 hemos realizado una comparación

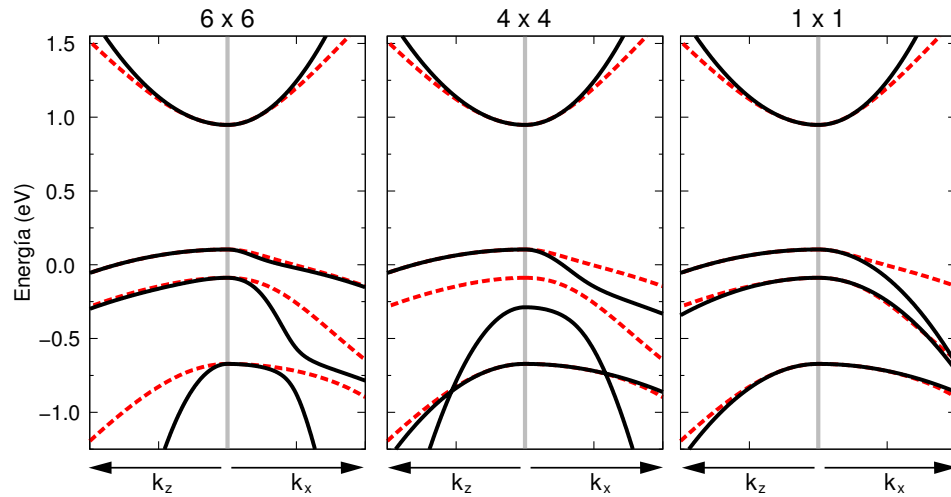


Figura 1.20: Ídem Figura 1.18 para InAs deformado biaxialmente.

Banda	m_z	m_{\perp}
e	0.0724	0.0464
hh	0.3450	0.0710
lh	0.2160	0.0872
so	0.0837	0.2880

Tabla 1.5: Masas efectivas obtenidas por medio de un ajuste parabólico de la dispersión de energía correspondiente al modelo 8×8 para InAs deformado biaxialmente (curva negra de la Figura 1.20).

de los diferentes modelos propuestos para describir la estructura de bandas del InAs. En el modelo 6×6 observamos que el impacto de haber asumido $P = 0$ afecta de forma diferente a las tres bandas de valencia. Mientras que la banda hh preserva aproximadamente la curvatura del modelo 8×8 , las bandas lh y so revelan una dispersión muy diferente. El anticruce mostrado en la Figura a lo largo de la dirección k_x también está presente en el modelo 8×8 , aunque no puede observarse en la gráfica por tener lugar a valores de k_x localizados fuera del rango representado. La banda de conducción ha sido calculada recurriendo a la aproximación de una única banda. Sin embargo, en lugar de emplear el valor de la masa efectiva correspondiente al InAs sin deformar, hemos realizado un ajuste parabólico de la dispersión obtenida del modelo 8×8 . En la Tabla 1.5 hemos agrupado los resultados del ajuste para las cuatro bandas. En el modelo 4×4 la banda so también ha sido descrita mediante la aproximación parabólica, mostrando un buen grado de acuerdo con los resultados del modelo 8×8 . También es posible observar que el modelo 4×4 no es capaz de resolver la energía en el punto Γ de la banda lh . El origen de tan particular resultado está en haber despreciado los elementos que acoplan las bandas lh y so en el Hamiltoniano de Bir y Pikus a pesar de no ser nulos en $\mathbf{k} = 0$ (ver Ec. (B.3)). Finalmente, en el modelo 1×1 vemos que la dispersión de las bandas resulta estar correctamente descrita al haber empleado las masas efectivas de la Tabla 1.5. Si en lugar de estas masas hubiésemos empleado las del InAs sin deformar, el desacuerdo habría sido mucho mayor. Es preciso indicar que, debido a la rotura de la degeneración de las bandas hh y lh introducida por la deformación, el modelo 1×1 resulta ser adecuado para su descripción.

1.5.4. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo wurtzita sin deformación

En este apartado mostraremos la forma que adopta el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en semiconductores con estructura cristalina tipo wurtzita. Tomaremos como ejemplo el GaN para ilustrar los diferentes aspectos relativos a la estructura electrónica de este tipo de materiales. Los valores de los parámetros que utilizaremos a lo largo de este trabajo están recogidos en el Apéndice A. En la imagen 1.21 hemos reproducido la estructura de bandas del GaN para toda la zona de Brillouin. La zona recuadrada se corresponde con el entorno de $\mathbf{k} = 0$, i.e. el área de interés en nuestro estudio. Comparando con la Figura 1.16 se pueden apreciar similitudes y diferencias. Por una parte, también hay ocho bandas en la zona próxima al gap fundamental como marca el recuadro de la Figura. Por otra parte, aunque en la

escala empleada en la Figura no es posible apreciarlo, la degeneración de las bandas de valencia se rompe totalmente en el punto Γ , a diferencia de lo que sucede en la zincblenda. A partir de ahora nos centraremos en el conjunto de bandas incluidas dentro del recuadro.

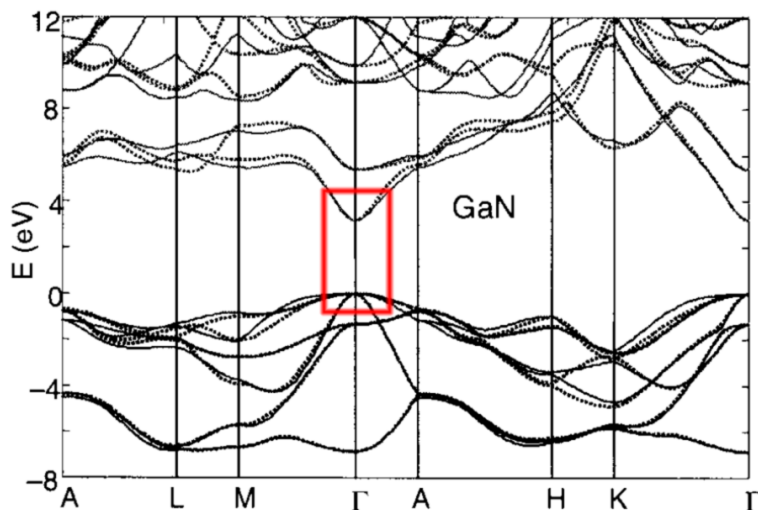


Figura 1.21: Estructura de bandas del GaN calculada por el método de pseudopotenciales empírico (línea discontinua) y por el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para toda la zona de Brillouin (línea continua). El recuadro indica la zona próxima a E_g . Extraída de R. Beresford [96].

El Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para la wurtzita fue derivado originalmente por E. I. Rashba, V. I. Sheka y G. E. Pikus en una serie de artículos y de ahí el nombre con el se suele conocer: Hamiltoniano de Rashba-Sheka-Pikus (RSP)[97]. En un trabajo posterior S. L. Chuang y C. S. Chang [98] han repetido la deducción de dicho Hamiltoniano, expresándolo con una notación más familiar a la empleada actualmente en el estudio de semiconductores. En este trabajo hemos adoptado este último Hamiltoniano. Al igual que ocurría en el caso de materiales tipo zincblenda, las bandas del semiconductor masivo se pueden expresar en términos de las funciones $|S \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, |X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle$ y $|Z \downarrow\rangle$ ⁸. Sin embargo, a diferencia de lo que sucede en la zincblenda, en este tipo de materiales no es posible encontrar una base que diagonalice el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en $\mathbf{k} = 0$ y sea a su vez independiente de los parámetros del material [98]. Más adelante discutiremos esta cuestión. Por esta razón para estudiar materiales cuya estructura cristalina es tipo wurtzita, hemos optado por expresar el Hamiltoniano en la base de funciones de momento angular orbital (l, m_l) definido (ver Ec. (1.24)) de la Tabla 1.6. Es importante destacar que los elementos de esta base, a pesar de no tener un mo-

⁸Es importante notar que en la Ref. [98] se tratan $|iS \uparrow\rangle$ y $|iS \downarrow\rangle$ como funciones base para la BC.

Wurtzita

u_k	$ \lambda, m_l, s_z\rangle$	S, X, Y, Z
u_1	$ c, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ S \uparrow\rangle$
u_2	$ c, 0, -\frac{1}{2}\rangle$	$ S \downarrow\rangle$
u_3	$ v, +1, +\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$
u_4	$ v, -1, +\frac{1}{2}\rangle$	$+\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \uparrow\rangle$
u_5	$ v, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ Z \uparrow\rangle$
u_6	$ v, -1, -\frac{1}{2}\rangle$	$+\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$
u_7	$ v, +1, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \downarrow\rangle$
u_8	$ v, 0, -\frac{1}{2}\rangle$	$ Z \downarrow\rangle$

Tabla 1.6: Funciones de Bloch del centro de la zona de Brillouin.

mento angular j bien definido, como sucedía en la representación escogida para la zincblenda (ver Tabla 1.5), presentan una proyección en z del momento angular total bien definida, i.e. $j_z = m_l + s_z$ es un buen número cuántico. Este hecho tiene una gran importancia y se discutirá en profundidad en el Capítulo 3. En la Ec. (B.4) del Apéndice B hemos escrito el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ explícitamente en esta representación. Mediante el uso de estas funciones queda reflejada de forma transparente la isotropía en el plano y anisotropía de la dirección z , características de este tipo de materiales.

La estructura wurtzita pertenece a una clase cristalina hexagonal, como se comentó en la Sección 1.3. En consecuencia, aparecen nuevos parámetros en el Hamiltoniano para contemplar la asimetría entre la dirección [0001], que supondremos paralela al eje Z , y las direcciones contenidas en el plano normal. A continuación mostramos una lista completa de los parámetros del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$:

- E_c : el borde de la banda de conducción.
- E_v : el borde de la banda de valencia para las funciones de Bloch $|Z\rangle$. Esto es,

$$E_v = \langle Z|H(\mathbf{k} = 0)|Z\rangle, \quad (1.39)$$

donde $H(\mathbf{k})$ es el Hamiltoniano de la Ec. (B.4).

- Δ_1 : término de interacción con el campo cristalino. Se define a partir del siguiente elemento de matriz:

$$\langle X|H(\mathbf{k} = 0)|X\rangle = \langle Y|H(\mathbf{k} = 0)|Y\rangle = E_v + \Delta_1. \quad (1.40)$$

Aquí se hace patente la asimetría mencionada anteriormente.

- Δ_2 y Δ_3 : términos de la interacción spin-órbita definidos como:

$$-i\Delta_2 = \langle Y | H_{so,z} | X \rangle, \quad (1.41)$$

$$-i\Delta_3 = \langle X | H_{so,y} | Z \rangle = \langle Z | H_{so,x} | Y \rangle. \quad (1.42)$$

- P_z y P_\perp : los elementos de matriz del momento definidos según:

$$P_z = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle, \quad (1.43a)$$

$$P_\perp = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle. \quad (1.43b)$$

A partir de estos parámetros introduciremos las energías de Kane $E_{p,z}$ y $E_{p,\perp}$ utilizando una expresión análoga a la empleada para definir E_p (ver Ec. (1.27)):

$$E_{p,z} = \frac{2m_0}{\hbar^2} |P_z|^2, \quad (1.44a)$$

$$E_{p,\perp} = \frac{2m_0}{\hbar^2} |P_\perp|^2. \quad (1.44b)$$

- A'_i , con $i = 1, 2, \dots, 6$: estos parámetros son el equivalente a los parámetros de Luttinger reducidos empleados en el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para la zincblenda. Están relacionados con los A_i a través de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} A'_1 &= A_1 + \frac{E_{p,z}}{E_g}, & A'_4 &= A_4 + \frac{1}{2} \frac{E_{p,\perp}}{E_g}, \\ A'_2 &= A_2, & A'_5 &= A_5 + \frac{1}{2} \frac{E_{p,\perp}}{E_g}, \\ A'_3 &= A_3 - \frac{E_{p,z}}{E_g}, & A'_6 &= A_6 + \frac{\sqrt{2}m_0}{\hbar^2} \frac{P_z P_\perp}{E_g}. \end{aligned}$$

En la definición de los parámetros A_i del Hamiltoniano de Rashba-Sheka-Pikus únicamente se contempló el acoplamiento entre las bandas de valencia.

En el Hamiltoniano (B.4) no se utiliza el parámetro m' , o dicho de otro modo, se asume que $m' = m_0$. Aunque en principio sería posible introducir este parámetro. Un problema que presentan los nitruros del grupo III es la poca información experimental que se tiene de los parámetros P_z y P_\perp . Por esta razón, los autores suelen tomar $m' = m_0$ y utilizan el resto de parámetros para fijar P_z y P_\perp , mediante las

siguientes expresiones:

$$P_z^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{m_{e,z}} - 1 \right) \frac{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2}{E_g + 2\Delta_2}, \quad (1.45)$$

$$P_\perp^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{m_{e,\perp}} - 1 \right) \frac{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2}{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + \Delta_2) - \Delta_3^2}, \quad (1.46)$$

donde $m_{e,z}$ y $m_{e,\perp}$ son las masas efectivas de la banda de conducción medidas experimentalmente. En los materiales tipo zincblenda, por contra, se determina E_p experimentalmente y a partir de este valor se fija m' .

En la wurtzita, al igual que en la zincblenda, también aparecen términos en el Hamiltoniano lineales en \mathbf{k} que tienen su origen en la ausencia de centro de simetría de la estructura cristalina. La interacción entre las bandas debida a este término viene ponderada por el parámetro A_7 , que no ha sido incluido en la Ec. (B.4) porque tiene, en general, muy poco impacto en la estructura electrónica [99].

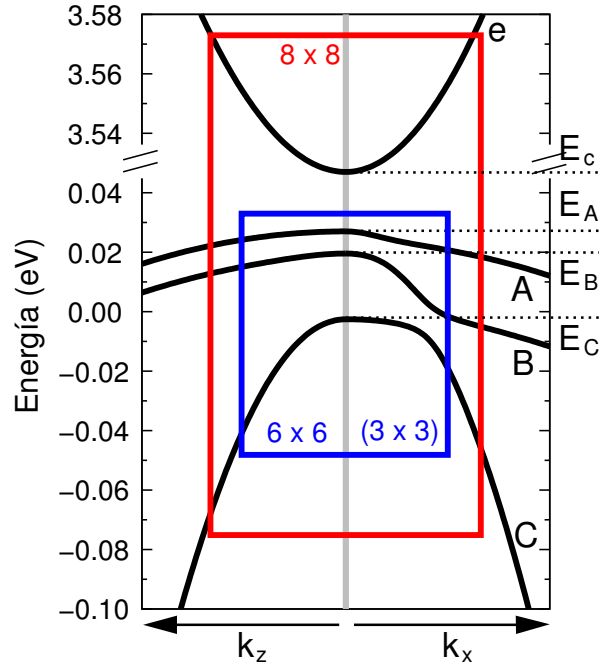


Figura 1.22: Estructura de bandas del GaN en el entorno del punto Γ obtenida mediante el Hamiltoniano de la Ec. (B.4). Los recuadros indican las bandas que se consideran acopladas en los diferentes modelos simplificados que estudiaremos en este trabajo (ver texto). El origen de energías se ha escogido $E_v = 0$.

Las energías de los bordes de banda se pueden obtener a través de la diagona-

lización del Hamiltoniano de la Ec. (B.4) en $\mathbf{k} = 0$ [98]:

$$E_e \equiv E_c = E_v + E_g + \Delta_1 + \Delta_2, \quad (1.47a)$$

$$E_A \equiv E_v + \Delta_1 + \Delta_2, \quad (1.47b)$$

$$E_B \equiv E_v + \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + 2\Delta_3^2}, \quad (1.47c)$$

$$E_C \equiv E_v + \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + 2\Delta_3^2}. \quad (1.47d)$$

Al analizar los autovectores encontramos que son, respectivamente:

$$u_1, u_2, \quad (1.48a)$$

$$u_3, u_6, \quad (1.48b)$$

$$a u_4 + b u_8, b u_5 + a u_7, \quad (1.48c)$$

$$b u_4 - a u_8, -a u_5 + b u_7, \quad (1.48d)$$

donde

$$a = \frac{E_B}{\sqrt{E_B^2 + 2\Delta_3^2}}, \quad b = \frac{\sqrt{2}\Delta_3}{\sqrt{E_B^2 + 2\Delta_3^2}}. \quad (1.49)$$

En esta ocasión hemos optado por etiquetar las bandas de valencia con las letras A , B y C . Esta forma de proceder contrasta con lo que se viene haciendo para el sistema tipo zincblenda. Sin embargo, más adelante veremos que el criterio basado en el valor de la masa efectiva no es adecuado en este sistema. Además, esta nomenclatura previene confusiones al comparar la estructura electrónica de un sistema tipo zincblenda con otro tipo wurtzita, pues las autofunciones en $\mathbf{k} = 0$ son distintas en los dos sistemas cristalinos, como se puede verificar de comparar las Ecs. (1.32) con (1.48).

Obsérvese que como resulta evidente a partir de (1.48) y (1.49) los autovectores del Hamiltoniano de la wurtzita en $\mathbf{k} = 0$ dependen de las propiedades del material a través de las energías E_c , E_v , Δ_1 , Δ_2 y Δ_3 . Esta situación ya no se produce si despreciamos la interacción spin-órbita, i.e. $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$. Al hacerlo encontramos los siguientes autovalores y autovectores:

$$E_e \rightarrow E_c = E_v + E_g + \Delta_1, \quad u_1, u_2 \quad (1.50a)$$

$$E_A \rightarrow E_v + \Delta_1, \quad u_3, u_6, \quad (1.50b)$$

$$E_B \rightarrow E_v + \Delta_1, \quad u_4, u_7, \quad (1.50c)$$

$$E_C \rightarrow E_v, \quad u_5, u_8. \quad (1.50d)$$

En esta aproximación las bandas A y B tienen el carácter definido por combinaciones lineales de las funciones $|X\rangle$ e $|Y\rangle$, y la banda C tiene el carácter tipo $|Z\rangle$.

En la Figura 1.22 hemos representado la dispersión de energía de las bandas del GaN en el entorno del punto Γ a lo largo de las direcciones k_x y k_z , que en la wurtzita han dejado de ser equivalentes. Siguiendo el mismo esquema que empleamos en el apartado dedicado a la zincblenda, hemos anotado en el margen derecho los bordes de bandas obtenidos a través de las Ecs. (1.47). Junto a cada banda hemos indicado la etiqueta empleada en su identificación. Obsérvese que las bandas de valencia ya no están degeneradas en $\mathbf{k} = 0$, y se pueden apreciar anticruces entre las bandas A y B , y B y C .

Análogamente a lo sucedía en la zincblenda, es posible definir una serie de modelos simplificados para la descripción de la estructura de bandas de semiconductores tipo wurtzita. Los recuadros de la Figura 1.22 representan los modelos alternativos que describiremos a continuación.

- “ 6×6 ”: Este modelo es análogo al descrito para la zincblenda. Se considera que la banda e está desacoplada del resto de bandas de valencia. Su uso está muy extendido en el estudio de nitruros como el GaN y el AlN debido a la magnitud de E_g , que es 3.5 eV y 6.3 eV, respectivamente. Para obtener el Hamiltoniano correspondiente basta hacer $P_z = P_\perp = 0$. La banda e se describe según la aproximación de una única banda, de forma que la relación de dispersión resulta ser:

$$E_e = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{e,z}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{e,\perp}}. \quad (1.51)$$

- “ 3×3 ”: En materiales con Δ_2 y Δ_3 muy pequeño, de unos pocos meV, una primera aproximación a la estructura electrónica se consigue asumiendo que la interacción spin-órbita es despreciable, i.e. $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$. Con ello el Hamiltoniano del modelo 6×6 se reduce a dos Hamiltonianos en los que únicamente están acopladas las bandas de valencia de igual spin. De ahí que este modelo sea denominado 3×3 .
- “ 1×1 ” o aproximación de una única banda: La aplicación de este modelo en la wurtzita presenta dificultades. En la zincblenda era suficiente con anular los elementos del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de fuera de la diagonal, haciendo formalmente $\mathbf{k} = 0$. En este caso, la aplicación de este procedimiento no conduce a un Hamiltoniano diagonal debido a la presencia del término Δ_3 .

Sólo si despreciamos la interacción spin-órbita resulta posible proceder de forma análoga a como se hizo con la zincblenda. En esta aproximación la relaciones de dispersión para las bandas A , B y C son:

$$E_A = E_v + \Delta_1 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{A,z}} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{A,\perp}}, \quad (1.52a)$$

$$E_B = E_v + \Delta_1 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{B,z}} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{B,\perp}}, \quad (1.52b)$$

$$E_C = E_v + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{C,z}} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{C,\perp}}, \quad (1.52c)$$

donde las masas efectivas están definidas como

$$\frac{m_{A,z}}{m_0} = \frac{-1}{A_1 + A_3}, \quad \frac{m_{A,\perp}}{m_0} = \frac{-1}{A_2 + A_4 - A_5}, \quad (1.53a)$$

$$\frac{m_{B,z}}{m_0} = \frac{-1}{A_1 + A_3}, \quad \frac{m_{B,\perp}}{m_0} = \frac{-1}{A_2 + A_4 + A_5}, \quad (1.53b)$$

$$\frac{m_{C,z}}{m_0} = \frac{-1}{A_1}, \quad \frac{m_{C,\perp}}{m_0} = \frac{-1}{A_2}. \quad (1.53c)$$

En las Ecs. (1.53) se puede comprobar que $m_{A,\perp} > m_{B,\perp}$ y $m_{A,z} = m_{B,z}$, lo cual evidencia la inconveniencia del uso del valor de la masa efectiva como criterio para nombrar las bandas.

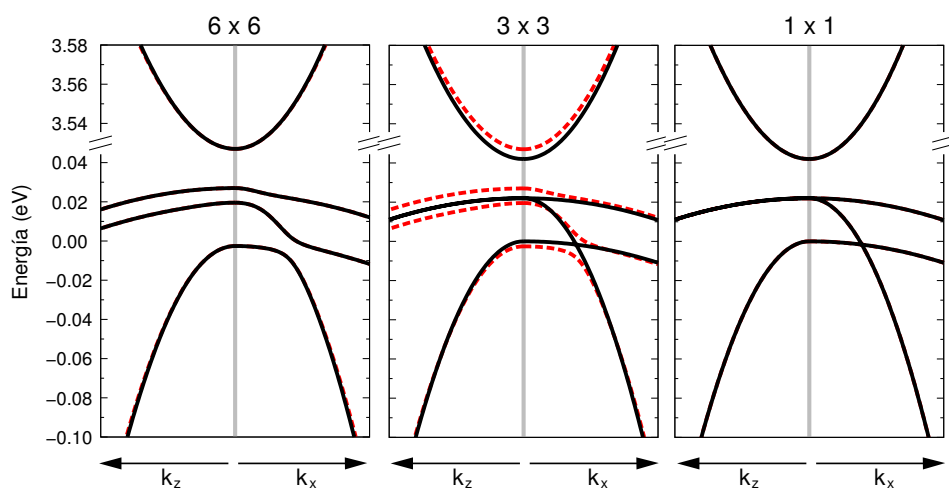


Figura 1.23: Dispersión de energía del GaN obtenida mediante los diferentes modelos discutidos en el texto. En el caso del modelo 1×1 para un única banda, se ha comparado esta aproximación (línea continua) con el modelo 3×3 (línea discontinua). En los otros paneles se han representado las correspondientes aproximaciones (línea continua) frente al modelo 8×8 (línea discontinua).

En la Figura 1.23 hemos representado la dispersión de energía de las diferentes bandas recurriendo a los modelos anteriormente descritos. Como se puede observar, los resultados obtenidos por el modelo 6×6 y 8×8 no muestran diferencias apreciables para el rango de energías mostrado. Este resultado viene a confirmar que el acoplamiento entre las bandas de valencia y conducción puede ser tratado por teoría de perturbaciones con un muy buen grado de aproximación. El modelo 3×3 describe razonablemente la dispersión de las bandas obtenida mediante el modelo 8×8 . Únicamente se aprecia un desplazamiento de los bordes de banda, como resultado de haber hecho $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$, y la desaparición del anticruce entre las bandas B y C , al ser cero tanto el término de interacción spin-órbita, como los términos del Hamiltoniano de la Ec. (B.4) que acoplan las funciones de Bloch u_4 (u_7) con u_5 (u_8). Finalmente, en la aproximación de una única banda hemos realizado la comparación entre los resultados de la Ec. (1.52) y los correspondientes al modelo 3×3 . Se puede observar que las energías de los estados están bien descritas por las dispersiones parabólicas a lo largo de las direcciones k_x y k_z .

1.5.5. Formulación del método $k \cdot p$ para semiconductores tipo wurtzita con deformación

Para contemplar el efecto de la deformación en la estructura electrónica vimos que era necesario conocer el Hamiltoniano de Bir y Pikus correspondiente. En la Ec. (B.5) del Apéndice B hemos reproducido de forma explícita el Hamiltoniano que será empleada en este trabajo. Al igual que hicimos en el apartado anterior, aquí también hemos desestimado los elementos del Hamiltoniano dependientes de la deformación que acoplan las banda de valencia con la de conducción. Nuevamente, es interesante indicar que el Hamiltoniano de Bir y Pikus puede ser obtenido a partir del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de la Ec. (B.4) recurriendo a la siguiente prescripción [98]:

$$\begin{aligned} k_i k_j &\rightarrow e_{ij}, \\ \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{0,z}} &\rightarrow a_z e_{zz}, \\ \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{0,\perp}} &\rightarrow a_{\perp} (e_{xx} + e_{yy}), \\ \frac{\hbar^2 A_i}{2m_0} &\rightarrow D_i, \end{aligned}$$

donde a_z y a_{\perp} son los potenciales de deformación correspondientes a la banda de conducción y D_i , con $i = 1, \dots, 6$, son los potenciales de deformación correspondientes a la banda de valencia.

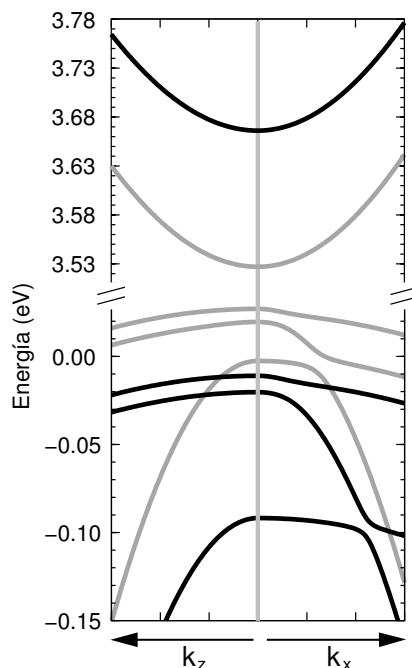


Figura 1.24: Dispersión de energía del GaN en el entorno del punto Γ obtenida por el modelo 8×8 en presencia de una deformación de tipo biaxial (línea negra) y en ausencia de la misma (línea gris).

Para ilustrar el impacto de la deformación en la estructura electrónica de este tipo de materiales, hemos procedido de forma análoga a como hicimos en el caso de la zincblenda. En la Figura 1.24 hemos representado la estructura de bandas del GaN sometido a una deformación de tipo biaxial descrita a través de las siguientes expresiones:

$$e_{xx} = e_{yy} = \frac{a^{\text{AlN}} - a^{\text{GaN}}}{a^{\text{GaN}}}, \quad (1.54a)$$

$$e_{zz} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} e_{xx}, \quad (1.54b)$$

$$e_{xy} = e_{yz} = e_{zx} = 0, \quad (1.54c)$$

donde a^{AlN} y a^{GaN} son las constantes de red de AlN y GaN, respectivamente y C_{13} y C_{33} son las constantes elásticas del GaN. Este es el estado de deformación característico de un pozo cuántico de GaN crecido sobre AlN (0001). Bajo la acción de esta deformación, la banda de conducción experimenta un desplazamiento

hacia altas energías (~ 140 meV), aunque la curvatura no experimenta un cambio tan pronunciado como ocurría en el InAs. Por contra, las bandas de valencia se desplazan hacia bajas energías (~ 38 meV), incrementando con ello el valor del gap fundamental. Obsérvese que la separación energética entre las bandas A y B , y la banda C se ha incrementado significativamente (~ 50 meV). Ello también ha provocado que el anticruce entre las bandas B y C se de a valores de k_x más alejados del centro de la zona de Brillouin.

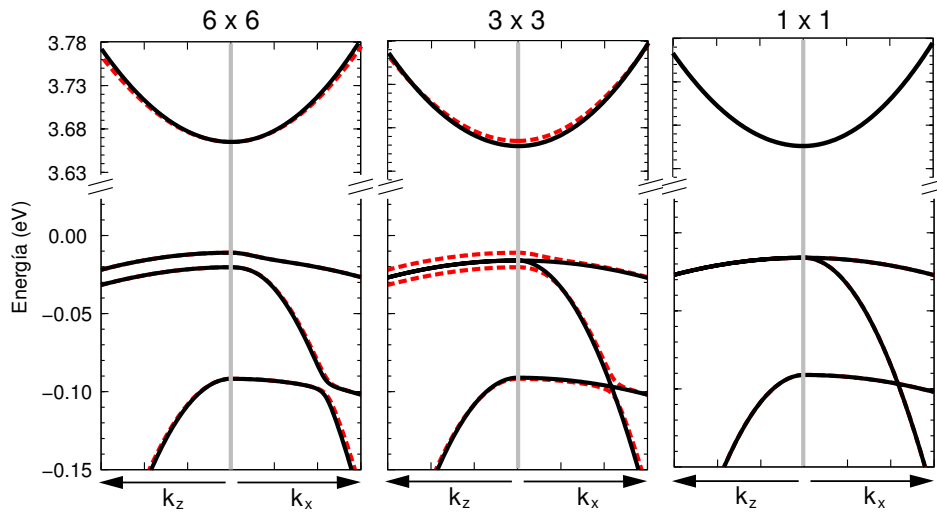


Figura 1.25: Ídem Figura 1.23 para GaN deformado biaxialmente.

La bondad de los modelos descritos en el apartado anterior puede ser discutida ahora en presencia de una deformación. En la Figura 1.25 hemos recogido los resultados obtenidos empleando los modelos 6×6 , 3×3 y 1×1 . En el modelo 1×1 hemos utilizado las masas efectivas de las Ecs. (1.53), y $m_{e,z}$ y $m_{e,\perp}$, ya que, en ausencia de interacción spin-órbita, la deformación no les influye significativamente [98]. A diferencia de lo que sucede en el InAs, se comprueba ahora que las consideraciones realizadas previamente sobre los diferentes modelos aplicados al GaN en ausencia de deformación son también válidas en presencia de una deformación biaxial.

1.6. Aproximación de la masa efectiva

La aproximación de la masa efectiva es una herramienta teórica sumamente útil para el estudio de la estructura electrónica de semiconductores sometidos a algún tipo de perturbación, e.g. la presencia de una impureza, un campo eléctrico, etc. . . . Asimismo, también ha resultado muy fructífera en el estudio de la estructura electrónica de heteroestructuras en el régimen de confinamiento cuántico [100]. En este

trabajo utilizaremos la aproximación de la masa efectiva para obtener la estructura electrónica de SAQDs, incluyendo los efectos de confinamiento, deformación y campos internos. En una primera parte de esta Sección cubriremos los aspectos más fundamentales del método y en una segunda discutiremos su aplicación el problema de la unión de dos o más semiconductores.

1.6.1. Formulación general de la aproximación de la masa efectiva

En el estudio de la dinámica de electrones en potenciales periódicos sometidos a algún tipo de perturbación, la aproximación de la masa efectiva ha demostrado ser una herramienta teórica imprescindible [101]. Cuando el potencial cristalino $V(\mathbf{r})$ está perturbado por el efecto de un potencial adicional $U(\mathbf{r})$, la ecuación de Schrödinger a resolver resulta ser:

$$(H + U(\mathbf{r}))\Psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right) E\Psi(\mathbf{r}). \quad (1.55)$$

Para resolver esta ecuación, se procede a hacer un desarrollo de la función de onda del electrón $\Psi(\mathbf{r})$ en un conjunto completo de funciones base de la función de onda. En [101] se demuestra que es posible utilizar para este desarrollo las amplitudes de Bloch en un punto fijo del espacio de la zona de Brillouin. Por el interés que tiene el punto Γ en el estudio de semiconductores de gap directo, se suelen escoger las funciones de Bloch con $\mathbf{k} = 0$ ($\{u_{j0}\}$) a tal fin. La función de onda puede ser expresada entonces como:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j F_j(\mathbf{r})u_{j0}(\mathbf{r}), \quad (1.56)$$

donde los coeficientes del desarrollo $\{F_j(\mathbf{r})\}$ dependen de la posición y reciben el nombre global de función envolvente. Cuando el potencial $U(\mathbf{r})$ varía suavemente en la escala de una celda unidad, se demuestra que las funciones envolventes son solución de la ecuación

$$\sum_{j'} [H_{jj'}(-i\nabla) + U(\mathbf{r})\delta_{jj'}] F_{j'}(\mathbf{r}) = EF_j(\mathbf{r}), \quad (1.57)$$

en la que el potencial periódico cristalino ya no aparece explícitamente. En su lugar, toda la información del potencial cristalino está contenida en los operadores diferenciales $H_{jj'}$, que se obtienen a partir del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ introducido en

las Ecs. (1.19) y (1.21) sin más que hacer la sustitución formal $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$.

En el caso más sencillo, esto es, cuando únicamente una amplitud de Bloch, e.g. correspondiente a la banda j_0 , se utiliza en el desarrollo de $\Psi(\mathbf{r})$, el operador cinético viene dado por la relación de dispersión $E_{j_0}(-i\nabla)$. Si además suponemos que dicha dispersión es parabólica, como la que se obtuvo en la Sección 1.5 al describir el modelo 1×1 :

$$E_{j_0}(-i\nabla) \approx E_{j_0}(0) + \frac{\hbar^2}{2m_{j_0}^*}(-i\nabla)^2, \quad (1.58)$$

donde $m_{j_0}^*$ es la masa efectiva, que por simplicidad se ha asumido isótropa, se obtiene la ecuación de la masa efectiva en su forma más conocida:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}) + E_{j_0}(0) \right] F_{j_0}(\mathbf{r}) = EF_{j_0}(\mathbf{r}). \quad (1.59)$$

Por este procedimiento se ha conseguido reemplazar el efecto del potencial periódico del Hamiltoniano de un único electrón por una masa efectiva tensorial, que caracteriza la estructura de la banda del cristal sin perturbar.

1.6.2. Aproximación de la masa efectiva aplicada a heteroestructuras

El estudio de la estructura electrónica de una heteroestructura puede resultar extraordinariamente complicado si se pretende emplear una teoría rigurosa. En el entorno de la intercara se encuentran diferentes especies atómicas que pueden complicar enormemente el análisis. G. Bastard propuso como alternativa la extensión del formalismo de la aproximación de la masa efectiva al estudio de superredes [100], de forma que el potencial perturbativo, $U(\mathbf{r})$, viniese dado en ese caso por la discontinuidad espacial de los bordes de banda $E_j(0)$. La mayoría de los estudios de la estructura electrónica y propiedades ópticas de todo tipo de heteroestructuras semiconductoras ha seguido este esquema teórico. En nuestro modelo también hemos implementado este esquema para el estudio del confinamiento 3D en puntos cuánticos.

A continuación ilustraremos esta definición del potencial perturbativo debido a la formación de la heteroestructura a través de un sencillo ejemplo. Supongamos la heteroestructura representada esquemáticamente en la Figura 1.26(a). El esquema podría representar un pozo cuántico en el que el material B está limitado espacialmente a lo largo del eje Z por las dos intercara con el material A situadas en L y

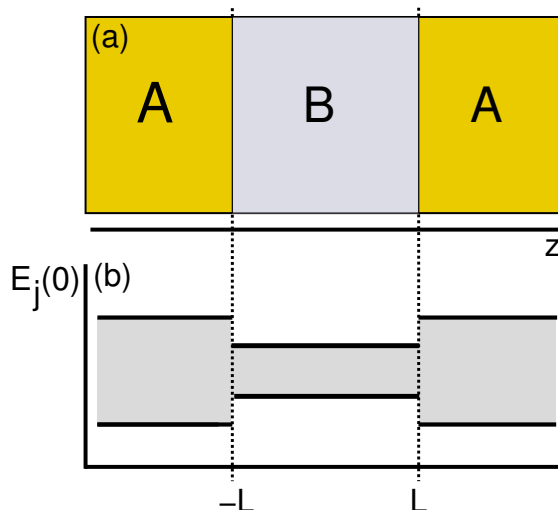


Figura 1.26: Esquema de una heteroestructura compuesta de dos materiales A y B. En la parte de abajo hemos representado las energías del centro de la zona de Brillouin de ambos materiales.

$-L$. En la Figura 1.26(b) hemos representado la discontinuidad de los bordes de banda $E_j(0)$ a lo largo de la dirección z debido a la presencia del material B. La diferencia de energía $E_j^A(0) - E_j^B(0)$, recibe el nombre de desalineamiento de la banda o *band off-set*. Este parámetro depende de la combinación de los dos materiales que participan en la heteroestructura y, normalmente, se determina experimentalmente o se calcula por métodos *ab-initio*. En la Figura 1.26 se ha supuesto que los materiales tienen dos bandas (valencia y conducción) alineadas formando un pozo en el material B. En efecto, un electrón en B no podrá propagarse en A, ya que su energía cae dentro de la banda prohibida de este último. Por tanto la ecuación a resolver ahora es:

$$\sum_{j'} H_{jj'}(-i\nabla_z) F_{j'}(\mathbf{r}) = \sum_{j'} [T_{jj'}(-i\nabla_z) + V_{j,\text{Conf}}(z)\delta_{jj'}] F_{j'}(\mathbf{r}) = E F_j(\mathbf{r}), \quad (1.60)$$

donde hemos separado el operador Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en una parte cinética $T_{jj'}$ y un potencial de confinamiento que contiene la discontinuidad de las bandas:

$$V_{j,\text{Conf}}(z) = E_j^A(0) + [E_j^B(0) - E_j^A(0)]\Theta(z - L)\Theta(L - z), \quad (1.61)$$

donde $\Theta(z)$ es la función de Heaviside.

A pesar de lo atractivo de este esquema, quedan por aclarar muchos aspectos antes de poder admitir que el problema está bien definido: (i) es necesario imponer las condiciones de contorno que se deben cumplir en las intercaras localizadas en $z = -L$ y $z = L$; (ii) la ecuación de la masa efectiva no impone ninguna condición

sobre los factores de Bloch $|u_{n0}\rangle$ de los diferentes materiales; (iii) los parámetros del operador cinético $\hat{T}_{jj'}$ dependen de z , haciendo que el Hamiltoniano pierda su hermiticidad; (iv) el potencial $V_{j,\text{Conf}}(z)$ no varía suavemente a escalas comparables con la celda unidad, lo que contradice la condición sobre $U(\mathbf{r})$ discutida en el apartado anterior. La respuesta a todas estas cuestiones no se puede dar de forma breve. De hecho, muchas de estas cuestiones siguen siendo objeto de investigación. En la gran mayoría de los trabajos publicados se suelen asumir las condiciones de contorno de BenDaniel-Duke [102] para soslayar algunos de estos problemas. En éstas se considera que los factores de Bloch son aproximadamente iguales en los dos materiales, i.e.

$$u_{j0}^{\text{A}}(\mathbf{r}) \approx u_{j0}^{\text{B}}(\mathbf{r}). \quad (1.62)$$

Además, el operador cinético se simetriza de forma que sea hermítico. En el caso de una única banda se obtiene:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} \rightarrow \mathbf{p} \frac{1}{2m^*} \mathbf{p}. \quad (1.63)$$

En el caso general, en el que un número mayor de factores de Bloch se utilizan en el desarrollo de (1.56), la prescripción que con mayor frecuencia se emplea para preservar la Hermiticidad del Hamiltoniano es simetrizar los operadores diferenciales según:

$$Q \frac{\partial}{\partial x_i} \rightarrow \frac{1}{2} \left(Q \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} Q \right), \quad (1.64)$$

$$Q \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \rightarrow \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} Q \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} Q \frac{\partial}{\partial x_i} \right), \quad (1.65)$$

donde Q representa un parámetro o campo arbitrario que depende de la posición y x_i , con $i = 1, 2, 3$ representa una coordenada espacial. Estas prescripciones equivalen a imponer la continuidad de la envolvente y la conservación de la corriente de probabilidad en la intercara. Esta aproximación ha tenido un extraordinario éxito en el estudio de pozos cuánticos y superredes debido, principalmente, a la sencillez de la formulación implicada [103]. Para una completa revisión sobre el estudio teórico de superredes remitiremos al lector interesado al trabajo de D. L. Smith y C. Mailhot [104].

Las condiciones de contorno que hemos presentado son, como ya hemos dicho, las que se emplean con mayor frecuencia en la bibliografía. Sin embargo, no son únicas. Es posible encontrar numerosos trabajos en los que se intenta dar respuesta a esta cuestión. En una serie de artículos de M. G. Burt y colaboradores, se hace una revisión de las diferentes propuestas y se desarrolla un nuevo método para

obtener la ecuación de la masa efectiva [105]. Uno de los principales resultados de esta nueva formulación es que las condiciones de contorno dependen de la orientación de la intercara [106, 107]. Mientras que en un pozo cuántico la intercara está constituida por un único plano, en un punto cuántico tenemos varias caras con diferentes orientaciones y por tanto la aplicación rigurosa de este procedimiento alternativo no resulta muy práctica para el estudio de la estructura electrónica en SAQDs.

Como ya se indicó en la Sección 1.4, en este trabajo emplearemos la aproximación de la masa efectiva en combinación con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para estudiar la estructura electrónica de los SAQDs. Dada la ambigüedad de las condiciones de contorno, hemos optado, como criterio general, por considerar los diferentes parámetros que aparecen en la definición del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (masas efectivas, parámetros de Luttinger, potenciales de deformación, etc...) homogéneos e iguales a los del material que constituye el punto cuántico. Por otro lado, las componentes del tensor deformación e_{ij} y el potencial electrostático interno φ dependen, en general, de la posición. Sin embargo, no es necesario introducir ningún cambio en el marco teórico descrito, pues la aproximación de la masa efectiva también contempla este tipo de perturbación, que será responsable de que el potencial de confinamiento y los elementos del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ adquieran una dependencia espacial más complicada.

1.7. Propiedades ópticas: Hamiltoniano de interacción radiación-materia

La teoría de la electrodinámica cuántica describe completamente la interacción entre un campo electromagnético y la materia. Sin embargo, su formulación resulta complicada y es por ello que con frecuencia se recurre a una descripción *semi-clásica* del problema. En la aproximación semi-clásica la estructura electrónica de la materia, en nuestro caso del semiconductor, se describe mediante la mecánica cuántica, i.e. utilizando los diferentes modelos descritos en las Secciones 1.4, 1.5, y 1.6, y el campo electromagnético a través de la teoría clásica del electromagnetismo. Los resultados y conclusiones a las que se llega utilizando la teoría de la electrodinámica cuántica o la aproximación semi-clásica son totalmente equivalentes en los casos que aquí serán tratados. Para la descripción del campo electromagnético haremos uso del potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ y del potencial escalar $\phi(\mathbf{r}, t)$. En adelante escogeremos el gauge de Coulomb para resolver la indeterminación en la definición de los potenciales, i.e. $\phi = 0$ y $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Los campos se obtienen explícitamente a través

de las siguientes expresiones:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (1.66a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (1.66b)$$

En todo momento consideraremos que el potencial vector tiene una evolución temporal armónica:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \hat{\mathbf{e}} \{ e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)} + \text{c.c.} \}, \quad (1.67)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}$ es un vector unitario. En este trabajo únicamente estudiaremos transiciones ópticas en que sea válida la aproximación dipolar, en la que el vector de onda del campo electromagnético es despreciable, i.e. $\mathbf{q} \approx 0$.

El Hamiltoniano clásico de una carga q bajo la influencia de un campo electromagnético se puede obtener a partir del Hamiltoniano de una partícula libre realizando la siguiente sustitución: $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ [108]. El operador Hamiltoniano de un electrón en un sólido en presencia de un campo electromagnético resulta ser:

$$H = \frac{1}{2m_0} [\mathbf{p} + (e\mathbf{A})]^2 + V(\mathbf{r}), \quad (1.68)$$

donde e es la carga del electrón definida positiva, i.e. $q = -e$. Tras desarrollar el término cuadrático es posible expresar (1.68) como:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{e}{m_0} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}, \quad (1.69)$$

donde se ha invocado la relación $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ y se ha despreciado el término proporcional a \mathbf{A}^2 . En esta expresión el efecto del campo electromagnético aparece como una perturbación del problema del electrón en el semiconductor que ya fue estudiado en la Sección 1.5. Este término adicional recibe el nombre de Hamiltoniano de interacción radiación-materia o, en lenguaje cuántico, electrón-fotón y en adelante nos referiremos a él como $H_{\text{r.m.}}$. El Hamiltoniano (1.69) depende armónicamente con el tiempo a través del potencial vector. En este trabajo no estamos interesado en la descripción exacta de la evolución temporal del sistema. Como veremos más adelante, las propiedades ópticas básicas se pueden describir a partir de la probabilidad de transición por unidad de tiempo inducida por el campo entre dos estados cuánticos. En consecuencia, recurriremos a la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo (i.e., a la Regla de Oro de Fermi) [89], de forma que la probabilidad de transición entre un estado inicial i y uno final f se puede calcular

como:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega). \quad (1.70)$$

El primer término describe la absorción de un fotón⁹ por la excitación de un electrón, ya que $E_f = E_i + \hbar\omega$, mientras que el segundo corresponde a la emisión de un fotón, pues $E_f = E_i - \hbar\omega$. La probabilidad total por unidad de tiempo de absorción de un fotón de energía $\hbar\omega$ será:

$$R(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \sum_f |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (1.71)$$

Finalmente, debemos enlazar la descripción microscópica desarrollada hasta ahora con las propiedades ópticas macroscópicas, pues son estas últimas las observadas experimentalmente. Para ello introduciremos la absorción óptica definida como al número de fotones absorbidos por unidad de volumen y por unidad de tiempo respecto el número de fotones incidentes por unidad de área y por unidad de tiempo [89]. Al tener dimensiones de inversa de longitud, es posible relacionar esta magnitud con la longitud de penetración de un fotón en el medio:

$$\alpha = \frac{1}{l_{ph}} = \frac{1}{v_{ph} \tau_{ph}} = \frac{n}{c} \frac{1}{\tau_{ph}}, \quad (1.72)$$

donde v_{ph} es la velocidad y τ_{ph} es el tiempo de vida media del fotón en el material. Este tiempo es la inversa de la probabilidad total de absorción de un fotón $R(\hbar\omega)$, con lo que llegamos finalmente a la expresión:

$$\begin{aligned} \alpha(\hbar\omega) &= \frac{n}{c} R(\hbar\omega) \\ &= \frac{n}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \sum_f |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (1.73)$$

La transición óptica entre dos niveles de energía está caracterizada por un tiempo de recombinación que introduce un ensanchamiento homogéneo en la línea espectral. En tales circunstancias la línea espectral se puede describir a través de una distribución Lorentziana en lugar de una distribución tipo delta de Dirac.

⁹Hemos utilizado el término cuántico “fotón” para describir la radiación de frecuencia ω . En adelante haremos uso de este lenguaje, aunque debe quedar claro que utilizamos en todo momento la teoría semi-clásica de la interacción radiación materia.

Como ya se ha mencionado en otras partes del trabajo, el punto cuántico no está aislado de su entorno, por lo que otra serie de procesos contribuyen a perturbar el ensanchamiento homogéneo de las transiciones, e.g. interacción con fonones, interacción de Coulomb con electrones libres, etc. . . , resultando ser, típicamente, de unos pocos meV. En este trabajo representaremos el ensanchamiento homogéneo a través del parámetro Γ sin profundizar en los detalles de su origen. La absorción vendrá descrita a través de la expresión:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{n}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \sum_f |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (1.74)$$

Por otro lado, en los espectros experimentales se observan ensanchamientos de las transiciones ópticas de varias decenas de meV, véase por ejemplo la Fig. 1.3. Este ensanchamiento tiene su origen principalmente en la dispersión de tamaños y composiciones de los SAQDs que están siendo estudiados, es por ello que se conoce como ensanchamiento inhomogéneo. Para su descripción en el espectro óptico se suele utilizar una distribución Gaussiana en lugar de la distribución Lorentziana, quedando entonces definida la absorción como:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{n}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \sum_f |\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (1.75)$$

Hasta ahora el tratamiento ha sido muy general, no se ha especificado la forma de las funciones de onda implicadas en el cálculo de la probabilidad de transición. A continuación describiremos el cálculo de $\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle$, que denominaremos elemento de matriz óptico. Para ello consideraremos, en primer lugar, un semiconductor masivo y, posteriormente, generalizaremos el tratamiento al caso de una heteroestructura descrita teóricamente en el marco de la aproximación de la masa efectiva.

1.7.1. Elemento de matriz óptico en un semiconductor masivo

Los estados inicial y final de una transición óptica vienen descritos en un sólido por funciones de Bloch de la forma (1.12). En el caso de un semiconductor, es posible simplificar el análisis suponiendo que el estado inicial pertenece a la banda

de valencia y el estado final a la banda de conducción:

$$\Psi_f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_c \mathbf{r}} u_{c\mathbf{k}_c}(\mathbf{r}), \quad (1.76a)$$

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_v \mathbf{r}} u_{v\mathbf{k}_v}(\mathbf{r}). \quad (1.76b)$$

Al sustituir (1.76) y (1.67) en el elemento de matriz, obtenemos:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left| \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} u_{c\mathbf{k}_c}^* e^{-i\mathbf{k}_c \mathbf{r}} (\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}) u_{v\mathbf{k}_v} e^{i\mathbf{k}_v \mathbf{r}} \right|^2, \quad (1.77)$$

donde \mathcal{V} es el volumen del cristal. La acción del operador momento sobre el estado inicial da lugar a los términos:

$$\mathbf{p} u_{v\mathbf{k}_v} e^{i\mathbf{k}_v \mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}_v \mathbf{r}} \mathbf{p} u_{v\mathbf{k}_v} + \hbar \mathbf{k}_v u_{v\mathbf{k}_v} e^{i\mathbf{k}_v \mathbf{r}}. \quad (1.78)$$

La integral de este segundo término es cero, como consecuencia de la ortogonalidad de los factores de Bloch. Para la integración del primer término es preciso tener en cuenta que los factores de Bloch tienen la misma periodicidad que el potencial cristalino. Tras realizar una serie de manipulaciones se llega a la siguiente expresión para el elemento de matriz [20]:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left| \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} u_{c\mathbf{k}_c}^* (\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}) u_{v\mathbf{k}_v} \right|^2 \delta_{\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v}, \quad (1.79)$$

siendo Ω el volumen de la celda unidad. De esta derivación se desprende que el vector de onda debe satisfacer la relación:

$$\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_c, \quad (1.80)$$

esto es, la condición de conservación del vector de onda. Se dice entonces que las transiciones son verticales o directas. Es interesante notar que la integral que aparece en la Ec. (1.79), fue introducida ya en la descripción del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, véase la Ec. (1.16). Es por ello que en el caso de semiconductores tipo zincblenda o wurtzita que estudiaremos en este trabajo su valor está relacionado con el elemento de matriz P definido en las Ec. (1.26) y (1.43), respectivamente. Por ejemplo, supongamos un material tipo zincblenda en el que la banda de valencia que participa en la transición óptica es la banda de hueco pesado, $u_{v\mathbf{k}=0} \equiv -|X + iY\rangle / \sqrt{2}$, y que el campo de radiación está polarizado paralelamente al eje X , i.e. $\hat{\mathbf{e}} \parallel \hat{\mathbf{x}}$.

Tendremos entonces que:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \frac{1}{2} |\langle S | p_x | X + iY \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{\hbar} \right)^2 \frac{|P|^2}{2}. \quad (1.81)$$

Vemos pues que las transiciones ópticas interbanda entre las bandas de valencia y de conducción vienen gobernadas por uno de los parámetros que fue definido en el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

1.7.2. Elemento de matriz óptico en una heteroestructura

En la Sección 1.6 vimos que para la descripción de los estados electrónicos de una heteroestructura la aproximación de la masa efectiva resultaba ser una herramienta apropiada. Recordemos que en el marco de esta teoría las funciones de onda de los estados inicial y final están definidos según:

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = \sum_m F_{i,m}(\mathbf{r}) u_{m0}(\mathbf{r}), \quad (1.82a)$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}) = \sum_j F_{f,j}(\mathbf{r}) u_{j0}(\mathbf{r}), \quad (1.82b)$$

Procediendo de forma análoga al apartado anterior, obtenemos la siguiente expresión para el elemento de matriz óptico:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left| \sum_{j,m} \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} F_{f,j}^*(\mathbf{r}) u_{j0}^*(\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}) F_{i,m}(\mathbf{r}) u_{m0} \right|^2, \quad (1.83)$$

El rango de integración de este elemento de matriz comprende todo el volumen del sistema V . Sin embargo, la integral puede ser simplificada gracias a que contiene funciones que varían de forma diferente sobre dos escalas de longitud distintas. Mientras que las funciones de Bloch varían dentro de una celda unidad, las funciones envolventes lo hacen sobre distancias comparables a varias celdas unidad. Por consiguiente, es posible dividir el volumen de integración en celdas unidad y extraer las funciones envolventes de la integral, argumentando que son aproximadamente constantes dentro del nuevo rango de integración.

$$\sum_{j,m} \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} F_{f,j}^*(\mathbf{r}) u_{j0}^*(\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}) F_{i,m}(\mathbf{r}) u_{m0}$$

$$\approx \sum_{j,m} \sum_l^{N_{\text{Celdas}}} F_{f,j}^*(\mathbf{R}_l) F_{i,m}(\mathbf{R}_l) \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} u_{j0}^*(\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}) u_{m0}, \quad (1.84)$$

donde N_{Celdas} representa el número de celdas unidad en el volumen \mathcal{V} , y \mathbf{R}_l son los vectores de red del cristal. Por último, podemos transformar la suma en las celdas unidad en una integral continua para obtener:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left| \sum_{j,m} \hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}_{jm} \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} F_{f,j}^*(\mathbf{r}) F_{i,m}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (1.85)$$

donde \mathbf{p}_{jm} fue definido en la Ec. (1.16). Las transiciones ópticas interbanda en el caso de una heteroestructura vienen gobernadas por el solapamiento de las funciones envolventes de los estados inicial y final, ponderado por el acoplamiento de los factores de Bloch a través del operador momento. De esta expresión se desprende que podrán existir reglas de selección impuestas por las propiedades de simetría tanto de los factores de Bloch, como de las funciones envolventes. Otra conclusión que estimamos importante destacar es que la polarización de la radiación incidente únicamente va a tener influencia sobre el factor $\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}_{jm}$. Por consiguiente, en el marco de esta teoría, una eventual anisotropía de las funciones envolventes, no condicionará la respuesta del sistema en función de la polarización.

Una forma alternativa de escribir la Ec. (1.85) consiste en expresar el desarrollo de las Ec. (1.82) recurriendo a una representación matricial. Sin riesgo de pérdida de generalidad y precisión de los cálculos que presentaremos más adelante, vamos a limitar el número de funciones base utilizadas en el desarrollo a las ocho funciones de Bloch utilizadas en la Sección 1.5 para escribir el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de semiconductores tipo zincblenda y wurtzita. Atendiendo a estas consideraciones, un estado electrónico como el representado en la Ec. (1.82) queda entonces expresado como:

$$\Psi(\mathbf{r}) \equiv (F_1(\mathbf{r}) \quad F_2(\mathbf{r}) \quad \dots \quad F_8(\mathbf{r})) \begin{pmatrix} u_1(\mathbf{r}) \\ u_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ u_8(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \mathbf{F}^T \mathbf{u}. \quad (1.86)$$

Aplicando esta notación en (1.85), obtendremos:

$$|\langle \Psi_f | H_{r-m} | \Psi_i \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \left| \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \mathbf{F}_f^{*\Gamma} \bar{\mathbf{p}}^{\hat{\mathbf{e}}} \mathbf{F}_i \right|^2, \quad (1.87)$$

donde $\bar{\mathbf{p}}^{\hat{\mathbf{e}}}$ es la representación matricial del operador $\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}$ en la base de funciones

de Bloch u_l . Al depender de u_l , tendremos que esta matriz presentará una forma distinta para semiconductores tipo zincblenda y wurtzita. Además, dependerá de la polarización del campo de radiación incidente \hat{e} . En este trabajo consideraremos que la polarización puede ser circular, dextrógira (\hat{e}_+) o levógira (\hat{e}_-), contenida en el plano de crecimiento, o lineal paralela a la dirección de crecimiento de los SAQDs (\hat{e}_z).

$$\hat{e}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} \pm i\hat{y}), \quad (1.88a)$$

$$\hat{e}_z = \hat{z}, \quad (1.88b)$$

donde \hat{x} , \hat{y} y \hat{z} son los vectores unitarios paralelos a los ejes cartesianos. Hemos escogido esta representación de la polarización pues resulta adecuada para trabajar con problemas que presenten simetría axial, como es nuestro caso. El primer caso será apropiado para tratar la incidencia normal al plano de crecimiento y el segundo será relevante en experimentos en que la radiación se propague paralela a dicho plano.

La matriz $\tilde{p}^{\hat{e}}$ en sistemas tipo zincblenda y wurtzita viene dada por las siguientes expresiones:

$$\tilde{p}_{\text{ZB}}^{\hat{e}} = P \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc} 0 & 0 & [-1]_- & [\sqrt{\frac{2}{3}}]_z & [\frac{1}{\sqrt{3}}]_+ & 0 & [-\frac{1}{\sqrt{3}}]_z & [-\sqrt{\frac{2}{3}}]_+ \\ 0 & 0 & 0 & [-\frac{1}{\sqrt{3}}]_- & [\sqrt{\frac{2}{3}}]_z & [1]_+ & [-\sqrt{\frac{2}{3}}]_- & [\frac{1}{\sqrt{3}}]_z \\ \hline [1]_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [-\sqrt{\frac{2}{3}}]_z & [\frac{1}{\sqrt{3}}]_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [-\frac{1}{\sqrt{3}}]_- & [-\sqrt{\frac{2}{3}}]_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [-1]_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline [\frac{1}{\sqrt{3}}]_z & [\sqrt{\frac{2}{3}}]_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [\sqrt{\frac{2}{3}}]_- & [-\frac{1}{\sqrt{3}}]_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right), \quad (1.89a)$$

$$\bar{\mathbf{p}}_{\text{WZ}}^{\hat{e}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \begin{bmatrix} -P_{\perp} \end{bmatrix}_{-} & \begin{bmatrix} P_{\perp} \end{bmatrix}_{+} & \begin{bmatrix} P_z \end{bmatrix}_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \begin{bmatrix} P_{\perp} \end{bmatrix}_{+} & \begin{bmatrix} -P_{\perp} \end{bmatrix}_{-} & \begin{bmatrix} P_z \end{bmatrix}_z \\ \begin{bmatrix} P_{\perp} \end{bmatrix}_{+} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \begin{bmatrix} -P_{\perp} \end{bmatrix}_{-} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \begin{bmatrix} -P_z \end{bmatrix}_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} -P_{\perp} \end{bmatrix}_{-} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} +P_{\perp} \end{bmatrix}_{+} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \begin{bmatrix} -P_z \end{bmatrix}_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.89b)$$

donde el subíndice introducido junto a cada elemento de matriz indica el valor que éste adopta para una polarización determinada de las tres consideradas.

En la Figura 1.27 mostramos un esquema que pretende ilustrar gráficamente el efecto de la polarización en las transiciones ópticas. Hemos considerado separadamente las bandas del semiconductor masivo en sistemas tipo zincblenda y tipo wurtzita. Junto a cada transición permitida hemos indicado el valor relativo de $|\hat{e}\mathbf{p}|^2$, que permite estimar la intensidad relativa entre las diferentes transiciones indicadas. El aspa indica qué transiciones están prohibidas.

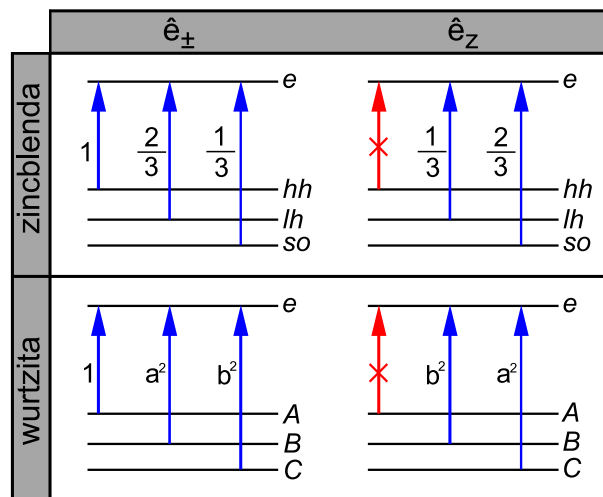


Figura 1.27: Esquema de las transiciones ópticas entre las bandas del semiconductor masivo para sistemas tipo zincblenda y wurtzita considerando diferentes polarizaciones. Las transiciones permitidas van acompañadas del valor relativo de $|\hat{e}\mathbf{p}|^2$ y las prohibidas han sido indicadas con un aspa.

En el Capítulo 3 y 4 emplearemos este formalismo para estudiar las propiedades ópticas de los SAQDs de InAs/GaAs y GaN/AlN.

Capítulo 2

Estudio de la distribución de la deformación y de los campos internos en puntos cuánticos auto-ensamblados

En el presente Capítulo estudiaremos la parte relativa a las propiedades estructurales de los SAQDs. Nos restringiremos al estudio de las propiedades elásticas y electrostáticas de estas nanoestructuras. Las características estructurales como el tamaño, la composición y la forma, serán consideradas como parámetros conocidos, o ajustables. No es un objetivo de este trabajo el desarrollo de modelos del proceso de formación de las nanoestructuras. La deformación elástica es una característica de particular importancia en el caso de los puntos cuánticos auto-ensamblados. Su origen está en la naturaleza misma del proceso de auto-organización, que fue descrito en el Capítulo 1 bajo el nombre de modo de crecimiento Stranski-Krastanov. Las heteroestructuras así obtenidas son islas tridimensionales que surgen espontáneamente sobre una capa mojante bidimensional como resultado de la relajación elástica de tensiones [109]. En consecuencia, este tipo de QDs siempre presentan un estado de deformación. Su descripción resulta interesante por varios motivos. Por una parte, vimos en el Capítulo 1 que el impacto de la deformación en la estructura electrónica de un semiconductor masivo es muy importante, y además, es responsable de la polarización piezoeléctrica (ver Ec. (1.5)). Por otro lado, mediante técnicas experimentales de caracterización estructural (rayos-X, microscopía, etc...), es posible cuantificar, con mayor o menor detalle, la deformación presente en los QDs, lo cual aporta, en conjunción con una modelización teórica apropiada, una información valiosa sobre las propiedades estructurales de los QDs.

Junto con la deformación también estudiaremos el potencial electrostático interno presente en QDs basados en nitruros del grupo III. Éste potencial tiene su origen en la polarización piezoeléctrica y en la polarización espontánea. En adelante nos referiremos al potencial y al campo creados por esta polarización simplemente como *potencial y campo interno*.

Hemos organizado el Capítulo en dos partes. En la primera trataremos el problema de la deformación para un QD aislado y para una superred de QDs. Aquí también hemos incluido una sección en la que analizaremos diferentes resultados experimentales con nuestro modelo. En la segunda parte abordaremos el estudio del potencial interno para un único QD.

2.1. Formulación y resolución del problema de la distribución de deformaciones

El objetivo de esta Sección es plantear una ecuación diferencial que describa el estado de formación de una isla auto-organizada y presentar una técnica de cálculo que permita resolverla. Como ya se ha comentado, el origen de la deformación en este sistema está en el desacuerdo entre las constantes de red del material que constituye los QDs y el sustrato. En la Sección 1.4 vimos que los modelos teóricos desarrollados para el estudio de la deformación en QDs podían ser catalogados en dos familias: modelos atomísticos y modelos continuos. En los modelos atomísticos se modelizan las fuerzas interatómicas mediante un potencial clásico de interacción de varios cuerpos y a través de condiciones de contorno apropiadas se persigue reconstruir la posición real de los átomos que constituyen el QD y su entorno. Entre los potenciales interatómicos que se emplean con mayor frecuencia podemos encontrar el modelo de Keating [68] y sus generalizaciones [66, 86, 110, 111, 112], así como el potencial de Stillinger-Weber [113] y el de Tersoff [114]. La implementación de estos modelos para el estudio de QDs exige grandes recursos de cálculo debido a la gran cantidad de átomos (10^3 - 10^9) que se necesitan para describir tanto el QD como el material que lo encierra. En los modelos continuos la estructura es sustituida por un continuo elástico y la distribución de la deformación se obtiene resolviendo la ecuación elástica de equilibrio o por minimización de la energía elástica almacenada en el medio. El tratamiento del problema de las deformaciones en un QD por medio de la teoría elástica del continuo resulta particularmente interesante dada la cantidad de métodos de resolución existentes. La primera dificultad que debemos superar en el planteamiento del problema radica en la transcripción del problema del SAQD a su análogo continuo. Este problema fue tratado por J. D.

Eshelby en el estudio de defectos en sólidos y sus conclusiones dieron lugar a lo que hoy se conoce como *método de las inclusiones de Eshelby* o simplemente *método de Eshelby*. En este trabajo hemos empleado este método para el estudio de los SAQDs de InAs/GaAs y de GaN/AlN. Es por ello que a continuación pasaremos a describirlo en detalle.

2.1.1. Método de Eshelby

Antes de empezar con la descripción del método de Eshelby introduciremos la nomenclatura y la notación que serán utilizadas a lo largo de esta Sección. Como introducción abreviada a la teoría de la elasticidad en medios continuos recomendamos la lectura del Capítulo 4 de C. Kittel [115], o el artículo monográfico de J. D. Eshelby [116]. En la Sección 1.4 introdujimos el campo de desplazamiento $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, las componentes del tensor de deformaciones $e_{ij}(\mathbf{r})$ y las componentes del tensor de tensiones $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$. Consideraremos que la heteroestructura está compuesta por una porción de un material, que en adelante llamaremos *inclusión* (I), incluida dentro de otro material, al que nos referiremos como *matriz* (M). Los dos materiales tienen diferentes constantes de red ($a_i^{(I)}$ y $a_i^{(M)}$, con $i = 1, 2, 3$ que representan las tres direcciones principales) y constantes elásticas ($C_{ijkl}^{(I)}$ y $C_{ijkl}^{(M)}$). Consideraremos que la intercara de contacto entre las dos regiones de la heteroestructura es coherente, i.e. está libre de dislocaciones. Esta condición es la responsable de que aparezca una distribución de deformaciones en el sistema, como ya se indicó previamente.

El método de Eshelby apareció originalmente en una serie de artículos en el contexto del estudio de los defectos en sólidos [71, 72]. A continuación detallaremos la adaptación de dicho método para el tratamiento del problema de una inclusión coherente en desacuerdo de malla con el entorno. Según Eshelby, a partir de un estado inicial sin tensiones, el estado de equilibrio final del sistema puede ser interpretado como el resultado de la siguiente serie de pasos idealizados (ver Figura 2.1):

1. Consideremos que la matriz llena una región del espacio, que denominaremos D . En el interior de ésta recortamos y sustraemos una región Ω que será ocupada posteriormente por la inclusión. Supongamos que el material sustraído está compuesto por N celdas unidad con parámetros de red $a_i^{(M)}$. Por otro lado, tenemos la inclusión que presenta la misma forma que el agujero practicado en la matriz y contiene el mismo número N de celdas unidad pero de constante de red $a_i^{(I)}$. En este paso, la deformación tanto en la inclusión, como en la matriz, es igual a cero.

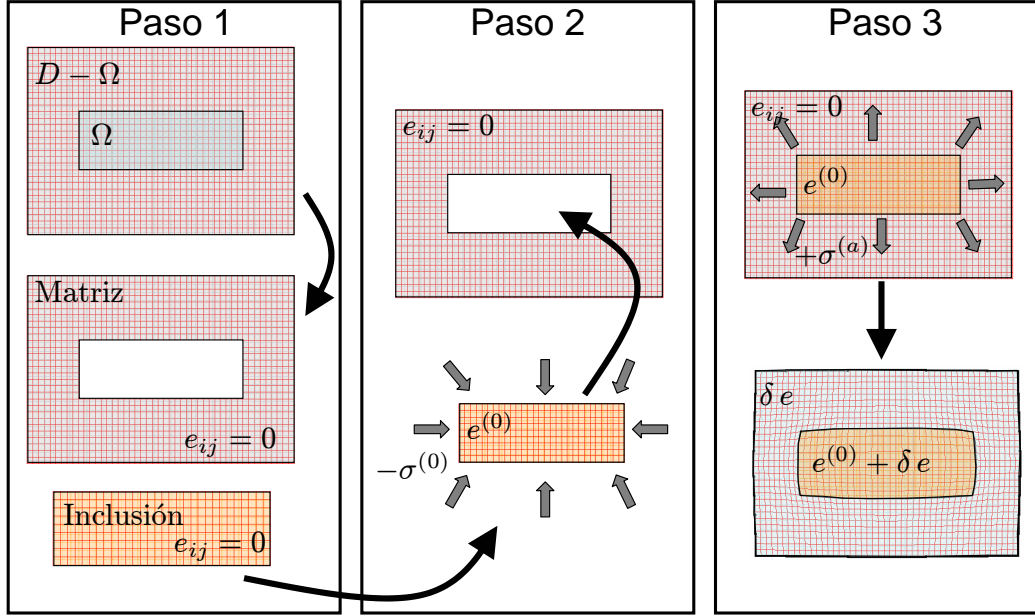


Figura 2.1: Representación esquemática de los diferentes pasos del método de Eshelby adaptado al caso de una inclusión coherente en desajuste de malla con la matriz (ver texto).

- En el segundo paso, un campo de tensiones externo (ficticio) se aplica sobre la inclusión de forma que ésta alcanza el mismo tamaño que el hueco de la matriz. Mientras que la deformación en la matriz sigue siendo nula, la inclusión experimentará una dilatación o compresión derivada del desajuste nominal entre las constantes de red de los dos materiales, i.e. la inclusión estará sometida a la deformación de desajuste de malla:

$$e_{ij}^{(0)} \equiv e_i^{(0)} \delta_{ij} \equiv \frac{a_i^{(M)} - a_i^{(I)}}{a_i^{(I)}} \delta_{ij} \quad (2.1)$$

La tensión aplicada necesaria para mantener dicha deformación vendrá dada por $-\sigma_{ij}^{(0)}$, donde

$$\sigma_{ij}^{(0)} = C_{ijkl}^{(I)} e_{kl}^{(0)}. \quad (2.2)$$

- Por último, la inclusión se introduce dentro del hueco dejado en la matriz y los dos materiales se “suelan” coherentemente a lo largo de la intercara. Ahora se deja relajar el sistema a la vez que se preserva en todos los puntos la coherencia de la red. Para ello se eliminan las fuerzas ficticias impuestas sobre la inclusión en el paso 2 aplicando sobre el dominio Ω una tensión:

$$\sigma_{ij}^{(a)} = +\sigma_{ij}^{(0)} = C_{ijkl}^{(I)} e_{kl}^{(0)}. \quad (2.3)$$

El sistema final no está sometido a ninguna fuerza externa real, pero sí se encuentra en un estado de deformación elástica conocido como *deformación de relajación*¹ debido a la inclusión coherente. El desplazamiento de relajación correspondiente puede ser obtenido a través de la resolución de la ecuación de equilibrio elástica:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[C_{ijkl}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} u_k(\mathbf{r}) \right] = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\sigma_{ij}^{(a)} \chi(\mathbf{r})], \quad (2.4)$$

donde las constantes elásticas del sistema están definidas según

$$C_{ijkl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}^{(M)}(\mathbf{r}) + \left[C_{ijkl}^{(I)}(\mathbf{r}) - C_{ijkl}^{(M)}(\mathbf{r}) \right] \chi(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

y $\chi(\mathbf{r})$ es la función característica de la inclusión definida como

$$\chi(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in \Omega \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \in D - \Omega \end{cases}. \quad (2.6)$$

Una vez resuelta la ecuación (2.4), es posible obtener la deformación de relajación derivando $\mathbf{u}(\mathbf{r})$:

$$\delta e_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.7)$$

Para la obtención de la deformación total del sistema debemos tener en cuenta que en el paso 2 hemos forzado a la inclusión a que adopte las constantes de red de la matriz. Esto significa que tanto $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ como $\delta e_{ij}(\mathbf{r})$ están referidas a la red cristalina de la matriz. Por consiguiente, para obtener la expresión de la deformación total referida a la red cristalina local sin deformar, deberemos escribir:

$$e_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{cases} e_{ij}^{(0)} + \delta e_{ij}(\mathbf{r}) & \text{si } \mathbf{r} \in \Omega \\ \delta e_{ij}(\mathbf{r}) & \text{si } \mathbf{r} \in D - \Omega \end{cases}, \quad (2.8)$$

o bien, en una forma más compacta,

$$e_{ij}(\mathbf{r}) = \left[e_{ij}^{(0)} \chi(\mathbf{r}) + \delta e_{ij}(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.9)$$

Para obtener la tensión deberemos recurrir a la ley de Hooke generalizada:

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) e_{kl}(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

¹La *relajación total* corresponde al estado en el que la constante de red del material es la misma que cuando está sin deformar.

Finalmente, es posible calcular la densidad de energía elástica del sistema mediante la siguiente expresión:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} C_{ijkl}(\mathbf{r}) e_{ij}(\mathbf{r}) e_{kl}(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

2.1.2. Resolución del problema de la relajación elástica por el método de la transformada de Fourier

El siguiente paso para la obtención del estado de deformación del sistema consiste en la resolución de la Ec. (2.4). Las técnicas analíticas que existen en la actualidad para acometer esta tarea obligan a reducir la generalidad del problema planteado. La resolución del caso inhomogéneo, en el que las constantes elásticas son diferentes dentro y fuera del material, es difícil de abordar y requiere de métodos avanzados como el método de la inclusión equivalente explicado en detalle por T. Mura [117] o el uso de técnicas perturbativas [118]. Por otra parte, la introducción de condiciones de contorno adicionales para modelizar superficies libres también requiere de métodos especializados, como el formalismo de Stroh [119]. Alternativamente, para la resolución de este tipo de problemas puede resultar conveniente recurrir a métodos numéricos de discretización del espacio, como son las diferencias finitas, los elementos finitos o los elementos de contorno finitos [120]. Aunque estos métodos resultan muy versátiles, son complicados de programar y requieren costosos recursos de computación.

Una vez hemos realizado estas observaciones pasaremos a justificar las aproximaciones que hemos adoptado para poder resolver la Ec. (2.4) utilizando métodos analíticos. En primer lugar, asumiremos que el dominio D se extiende hasta el infinito, de forma que la condición de contorno que deberán cumplir nuestras soluciones es que $\mathbf{u}(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = 0$. El problema así planteado presenta invariancia de escala. Esto es, la solución final ya no depende del volumen de la inclusión, sino únicamente de su forma. La validez de la aproximación se ha corroborado a lo largo de un gran número de publicaciones en el área de las propiedades mecánicas de sólidos. Esencialmente se debe a que la distribución de deformaciones no se extiende infinitamente. Desde un punto de vista práctico es posible asumir, en general, que el desplazamiento es cero a una distancia finita, del orden de diez veces las dimensiones de la nanoestructura. Esta argumentación está respaldada por los diferentes resultados que mostraremos a lo largo del Capítulo. La segunda aproximación que haremos es suponer las constantes elásticas homogéneas en todo

el sistema. En la siguiente Sección estudiaremos cómo se modifica la deformación al considerar las constantes de red del material de la matriz o de la inclusión, pues la solución exácta debe estar de alguna forma entre ambos casos. Existen muchas razones que respaldan este procedimiento. Referiremos al lector interesado a los trabajos en los que este método ha sido empleado y en los que se ha analizado este aspecto [118]. Finalmente, la ecuación que deberemos resolver resulta ser:

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} u_k(\mathbf{r}) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sigma_{ij}^{(a)} \chi(\mathbf{r}) \right], \quad (2.12)$$

con $\mathbf{u}(\mathbf{r} \rightarrow \infty) \rightarrow 0$.

Las dos técnicas analíticas que con mayor frecuencia se emplean para resolver esta ecuación son: el método de las funciones de Green y el método de la transformada de Fourier [117]. En el primero se busca resolver la ecuación (2.12) para una inclusión puntual y a partir de esta solución obtener la correspondiente al volumen Ω . El segundo método es el que se ha empleado en este trabajo y lo explicaremos con detalle a continuación.

En primer lugar, es preciso transformar la ecuación (2.12) al espacio de Fourier². Al hacerlo, obtenemos

$$C_{ijkl} q_j q_l \tilde{u}_k(\mathbf{q}) = i q_j \sigma_{ij}^{(a)} \tilde{\chi}(\mathbf{q}). \quad (2.15)$$

que no es más que un sistema de ecuaciones lineales para $\tilde{u}_i(\mathbf{q})$ que puede ser resuelto recurriendo a técnicas algebraicas estándar [117], para obtener:

$$\tilde{u}_i(\mathbf{q}) = \frac{N_{ij}(\mathbf{q})}{D(\mathbf{q})} \sigma_{jl}^{(a)} i q_l \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.16)$$

donde $N_{ij}(\mathbf{q})$ y $D(\mathbf{q})$ son la matriz cofactor y el determinante, respectivamente, de la matriz $K_{ij}(\mathbf{q}) = C_{ijkl} q_j q_l$. Vienen dados de forma explícita por:

$$N_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} K_{km} K_{ln}, \quad (2.17)$$

²La definición adoptada en este trabajo para la transformada de Fourier directa e inversa, es la siguiente:

$$\tilde{f}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (2.13)$$

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{q} \tilde{f}(\mathbf{q}) e^{+i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (2.14)$$

$$D(\mathbf{q}) = \epsilon_{mnl} K_{m1} K_{n2} K_{l3}, \quad (2.18)$$

siendo ϵ_{ijk} el tensor totalmente antisimétrico de Levi-Civita. Para determinar la deformación de relajación deberemos utilizar las Ecs. (2.7) y (2.16):

$$\delta \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} [i q_j \tilde{u}_i(\mathbf{q}) + i q_i \tilde{u}_j(\mathbf{q})]. \quad (2.19)$$

Vemos que es posible obtener las soluciones en el espacio de Fourier de forma sistemática para cualquier estructura cristalina que presente el material. Esto le confiere una gran versatilidad a la técnica de la transformada de Fourier, ya que por muy reducida que sea la simetría de la estructura cristalina del material siempre nos va a ser posible obtener expresiones analíticas para $\tilde{u}_i(\mathbf{q})$. La elegancia y la sencillez de este método algebraico contrasta con el procedimiento seguido por A. D. Andreev *et al.* en la obtención de un resultado equivalente utilizando la técnica de la función de Green [118, 121].

La dependencia con la forma de la inclusión entra en el problema a través de la función característica $\tilde{\chi}(\mathbf{q})$. Por consiguiente, definiendo convenientemente $\chi(\mathbf{r})$ es posible estudiar la deformación en diferentes tipos de nanoestructuras. Mediante una inclusión bidimensional podemos representar pozos cuánticos y superredes, con una unidimensional hilos cuánticos, y, finalmente, con una tridimensional podemos describir el problema del punto cuántico. La forma más sencilla de reducir la dimensionalidad del problema en la formulación presentada más arriba es introduciendo una delta de Dirac en la definición de la transformada de Fourier de la función característica:

$$\chi^{3D}(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{\chi}^{3D}(\mathbf{q}) = f(q_1, q_2, q_3), \quad (2.20)$$

$$\chi^{2D}(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{\chi}^{2D}(\mathbf{q}) = f(q_1, q_2) \delta(q_3), \quad (2.21)$$

$$\chi^{1D}(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{\chi}^{1D}(\mathbf{q}) = f(q_1) \delta(q_2) \delta(q_3), \quad (2.22)$$

Además, debido a que estamos utilizando la teoría del continuo elástico lineal se cumple el principio de superposición que permite obtener el campo de deformaciones para un sistema de inclusiones como la superposición de los campos de las inclusiones aisladas.

Para obtener las soluciones en el espacio real es necesario aplicar la transformada de Fourier inversa. Es en este paso donde se pierde el carácter analítico del método, y debemos recurrir a la integración numérica en algún punto del cálculo. La transformada inversa de Fourier de (2.16) y (2.19) nos proporcionará los desplazamientos y la deformación en el espacio real. Sin embargo, las soluciones en

el espacio de Fourier también son de utilidad pues permiten realizar simulaciones de difracción por rayos-X [65, 122] y calcular de forma analítica los elementos de matriz entre ondas planas en el cálculo de la estructura electrónica de puntos cuánticos [118].

2.2. Inclusión coherente axisimétrica

El planteamiento presentado en apartados anteriores es absolutamente general y puede ser empleado en la descripción del estado de deformación de sistemas en los que la inclusión puede exhibir cualquier forma. Dado que nuestro objetivo es el estudio de puntos cuánticos, debemos fijarnos en las diferentes formas que exhiben estas nanoestructuras en los sistema que vamos a estudiar en este trabajo, InAs/GaAs y GaN/AlN, como ya se comentó en el Capítulo 1. En general resulta ser una buena aproximación asumir una geometría axialmente simétrica para describir los puntos cuánticos, escogiendo el eje Z como eje de simetría. Así pues, nuestra primera tarea será aplicar la formulación presentada en la Sección anterior al problema de inclusiones con simetría de revolución.

Sin embargo, el hecho de que la inclusión sea invariante bajo una rotación alrededor del eje axial no es condición suficiente para que las soluciones de la ecuación (2.12) también lo sean (problema axialmente simétrico). Es además necesario que los materiales que forman la inclusión y la matriz sean elásticamente isótropos en el plano perpendicular al eje de simetría de la inclusión. Esta consideración no supone ninguna restricción para el sistema GaN/AlN (0001), pues la estructura cristalina tipo wurtzita es transversalmente isótropa [70]. En el InAs/GaAs (001) la estructura cristalina es de tipo zincblenda, i.e. cúbica, y por tanto presenta cierta anisotropía en el plano. Es por ello que para poder formular el problema en forma completamente axisimétrica, nos interesará considerar estos materiales en la aproximación isótropa.

A continuación mostramos las expresiones que definen el tensor de constantes elásticas para ambos tipos de materiales:

$$C_{ijkl}^{ZB} = C_{12}\delta_{ij}\delta_{kl} + C_{44}(\delta_{ik}\delta_{lj} + \delta_{il}\delta_{jk}) + C_{an} \sum_{p=1}^3 \delta_{ip}\delta_{jp}\delta_{kp}\delta_{lp}, \quad (2.23)$$

donde $C_{\text{an}} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$

$$\begin{aligned} C_{ijkl}^{\text{WZ}} = & \alpha \delta_{ij} \delta_{kl} + \beta (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \gamma \delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{k3} \delta_{l3} \\ & + \kappa (\delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{kl} + \delta_{ij} \delta_{k3} \delta_{l3}) \\ & + \rho (\delta_{il} \delta_{j3} \delta_{k3} + \delta_{i3} \delta_{l3} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{j3} \delta_{l3} + \delta_{i3} \delta_{k3} \delta_{jl}) \end{aligned} \quad (2.24)$$

siendo

$$\begin{aligned} \alpha &= C_{12}, \quad \beta = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \\ \gamma &= C_{33} - 2C_{13} - 4C_{44} + C_{11}, \\ \kappa &= C_{13} - C_{12}, \quad \rho = C_{44} + \frac{C_{12} - C_{11}}{2}. \end{aligned}$$

El límite isótropo de los materiales tipo zincblenda se obtienen de forma sencilla considerando que $C_{\text{an}} = 0$ en la Ec. (2.23), o de forma equivalente, que $C_{11} = C_{12} + 2C_{44}$.

Las constantes elásticas se suelen expresar en la notación de Voigt o notación matricial. Para ello los dos primeros índices y los dos segundos se sustituyen por dos únicos índices de acuerdo con:

$$\begin{array}{l|cccccc} \text{notación tensorial} & 11 & 22 & 33 & 23,32 & 31,13 & 12,21 \\ \text{notación matricial} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array} .$$

Recurriendo a esta notación, obtenemos que la la ley de Hooke generalizada se expresa como $\sigma_i = C_{ij}e_j$ donde

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{13} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} . \quad (2.25)$$

Para materiales tipo zincblenda el tensor de rigidez queda expresado como:

$$C_{ij} \equiv \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} , \quad (2.26)$$

y para materiales tipo wurtzita como:

$$C_{ij} \equiv \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

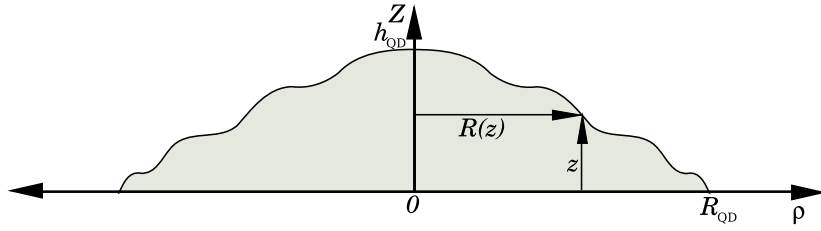


Figura 2.2: Corte transversal de un punto cuántico axisimétrico con un perfil dado por una función $R(z)$ arbitraria.

Para obtener las expresiones del desplazamiento y de la deformación de una inclusión axialmente simétrica utilizaremos el sistema de coordenadas cilíndricas: (ρ, ϕ, z) con los vectores unidad asociados $\hat{\rho}, \hat{\phi}, \hat{z}$. Por construcción, la función característica χ_{QD} dependerá de ρ y z , siendo independiente de ϕ . De hecho, la forma del QD puede ser especificada completamente dando la la función que define el perfil $R(z)$ (ver Fig. 2.2). La función $R(z)$, que proporciona el valor del radio correspondiente a cada altura, es distinta de cero únicamente en el rango $z \in [0, h_{\text{QD}}]$, donde h_{QD} es la altura del punto cuántico. Con ayuda de $R(z)$ la función característica del QD puede escribirse como:

$$\chi(\mathbf{r}) \rightarrow \chi(\rho, z) = \Theta(R(z) - \rho), \quad (2.28)$$

donde $\Theta(x)$ es la función de Heaviside:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}. \quad (2.29)$$

La transformada de Fourier $\tilde{\chi}(\mathbf{q})$ se podrá expresar entonces como:

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}(\mathbf{q}) \rightarrow \tilde{\chi}(q_{\perp}, q_z) &= 2\pi \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' e^{-iq_z z'} \int_0^{R(z')} \rho' d\rho' J_0(q_{\perp} \rho') \\ &= \frac{2\pi}{q_{\perp}} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') J_1(q_{\perp} R(z')) e^{-iq_z z'},\end{aligned}\quad (2.30)$$

donde \mathbf{q} también ha sido expresado en coordenadas cilíndricas (q_{\perp}, ϕ_q, q_z) .

La definición de un problema elástico axisimétrico implica que todas las variables elásticas (desplazamiento, deformación, tensión, etc...) sean solo funciones de las dos coordenadas independientes ρ y z . De esta forma los desplazamientos se pueden expresar en coordenadas cilíndricas como:

$$\mathbf{u}(\rho, z) = u_{\rho}(\rho, z) \hat{\boldsymbol{\rho}} + u_z(\rho, z) \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.31)$$

Obsérvese que para que el problema elástico sea axialmente simétrico es necesario también que $u_{\phi} = 0$.

Análogamente, las componentes de la deformación quedan definidas en un problema axisimétrico como:

$$\begin{aligned}\delta e_{\rho\rho} &= \frac{\partial u_{\rho}}{\partial \rho}, & \delta e_{\rho\phi} &= 0, \\ \delta e_{\phi\phi} &= \frac{u_{\rho}}{\rho}, & \delta e_{\rho z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{\rho}}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial \rho} \right), \\ \delta e_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z}, & \delta e_{\rho\phi} &= 0.\end{aligned}\quad (2.32)$$

Vemos que el desplazamiento pasa a estar definido por dos componentes, y la deformación por cuatro. En este punto vamos a introducir la siguiente notación:

$$\delta e_{\text{SUM}} \equiv \delta e_{\rho\rho} + \delta e_{\phi\phi}, \quad (2.33)$$

$$\delta e_{\text{DIF}} \equiv \delta e_{\rho\rho} - \delta e_{\phi\phi}, \quad (2.34)$$

que será de gran utilidad en la deducción de posteriores ecuaciones.

Para recuperar el desplazamiento y la deformación en coordenadas cartesianas, deberemos recurrir a la siguientes expresiones:

$$u_1 = u_x = u_{\rho} \cos \phi, \quad (2.35a)$$

$$u_2 = u_y = u_{\rho} \sin \phi, \quad (2.35b)$$

$$u_3 = u_z = u_z, \quad (2.35c)$$

y

$$\delta e_{11} = \delta e_{xx} = \cos^2 \phi \delta e_{\rho\rho} + \sin^2 \phi \delta e_{\phi\phi}, \quad (2.36a)$$

$$\delta e_{22} = \delta e_{yy} = \sin^2 \phi \delta e_{\rho\rho} + \cos^2 \phi \delta e_{\phi\phi}, \quad (2.36b)$$

$$\delta e_{33} = \delta e_{zz} = \delta e_{zz}, \quad (2.36c)$$

$$\delta e_{23} = \delta e_{xy} = \sin \phi \cos \phi \delta e_{\rho\rho} - \sin \phi \cos \phi \delta e_{\phi\phi}, \quad (2.36d)$$

$$\delta e_{13} = \delta e_{xz} = \cos \phi \delta e_{\rho z}, \quad (2.36e)$$

$$\delta e_{12} = \delta e_{yz} = \sin \phi \delta e_{\rho z}. \quad (2.36f)$$

2.2.1. Material transversalmente isótropo

En este apartado vamos a escribir explícitamente las soluciones para el desplazamiento y la deformación correspondientes al problema de una inclusión donde los materiales son transversalmente isótropos, como es el caso del sistema hexagonal GaN/AlN (0001)³. El tensor de deformaciones debido al desacuerdo de malla fue definido en la Ec. (2.1) y para este tipo de materiales puede ser expresado como:

$$e_{ij}^{(0)} = \begin{pmatrix} e_a & 0 & 0 \\ 0 & e_a & 0 \\ 0 & 0 & e_c \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

donde

$$e_a \equiv \frac{a^{(M)} - a^{(I)}}{a^{(I)}} \quad \text{y} \quad e_c \equiv \frac{c^{(M)} - c^{(I)}}{c^{(I)}}, \quad (2.38)$$

siendo a y c las constantes de red en las direcciones cristalográficas [1000] y [0001], respectivamente. Para obtener los desplazamientos y la deformación en el espacio de Fourier debemos sustituir (2.37) y (2.24) en (2.16) y (2.19). Tras realizar una serie de manipulaciones algebraicas obtenemos:

$$\tilde{u}_i(\mathbf{q}) = iq_i \frac{A_{\perp}^{(i)} q_{\perp}^2 + A_3^{(i)} q_3^2}{(q_3^2 + \Lambda_+ q_{\perp}^2)(q_3^2 + \Lambda_- q_{\perp}^2)} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.39)$$

$$\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{2} \frac{(A_{\perp}^{(i)} + A_{\perp}^{(j)}) q_{\perp}^2 + (A_3^{(i)} + A_3^{(j)}) q_3^2}{(q_3^2 + \Lambda_+ q_{\perp}^2)(q_3^2 + \Lambda_- q_{\perp}^2)} q_i q_j \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.40)$$

³Nótese que desde el punto de vista de la teoría del continuo elástico, un cristal hexagonal es isótropo en el plano (0001).

siendo

$$A_{\perp}^{(1)} = A_{\perp}^{(2)} = \frac{(C_{11} + C_{12}) C_{44} e_a + C_{13} C_{44} e_c}{C_{33} C_{44}}, \quad (2.41a)$$

$$A_3^{(1)} = A_3^{(2)} = \frac{((C_{11} + C_{12}) C_{33} - 2C_{13} (C_{13} + C_{44})) e_a - C_{33} C_{44} e_c}{C_{33} C_{44}}, \quad (2.41b)$$

$$A_{\perp}^{(3)} = \frac{((C_{11} - C_{12}) C_{13} - (C_{11} + C_{12}) C_{44}) e_a - (C_{13} (C_{13} + C_{44}) - (C_{11} C_{33})) e_c}{C_{33} C_{44}}, \quad (2.41c)$$

$$A_3^{(3)} = \frac{2C_{13} C_{44} \varepsilon_a + C_{33} C_{44} \varepsilon_c}{C_{33} C_{44}}. \quad (2.41d)$$

Las constantes Λ_{\pm} vienen dadas por:

$$\Lambda_{\pm} = \frac{(C_{11} C_{33} - C_{13} (C_{13} + 2C_{44}))}{2C_{33} C_{44}} \pm \frac{\sqrt{(C_{11} C_{33} - C_{13}^2) (C_{11} C_{33} - (C_{13} + 2C_{44})^2)}}{2C_{33} C_{44}}. \quad (2.42)$$

Se puede demostrar que la constante Λ_{\pm} es positiva y, por tanto, podemos introducir una nueva constante $\eta_{\pm} = \sqrt{\Lambda_{\pm}}$, que será de utilidad más adelante.

Expresiones equivalentes a las que hemos obtenido en este apartado fueron derivadas por A. D. Andreev utilizando la técnica de funciones de Green en el espacio de Fourier [118]. No obstante, estimamos que el método que hemos descrito aquí es más sistemático y sencillo de implementar que el desarrollo de [118]. Hay que decir que las expresiones (2.39) y (2.40) son válidas para cualquier inclusión, no necesariamente con simetría de revolución, ya que su forma está implícita en $\chi(\mathbf{q})$ y por tanto sin especificar todavía. En efecto, para obtener las expresiones que nos permitirán calcular tanto el desplazamiento como la deformación para la inclusión axisimétrica deberemos sustituir (2.30) en (2.39) y (2.40) y aplicar la transformada de Fourier inversa (Ec. (2.14)) a las expresiones que obtengamos. Tras realizar una serie de tediosos cálculos, obtenemos las siguientes expresiones para el desplazamiento:

$$u_{\rho}(\rho, z) = u_{\rho}^{(+)}(\rho, z) + u_{\rho}^{(-)}(\rho, z), \quad (2.43a)$$

$$u_z(\rho, z) = u_z^{(+)}(\rho, z) + u_z^{(-)}(\rho, z), \quad (2.43b)$$

donde

$$u_{\rho}^{(\pm)}(\rho, z) = -\frac{A_{\pm}^{(1)}}{\eta_{\pm}} \frac{1}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{1,1}^0 [\rho, R(z'); \eta_{\pm}(z - z')], \quad (2.44a)$$

$$u_z^{(\pm)}(\rho, z) = -A_{\pm}^{(3)} \frac{1}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \text{sign}(z - z') \mathcal{I}_{0,1}^0 [\rho, R(z'); \eta_{\pm}(z - z')]. \quad (2.44b)$$

En estas expresiones hemos introducido las constantes

$$A_{\pm}^{(i)} = \pm \frac{\Lambda_{\pm} A_3^{(i)} - A_{\pm}^{(i)}}{\Lambda_{+} - \Lambda_{-}}. \quad (2.45)$$

Las definiciones y propiedades de las funciones $\mathcal{I}_{n,m}^p$ se pueden encontrar en el Apéndice C.

Para obtener las componentes del tensor de deformaciones recurriremos a las expresiones (2.32). Las derivadas de $u_{\rho}^{\pm}(\rho, z)$ y $u_z^{\pm}(\rho, z)$ se pueden evaluar recurriendo a las propiedades de las funciones $\mathcal{I}_{n,m}^p$ descritas en el Apéndice C. Finalmente encontramos que la deformación del sistema puede ser calculada a través de las siguientes expresiones:

$$\delta e_{\text{SUM}}(\rho, z) = \delta e_{\text{SUM}}^{(+)}(\rho, z) + \delta e_{\text{SUM}}^{(-)}(\rho, z), \quad (2.46a)$$

$$\delta e_{zz}(\rho, z) = \delta e_{zz}^{(+)}(\rho, z) + \delta e_{zz}^{(-)}(\rho, z) - \left(A_+^{(3)} + A_-^{(3)} \right) \chi(\rho, z), \quad (2.46b)$$

$$\delta e_{\text{DIF}}(\rho, z) = \delta e_{\text{DIF}}^{(+)}(\rho, z) + \delta e_{\text{DIF}}^{(-)}(\rho, z), \quad (2.46c)$$

$$\delta e_{\rho z}(\rho, z) = \delta e_{\rho z}^{(+)}(\rho, z) + \delta e_{\rho z}^{(-)}(\rho, z), \quad (2.46d)$$

donde

$$\delta e_{\text{SUM}}^{(\pm)}(\rho, z) = -\frac{A_{\pm}^{(1)}}{\eta_{\pm}} \frac{1}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{0,1}^1 [\rho, R(z'); \eta_{\pm}(z - z')], \quad (2.47a)$$

$$\delta e_{zz}^{(\pm)}(\rho, z) = -\frac{A_{\pm}^{(3)}}{A_{\pm}^{(1)}} \eta_{\pm}^2 \delta e_{\text{SUM}}^{(\pm)}(\rho, z), \quad (2.47b)$$

$$\delta e_{\text{DIF}}^{(\pm)}(\rho, z) = +\frac{A_{\pm}^{(1)}}{\eta_{\pm}} \frac{1}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{2,1}^1 [\rho, R(z'); \eta_{\pm}(z - z')], \quad (2.47c)$$

$$\delta e_{\rho z}^{(\pm)}(\rho, z) = +\frac{\left(A_{\pm}^{(1)} + A_{\pm}^{(3)} \right)}{4} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \text{sign}(z - z') \mathcal{I}_{1,1}^1 [\rho, R(z'); \eta_{\pm}(z - z')]. \quad (2.47d)$$

Las expresiones (2.44) y (2.47) son el principal resultado teórico de este capítulo.

lo. Aunque no son totalmente analíticas, permiten obtener la solución en cualquier punto del espacio realizando únicamente una sencilla integración numérica. Ésta es una de las grandes ventajas del modelo, ya que no es necesario recurrir a ningún método numérico sofisticado para obtener resultados. Por el contrario, si se opta por resolver el problema desde el principio utilizando diferencias finitas o elementos finitos, se requiere una cierta experiencia con las particularidades del método numérico.

Por otro lado, las expresiones que sí admiten soluciones analíticas son las correspondientes a una inclusión cilíndrica en $\rho = 0$. Éstas permiten estudiar la deformación en el eje axial a través de expresiones muy compactas:

$$\delta e_{\text{SUM}}^{(\pm)}(0, z) = \frac{A_{\pm}^{(1)}}{\eta_{\pm}} \frac{1}{2} \left(\frac{z - h_{\text{QD}}}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + \eta_{\pm}|z - h_{\text{QD}}|^2}} - \frac{z}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + \eta_{\pm}|z|^2}} \right), \quad (2.48a)$$

$$\delta e_{\text{zz}}^{(\pm)}(0, z) = -A_{\pm}^{(3)} \eta_{\pm} \frac{1}{2} \left(\frac{z - h_{\text{QD}}}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + \eta_{\pm}|z - h_{\text{QD}}|^2}} - \frac{z}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + \eta_{\pm}|z|^2}} \right), \quad (2.48b)$$

$$\delta e_{\text{DIF}}^{(\pm)}(0, z) = 0, \quad (2.48c)$$

$$\delta e_{\rho z}^{(\pm)}(0, z) = 0. \quad (2.48d)$$

Más adelante recurriremos a estas expresiones para estudiar la extensión de la deformación en la matriz.

2.2.2. Material isótropo

En un material cúbico el tensor de deformaciones debido al desacuerdo de malla se define como:

$$e_{ij}^{(0)} = e_a^{(0)} \delta_{ij}, \quad \text{donde } e_a^{(0)} = \frac{a^{(M)} - a^{(I)}}{a^{(I)}}. \quad (2.49)$$

Sin embargo, vimos más arriba que para tratar con un problema elástico axisimétrico era necesario considerar las propiedades elásticas del material cúbico como si éstas fuesen isótropas. Las expresiones del desplazamiento y de la deformación se pueden obtener siguiendo los mismos pasos que fueron descritos para el caso de un material transversalmente isótropo. Debemos sustituir el tensor de las constantes elásticas (2.23) suponiendo $C_{\text{an}} = 0$ en las ecuaciones (2.16) y (2.19). Finalmente

llegamos a las expresiones:

$$\tilde{u}_i(\mathbf{q}) = iq_i \frac{A}{q^2} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.50)$$

$$\delta \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}) = -\frac{A}{q^2} q_i q_j \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.51)$$

con

$$A = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} e_a^{(0)}. \quad (2.52)$$

Nuevamente, las expresiones obtenidas son válidas para inclusiones que exhiban cualquier geometría. Para particularizar al caso de una inclusión axialmente simétrica realizamos la transformada de Fourier inversa, obteniendo las siguientes expresiones para describir el desplazamiento:

$$u_\rho(\rho, z) = -\frac{A}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{1,1}^0 [\rho, R(z'); (z - z')], \quad (2.53a)$$

$$u_z(\rho, z) = -\frac{A}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \text{sign}(z - z') \mathcal{I}_{0,1}^0 [\rho, R(z'); (z - z')]. \quad (2.53b)$$

y las componentes del tensor de deformaciones

$$\delta e_{\text{SUM}}(\rho, z) = -\frac{A}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{0,1}^1 [\rho, R(z'); (z - z')], \quad (2.54a)$$

$$\delta e_{zz}(\rho, z) = -\delta e_{\text{SUM}}(\rho, z) - A \chi(\rho, z), \quad (2.54b)$$

$$\delta e_{\text{DIF}}(\rho, z) = +\frac{A}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \mathcal{I}_{2,1}^1 [\rho, R(z'); (z - z')], \quad (2.54c)$$

$$\delta e_{\rho z}(\rho, z) = +\frac{A}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \text{sign}(z - z') \mathcal{I}_{1,1}^1 [\rho, R(z'); (z - z')]. \quad (2.54d)$$

Alternativamente, se podrían haber obtenido estos resultados a partir de las expresiones deducidas para el caso transversalmente isótropo (Ecs. (2.43)-(2.47)), tomando los siguientes límites:

$$A_\pm^{(i)} \rightarrow \frac{A}{2}, \text{ y } \eta_\pm \rightarrow 1. \quad (2.55)$$

Si ahora calculamos la deformación hidrostática:

$$\delta e_h = \delta e_{\text{SUM}} + \delta e_{zz} = -A \chi(\rho, z), \quad (2.56)$$

comprobamos que ésta es proporcional a la función característica del QD, i.e. con-

stante dentro del QD y cero fuera. Este resultado es independiente de la geometría de la inclusión, por tanto en cualquier aspecto referente a la dilatación del QD deberemos tener presente que ésta es constante. Para comprobar el grado de validez de esta propiedad del sistema hemos reproducido en la Figura 2.3 la deformación hidrostática obtenida por C. Pryor *et al.* [66] a través de dos procedimientos diferentes, un modelo atomístico con el potencial interatómico de Keating (AE) y la teoría del continuo elástico (CE), considerando en los dos casos que el material es cúbico. El sistema estudiado es un QD de InAs/GaAs con geometría piramidal de base cuadrada. En esta figura se puede apreciar que la componente hidrostática de la deformación exhibe un comportamiento semejante al descrito por la ecuación (2.56). El valor que da esta ecuación utilizando los mismos parámetros que en [66] es $e_h = -0.086$, el cual es muy próximo al valor calculado en el centro del QD. Para un material transversalmente isótropo y, en general para cualquier material anisótropo, la deformación hidrostática no es uniforme dentro y fuera de la inclusión.

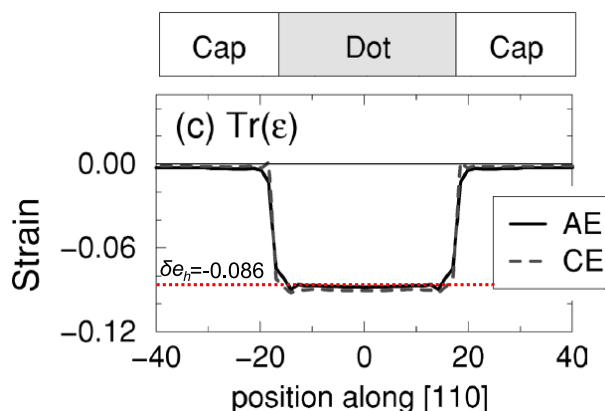


Figura 2.3: Deformación hidrostática para un punto cuántico con estructura de la zincblenda calculada mediante el modelo de Keating (AE) y la teoría elástica continua (CE). Figura extraída de C. Pryor *et al.* [66]

2.3. Estado de deformación en un punto cuántico aislado

Tras haber resuelto el problema de la deformación en un QD, vamos a presentar los resultados numéricos correspondientes al caso de un SAQD aislado. Previamente vamos a estudiar dos casos límite que nos ayudarán a comprender el proble-

ma general: una lámina bidimensional y cilindro de altura infinita. Por simplicidad, en este estudio preliminar consideraremos que los materiales son isótropos.

Deformación de una lámina bidimensional

El problema de una lámina bidimensional puede ser empleado como ejemplo de la deformación de un pozo cuántico (en inglés “Quantum Well”, QW). Consideraremos que la dirección de crecimiento de esta estructura es paralela al eje Z , de forma que la inclusión que representa esta lámina puede ser descrita a través de una función característica dependiente únicamente de z :

$$\chi(\mathbf{r}) = f(z). \quad (2.57)$$

Recurriendo a las relaciones introducidas en la Ec. (2.20), la transformada de Fourier de la función característica podrá ser expresada como:

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}) = \delta(q_x)\delta(q_y)\tilde{f}(q_z). \quad (2.58)$$

Sustituyendo (2.58) en (2.51) y, posteriormente, calculando la transformada de Fourier inversa, se obtienen las siguientes expresiones para la deformación de relajación:

$$\delta e_{\rho\rho}(z) = \delta e_{\phi\phi}(z) = 0, \quad (2.59a)$$

$$\delta e_{zz}(z) = -A\chi(z), \quad (2.59b)$$

$$\delta e_{ij}(z) = 0, \text{ para } i \neq j. \quad (2.59c)$$

Las expresiones de la deformación total se obtienen sustituyendo (2.59) en (2.9):

$$e_{\rho\rho}(z) = e_{\phi\phi}(z) = e_a^{(0)}\chi(z), \quad (2.60a)$$

$$e_{zz}(z) = -2\frac{C_{12}}{C_{11}}e_a^{(0)}\chi(z), \quad (2.60b)$$

$$e_{ij}(z) = 0, \text{ para } i \neq j. \quad (2.60c)$$

Obsérvese que la deformación en el plano de crecimiento en el interior de la lámina es uniforme e igual al valor del desacuerdo de malla $e_a^{(0)}$ ($e_{\rho\rho} = e_{\phi\phi}$). Este resultado es bien conocido en la literatura, y viene a indicar que las constantes de red $a_1^{(I)}$ y $a_2^{(I)}$ del material de la lámina se adaptan a las constantes de red $a_1^{(M)}$ y $a_2^{(M)}$ del material en la matriz, y que debido a que la extensión de la superficie de contacto es infinita, el sistema no puede relajar la deformación en ningún punto (i.e., $\delta e_{\rho\rho} = \delta e_{\phi\phi} = 0$). La deformación a lo largo de la dirección de crecimiento e_{zz}

también es uniforme, aunque, la deformación de relajación δe_{zz} es ahora distinta de cero (ver Ec. (2.59)). En esta dirección la matriz no impone ninguna restricción sobre la constante de red, pudiendo entonces la lámina expandirse o contraerse libremente. El resultado obtenido para e_{zz} puede ser interpretado en términos del efecto Poisson. Aunque en sentido estricto esta deformación recibe el nombre de *bisotrópica* [123], en la literatura se suele hacer referencia a ella como *deformación biaxial*. En este trabajo haremos uso de esta última terminología para mantener la coherencia con la bibliografía. De hecho, en el Capítulo 1 ya fue empleado este término al describir el efecto de la deformación en la estructura de bandas de un semiconductor masivo.

Deformación en un cilindro infinito

En el siguiente sistema que vamos a estudiar la situación es algo más compleja. Consiste en un cilindro de longitud de radio R_{cil} y longitud infinita inmerso en una matriz también infinita. Este sistema es adecuado para el estudio de un hilo cuántico (en inglés “Quantum Wire”, QWR). Las expresiones para la deformación total son las siguientes [124]:

$$e_{zz}(\rho) = \begin{cases} e_a^{(0)} & \text{si } \rho < R_{\text{cil}} \\ 0 & \text{si } \rho > R_{\text{cil}} \end{cases}, \quad (2.61a)$$

$$e_{\rho\rho}(\rho) = \begin{cases} \left(\frac{1}{2} - \frac{C_{12}}{C_{12} + 2C_{44}} \right) e_a^{(0)} & \text{si } \rho \leq R_{\text{cil}} \\ \left(\frac{1}{2} + \frac{C_{12}}{C_{12} + 2C_{44}} \right) e_a^{(0)} \left(\frac{R_{\text{cil}}}{\rho} \right)^2 & \text{si } \rho > R_{\text{cil}} \end{cases}, \quad (2.61b)$$

$$e_{\phi\phi}(\rho) = \begin{cases} +e_{\rho\rho}(\rho) & \text{si } \rho < R_{\text{cil}} \\ -e_{\rho\rho}(\rho) & \text{si } \rho > R_{\text{cil}} \end{cases}, \quad (2.61c)$$

$$e_{ij}(\rho) = 0, \text{ para } i \neq j, \quad (2.61d)$$

Las componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$, $e_{\phi\phi}$ y e_{zz} también en el interior del cilindro son uniformes⁴ y fuera decrecen inversamente con el cuadrado de la distancia. Para materiales cuyas constantes de red verifiquen la relación $a^{(M)} < a^{(I)}$ ($e_a^{(0)} < 0$), se cumple que en el interior del cilindro tanto $e_{\rho\rho}$ como $e_{\phi\phi}$ son negativas. En la matriz, sin embargo, se verifica que $e_{\rho\rho} < 0$ y $e_{\phi\phi} > 0$. Esto se puede interpretar en los siguientes términos: el cilindro relaja parte de su energía elástica

⁴La uniformidad de la deformación en el interior de un cilindro infinito es un caso particular de la solución obtenida por J. D. Eshelby para una inclusión elipsoidal [71].

expandiéndose en el plano perpendicular a su eje axial respecto al volumen *inicial*⁵. Esta expansión comprime la matriz en la dirección radial. En la dirección paralela a $\tilde{\phi}$, la coherencia de las constantes de red obliga a que la matriz se expanda, ya que $a^{(M)} < a^{(I)}$. Esto mismo ocurría para la lámina bidimensional.

Deformación de un punto cuántico

Los resultados correspondientes a los dos modelos ideales que acabamos de estudiar nos servirán de guía en la discusión de la deformación de una inclusión de forma cilíndrica que emplearemos de ejemplo para el estudio de la deformación en SAQDs. Las dimensiones de la inclusión son altura h_{QD} y radio R_{QD} . En la Figura 2.4 hemos representado las diferentes componentes del tensor de deformación. Hemos asumido que $h_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}$ y que los semiconductores que componen la heteroestructura son InAs/GaAs, i.e. $e_a^{(0)} = -0.067$. Debido a la invariancia de escala del modelo, los resultados son válidos para cualquier valor de las dimensiones de la nanoestructura, siempre y cuando, se mantenga la ratio entre h_{QD} y R_{QD} . Hemos representado cada una de las componentes en un cuadrante del cilindro, dada la simetría que éste presenta. Las áreas delimitadas con líneas de puntos indican las zonas en las que la deformación del QD cilíndrico se puede interpretar como la deformación de una lámina (región alrededor del eje axial), o como la deformación de un cilindro de longitud infinita (sección trasversal del sistema a media altura).

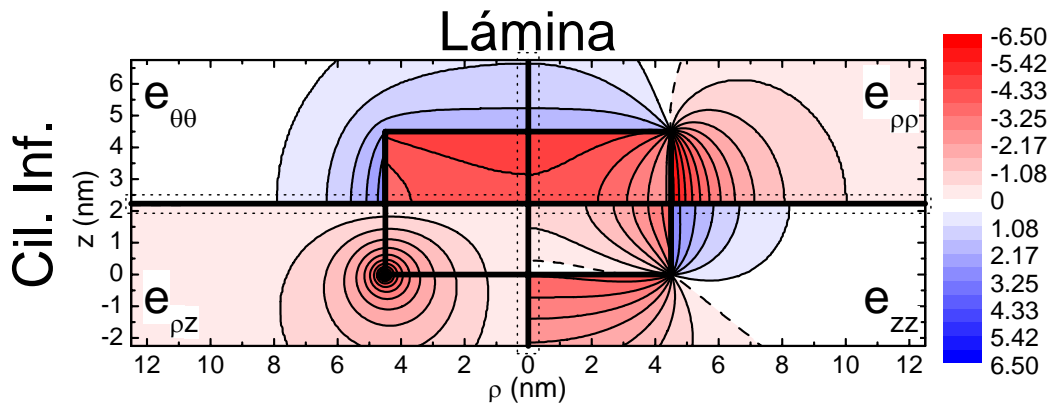


Figura 2.4: Deformación en un QD con forma cilíndrica en el que $h_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}$. En cada cuadrante se ha representado una componente del tensor de deformaciones. La deformación está indicada en %. Los contornos discontinuos corresponden a la deformación nula.

⁵Por *inicial* estamos haciendo referencia a las condiciones impuestas en el Paso 2 del método de Eshelby (ver Fig. 2.1).

En el análisis de los resultados obtenidos comenzaremos por fijarnos en la zona próxima al eje axial, donde la deformación del QD tiene un comportamiento análogo al de una lámina bidimensional. Recordemos que en el interior de la lámina la componente $e_{\rho\rho}$ era homogénea e igual a $e_a^{(0)}$, y por tanto el material está comprimido, y en la matriz, esa misma componente era nula. En el QD las superficies de contacto superior e inferior ya no son infinitas, por lo que el material en el interior del QD puede relajar parte de la tensión inicial, aunque permanece en un estado de compresión. Por otro lado, la matriz, en respuesta al cambio de estado de deformación del material del QD, experimenta una dilatación en la zona próxima a las intercaras superior e inferior. En la región axial $e_{\phi\phi}$ exhibe un comportamiento similar a $e_{\rho\rho}$. Para la componente e_{zz} la situación también cambia respecto a la de una lámina. Recordemos que la lámina estaba expandida en la dirección z y la deformación de la matriz era cero. En el QD, el contacto entre el material de la inclusión y el de la matriz en las paredes laterales frustran esa expansión libre. Por tanto, e_{zz} en la zona del eje del QD está expandida, aunque no alcanza el mismo valor que en la lámina. Al ser $e_{\rho\rho}$ positiva en la matriz, e_{zz} deberá ser negativa para que se conserve el volumen de la celda unidad. En la Figura 2.5 mostramos las componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} a lo largo del eje z para diferentes valores de R_{cil} , de forma que se puede comprobar como se aproximan los valores de la deformación al caso límite de una lámina.

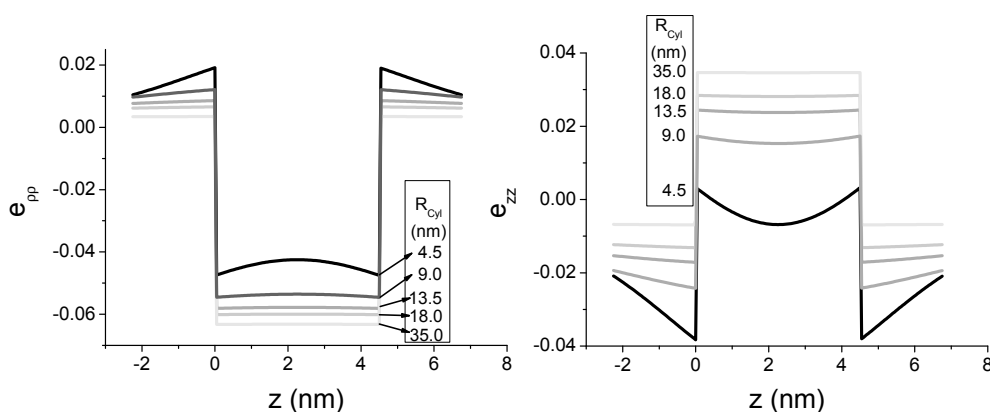


Figura 2.5: Componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} a lo largo del eje de un QD cilíndrico de InAs/GaAs para diferentes radios.

Ahora nos fijaremos en la zona del QD que debe tener un comportamiento análogo al de un cilindro infinito, esto es, en el corte trasversal a la dirección Z en $z = h_{\text{QD}}/2$. Recordemos que en un cilindro infinito, el material no puede relajar en la dirección paralela a su eje, de forma que e_{zz} es homogéneo e igual a $e_a^{(0)}$ en su interior y cero fuera. Al reducir la extensión longitudinal de la nanoestructura

a un valor finito, la condición que acabamos de describir ya no es válida y el QD puede relajar parte de la deformación inicial a lo largo del eje Z . Por ello, aunque e_{zz} continuará siendo negativa en el interior del cilindro, decrecerá al ir de la superficie lateral hacia el eje. En la matriz la situación es la opuesta. En la zona de contacto con el QD tenemos que $e_{zz} > 0$, por lo que el material está expandido en la dirección Z , y en la zona más distante se va relajando ($e_{zz} \rightarrow 0$). Por otra parte, vemos que $e_{\rho\rho}$ es negativa tanto dentro del QD como fuera. Este comportamiento también se daba en el cilindro infinito. Por su parte, $e_{\phi\phi}$ también es negativa debido a la condición de coherencia entre las constantes de red de los materiales en la interacción lateral del QD. En la Figura 2.6 hemos representado $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} en función de ρ para $z = h_{\text{QD}}/2$. En la misma gráfica presentamos los resultados obtenidos para diferentes valores de h_{QD} , de forma que es posible apreciar como la deformación del QD se aproxima a la de un cilindro infinito de igual radio. Aquí se puede observar que $e_{\rho\rho}$ aumenta su valor en el interior del QD al aproximarse al caso del cilindro infinito, reflejando una progresiva relajación del material. Ello se explica por el alejamiento de las superficies superior e inferior del QD de la zona estudiada. En cambio, el valor de e_{zz} disminuye con h_{QD} exhibiendo el comportamiento opuesto al de $e_{\rho\rho}$.

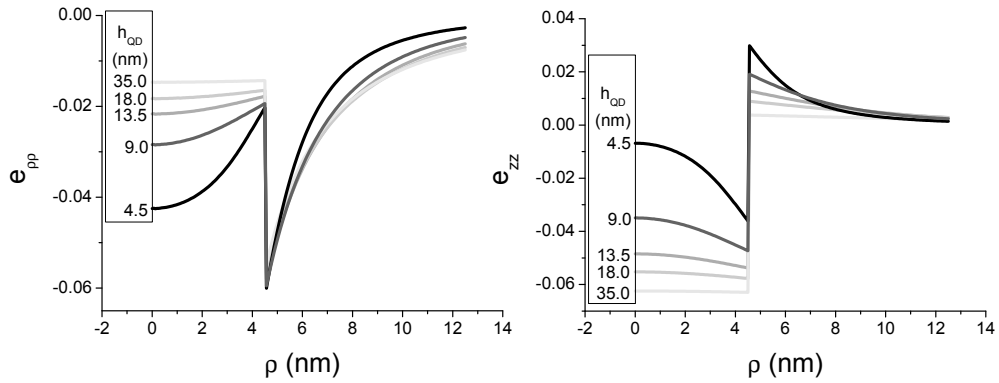


Figura 2.6: Componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} representadas en función de ρ para $z = h_{\text{QD}}/2$ variando la altura de un QD cilíndrico de radio, $R_{\text{cil}} = 4.5$ nm.

En la zona de contacto entre las superficies superior e inferior del cilindro con la superficie lateral (véase la zona del vértice en el perfil del QD en la Fig. 2.4) compiten los dos regímenes antes descritos. La componente $e_{\rho\rho}$, que está muy comprimida en la zona del eje, pasa a estar menos comprimida al aproximarse al límite de las tapas del cilindro. En esa zona $e_{\rho\rho}$ alcanza su valor mínimo en valor absoluto. Una discusión similar se puede hacer para e_{zz} . Análogamente, e_{zz} toma su valor máximo en valor absoluto en la superficie lateral para $z = h_{\text{QD}}/2$ y al aproximarse

al vértice se va reduciendo. Por otro lado, en las zonas que hemos identificado el comportamiento típico de una lámina y un cilindro infinito la componente de cizalla $e_{\rho z}$ tiene su valor mínimo y en la zona del vértice alcanza su valor máximo.

En las figuras mostradas hasta ahora hemos representado el tensor de deformación e_{ij} para estudiar el estado del sistema. Sin embargo, hubiésemos podido haber realizado este estudio a través del vector desplazamiento \mathbf{u} o del tensor de tensiones σ_{ij} . El motivo de haber escogido la deformación radica en su carácter adimensional, que le confiere una mayor generalidad. Por completitud hemos representado las componentes del tensor de tensiones y del vector desplazamiento en la Figura 2.7. La red deformada del panel (a) se ha calculado a partir del vector desplazamiento de cada punto. Para ello hemos partido de una red cuadrada con la constante de red de la matriz y en cada nodo hemos aplicado el desplazamiento de relajación $\mathbf{u}(\rho, z)$ de la siguiente forma:

$$(\rho_i, z_i) \rightarrow (\rho_i + s u_\rho(\rho_i, z_i), z_i + s u_z(\rho_i, z_i)), \quad (2.62)$$

donde s es un factor de escala empleado para magnificar la deformación experimentada por la red, de forma que resulte más fácil de visualizar su distorsión. En esta representación hemos empleado $s = 10$. A efectos de comparación, en la misma Figura hemos representado una porción de red sin deformar de la matriz y de la inclusión. Además, con la intención de facilitar la comparación con las componentes de la deformación, también hemos representado mediante un mapa de colores las componentes $e_{\rho\rho}$ (parte derecha) y e_{zz} (parte izquierda). En el panel (b) hemos representado la tensión en unidades de GPa. Estas dos representaciones complementan las conclusiones a las que habíamos llegado a partir del estudio de la deformación.

Hasta ahora hemos considerado en todos los casos el material isótropo. Para estudiar el impacto de la anisotropía, presentamos en la Figura 2.8 una representación análoga a la de la Figura 2.4 para la deformación en un QD de GaN/AlN. En este sistema el desacuerdo de malla es $e_a^{(0)} = -0.024$ y $e_c^{(0)} = -0.039$. Por tanto, este sistema no presentará una deformación tan grande como el estudiado previamente, aunque la distribución de la deformación puede entenderse cualitativamente en los términos expuestos más arriba. Esto no quiere decir que la descripción del sistema GaN/AlN a través de un material isótropo sea una buena aproximación. De hecho, el error cuantitativo que se introduce al hacer esta simplificación es muy grande, especialmente para las componentes e_{zz} y $e_{\rho z}$. A pesar de ello, esta aproximación ha sido empleada por otros autores. Por ejemplo, D. Williams *et al.* la han aplicado en el estudio de QDs tipo GaN/AlN [125] e InGaN/GaN [126].

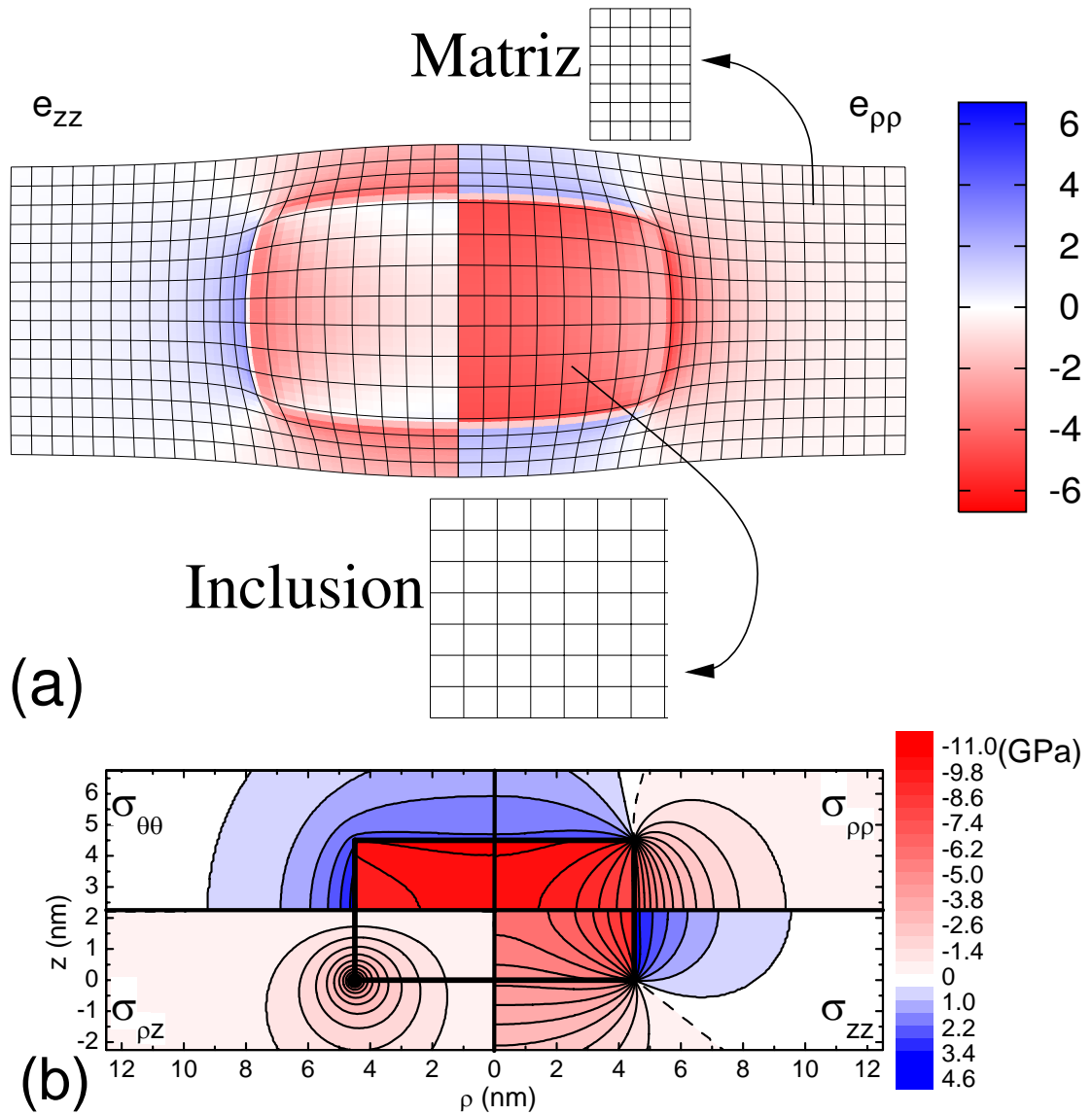


Figura 2.7: (a) Red deformada calculada a partir del vector desplazamiento de cada punto del sistema. Sobre dicha red hemos representado las componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$ (parte derecha) y e_{zz} (parte izquierda). (b) Componentes del tensor de tensiones σ_{ij} para un QD como el de la Figura 2.4.

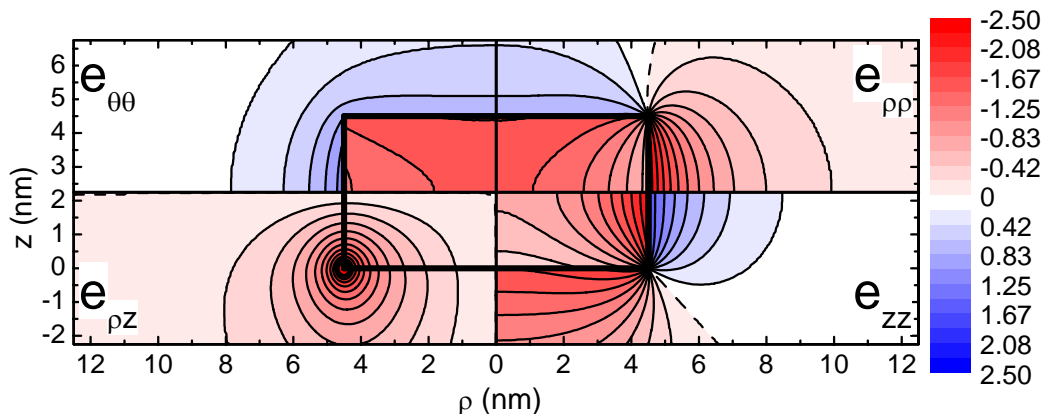


Figura 2.8: Representación análoga a la mostrada en la Fig. 2.4 para el sistema GaN/AlN.

Una vez hemos analizados los aspectos más relevantes del estado de la deformación de un QD, vamos a pasar a describir la influencia de otros factores geométricos como son su forma y la ratio entre su radio y su altura.

2.3.1. Influencia de la forma del QD

En este apartado estudiaremos la distribución de la deformación para varias formas que típicamente exhiben los QDs y son compatibles con la simetría de nuestra formulación: cono, cono truncado y lente. Denotaremos la altura por h_{QD} , el radio de la base por R_{QD} , y el radio superior por R_{Sup} .

En las Figuras 2.9 y 2.10 hemos representado las componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} para QDs de diferente forma basados en InAs/GaAs y GaN/AlN, respectivamente. Es interesante fijarnos en la transición cono truncado \rightarrow cono. Cuando se reduce la superficie superior del QD la simetría de paridad respecto al plano medio característica del cilindro se pierde progresivamente, de forma que, $e_{\rho\rho}$ pasa de ser negativa en la base a positiva en el vértice, y e_{zz} al contrario, es positiva en la base y negativa en el vértice. Para el caso límite del cono vemos además que las líneas de contorno son casi paralelas. Este resultado es característico de esta geometría.

La geometría tipo lente es cualitativamente diferente a las otras dos. Ahora el perfil viene representado por una función suave, i.e. la primera derivada de $R(z)$ es continua. Esto hace que no tengamos las singularidades en el vértice o bordes superiores y por tanto la deformación es más uniforme. Sin embargo, debemos

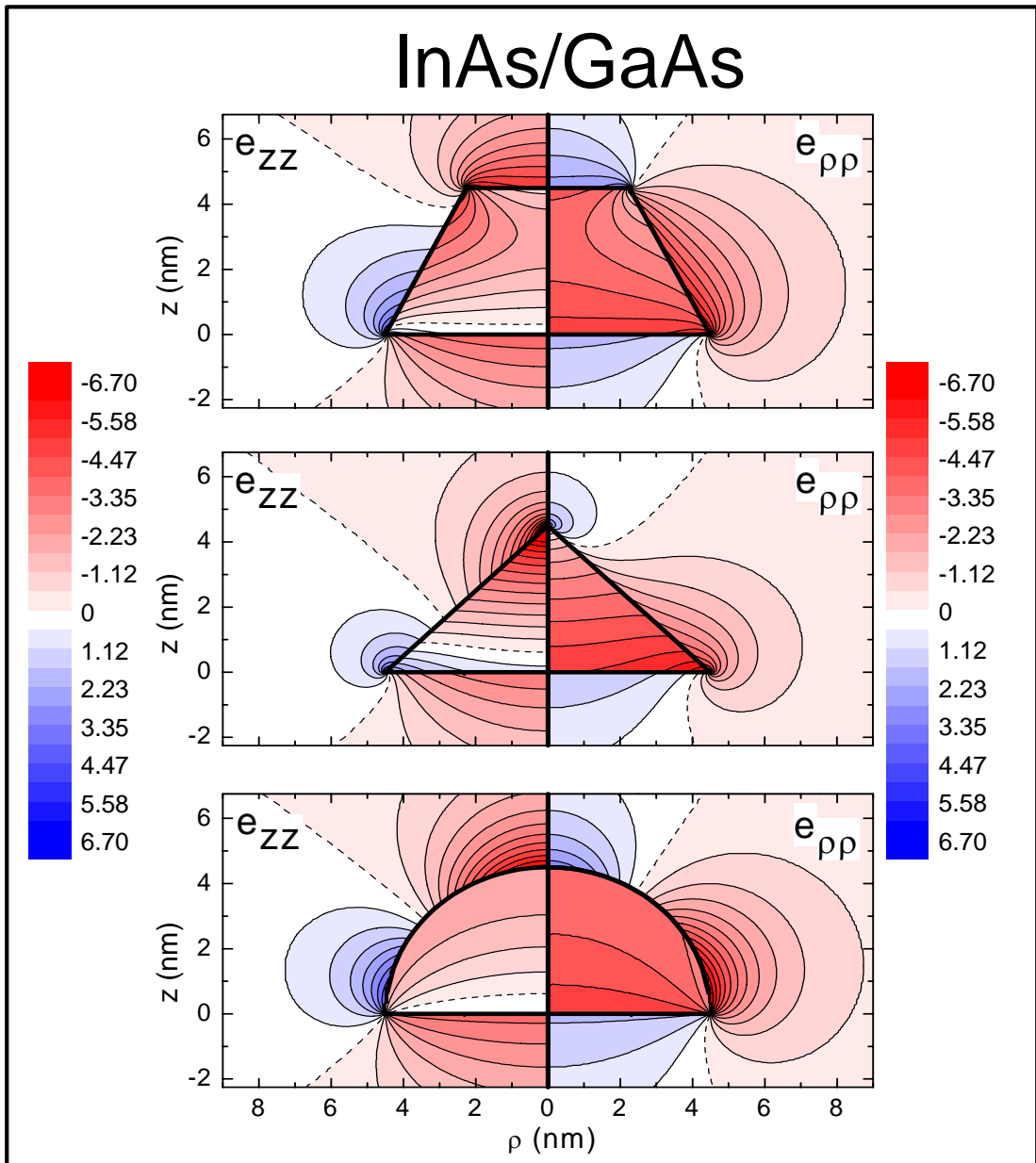


Figura 2.9: Componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} para QDs con forma de cono truncado, cono y lente, para el sistema InAs/GaAs. En todos los casos $h_{\text{QD}} = R_{\text{QD}} = 4.5$ nm. Para el cono truncado $R_{\text{Sup}} = 2.25$ nm.

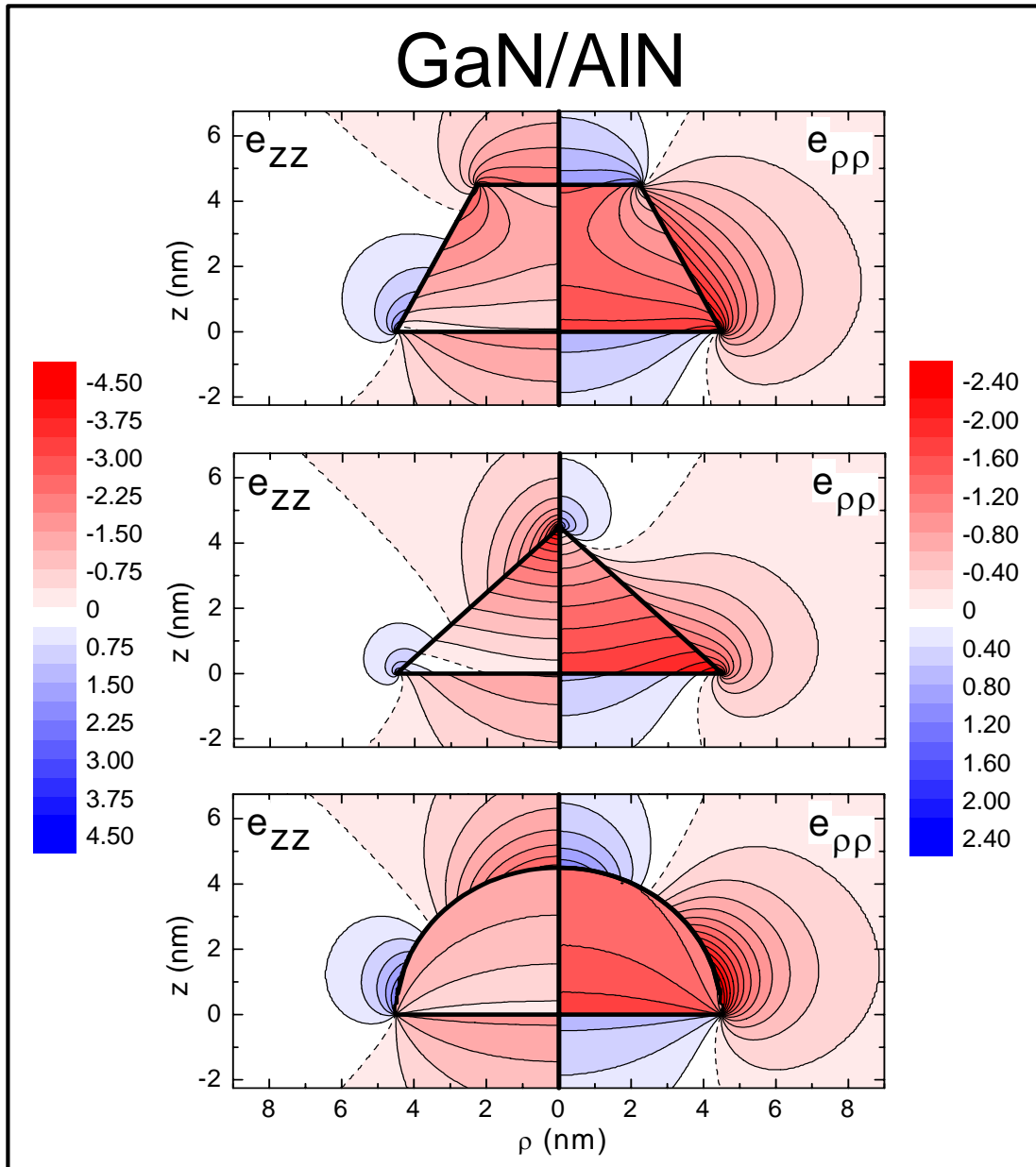


Figura 2.10: Igual que la Figura 2.9 para el sistema GaN/AlN.

destacar una particularidad: en la zona de la base del QD las líneas de contorno son más parecidas a las del cilindro (ver Figs. 2.4 y 2.8) que en los otros casos.

Vemos que los resultados obtenidos para el sistema InAs/GaAs son de nuevo cualitativamente parecidos a los obtenidos para el GaN/AlN. La anisotropía entre las direcciones $\rho - z$ no produce cambios significativos para QDs con formas que también son anisótropas. Para una geometría esférica sí que se espera que la anisotropía de la wurtzita se refleje más claramente en la deformación.

Para concluir hemos calculado el promedio en el volumen de QD de las dos componentes de la deformación para las distintas geometrías consideradas. La intención es poder cuantificar el grado de deformación del material en el interior de la nanoestructura. El promedio se ha calculado sobre el volumen del QD siguiendo la siguiente expresión:

$$\bar{e}_{ij} = \frac{1}{V_{\text{QD}}} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_{\text{QD}}} \rho d\rho e_{ij}(\mathbf{r}) \chi_{\text{QD}}(\mathbf{r}), \quad (2.63)$$

En la Tabla 2.1 hemos recogido los valores para QDs de las diferentes formas basados en los dos sistemas que estamos estudiando. Estos valores confirman que el material del QD está menos comprimido para la forma cónica, y que está más comprimido para la forma cilíndrica. Resulta interesante comprobar que la forma lenticular presenta un comportamiento singular, pues la compresión en el plano es mayor que para el cono truncado, pero la compresión en la dirección Z es menor. Por consiguiente, vemos que el hecho de que $R(z)$ presente un perfil suave introduce efectos característicos en la deformación.

	InAs/GaAs		GaN/AlN	
	$\bar{e}_{\rho\rho}$	\bar{e}_{zz}	$\bar{e}_{\rho\rho}$	\bar{e}_{zz}
Cilindro	-3.83	-1.52	-1.32	-1.14
Cono truncado	-2.21	-0.96	-0.77	-0.68
Cono	-1.45	-0.15	-0.51	-0.20
Lente	-2.67	-0.81	-0.93	-0.64

Tabla 2.1: Valores de la deformación (expresados en %) promediados en el volumen del QD.

2.3.2. Influencia de la ratio $R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}}$

En la descripción del método de Eshelby ya discutimos que la distribución de la deformación es independiente del tamaño del QD. Sin embargo, un parámetro que sí afecta a los resultados finales es la ratio entre el radio y la altura del QD, $r_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}}$. El objetivo de este apartado es estudiar cómo se modifican los

perfiles de deformación de las Figuras 2.9 y 2.10 cuando se modifica la ratio del QD.

Los resultados en el caso del cilindro son fácilmente previsible: Al aumentar el radio, en la zona central del QD la deformación converge hacia la característica de una lámina. De forma similar, al aumentar la altura, la deformación tiende a reproducir el límite de un cilindro infinito. En efecto, en las Figura 2.5 y 2.6 ya fue ilustrado este comportamiento. Por otro lado, para una geometría de cono truncado en la que se mantiene constante el ángulo entre las superficies inferior y lateral, tendremos que al aumentar la ratio la deformación será más parecida a la de un cilindro y al reducirla se aproximará a la de un cono. Así pues, nos centraremos en la forma de cono. En la Figura 2.11 hemos ilustrado el caso de un QD cónico de InAs/GaAs. Hemos representado las componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} para cuatro ratio diferentes: 0.5, 1.0, 2.0 y 3.0. Nótese que la escala de los ejes empleada en la representación ha sido ajustada en cada caso relativa a las dimensiones del QD, de forma que resulte más fácil de realizar la comparación entre los diferentes casos. En el interior del QD se puede apreciar que al aumentar r_{QD} , la componente $e_{\rho\rho}$ tiende hacia el valor de $e_a^0 = -0.067$. Esto es así, por haber aumentado la superficie de contacto entre el QD y la matriz en relación a su altura. Este efecto es responsable del cambio de signo de e_{zz} , que pasa de ser negativa cuando $r_{\text{QD}} = 0.5$, a positiva cuando $r_{\text{QD}} = 3.0$. La matriz, por su lado, tiende a un estado de relajación conforme crece el valor de la ratio, excepto en las regiones situadas por encima y por debajo del QD, que presentan un estado de mayor deformación mayor. También resulta interesante comprobar cómo las líneas de los contornos pasan de ser aproximadamente perpendiculares al eje Z para una ratio pequeña a ser cuasi-paralelas cuando la ratio crece. Ello es consecuencia del aspecto cada vez más plano que adopta la nanoestructura. Para el problema con geometría lenticular se obtiene un comportamiento análogo y por tanto no presentaremos los resultados numéricos.

2.4. Estado de deformación en una superred de puntos cuánticos

Una superred de puntos cuánticos semiconductores consiste en una disposición espacial ordenada de estas nanoestructuras⁶. Una de las principales motivaciones

⁶En este trabajo únicamente vamos a estudiar el estado de deformación de los QDs en una superred, quedando fuera de los objetivos de la Tesis el estudio de la estructura electrónica de estas estructuras [127].

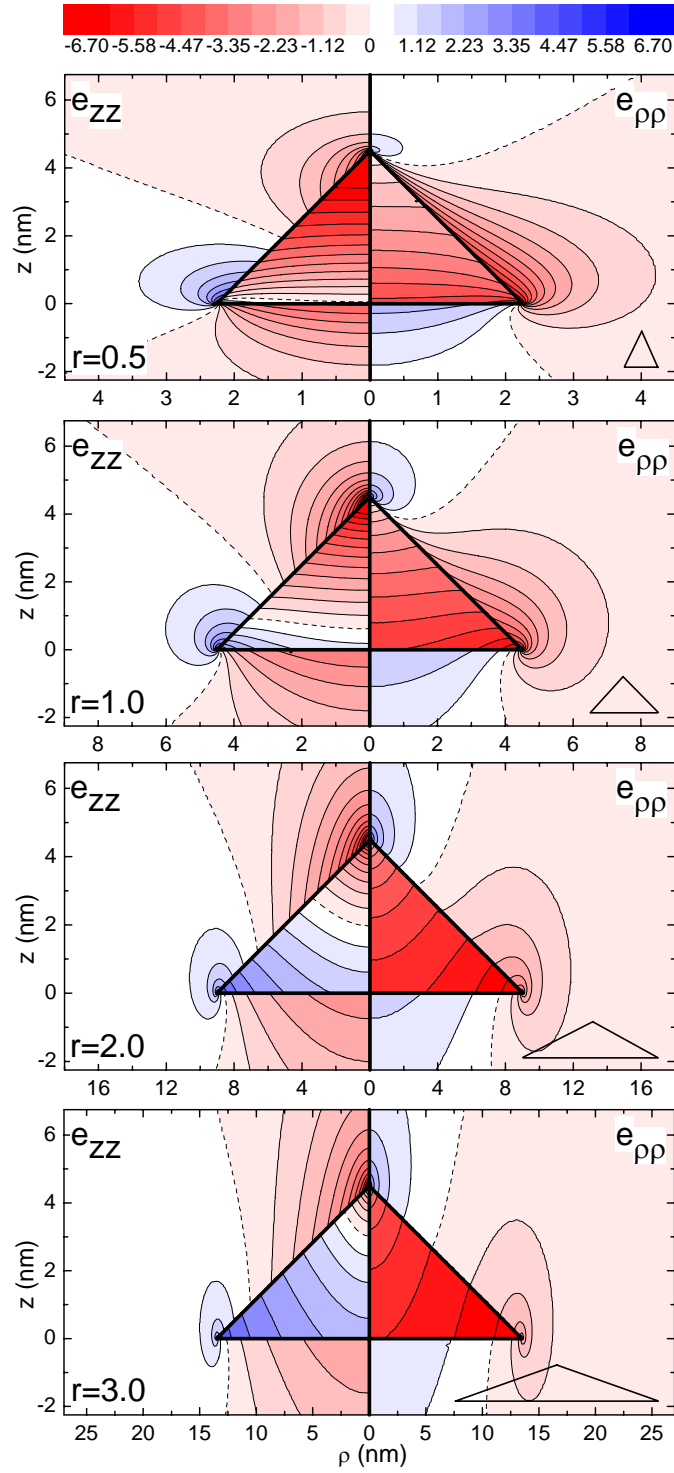


Figura 2.11: Componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} de la deformación para un QD cónico de InAs/GaAs con diferentes ratio $r_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}}$. En la zona inferior derecha hemos incluido una representación del QD empleando la misma escala para las direcciones x e y .

del estudio de las propiedades de superredes de puntos cuánticos auto-ensamblados está en el interés por mejorar el rendimiento de los dispositivos optoelectrónicos basados en estas nanoestructuras. En un elemento activo compuesto por un gran número de QDs, sus propiedades ópticas serán la suma de las de cada QD pudiéndose conseguir un aumento de la potencia de la radiación emitida o una mayor sensibilidad en la detección de radiación. Sin embargo, conseguir crecer redes tridimensionales de QDs en posiciones controladas y de tamaños uniformes sigue siendo un reto experimental.

Para conseguir este objetivo se debe controlar tanto la correlación lateral de los QDs, como su correlación vertical. La correlación lateral es muy débil y únicamente puede conseguirse experimentalmente para deposiciones de material lentas y próximas al equilibrio termodinámico [128]. La interacción entre los QDs pertenecientes a una misma superficie ocurre a dos niveles: por una parte afecta a su tamaño (*coarsening* o ensanchamiento⁷) y por otra a su disposición espacial [130]. Para que se produzca un desplazamiento de la isla, la interacción debe ser suficientemente fuerte. En la práctica la nucleación inicial tiene un carácter aleatorio y la interacción entre QDs en el mismo plano es muy débil. Por consiguiente, la obtención de una disposición de QDs en una red lateral periódica resulta muy difícil de conseguir. Una vía alternativa consiste en la generación de patrones sobre el sustrato que condicionen la nucleación inicial [131].

Por otro lado, la correlación vertical es más fácil de conseguir pues tiene su origen en la deformación local causada por uno o varios QDs enterrados por debajo de la superficie de crecimiento. El QD enterrado deforma la barrera que le cubre, aumentando así la constante de red en el plano justo encima de él (ver Fig. 2.9 y 2.10), de forma que al crecer una nueva capa de puntos cuánticos, la probabilidad de nucleación sobre el QD aumentará. Un factor importante en la consecución de este tipo de crecimiento es el grosor de la capa espaciadora, i.e. la cantidad de material que recubre a la isla. Cuanto mayor sea éste, menor será el efecto de la deformación creada por el QD enterrado. La demostración experimental de este fenómeno fue presentada por Q. Xie *et al.* para el sistema InAs/GaAs [11]. En la Figura 2.12 hemos reproducido una gráfica de dicho trabajo en la que es posible identificar para qué espesores de la capa espaciadora tiene lugar el régimen correlacionado y no correlacionado. La zona en la cual la probabilidad de tener una isla crecida sobre otra es mayor de un 95 % es la denominada por los autores como *régimen de correlación* y se da para espesores menores a 36 ML, esto es ~ 10 nm. Una descripción teórica del origen de la correlación fue realizada por J. Tersoff

⁷Proceso que tiene lugar durante el crecimiento donde unos QDs crecen a expensas de otros para minimizar la energía superficial total [129].

et al. [132]. En este trabajo, además de predecir la posición de los QDs en las diferentes capas apiladas, se obtuvo un interesante resultado: Con el crecimiento de capas de QDs sucesivas, el tamaño y la separación entre los QDs se vuelven más uniformes.

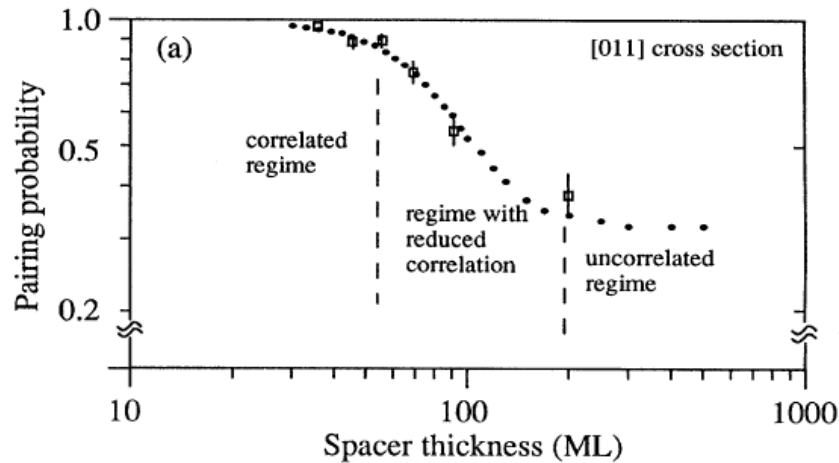


Figura 2.12: Probabilidad de que crezca un QD sobre otro (*Pairing probability*) en función del espesor de la capa espaciadora. Extraída de [11].

En la Sección 2.3 vimos que la estructura cristalina tipo wurtzita era elásticamente isotrópica en el plano perpendicular a la dirección [0001]. Por esta razón, únicamente se puede esperar una superred vertical de QDs tipo GaN/AlN. En efecto, este tipo de apilamiento ha sido observado experimentalmente [42, 45], y en la actualidad es posible obtener apilamientos verticales de QDs de forma rutinaria [133]. En la Figura 2.13 (a) hemos incluido una imagen de microscopía electrónica de transmisión en la que se pueden distinguir diferentes capas de QDs verticalmente alineados. El tamaño de los QDs en función del número de capas apiladas también ha sido investigado y los resultados se muestran en la Figura 2.13(b). Vemos que la evolución del diámetro del QD con el número de periodos sigue el comportamiento descrito teóricamente por J. Tersoff *et al.* [132], y que fue comentado más arriba.

No tenemos constancia de que el caso de QDs de GaN/AlN se haya realizado un estudio tan sistemático como el antes mencionado de Q. Xie *et al.* [11] referente a la probabilidad de nucleación en función del espesor de la capa espaciadora. En cualquier caso, dicho estudio debería tener en cuenta una serie de particularidades sobre el crecimiento de GaN sobre AlN. Por una parte, J. L. Rouvière *et al.* analizaron el papel que desempeñan las dislocaciones presentes en el sustrato en el crecimiento de QDs de GaN/AlN [55]. Observaron que la densidad de dislocaciones puede llegar a ser superior a la densidad de QDs y que éstos tienden a nuclear cerca

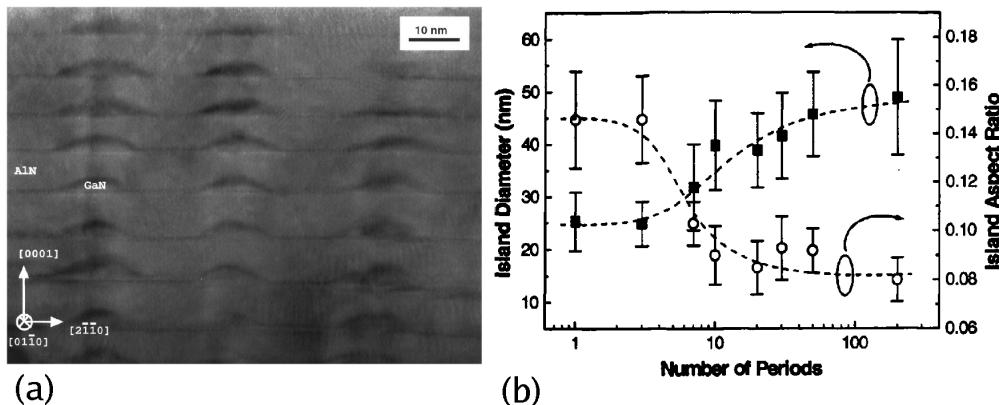


Figura 2.13: (a) Imagen de una sección transversal tomada por microscopía de transmisión electrónica que muestra el apilamiento vertical de QDs de GaN/AlN. (ver Ref. [54]). (b) Dependencia del tamaño y forma de los QDs de GaN/AlN en función del número de capas apiladas. (ver Ref. [133]).

de ellas. Esto explica por qué en ocasiones se observa que un apilamiento de QDs se desvía de la dirección de crecimiento, pues la nucleación se produce a lo largo de la dislocación. Sin embargo, no en toda dislocación se forma un QD. De ser así, la densidad de estos defectos sería igual que la de nanoestructuras. Además, el campo de deformaciones de los QDs también debe jugar un papel importante, pues la uniformidad del tamaño de los QDs observada experimentalmente (véase la Fig. 2.13(b)) no se puede explicar en términos de la proximidad de una dislocación. Por otra parte, V. Chamard *et al.* estudiaron por difracción de rayos-X el grado de desalineamiento en apilamientos de QDs para diferente número de capas de QDs (n_{QD}) y espesores de la capa espaciadora (t_{AlN}) [134, 135]. Los resultados mostraban que el alineamiento disminuye con t_{AlN} para valores de n_{QD} pequeños y que es independiente de t_{AlN} para valores grandes de n_{QD} . Una muestra con $n_{\text{QD}} = 13$ y $t_{\text{AlN}} = 40 \text{ \AA}$ fue estudiada con mayor detalle en la Ref. [134], observando una distancia de correlación vertical igual a 150 nm. En este experimento la distancia de correlación vertical está definida como aquella distancia para la cual la separación lateral entre dos QDs situados en capas contiguas es menor que el diámetro de dichas nanoestructuras. Este resultado contrasta con el hecho de que B. Daudin *et al.* no observasen correlación vertical en muestras con $t_{\text{AlN}} = 20 \text{ nm}$ [42]. Aunque es cierto que la geometría de los QDs contenidos en las muestras utilizadas en los dos trabajos puede ser diferente, no es razón suficiente para explicar el manifiesto desacuerdo entre los dos valores.

En resumen, en los dos sistemas sometidos a estudio en este trabajo se ha observado la presencia de una correlación vertical entre los QDs crecidos en capas

diferentes y una uniformización de tamaños. Sin embargo, mientras que la distancia de correlación vertical en el InAs/GaAs puede ser considerada igual a ~ 10 nm, en el GaN/AlN la situación es diferente. Por una parte, V. Chamard *et al.* determinaron que la distancia era igual a 150 nm, y por otra parte, B. Daudin *et al.* no observaron correlación alguna para un espesor de 20 nm. Finalmente, otro elemento importante que determina el comportamiento en un sistema y otro es la presencia de dislocaciones. En el InAs/GaAs su presencia puede ser despreciada, pero en el GaN/AlN, J. L. Rouvière *et al.* observaron que juegan un papel importante en la posición y alineamiento de las nanoestructuras.

Con el modelo desarrollado en la Sección 2.1 podemos estudiar ahora algunos de los aspectos más relevantes relacionados con la deformación de superredes de QDs. Como dijimos, aunque las expresiones derivadas en Secciones anteriores se refieren a la deformación de un único QD, es posible conocer el de un número finito haciendo uso del principio de superposición.

2.4.1. Estado de deformación de la matriz

Como hemos visto al comentar los resultados experimentales, el estudio del estado de deformación de la matriz juega un papel importante en la formación y en el estado de deformación final de una superred. Téngase en cuenta que, en virtud del principio de superposición, la “interacción elástica” entre dos QDs de una superred dependerá de cual es el estado de deformación del material de la matriz que los separa.

En la Figura 2.14 mostramos de forma esquemática el estado de deformación en la matriz alrededor del QD a partir de los resultados de apartados anteriores. En la parte derecha indicamos el estado local de la constante de red a y en la parte izquierda de la constante de red c . El signo $+$ indica que el material está expandido y el signo $-$ que está comprimido. Si ahora consideramos la deformación de un QD apilado sobre otro, tendremos que el primero habrá crecido sobre un material expandido en el plano debido a la presencia del segundo. Por tanto, es posible adelantar que la deformación del material del QD superior será menor que la correspondiente al material de un único QD, ya que el desacuerdo de malla será también menor. La situación es la opuesta al considerar un apilamiento horizontal, ya que ahora la barrera situada a los lados del QD está comprimida en el plano y un QD que crezca en esa región lo hará sobre un material con un desacuerdo de malla mayor. Un enfoque alternativo al problema se puede hacer fijándonos en los casos límite que describen el conjunto de QDs. Por ejemplo, la deformación de un apilamiento vertical de QDs puede ser interpretada en términos de la deforma-

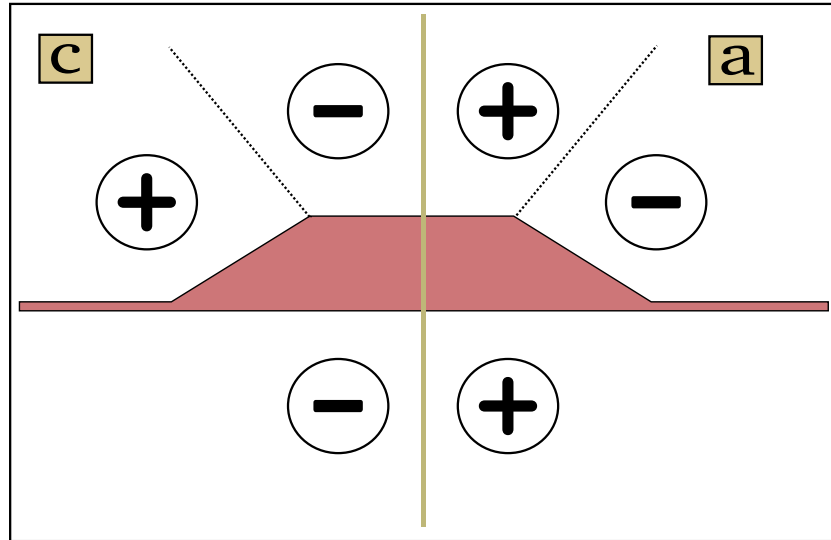


Figura 2.14: Esquema del estado de deformación de la matriz alrededor del QD. El signo + indica expansión y el - compresión.

ción de un cilindro infinito. De forma análoga la deformación en un apilamiento bidimensional se puede entender en términos de la deformación de una lámina. En la Figura 2.15 hemos ilustrado estos casos límite a través de una representación esquemática.

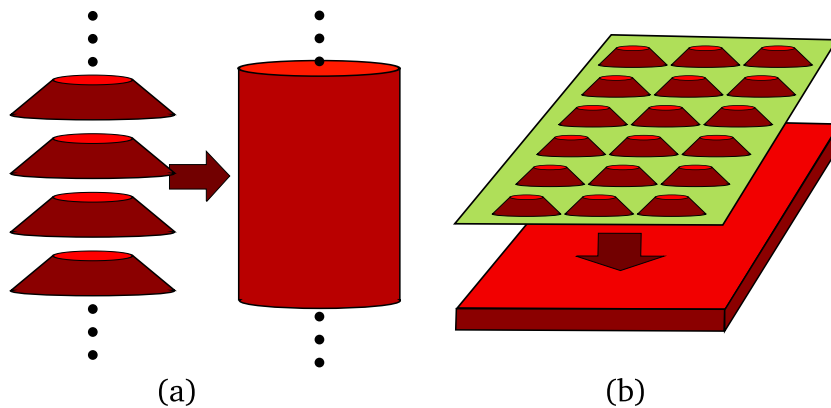


Figura 2.15: Representación esquemática de la equivalencia entre conjuntos de QDs y casos límite. (a) Un apilamiento vertical guarda una analogía con un QWR. (b) Una distribución bidimensional lo hace con un QW.

Empezaremos considerando la deformación en la matriz debida a un QD cilíndrico. Hemos escogido esta simetría, porque su deformación a lo largo del eje axial puede ser estudiada mediante expresiones analíticas compactas (ver Ec. (2.48)). Las componentes del tensor de deformación $\delta e_{\rho\rho}$, $\delta e_{\phi\phi}$ y δe_{zz} son proporcionales a

la siguiente función:

$$f(z) = \left(\frac{z - h_{\text{QD}}}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + (z - h_{\text{QD}})^2}} - \frac{z}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + z^2}} \right), \quad (2.64)$$

Por simplicidad, hemos considerado que los materiales son elásticamente isótropos, i.e. $\eta_{\pm} = 1$. Utilizaremos los parámetros del sistema InAs/GaAs para realizar los cálculos.

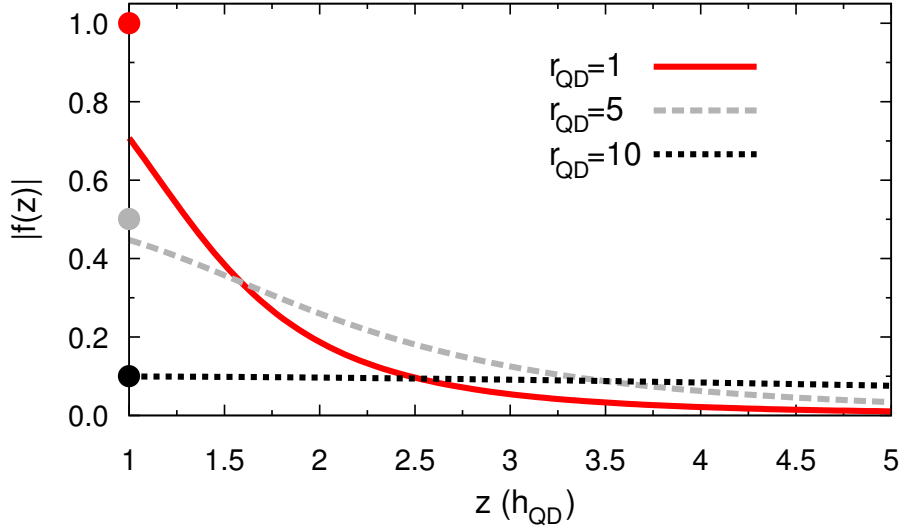


Figura 2.16: Deformación de la matriz descrita según la Ec. (2.64) para diferentes ratio r_{QD} . Los puntos sobre el eje de ordenadas representan r_{QD}^{-1} .

En la Figura 2.16 hemos representado $|f(z)|$ para tres valores diferentes de la ratio, $r_{\text{QD}} = 1, 5$ y 10 . Los tres casos analizados exhiben un comportamiento muy diferente. En primer lugar, la pendiente de $f(z)$ se reduce al aumentar r_{QD} . El valor de $f(z)$ en $z \lesssim 1.5h_{\text{QD}}$ es máximo para el menor valor de r_{QD} . Para $z \approx 2h_{\text{QD}}$, el valor de $f(z)$ es máximo para la curva correspondiente al QD con $r_{\text{QD}} = 5$. Finalmente, si $z > 3.5h_{\text{QD}}$ el valor de $f(z)$ pasa a ser máximo para el QD con $r_{\text{QD}} = 10$. Es decir, tenemos que el valor absoluto de la deformación *aumenta* con la ratio en regiones alejadas del QD. Al estudiar la convergencia de la deformación de un QD a los resultados característicos de una lámina (ver Fig. 2.5), ya vimos este tipo de comportamiento. Entonces nos sirvió para entender la deformación de un QD, y ahora cobra un significado diferente. Apoyándonos en este resultado podemos decir que la deformación en la barrera tiene un alcance mayor al aumentar r_{QD} . Esto significa que la correlación vertical en un apilamiento de QDs será mejor para nanoestructuras que presenten una ratio mayor.

Finalmente queremos discutir la cuestión concerniente al valor que toma la deformación justo en la intercara QD-matriz. Resulta inmediato comprobar que dicha deformación viene determinada por:

$$|f(h_{\text{QD}})| = \frac{h_{\text{QD}}}{\sqrt{R_{\text{QD}}^2 + h_{\text{QD}}^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + r_{\text{QD}}^2}}. \quad (2.65)$$

Cuando se verifica $r_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}} \gg 1$, r_{QD}^{-1} resulta ser una buena aproximación a $f(h_{\text{QD}})$. En el eje de ordenadas de la Fig. 2.16 hemos marcado con un punto sólido los tres valores de r_{QD}^{-1} para cada ratio. Esta sencilla expresión nos permite comprobar que la deformación tiende a cero como la inversa de la ratio cuando $r_{\text{QD}} \gg 1$.

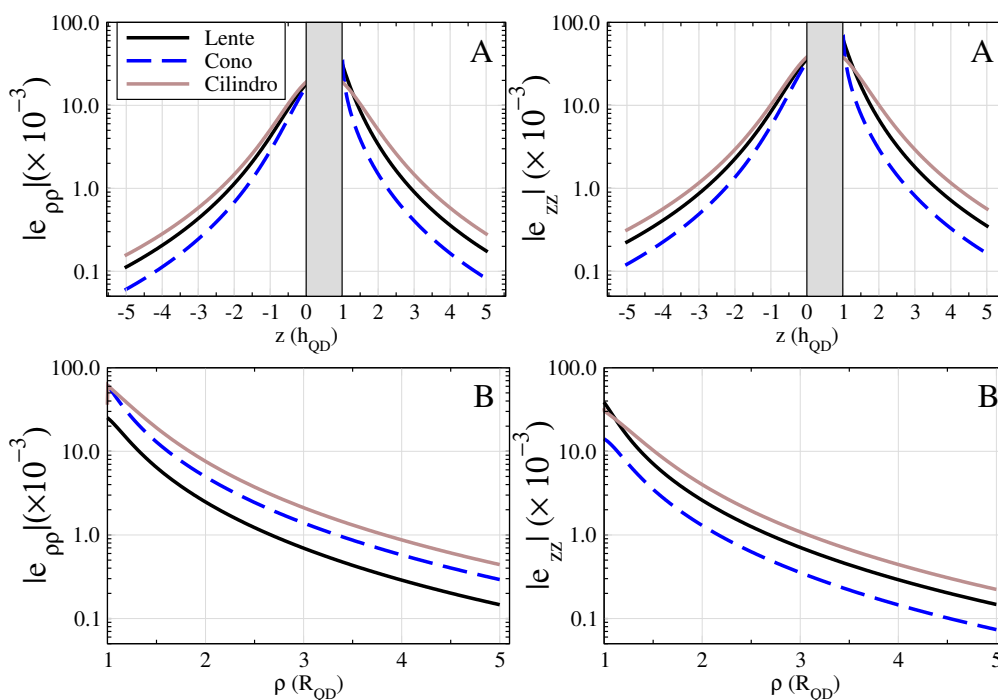


Figura 2.17: Representación del valor absoluto de la deformación en escala logarítmica a lo largo de la dirección Z (paneles A) y dirección radial (paneles B) para tres geometrías del QD distintas. La deformación correspondiente a la región del QD (zona sombreada) ha sido suprimida por claridad.

Para ampliar el análisis de la deformación en la barrera hemos realizado un cálculo considerando también diferentes geometrías del QD. En todos los casos hemos considerado $r_{\text{QD}} = 1$. Además de presentar la deformación en el eje Z (paneles A), hemos incluido los resultados en la dirección radial (paneles B). El criterio seguido para la elección del eje radial en los paneles B ha consistido en

fijar la altura z para la que la deformación mostrada en la Figura 2.9 varía más lentamente con ρ . Esto nos dará un valor máximo de la distancia sobre la que decae lateralmente la deformación. Como valores representativos hemos considerado $z = h_{\text{QD}}/5$ para las geometrías cónica y lenticular, y $z = h_{\text{QD}}/2$ para la geometría cilíndrica. En la Figura 2.17 hemos representado los resultados. Hemos empleado la escala logarítmica en el eje de ordenadas para poder cuantificar la atenuación de la deformación en órdenes de magnitud. Por esta razón hemos representado las variables en valor absoluto. Comparando los resultados obtenidos para $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} se comprueba que ambas componentes tienen una dependencia con la distancia muy parecida. A lo largo del eje Z se observa que la deformación disminuye más lentamente para la geometría cilíndrica y lo hace más rápidamente para la cónica. Como norma general podemos asumir que para un QD con r_{QD} fijo la caída de la deformación es más rápida a lo largo de la dirección Z cuanto menor es su volumen. Para la dirección radial se observa que la deformación cae aproximadamente igual con la distancia independientemente de la geometría. A lo largo de esta línea, la comparación es más difícil de realizar, pues, como ya dijimos, el valor de corte en el eje Z se ha escogido de forma arbitraria. A modo de resumen, en todos los casos se puede considerar que la deformación cae un orden de magnitud para $z \sim 2 - 3 h_{\text{QD}}$ y $\rho \sim 2 R_{\text{QD}}$.

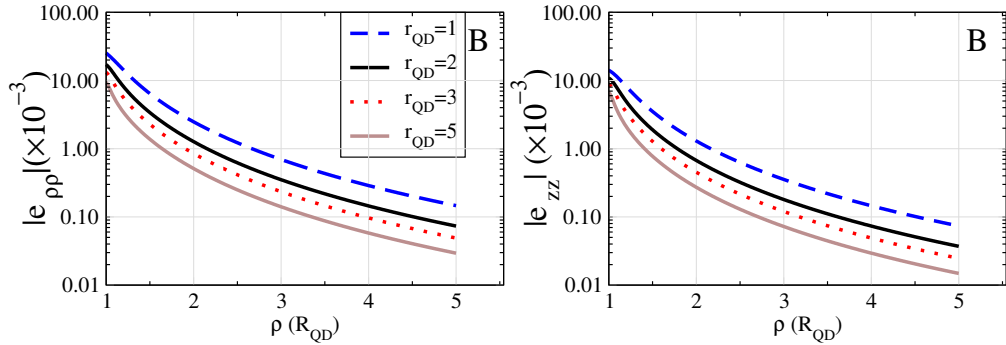


Figura 2.18: Valor absoluto de la deformación a lo largo de la dirección radial para un QD cónico considerando diferentes valores de r_{QD} .

Al hacer los cálculos para diferentes ratio hemos comprobado que la deformación a lo largo del eje Z tiene un comportamiento análogo al mostrado por la Figura 2.16. En la Figura 2.18 mostramos la deformación a lo largo de la dirección radial debida a un QD cónico para diferentes valores de r_{QD} considerando los mismos valores de z que fueron empleados en la Fig. 2.17. Aquí también se observa que el comportamiento de $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} es muy parecido. Estos resultados son representativos de los obtenidos al considerar otras formas del QD. A diferencia del comportamiento observado en la Figura 2.16, el aspecto de las curvas no

se modifica tan acusadamente al variar r_{QD} . En términos de distancia relativa al tamaño del QD se puede decir que la deformación en la barrera experimenta una mayor atenuación al considerar un QD de mayor r_{QD} . Si consideramos una serie de QDs con R_{QD} fijo, esto significa que al reducir la altura, la deformación de la barrera a una distancia dada es cada vez menor. Por otro lado, si consideramos como parámetro fijo h_{QD} , encontramos que al aumentar R_{QD} la deformación en la barrera se atenúa.

Hemos visto que en un QD con $r_{\text{QD}} = 1$ la deformación experimenta una atenuación de un orden de magnitud para $z \sim 2 - 3 h_{\text{QD}}$ a lo largo de la dirección z y $\rho \sim 2 R_{\text{QD}}$ a lo largo de la dirección radial. Al aumentar r_{QD} , hemos comprobado que una atenuación similar se observa para valores de z mucho mayores a lo largo del eje Z y para un valor aproximadamente igual de ρ a lo largo del eje radial. En conclusión, al aumentar la ratio r_{QD} del QD la interacción entre QDs apilados verticalmente se puede considerar mayor que la interacción lateral entre QDs localizados en un mismo plano. Más adelante veremos las implicaciones que este resultado en el estudio de diferentes superredes de QDs.

2.4.2. Estudio de la deformación en una superred vertical de puntos cuánticos

En este apartado abordaremos el estudio de la deformación en una superred vertical de QDs (SR 1D), esto es, en un apilamiento donde cada capa esta compuesta por un único QD. Para ilustrar los resultados numéricos de este apartado tomaremos como modelo los QDs de GaN/AlN obtenidos por N. Gogneau *et al.* [133]. Estos QDs presentan $h_{\text{QD}} = 3.8$ nm, $R_{\text{QD}} = 17.5$ nm, un ángulo entre la superficie lateral y la base $\alpha = 30^\circ$ y un espesor de la capa espaciadora es igual a 8.6 nm.

En la Figura 2.19 hemos representado $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} a lo largo del eje Z , i.e. $\rho = 0$, para diferentes números de capas apiladas, N_{QD} . Conforme N_{QD} aumenta hemos empleado un trazo más claro para representar la curva. Aquí podemos observar cómo la deformación en el plano, representada a través de $e_{\rho\rho}$, se reduce en el QD a medida que N_{QD} aumenta. Por contra, el valor de $e_{\rho\rho}$ en la matriz aumenta con N_{QD} . La componente e_{zz} de la deformación presenta un comportamiento diferente. En el interior del QD e_{zz} experimenta un cambio de signo (de positivo a negativo) al aumentar N_{QD} , mientras que en la matriz va tomando valores cada vez más negativos.

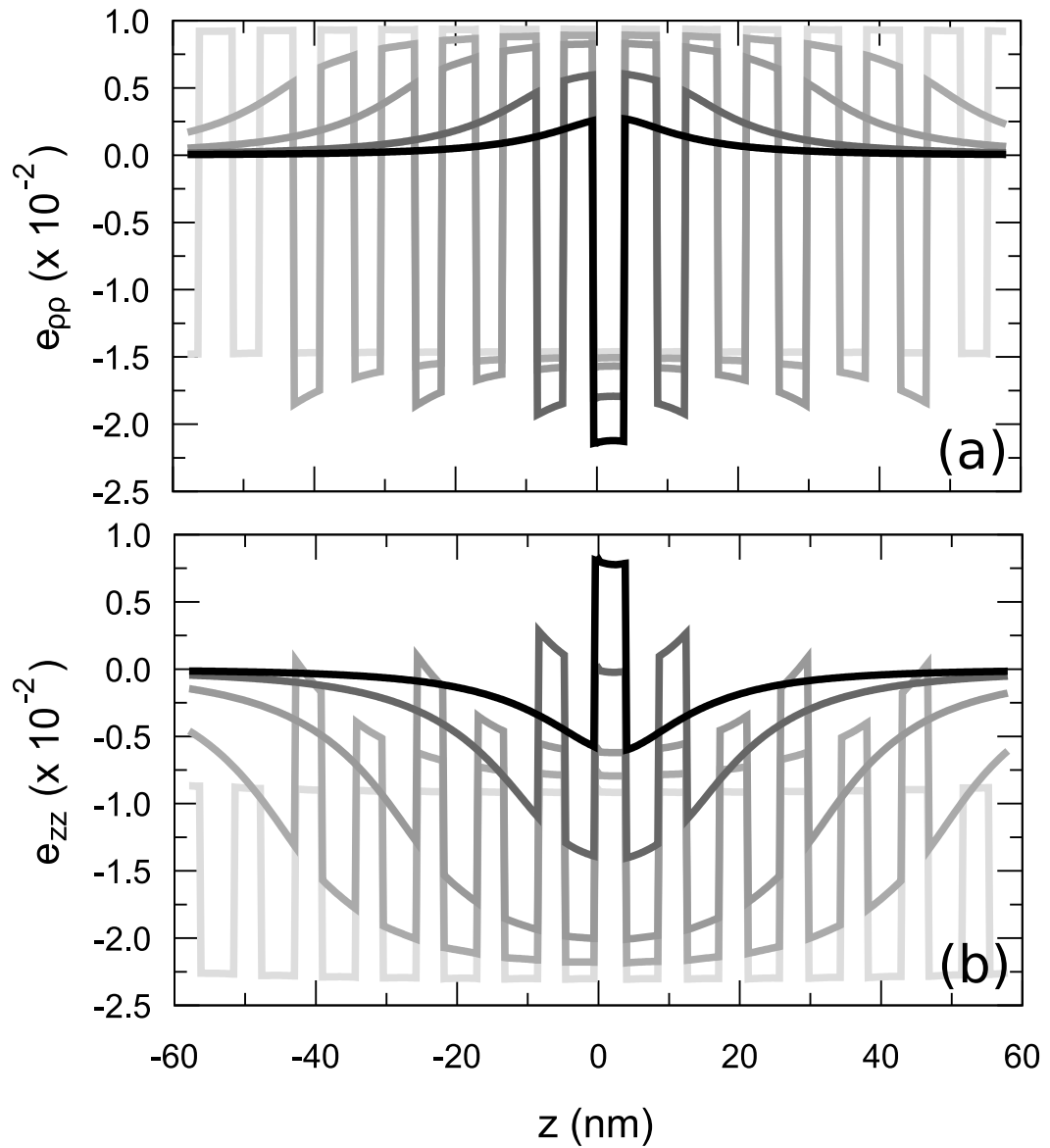


Figura 2.19: Componentes de la deformación e_{pp} (a) y e_{zz} (b) a lo largo del eje Z para $N_{QD} = 1, 3, 7, 11$ y 25 . El color de la curva pasa de más oscuro a más claro al aumentar N_{QD} .

El valor máximo de N_{QD} considerado es 25. Se puede observar que al pasar de $N_{\text{QD}} = 11$ a $N_{\text{QD}} = 25$ las componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} experimentan una variación muy pequeña. Por consiguiente, se puede considerar que el QD situado en el centro del apilamiento presenta una distribución de la deformación que es representativa de la correspondiente a un QD en un apilamiento infinito. Además, también se puede extraer de este resultado que las distribuciones de deformación de dos QDs separados 12 periodos tienen una interacción mutua muy pequeña. Estudiando los resultados con más detalle, hemos comprobado que para obtener una variación de la deformación menor de 1% en función de N_{QD} , hay que contemplar un apilamiento de 40 QDs. Enlazando con los resultados del apartado anterior, si en el apilamiento consideramos nanoestructuras de menor r_{QD} pero igual h_{QD} , el valor de N_{QD} necesario para que la deformación se modifique menos de 1% se reduce.

Resultados similares han sido obtenidos por H. Shin *et al.* [136, 137, 138] para el sistema cúbico InAs/GaAs variando el espaciado de un apilamiento de 7 QDs. G. S. Pearson y D. A. Faux también obtuvieron resultados similares a los aquí mostrados para un sistema de 5 QDs de InAs/GaAs en la aproximación isótropa [139].

Una vez hemos visto cómo varía la deformación a lo largo del eje central del apilamiento, vamos a pasar a estudiar su comportamiento en un plano trasversal al QD central. Para ello hemos representado en la Figura 2.20 tanto $e_{\rho\rho}$ como e_{zz} a lo largo de una dirección perpendicular al eje Z . La altura del corte escogido es $z = h_{\text{QD}}/5$, siguiendo el mismo criterio que en la Figura 2.17. Debido a la discontinuidad en la deformación al pasar del QD a la barrera, hemos utilizado los dos ejes de ordenadas en esta representación: la deformación del QD se lee en el eje de la izquierda y la de la barrera en el eje de la derecha. La línea vertical separa las dos regiones. En el interior del QD observamos el mismo comportamiento de $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} que en la Figura 2.19. En la barrera $e_{\rho\rho}$ es negativa y e_{zz} es positiva, i.e. presentan el signo opuesto al exhibido en el eje axial del QD. Esta deformación puede ser interpretada recordando los resultados obtenidos para un cilindro infinito. Basta comparar la curva asociada a $N_{\text{QD}} = 25$ (línea de puntos) con las curvas mostradas en la Figura 2.6, donde se considera un QD cilíndrico tipo InAs/GaAs, que para h_{QD} grande representa un cilindro indefinido. Por tratarse de un sistema diferente únicamente tiene sentido fijarnos en el comportamiento general. En el interior del QD la deformación se hace más uniforme sin llegar, sin embargo, a un valor constante como el hallado en el caso infinito. Fuera del QD, $e_{\rho\rho}$ es negativa en la superficie de contacto y se aproxima a cero al aumentar ρ . La componente e_{zz} converge a un valor constante a medida que N_{QD} aumenta que progresivamente se aproxima a cero. Es importante resaltar que mientras la columna representa un

límite exacto para un QD cilíndrico con h_{QD} infinito, la columna únicamente representa un límite aproximado a la SR vertical de QDs. Por esta razón no buscaremos una convergencia cuantitativa entre ambas soluciones.

2.4.3. Estudio de la deformación en una superred bidimensional de puntos cuánticos

Tras haber estudiado la deformación en un apilamiento vertical de QDs, vamos a pasar al estudio de una superred en el plano de crecimiento (SR 2D). Ya hemos comentado más arriba las dificultades técnicas para la obtención de una superred periódica lateral de SAQDs. A la vista de las imágenes de AFM de este tipo de sistemas [51, 140], no es posible reconocer la existencia de un arreglo bidimensional de este tipo. Sin embargo, para estudiar los efectos debidos a la presencia de QDs adyacentes en un plano supondremos, como primera aproximación, que dicho orden lateral existe y, por simplicidad, consideraremos que viene dado por una red cuadrada tal y como se muestra esquemáticamente en la Figura 2.21.

El área de la celda unidad ha sido determinado recurriendo a la densidad de QDs por unidad de área, n_{QD} , fácilmente obtenible de los experimentos de AFM. Cada QD ocupa un espacio promedio igual a n_{QD}^{-1} , por tanto la constante de la superred será:

$$a_{\text{SR}} = \frac{1}{\sqrt{n_{\text{QD}}}} \quad (2.66)$$

En las muestras obtenidas por N. Gogneau *et al.* la densidad promedio resulta ser de $0.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (ver Fig. 1 Ref. [133]). Por tanto, $a_{\text{SR}} = 37.8 \text{ nm}$. Dado que $R_{\text{QD}} = 17.5 \text{ nm}$, la separación mínima entre QDs es 2.8 nm, y vemos que en este sistema los QDs están muy próximos.

En la Figura 2.22 hemos mostrado las componentes $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} de la deformación en un corte perpendicular al eje Z con $z = h_{\text{QD}}/5$ para diferentes valores de N_{QD} . Ahora N_{QD} representa el número de QDs considerados en las direcciones [100] y [010] de la superred, de forma que el número total de QDs será N_{QD}^2 . Vemos que la deformación en el QD central no se modifica al considerar $N_{\text{QD}} > 3$. Esto se puede explicar a partir de los resultados mostrados en la Figura 2.18. Allí podemos ver que la deformación en la matriz se atenúa monótonamente, y que para un QD de $r_{\text{QD}} = 4.6$ se reduce en dos ordenes de magnitud en $\rho = 3R_{\text{QD}}$. Esto hace que se pueda despreciar la contribución de QDs alejados. Por otro lado, podemos observar que en el interior del QD la componente $e_{\rho\rho}$ se hace más negativa y e_{zz} más positiva, en virtud del efecto Poisson. El material de la barrera localizado entre

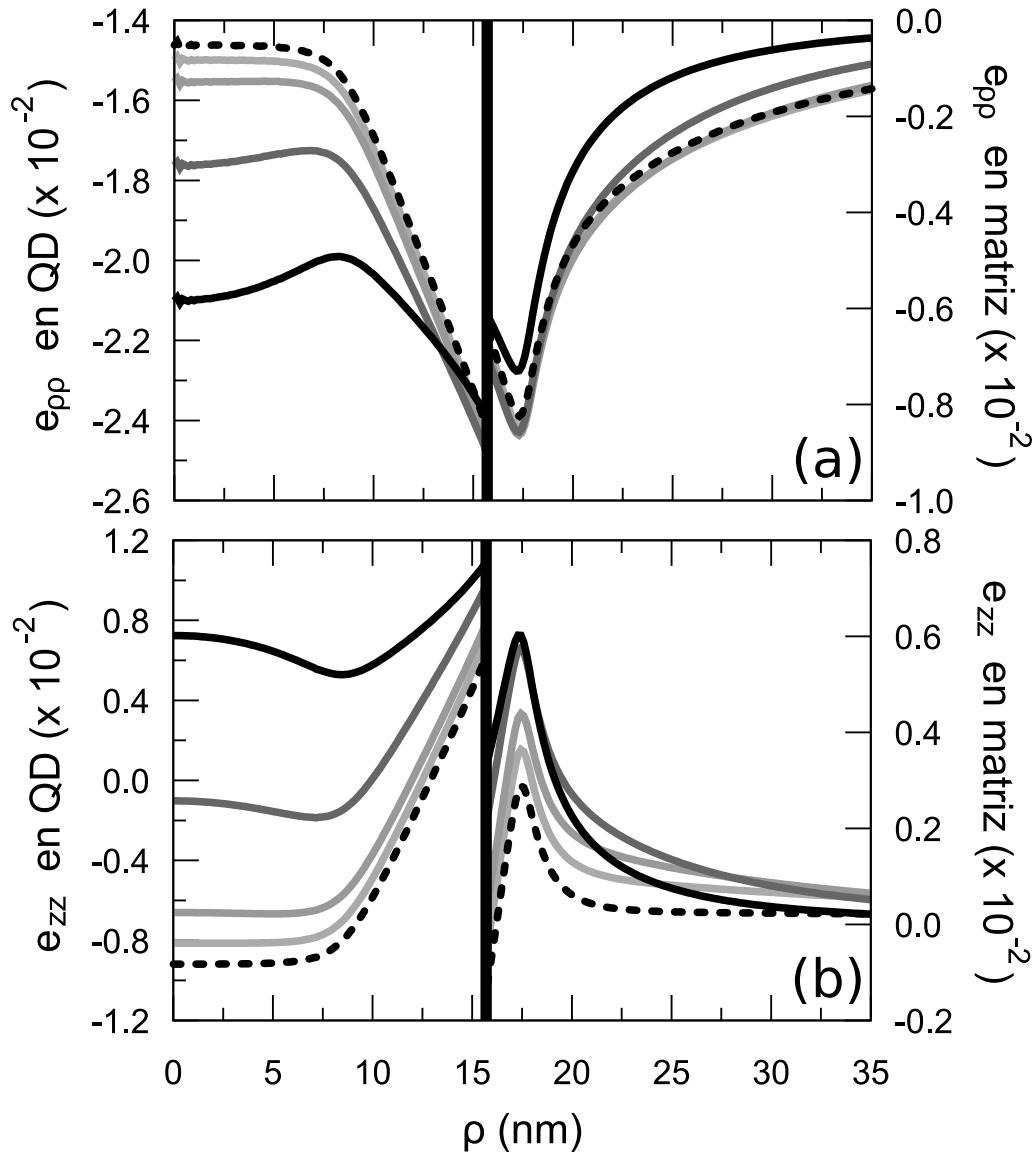


Figura 2.20: Componentes $e_{\rho\rho}$ (a) y e_{zz} (b) de la deformación a lo largo de la dirección perpendicular al eje Z con $z = h_{\text{QD}}/5$ para $N_{\text{QD}} = 1, 3, 7, 11$ y 25 . El color de la curva pasa de más oscuro a más claro al aumentar N_{QD} . La línea de puntos corresponde a $N_{\text{QD}} = 25$.

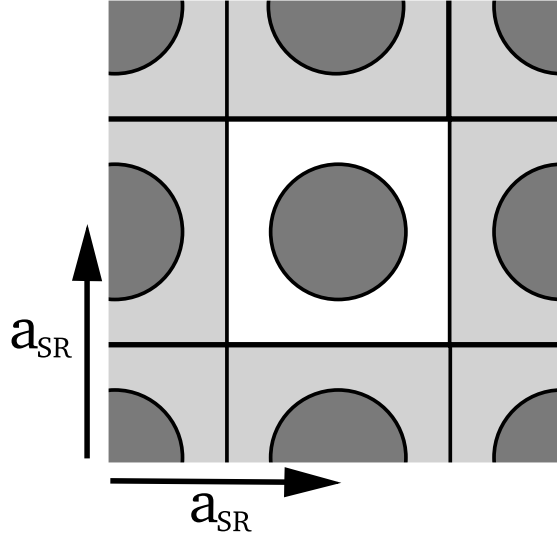


Figura 2.21: Esquema de la celda unidad utilizada para describir la superred en el plano de crecimiento.

los QDs experimenta igualmente una compresión en el plano y una expansión en la dirección de crecimiento.

En la introducción de este apartado comentamos que una superred bidimensional de QDs podría ser interpretada en términos de la deformación de una lámina (ver Fig. 2.15), i.e. que la deformación en el sistema se podría describir con las Ecs. (2.60). Sin embargo, tal comportamiento no parece evidente en la Figura 2.22. Ello es debido a la forma de los QDs, que no es capaz de llenar el espacio completamente. Los valores de la deformación en una lámina bidimensional de GaN/AlN son $e_{\rho\rho} = -0.024$ y $e_{zz} = 0.014$ y los valores promedio en el interior de un QD para una SR 2D son $e_{\rho\rho} = -0.022$ y $e_{zz} = 0.008$. Obsérvese que cuantitativamente existe una diferencia importante entre la deformación obtenida para estos dos sistemas, especialmente para la componente e_{zz} . No obstante, la tendencia sí que es clara, pues al aproximar los QDs la compresión en el plano aumentará, conjuntamente con la expansión en la dirección Z .

2.4.4. Estudio de la deformación en una superred tridimensional de puntos cuánticos

Finalmente abordaremos el estudio de la deformación en una superred de puntos que se extiende en las tres direcciones del espacio. Dicho estudio puede ser planteado desde dos enfoques diferentes. En primer lugar podemos seguir el procedimiento que hemos adoptado hasta ahora, i.e., estudiar la deformación en un

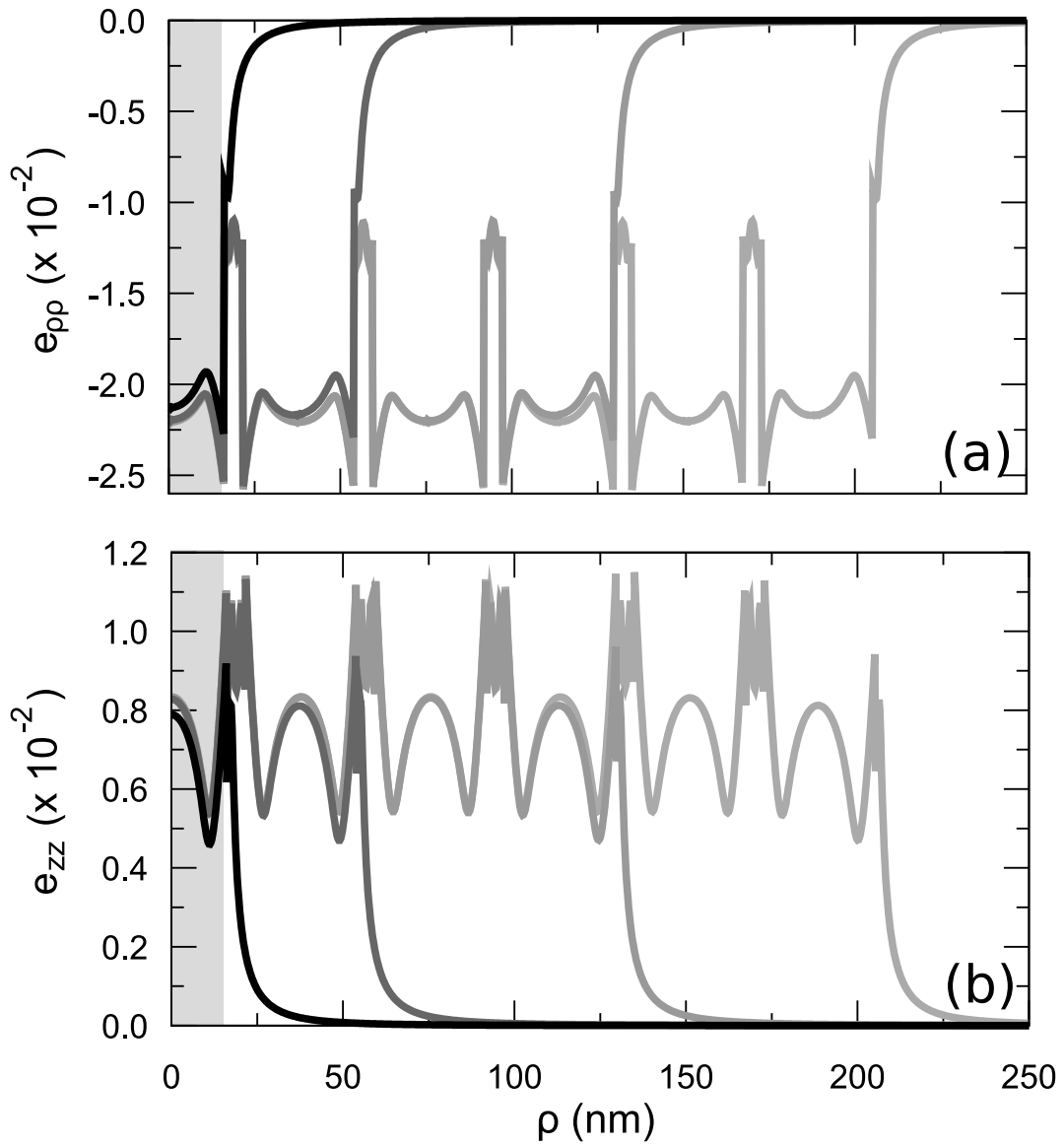


Figura 2.22: Componentes $e_{\rho\rho}$ (a) y e_{zz} (b) de la deformación a lo largo de la dirección radial con $z = h_{\text{QD}}/5$ para $N_{\text{QD}} = 1, 3, 7$ y 11 . La intensidad del color de la curva pasa de más oscuro a más claro al aumentar N_{QD} .

arreglo finito de QDs en función de N_{QD} . Cuando esta deformación sea independiente del número de QDs considerados en el cálculo, obtendremos el estado de deformación que será representativo de una superred infinita. Este proceso puede llegar a ser muy costoso en términos de tiempo de computación, pues para calcular la deformación en cada punto (ρ, z) es preciso evaluar la contribución de N_{QD}^3 puntos cuánticos. El procedimiento alternativo consiste en calcular la deformación en el espacio real para un sistema de inclusiones infinito y periódico a partir de la serie de Fourier. Matemáticamente este problema resulta muy sencillo de resolver pues únicamente es preciso evaluar la siguiente suma [118]:

$$e_{ij}^{SR}(\mathbf{r}) = \frac{1}{a_{\text{SR}} b_{\text{SR}} c_{\text{SR}}} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n) \exp(i\mathbf{q}_n \mathbf{r}), \quad (2.67)$$

donde a_{SR} , b_{SR} y c_{SR} son los periodos de la superred en las tres direcciones, $\mathbf{q}_n = 2\pi(n_1/a_{\text{SR}}, n_2/b_{\text{SR}}, n_3/c_{\text{SR}})$ y los coeficientes de la serie $\tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n)$ se evalúan a partir de la deformación en el espacio de Fourier, que obtuvimos en Secciones anteriores (ver Ecs. (2.40) y (2.51)). Obviamente, debido a las propiedades de la serie de Fourier, esta aproximación sólo resulta apropiada para problemas que presenten periodicidad [117, 118, 121].

Antes de continuar con el estudio de la deformación en superredes, es interesante apuntar que esta aproximación permite, en principio, obtener la deformación para un QD aislado aumentando el valor de a_{SR} , b_{SR} y c_{SR} . Mientras que el cálculo exacto de las transformadas de Fourier de (2.40) y (2.51) puede resultar muy laborioso, evaluar la suma de la Ec. (2.67) no entraña ninguna complicación. Por tanto la Ec. (2.67) puede ser considerada como una herramienta interesante para realizar un primer acercamiento al problema de la deformación de un QD aislado. No obstante, el problema del QD aislado requiere aumentar las constantes de red de la superred de forma que un gran número de frecuencias espaciales (n_1 , n_2 , y n_3) han de ser consideradas en la suma. Además, debemos tener en cuenta que siempre que se procede a la evaluación de una serie de Fourier de funciones discontinuas, como es el caso de $\chi(\mathbf{r})$, surge una modulación en la función transformada que limita la exactitud del cálculo, así como la claridad de las representaciones realizadas a partir de los resultados. Esta modulación recibe el nombre de *oscilaciones de Gibbs*. Para su eliminación existen diferentes métodos que se pueden encontrar en la bibliografía especializada [141]. En este trabajo emplearemos el propuesto por S. Tandon *et al.* [142], que consiste en aplicar al coeficiente de Fourier $\tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n)$

el filtro

$$g(q) = \frac{3}{q^2} (\text{sinc}^2(q) - \text{sinc}(2q)) + \alpha \frac{2}{q^2} (3 \text{sinc}^2(2q) - 2 \text{sinc}(2q) - \text{sinc}(4q)) , \quad (2.68)$$

antes de evaluar la serie. En esta expresión el parámetro α debe ser ajustado para minimizar las oscilaciones. En los resultados que mostraremos a continuación hemos considerado $\alpha = 0.0$, aunque dependiendo del sistema que se esté estudiando puede ser conveniente tomar un valor diferente.

Por último, es necesario realizar un comentario relativo al valor del coeficiente de Fourier en $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$: $\tilde{e}_{ij}(0)$. Del estudio de las ecuaciones (2.40) y (2.51) en el límite $\mathbf{q} \rightarrow 0$, se puede concluir que este valor no está definido. A. Andreev y E. P. O'Reilly, han discutido en detalle el papel que juega este término en el cálculo [118]. Su significado físico se puede obtener a partir de la definición de la transformada de Fourier:

$$\tilde{e}_{ij}(0) = \int_{\mathbb{R}^3} e_{ij}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (2.69)$$

y resulta ser la deformación total del sistema. El tratamiento que se da habitualmente en la bibliografía a este término pasa por excluirlo de la suma (2.67). Esto implica asumir que la deformación total es idénticamente nula, i.e. se está suponiendo que la expansión en un punto del espacio se compensa con la compresión en otro punto, resultando en una deformación total igual a cero. Por consiguiente, se está ignorando la influencia de un posible sustrato, el cual es indeformable en el infinito por construcción. Con el fin de explicar mejor este aspecto nos apoyaremos en el ejemplo de una superred de QWs. Las soluciones para un único QW vienen descritas por la Ec. (2.60). Estas soluciones son válidas siempre y cuando la matriz sea infinita. Esta matriz desempeña el papel de sustrato. Bajo estas condiciones la deformación fuera del QW es exactamente cero. Si ahora suponemos una secuencia de QWs, en virtud del principio de superposición, obtendremos que la matriz continuará estando totalmente relajada independientemente del número de QWs. Sin embargo, en el caso de una superred infinita (*free-standing* o libre), estrictamente ya no hay ningún material que desempeñe el papel de matriz descrito en el método de Eshelby, y es de esperar que ambos materiales de la superred pasen a estar deformados. La condición de equilibrio elastostático impone en este caso que la constante de red en el plano, a , será la misma en los dos materiales e igual al valor que se obtiene de promediar con la proporción en la que éstos aparecen en

la superred:

$$a = f a^{(I)} + (1 - f) a^{(M)}, \quad (2.70a)$$

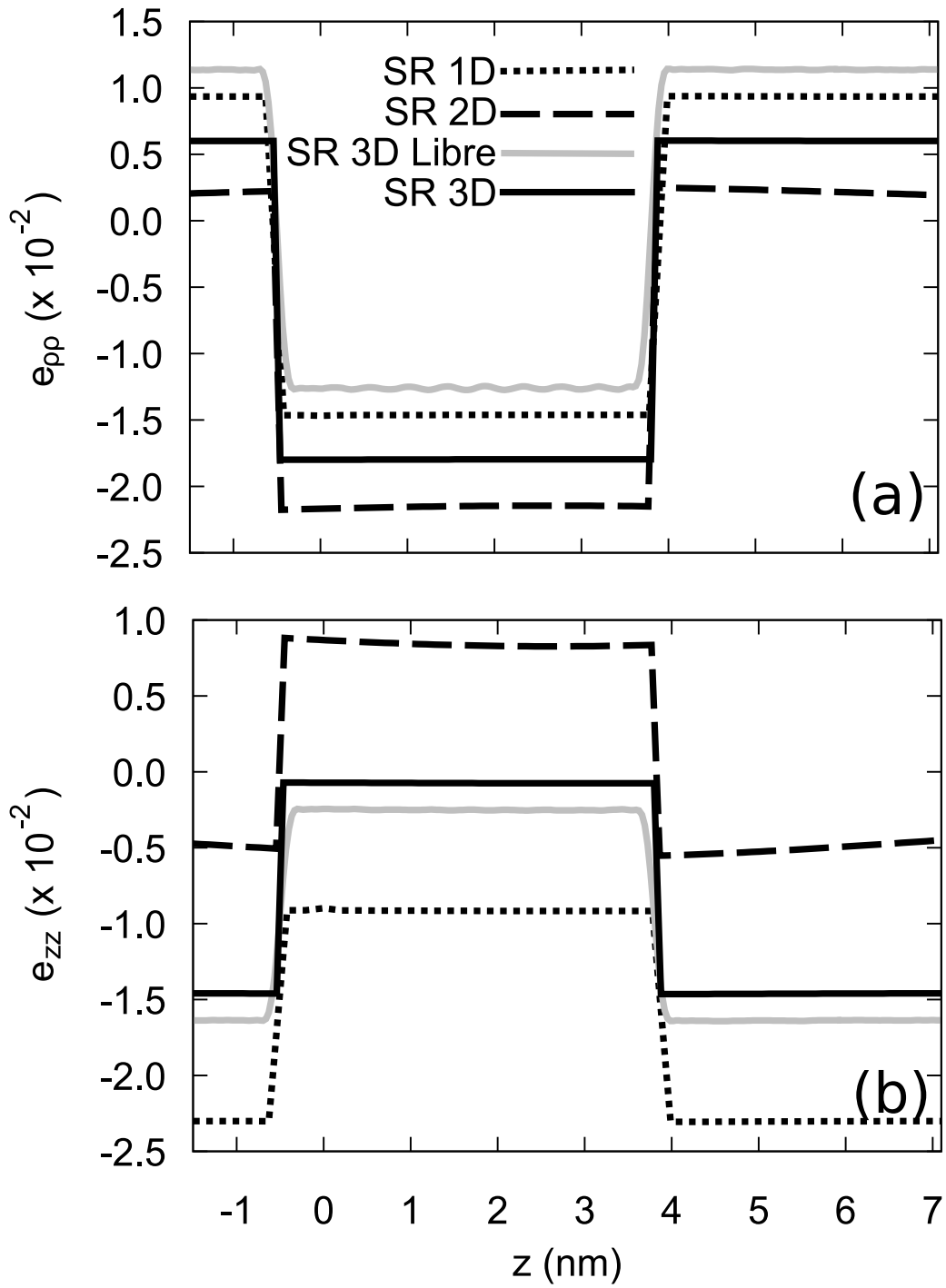
$$e_{\rho\rho}^{(M)} = f e_a^{(0)}, \quad (2.70b)$$

$$e_{\rho\rho}^{(I)} = (f - 1) \frac{a^{(M)}}{a^{(I)}} e_a^{(0)}, \quad (2.70c)$$

donde $f = d_{\text{QW}}/c_{\text{SR}}$, d_{QW} es el espesor de cada QW, y c_{SR} es el periodo de la superred. El valor de a fijará la componente e_{xx} y la componente e_{zz} se podrá calcular a través del efecto Poisson. A este resultado se puede llegar de forma independiente mediante la Ec. (2.67) imponiendo $\tilde{e}_{ij}(0) = 0$.

Por consiguiente, los dos procedimientos (la superposición de los resultados para un único QD aislado y la suma de la serie de Fourier (2.67) con $\tilde{e}_{ij}(0)$) no son equivalentes y cada uno de ellos representa un problema diferente. Para determinar qué aproximación es más representativa será necesario disponer de información experimental acerca de la influencia del sustrato en el sistema real. Para completar esta discusión, queremos añadir que A. D. Andreev y E. P. O'Reilly proponen la posibilidad de imponer a mano un valor para $\tilde{e}_{ij}(0)$, de forma que se pueda contemplar la influencia del sustrato. En nuestra opinión, esta forma de proceder resulta ambigua y únicamente estimamos que está justificada como una aproximación. Como conclusión, para calcular la deformación de una superred de QDs sin influencia del sustrato, a la que denominaremos libre, consideraremos $\tilde{e}_{ij}(0) = 0$. Para contemplar el efecto de un sustrato “infinito” recurriremos al principio de superposición y sumaremos los efectos de un gran número de QDs.

En las Figuras 2.23 y 2.24 hemos representado las componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} a lo largo de las direcciones axial y radial, que fueron utilizadas en la Figura 2.17, considerando cuatro superredes diferentes: una superred vertical paralela a la dirección [0001] (SR 1D), otra en el plano (SR 2D), una tridimensional (SR 3D) y, por último, una tridimensional libre (SR 3D libre). Todas excepto la última son superredes finitas, pero contienen un elevado número de QDs. La geometría del QD y las constantes de la SR han sido escogidas de acuerdo a los valores empleados en los cálculos realizados en el estudio de las superredes vertical y en el plano. Para los parámetros empleados en este cálculo hemos comprobado que la deformación experimenta una variación menor de un 1% en $\rho = 0$ si $N_{\text{QD}} < 15$. En los cálculos mostrados en la SR 3D hemos considerado $N_{\text{QD}} = 25$, con el fin de asegurar también la convergencia en las zonas alejadas del eje axial. La SR 1D y la SR 2D ya han sido estudiadas en apartados anteriores. Podemos comprobar nuevamente que a lo largo del eje Z en la SR 2D el material del QD

Figura 2.23: Componentes e_{pp} (a) y e_{zz} (b) de la deformación a lo largo de la línea (A)

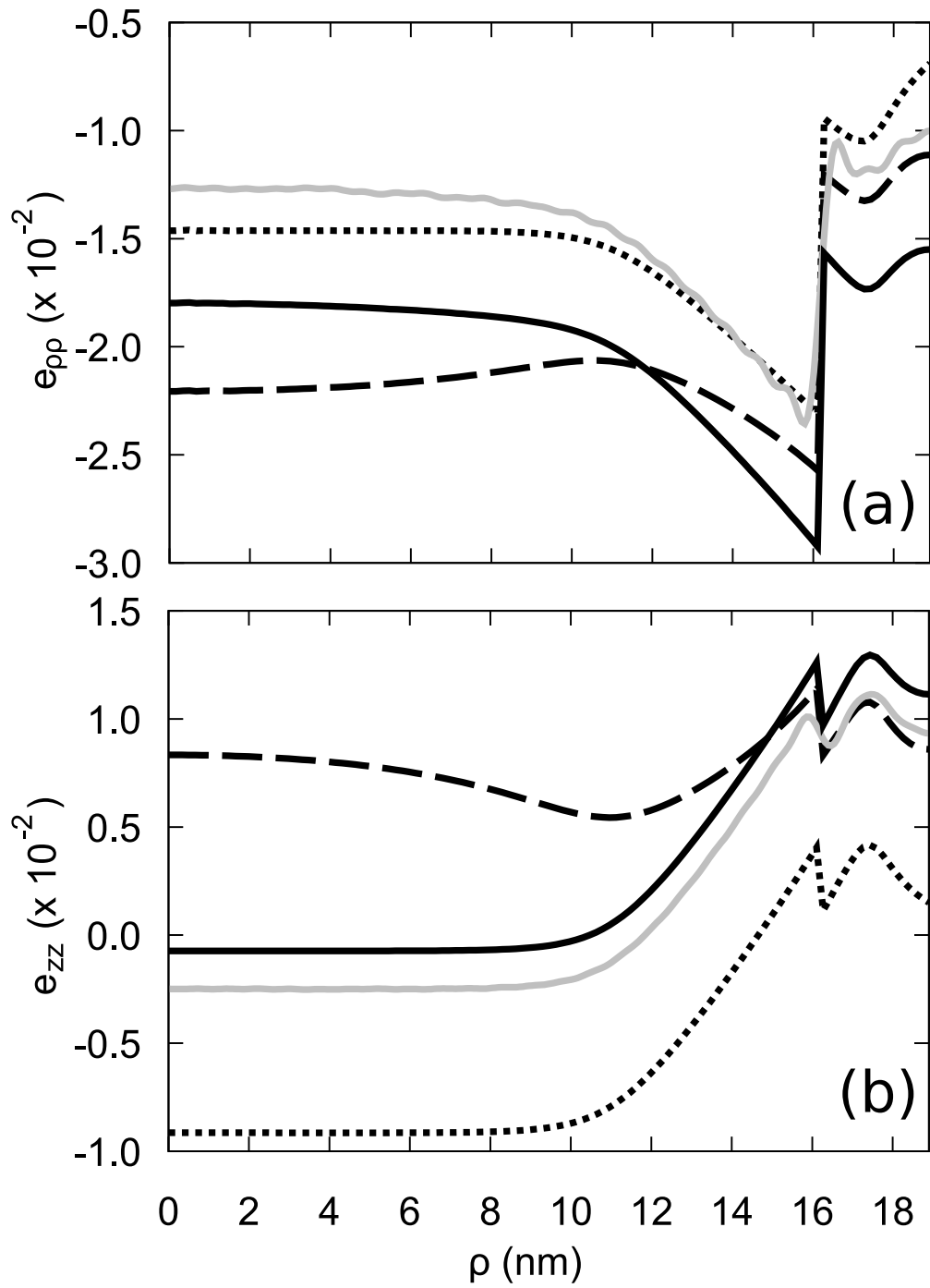


Figura 2.24: Componentes $e_{\rho\rho}$ (a) y e_{zz} (b) de la deformación a lo largo de la línea (B)

está más comprimido en el plano y más expandido en la dirección Z que en la SR 1D. En cambio, el material de la matriz en la SR 2D está menos expandido en el plano y menos comprimido en la dirección z que en la SR 1D. A lo largo de la dirección radial, el material tanto del QD como de la matriz está más comprimidos en la SR 2D que en la SR 1D. Por tanto, ambos materiales están más expandidos en la dirección Z en la SR 2D que en la SR 1D. Estas Figuras resultan útiles para entender cómo evolucionaría la deformación al modificar las constantes de la superred. Si $a_{\text{SR}} \rightarrow \infty$, la SR 3D convergería a la SR 1D. Por otra parte, si $c_{\text{SR}} \rightarrow \infty$, el valor límite de la SR 3D lo constituiría la SR 2D. En el caso de la SR 3D se observa que las componentes de la deformación $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} toman, en general, un valor intermedio entre el obtenido para las SRs 1D y 2D. Finalmente, en la SR 3D libre el papel predominante de la matriz (sustrato) desaparece y se observa que el material del QD pasa a estar menos comprimido en el plano y el de la matriz experimenta una expansión mayor también en el plano a lo largo del eje Z y una compresión menor a lo largo de la dirección radial, i.e. su constante de red a aumenta. La diferencia no es tan grande en el caso de e_{zz} , aunque vemos que en general se reduce el parámetro de red c respecto del caso SR 3D.

El valor obtenido para la deformación $e_{\rho\rho}$ a lo largo del eje axial para la SR 3D libre, ver Fig. 2.23, puede ser relacionado con el correspondiente a una superred de QWs. En este sistema, el valor de la constante de red en el plano y por tanto $e_{\rho\rho}$ depende únicamente de la relación entre la cantidad de material del QW y la barrera, como vimos en la Ec. (2.70). Suponiendo una superred de QWs donde $d_{\text{QW}} = h_{\text{QD}} + d_{\text{WL}}$ y el periodo es igual a c_{SR} , obtenemos los siguientes valores para la deformación: $e_{\rho\rho}^{(I)} = -0.0127$ y $e_{\rho\rho}^{(M)} = 0.0117$. De la lectura de los resultados mostrados en la Figura 2.23 encontramos que la deformación en la SR 3D libre es: $e_{\rho\rho}^{(I)} = -0.0126$ y $e_{\rho\rho}^{(M)} = 0.0114$. Tras comparar ambos resultados concluimos que a lo largo del eje axial del QD la deformación en el plano de los materiales del QD y de la matriz puede ser estimada con una buena aproximación a partir de las ecuaciones sencillas (Ecs. (2.70)) que gobiernan la deformación en una SR de QWs infinita.

2.5. Comparación con resultados experimentales

En esta Sección vamos a comparar los resultados de la deformación que hemos ido obteniendo a lo largo de este Capítulo con medidas y estimaciones obtenidas a través de diferentes técnicas experimentales. Únicamente hemos considerado experimentos relativos al sistema GaN/AlN. Otros sistemas como el InAs/GaAs, Si/Ge,

...han sido estudiados más extensamente en otros trabajos [19, 122, 143]. Las técnicas experimentales que se suelen emplear para la medida (directa o indirecta) de la deformación son la microscopía de transmisión electrónica de alta resolución (en inglés “High Resolution Transmission Electron Microscopy”, HRTEM) [144, 145], la difracción de rayos X (en inglés, “X-Ray Diffraction”, XRD) [19, 145, 146], la dispersión de iones de energía media (en inglés “Medium Energy Ion Scattering”, MEIS) [147, 148, 149, 150] y la dispersión Raman [151, 152, 153]. Otra técnica que se suele emplear es la reflexión de electrones de alta energía difractados (en inglés, “Reflection High-Energy Electron Diffraction”, RHEED). Sin embargo, esta técnica se emplea *in situ* durante el crecimiento, por lo que ofrece unos valores de las constantes de red a la temperatura de crecimiento. Dado que ésta suele ser de $\gtrsim 700$ °C en el GaN/AlN, sería necesario tener en cuenta la corrección debido a la temperatura. En general, esta técnica resulta ser muy útil para seguir el proceso de crecimiento, aunque no tanto para realizar un estudio del estado de deformación definitivo del sistema. Una breve descripción sobre la aplicación de algunas de estas técnicas al estudio de QDs se puede encontrar en las Refs. [65]. No vamos a incluir tampoco los resultados relativos a la dispersión Raman en este trabajo, porque para ello sería preciso describir cómo afecta la deformación de un cristal a las frecuencias de los fonones de la red y eso exigiría un trabajo en sí mismo. No obstante, queremos mencionar que hemos empleado con éxito nuestro modelo en la interpretación de una serie de experimentos de dispersión Raman de superredes de QD realizados por nuestro grupo de investigación. Los detalles sobre dicho trabajo se pueden encontrar en la Ref. [153, 154].

En esta Sección nos centraremos en el análisis de los resultados experimentales obtenidos por V. Chamard *et al.* mediante las técnicas HRTEM y XRD [145] y por D. Jalabert *et al.* utilizando la técnicas MEIS [149].

2.5.1. Análisis de medidas de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución

La técnica HRTEM se ha revelado especialmente potente para el estudio de la forma del QD, de su composición y su estado de deformación. La principal ventaja que presenta sobre otras técnicas es que permite formar una imagen de la estructura tridimensional del sistema investigado. Esto es, no proporciona una imagen de barrido como la técnica de AFM o la microscopía electrónica de barrido (en inglés “Scanning Electron Microscopy”, STM). No obstante, esta ventaja coexiste con diferentes inconvenientes como son la complejidad de la preparación de la muestra [155] y la dificultad de la interpretación de los resultados [156]. El espesor de la

muestra no debe exceder de unas decenas de nanómetros para evitar la difracción inelástica de los electrones. Por consiguiente, es posible que el diámetro del QD sea comparable con el espesor de la muestra.

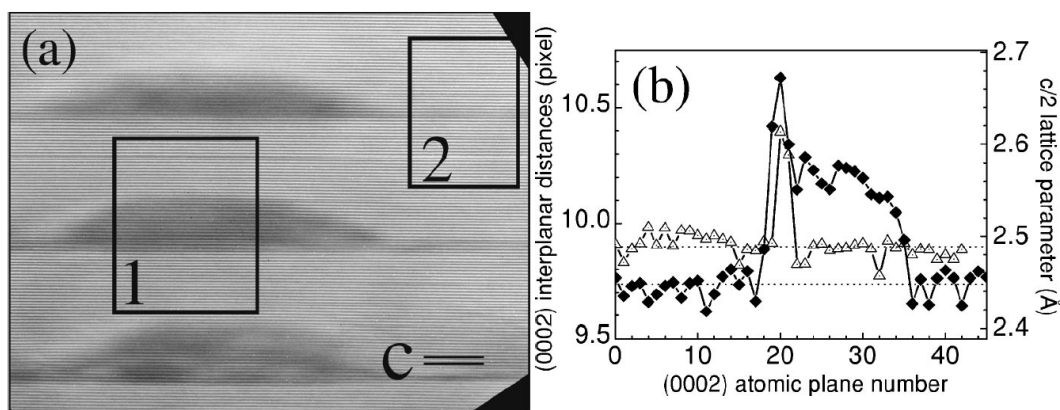


Figura 2.25: (a) Imagen HRTEM de un apilamiento de QDs. Solo los planos (0002) son visibles. Las distancias interplanares han sido referidas a las medidas de la zona inferior derecha. (b) Distancias interplanares de los cuadros de la imagen (a) medidas en pixels y en Å. Los rombos sólidos corresponden al cuadro izquierdo (1) y los triángulos blancos al cuadro derecho (2). Las líneas de puntos indican los valores promedio en la barrera de AlN. Imagen extraída de V. Chamard *et al.* [145].

En la mayoría de los trabajos relativos al estudio de QDs de GaN/AlN aparecen imágenes de HRTEM como parte de la caracterización estructural. En este Capítulo y en el anterior hemos visto algunos ejemplos. Sin embargo, dichas imágenes únicamente han sido analizadas en los trabajos de M. Arlery *et al.* [144] y V. Chamard *et al.* [145]. En este apartado nos centraremos en el análisis de los resultados obtenidos en el último de dichos trabajos. En la Figura 2.25 mostramos una imagen de HRTEM y el posterior análisis de las distancias interplanares de la familia de planos (0002) que permite la obtención de la constante de red c . Los recuadros que aparecen en el panel (a) indican las zonas que han sido estudiadas. En la gráfica del panel (b) se ha representado la distancia entre planos (medida en pixels) correspondiente a cada número de plano promediada en la anchura de cada recuadro. En la escala del eje derecho de ordenadas de la gráfica del panel (b), la distancia entre planos ha sido expresada en Å. En la transformación de pixels a Å se ha establecido como referencia la zona inferior derecha de la imagen del panel (a), donde el AlN se ha supuesto totalmente relajado. A la distancia interplanar se le ha asignado el espesor de una monocapa, i.e. $c_{\text{AlN}}/2 = 2.491 \text{ \AA}$.

Para realizar la comparación con nuestro modelo teórico hemos fijado en primer lugar los parámetros estructurales de estos QDs. Como ya se ha comentado con anterioridad, estos QDs exhiben una geometría de pirámide truncada de base hexag-

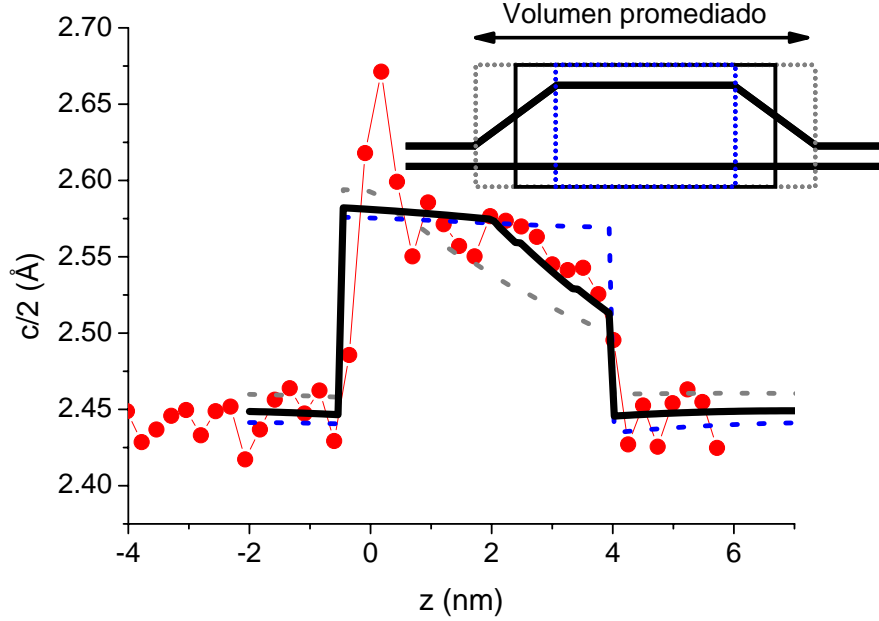


Figura 2.26: Resultados obtenido de nuestro modelo para $c/2$. La línea de puntos sólidos indica los puntos experimentales. Las líneas discontinuas y continua muestran el resultados de realizar diferentes promedios en el QD. En la Figura insertada hemos indicado con el mismo tipo de línea el área promediada.

onal. Por esta razón, en nuestro modelo representaremos los QDs a través de un cono truncado de dimensiones: $R_{\text{QD}} = 15.0$ nm, $R_{\text{Sup}} = 8.1$ nm y $h_{\text{QD}} = 4.0$ nm. También hemos considerado la presencia de una WL de espesor $d_{\text{WL}} = 0.5$ nm. En la Figura 2.26(a) no se distinguen QDs alrededor del analizado, por tanto hemos descrito el sistema a través de una SR 1D de periodo $c_{\text{SR}} = 10.0$ nm. En la Figura 2.26 mostramos los resultados del cálculo. Para intentar dar cuenta del área promediada en el cuadro 1 de la Figura 2.25(a) hemos calculado la constante de red \bar{c} promediando sobre una sección circular transversal al eje Z hasta un determinado radio R :

$$\bar{c} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^R \rho d\rho c(\mathbf{r}), \quad (2.71)$$

En la Figura 2.26 hemos representado con un trazo diferente los promedios obtenidos para tres valores de R : R_{Sup} , $(R_{\text{Sup}} + R_{\text{QD}})/2$ y R_{QD} . Para ilustrar gráficamente la región promediada, hemos incluido una Figura insertada con la proyección de los volúmenes considerados. Como se puede apreciar en la Figura, a medida que el volumen promediado incorpora más material de la barrera en su interior, la constante de red c tiende hacia el valor del AlN ($c^{\text{AlN}}/2 = 2.491$ Å). Resulta sorprendente comprobar el buen acuerdo entre los resultados experimentales y teóricos, lo cual

pone de manifiesto la idoneidad del modelo desarrollado para el estudio de este tipo de nanoestructuras. Sin embargo, debemos tener presente que efectos como la relajación de la muestra debido a su preparación [157], así como una posible desviación a consecuencia de que la zona de referencia no se hallase relajada podrían introducir cambios en los resultados mostrados. En cualquier caso no consideramos que éstos puedan resultar muy importantes.

2.5.2. Análisis de medidas de difracción de rayos-X

La técnica de difracción de rayos-X (XRD) es una de las clásicas dentro de la ciencia de materiales. En la bibliografía se pueden encontrar gran cantidad de trabajos en los que se han estudiado muestras de QDs de diferentes sistemas. En los artículos monográficos de J. Stangl *et al.* [65], M. Schmidbauer [158] y A. Krost [159] se puede encontrar mucha información relativa a la técnica aplicada a este tipo de nanoestructuras. En las técnicas de XRD, la distribución de intensidades se recoge en el espacio recíproco en lugar de ser recogida en el espacio real, y en muchos casos la interpretación de los experimentos requiere el empleo de modelos y la realización de ajustes. La penetración en la muestra viene a cubrir un rango comprendido entre varios nm y cientos de nm. Así pues, dependiendo de la geometría que se escoja es posible estudiar la superficie, o bien el interior de la muestra.

En esta Sección vamos a mostrar y analizar desde el punto de vista teórico los resultados obtenidos por V. Chamard *et al.* [145] sobre los mismos QDs del apartado anterior. Las medidas fueron realizadas en la configuración de incidencia rasante ajustando la energía de la radiación para observar la difracción anómala⁸. En la geometría de incidencia rasante la superficie es iluminada con un haz monocromático formando un ángulo α_i muy pequeño. Debido a que la parte real del índice de refracción es ligeramente inferior que la unidad para los rayos-X, existe un régimen de reflexión total para α_i menor que el ángulo crítico α_c , que depende de los materiales y de la energía de la radiación incidente. Sin embargo, la onda evanescente penetra en la muestra distancias del orden de unos 100 Å. Ajustado $\alpha_i > \alpha_c$, es posible controlar la longitud de penetración y por tanto gran cantidad de capas de QDs pueden ser analizadas. Con estos experimentos se obtienen espectros como los representados en las Figura 2.27(a).

⁸En los experimentos se sintoniza la energía del haz incidente con la del borde K del Ga. El objetivo es investigar la deformación en diferentes partes de la superred de QDs así como el contenido de Ga, aprovechando la sensibilidad química de la radiación dispersada.

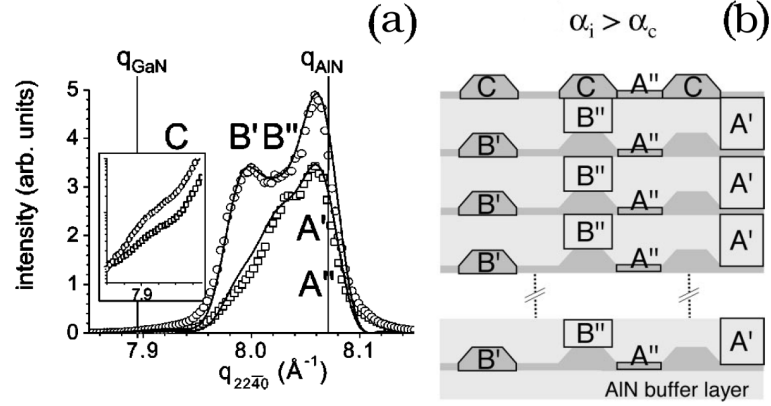


Figura 2.27: (a) Espectros de difracción de rayos x con incidencia $\alpha_i > \alpha_c$ de una muestra que consiste en un apilamiento de QDs de GaN/AlN, de manera que se obtiene información del volumen. Las letras que aparecen sobre los espectros corresponden a diferentes regiones del apilamiento. En el panel (b) hemos reproducido dicha correspondencia. Las figuras han sido extraídas de [145].

Para realizar el ajuste de los espectros de la Figura 2.27(a), los autores utilizan un modelo estructural en el que la intensidad dispersada se pone como función de un conjunto de parámetros que describen diferente zonas de la superred de QDs. Dichas zonas vienen indicadas por letras mayúsculas en la Fig. 2.27(b). Los parámetros del ajuste son la deformación promedio, el volumen y la composición química de cada una de esas regiones. A cada zona se le asigna una resonancia del espectro, pues representa un estado de deformación diferente. Nuestro objetivo en este apartado no es analizar en detalles dichos espectros, sino comparar los resultados obtenidos por los autores en relación al estado de deformación de la estructura con nuestro modelo. En el artículo original, la deformación está referida a la constante de red del AlN relajado. Para facilitar la comparación con los resultados de nuestro modelo teórico hemos transformado dichos valores de la deformación para referirlos a la constante de red de cada material, obteniendo los siguientes resultados:

Región	C	B'	B''	A'	A''
e_{xx} (%)	-0.55	-1.42	0.55	0.00	-2.40

Con nuestro modelo, podemos comparar los valores teóricos para uno o varios puntos cuánticos en el seno de una matriz infinita con los valores correspondientes a las regiones internas de la muestras, i.e. las regiones etiquetadas como A', A'', B' y B''. La región A' se corresponde con una zona de la matriz alejada de los QDs, por ello su deformación es cero, indicando un estado de relajación total. Por su parte, la región A'' representa la WL situada entre dos QDs y de ahí que su deformación

coincida con el desacuerdo de malla $e_a^{(0)} = -0.024$ característico de una lámina bidimensional (ver Ec. (2.60)). En adelante nos centraremos en el estudio de las regiones B' y B''.

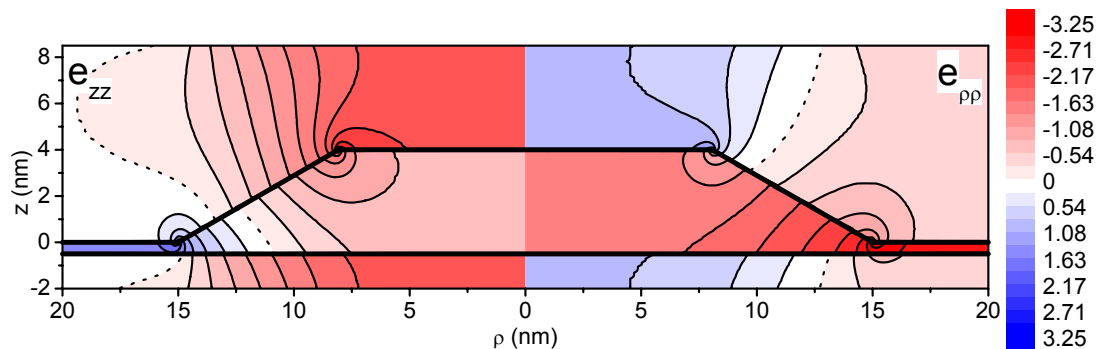


Figura 2.28: Deformación en un QD de GaN/AlN de las dimensiones observadas por V. Chamard *et al.*. A la derecha hemos representado e_{zz} y a la izquierda $e_{\rho\rho}$.

En la Figura 2.28 hemos reproducido los valores de $e_{\rho\rho}$ y e_{zz} para el punto cuántico descrito en el apartado anterior. Para comparar con los valores obtenidos de las medidas de XRD, hemos promediado la deformación en el volumen del QD y de la barrera, de acuerdo con:

$$\bar{e}_{ij} = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{av}}} \int_0^{c_{\text{SR}}} dz' \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho e_{ij}(\mathbf{r}) \chi_{\text{av}}(\mathbf{r}), \quad (2.72)$$

donde \mathcal{V}_{av} es el volumen de la región promediada, que podrá ser el QD o la barrera indistintamente, $\chi_{\text{av}}(\mathbf{r})$ es la función característica de la misma región y \mathcal{R} es un radio arbitrario utilizado para definir el volumen en el que promediar. Para este cálculo hemos fijado $\mathcal{R} = 20$ nm, coincidiendo con el máximo valor de x representado en la Figura. Los valores obtenidos al evaluar la integral (2.72) son:

$$\bar{e}_{xx}^{\text{QD}} = -1.53\%, \quad (2.73a)$$

$$\bar{e}_{xx}^{\text{BR}} = 0.42\%, \quad (2.73b)$$

para las regiones del QD y la barrera, respectivamente. Si ahora comparamos con la deformación en las regiones B' y B'', vemos que desde el punto de vista cualitativo el estado de deformación ha quedado bien descrito por nuestro modelo. Sin embargo, cuantitativamente nuestro modelo predice un estado de mayor compresión para el GaN y de mayor expansión para el AlN.

Para completar el análisis es preciso determinar si la muestra analizada por V. Chamard *et al.* podría quedar descrita más convenientemente a través de una

superred 3D o una superred 3D libre. A la luz de los resultados mostrados en la Figura 2.23(a) podemos decir que la superred 3D describe un estado de deformación que se aleja más de los hallados por V. Chamard *et al.*, pues el GaN aparece más comprimido y el AlN menos expandido que en la superred vertical. No sucede lo mismo para la superred 3D libre, que describe el GaN menos comprimido y el AlN más expandido, aproximándose a los valores obtenidos de las medidas XRD. A continuación consideraremos que la muestra de QDs puede ser considerada como una superred 3D libre. En el apartado anterior mencionamos las dimensiones que los autores asignaron a los QDs y a la separación vertical. Para describir la superred necesitamos estimar la separación entre QDs en el plano. A partir de la densidad de QDs $n_{\text{QD}} = 5.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$: $a_{\text{SR}} = b_{\text{SR}} = 50.0 \text{ nm}$. Podría parecer inconsistente recurrir a un apilamiento vertical para modelizar la imagen de HRTEM y a una superred tridimensional para los rayos-X. Sin embargo, tal inconsistencia es sólo aparente. Mientras que la imagen de HRTEM es especialmente sensible al entorno de un QD, los rayos-X tienen acceso a una gran proporción de la muestra. Para calcular el promedio de la deformación en el caso de la superred, en lugar de recurrir a la expresión (2.72), introduciremos la integral en la suma de la serie de Fourier de la Ec. (2.67). El promedio para el GaN será:

$$\begin{aligned} \bar{e}_{ij}^{\text{QD}} &= \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{QD+WL}}} \int_{\text{QD+WL}} e_{ij}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{QD+WL}}} \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{SR}}} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n) \int_{\text{QD+WL}} \exp(i\mathbf{q}_n \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{QD+WL}}} \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{SR}}} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n) \tilde{\chi}_{\text{QD+WL}}(-\mathbf{q}_n). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Para el AlN obtendremos una expresión similar:

$$\bar{e}_{ij}^{\text{BR}} = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{BR}}} \int_{\text{BR}} e_{ij}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{BR}}} \frac{1}{\mathcal{V}_{\text{SR}}} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{ij}(\mathbf{q}_n) \tilde{\chi}_{\text{BR}}(-\mathbf{q}_n), \quad (2.75)$$

Para obtener la función característica de la barrera bastará con recurrir a las propiedades lineales de la transformada de Fourier, que permiten deducir que:

$$\tilde{\chi}_{\text{BR}}(\mathbf{q}) = \tilde{\chi}_{\text{SR}}(\mathbf{q}) - \tilde{\chi}_{\text{QD+WL}}(\mathbf{q}). \quad (2.76)$$

Tras evaluar los sumatorios de (2.74) y (2.75) obtenemos como valores promedio: $e_{xx}^{\text{QD}} = -1.47\%$ y $e_{xx}^{\text{BR}} = 0.47\%$. Podemos comprobar que la discrepancia relativa entre los resultados teóricos y los experimentales de e_{xx}^{QD} se ha reducido a un 3.5%, mientras que el de e_{xx}^{BR} sigue siendo muy alto $\sim 20\%$.

Como conclusión, tanto las medidas de XRD como los cálculos de la deformación llevados a cabo con nuestro modelo predicen que el material de los QDs alejados de la superficie está comprimido en el plano y que el material de la barrera localizada entre los mismos QDs está expandida en el plano. Hemos encontrado que, de las diferentes superredes que podrían describir la muestra analizada por V. Chamard *et al.* la superred 3D libre definida en la Sección 2.4 es la que mejor reproduce los valores numéricos. Aunque hemos hallado un buen acuerdo para la componente e_{xx} en el interior del QD, no ha sucedido lo mismo para el valor de la misma componente en la barrera. En general, siempre es más complicado describir el estado de deformación de la barrera correctamente, por ser éste el material mayoritario, y ser susceptible de albergar en su interior un mayor número de defectos cristalinos. En cualquier caso, si dispusiésemos de una mayor información estructural es posible que se pudiese mejorar el acuerdo. Finalmente, también hay que tener presente que V. Chamard *et al.* han determinado la deformación recurriendo a un modelo teórico para ajustar los espectros de difracción de rayos-X, y, en consecuencia, los valores de las medidas de XRD también pueden presentar un error.

2.5.3. Análisis de medidas de dispersión de iones de energía media

En los dos apartados anteriores hemos presentado valores de la deformación de un QD obtenidos a través de dos técnicas experimentales diferentes. Mediante la microscopía HRTEM vimos que era posible determinar la constante de red c y mediante XRD la constante a . La técnica que describiremos a continuación permite acceder a la ratio c/a , por lo que complementará los resultados obtenidos en apartados anteriores. En la dispersión de iones de energía media (MEIS) se hacen incidir sobre el material a estudiar haces monocromáticos de iones ligeros (típicamente H^+ y He^+ , de ~ 100 keV de energía). La energía y el ángulo de los iones dispersados por el material son medidos simultáneamente, con lo que se puede conseguir información relativa a la composición química y a la estructura cristalina de la muestra. Dado que esta técnica se ha empleado sólo esporádicamente en el estudio de nanoestructuras semiconductoras, haremos una breve introducción a la misma.

Descripción de la técnica MEIS

En la Figura 2.29 se pueden apreciar las partes más importantes de una estación empleada para la realización de este tipo de experimentos. En la parte derecha se puede identificar la fuente de iones junto con el generador que lo alimenta. En la zona intermedia se realiza el guiado y colimación del haz de iones. Finalmente en la parte izquierda se encuentra la estación experimental, donde se prepara la muestra y tiene lugar la dispersión de los iones.

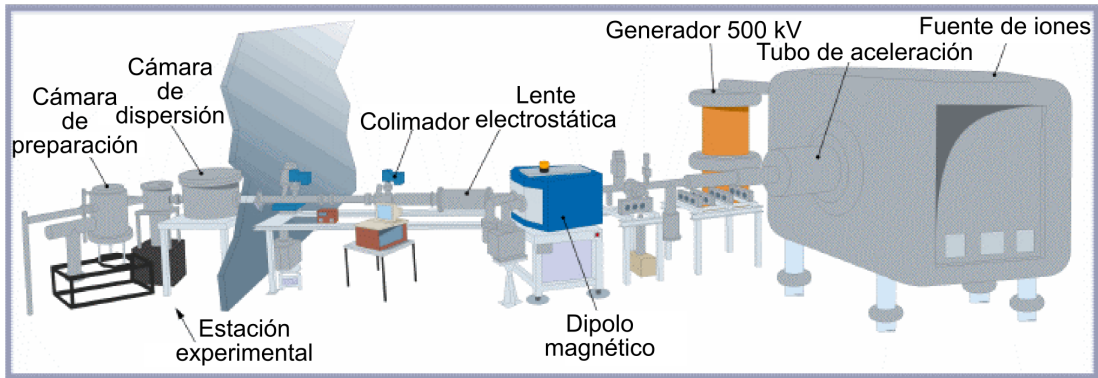


Figura 2.29: Esquema del montaje experimental de la línea MEIS de la Universidad de Daresbury.

En general, los iones incidentes poseen una velocidad mucho mayor que las velocidades de vibración de los átomos del material. Por tanto, las colisiones pueden interpretarse como eventos de dispersión entre los iones y los núcleos “congelados” en sus posiciones de equilibrio. La energía de los iones dispersados depende tanto de la masa del ion incidente (M_{ion}), como de la masa de las especies atómicas presentes en el material ($M_{\text{núcleos}}$). Es posible relacionar la energía de los iones dispersados con la energía de los iones incidentes a través de una constante de proporcionalidad:

$$E = k(M_{\text{ion}}, M_{\text{núcleos}}, \theta) E_0, \quad (2.77)$$

donde E es la energía de los iones dispersados, E_0 es la de los iones incidentes y k es la mencionada constante, denominada factor de dispersión cinemático, que depende de M_{ion} , $M_{\text{núcleos}}$ y del ángulo de dispersión θ [160]. Si en el material existen especies atómicas de masas diferentes, cada una de ellas tendrá asignado un k diferente, por lo que al discriminar la energía del haz dispersado será posible realizar un análisis químico de la muestra. Por otro lado, los iones pierden energía de forma continua al ir atravesando la muestra. Al realizar una detección suficientemente precisa de la energía es posible relacionar la energía del haz detectado con la profundidad a la cual se ha producido la dispersión: $\Delta E = (dE/dz)\Delta z$, donde z es la coordenada

que indica la profundidad y (dE/dz) es la pérdida de energía por unidad de longitud debida a colisiones inelásticas. Este efecto permite extraer información estructural en función de la profundidad.

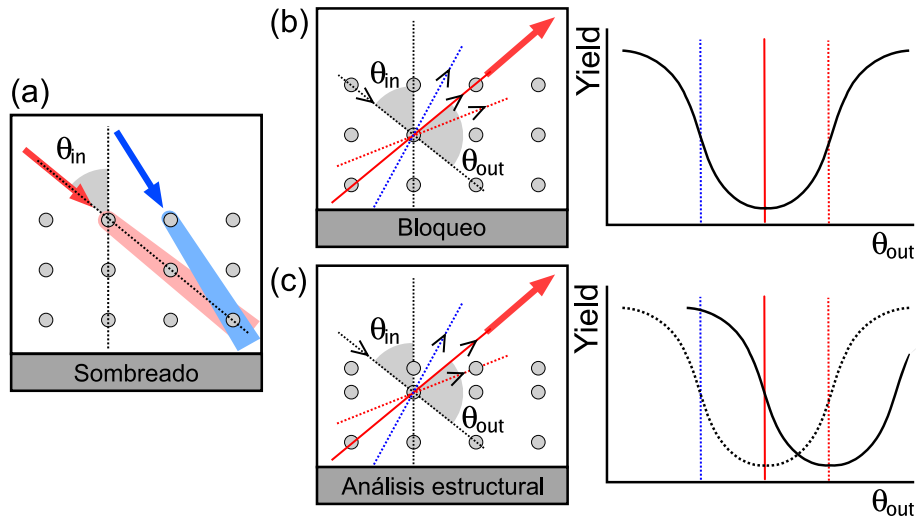


Figura 2.30: Diferentes procesos de dispersión de iones de la geometría elegida: (a) proceso de sombreado indicado para dos posibles ángulos de incidencia, (b) proceso de bloqueo y (c) desplazamiento del ángulo de bloqueo debido a una modificación estructural.

Finalmente falta describir cómo se consigue determinar el estado de deformación del material. Para ello se deben posicionar convenientemente el haz incidente y el haz dispersado con las direcciones cristalográficas del material. En la Figura 2.30 hemos reproducido esquemáticamente los aspectos más relevantes relativos al alineamiento del haz incidente y del detector. En el panel (a) podemos ver el proceso de sombreado (*shadowing*). Al alinear el ángulo de incidencia θ_{in} con una de las direcciones cristalográficas del cristal, los primeros planos de átomos proyectan su sombra sobre los planos más profundos, de forma que la señal registrada vendrá de la región de la superficie. Si por el contrario esta dirección no coincide con ninguna de las cristalográficas, más planos son irradiados y la señal contendrá información de un espesor mayor de la muestra. Hemos ilustrado el proceso de bloqueo (*blocking*) en la Figura 2.30(b). En este proceso interviene el ángulo de detección θ_{out} . Una vez θ_{in} ha sido fijado, al variar θ_{out} se puede apreciar una “sombra” (también llamada “blocking dip”) en la radiación dispersada cuando este ángulo hace que el detector este alineado con una dirección cristalográfica. En la gráfica situada a la derecha hemos reproducido esquemáticamente el espectro que se obtiene al variar dicho ángulo. Finalmente, es posible detectar cambios estructurales de la zona irradiada aprovechando el efecto de bloqueo. En el panel (c) hemos repre-

sentado una situación en la que la muestra ha experimentado una reducción de la distancia entre los dos primeros planos. En estas condiciones el bloqueo se observa a un ángulo θ_{out} diferente. Estudiando la posición del ángulo de bloqueo es posible extraer información sobre el estado de deformación de la muestra.

Esta técnica ha sido empleada extensamente en el estudio de superficies [161] y menos en el estudio de nanoestructuras como hilos cuánticos [148] y puntos cuánticos [147]. Los diferentes aspectos que hemos descrito hasta ahora serán suficientes para poder comprender el estudio realizado en QDs de GaN/AlN por D. Jalabert *et al.* [149] en el que nuestro grupo de investigación ha colaborado en la interpretación teórica de los resultados experimentales.

Estudio de puntos cuánticos de GaN/AlN mediante MEIS

Los experimentos se realizaron sobre tres muestras de puntos cuánticos, que se diferenciaban en el espesor de la capa empleada para recubrir las nanoestructuras. En la Figura 2.31 hemos realizado un esquema de las diferentes partes de dichas muestras. Los detalles del crecimiento se pueden encontrar en la Ref. [149]. Resulta conveniente mencionar que el AlN depositado sobre los puntos cuánticos de GaN crea una capa mojante que los recubre de forma uniforme [162]. No se han observado cambios estructurales apreciables en las nanoestructuras durante el recubrimiento, y, por tanto, es factible asumir que su geometría no experimenta diferencias apreciables en las tres muestras. En el sistema InAs/GaAs, por otra parte, sí se observan cambios morfológicos al recubrir con el material de la barrera, dando lugar a nanoestructuras ciertamente exóticas [10, 163].

La caracterización estructural de los QDs se ha realizado por AFM sobre la muestra sin recubrir. La altura de los puntos cuánticos observada es igual a 3.0 ± 0.5 nm, el radio de la base es 6.5 ± 0.5 nm y la densidad de puntos 1.2×10^{11} cm⁻². La geometría adoptada para la realización de los experimentos de MEIS se puede observar en la Figura 2.32. El ángulo de incidencia fue de $\theta_{\text{in}} \sim 7^\circ$ respecto de la dirección [0001] y la detección se realizó en un rango de $\theta_{\text{out}} (= \theta_{\text{Ga}}) \pm 10^\circ$ alrededor de la dirección $[\bar{1}\bar{1}01]$ en el plano $(11\bar{2}0)$.

En la Figura 2.33 hemos reproducido los espectros obtenidos en el experimento realizado sobre la muestra sin recubrir. En el panel (a) podemos observar una representación bidimensional de la intensidad detectada en función de E y de θ_{out} . Las dos flechas indican la localización de los umbrales energéticos asociados al Ga (GaN) y al Al (AlN). Éstos están relacionados con el factor cinemático k descrito más arriba. Por debajo de los valores umbrales, la pérdida de energía indica que se están analizando regiones situadas a una profundidad creciente. La

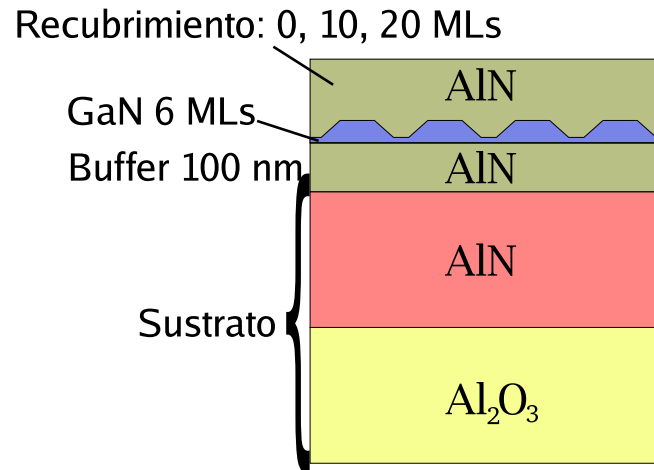


Figura 2.31: Diferentes partes que componen las muestras analizadas por D. Jalabert *et al.* [149]. Las tres muestras se diferencian inicialmente en el espesor de la capa de AlN empleada en el recubrimiento.

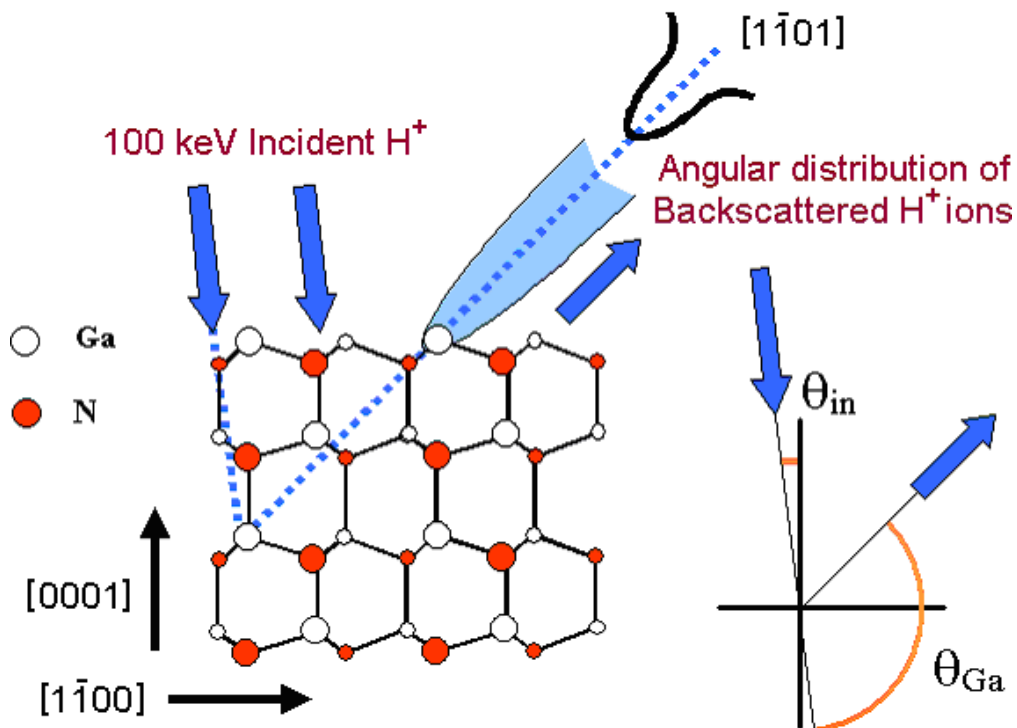


Figura 2.32: Esquema de la geometría de dispersión en un experimento de MEIS. El plano de dispersión adoptado es el (1120). El ángulo θ_{Ga} es equivalente al ángulo θ_{out} que hemos utilizado en la descripción general de la técnica MEIS.

línea discontinua sirve de guía visual para poder comparar el ángulo de bloqueo del AlN con el correspondiente al GaN. La desviación respecto de la línea discontinua que se produce en la región del GaN pone en evidencia la existencia de un gradiente de deformación en los puntos cuánticos de GaN a diferentes profundidades. Para visualizar mejor este efecto en el panel (b) se muestran los espectros angulares de la región del GaN para el rango de energía comprendido entre 96 530 eV y 94 339 eV, que se corresponde con la zona marcada con un recuadro en el panel (a). La energía 96 530 eV se asocia a la superficie libre de los QDs y la energía 94 339 eV a la intercara GaN/AlN en la base de los QDs. Es posible apreciar claramente el desplazamiento del ángulo de bloqueo en el GaN, que se atribuye al estado de deformación del punto cuántico.

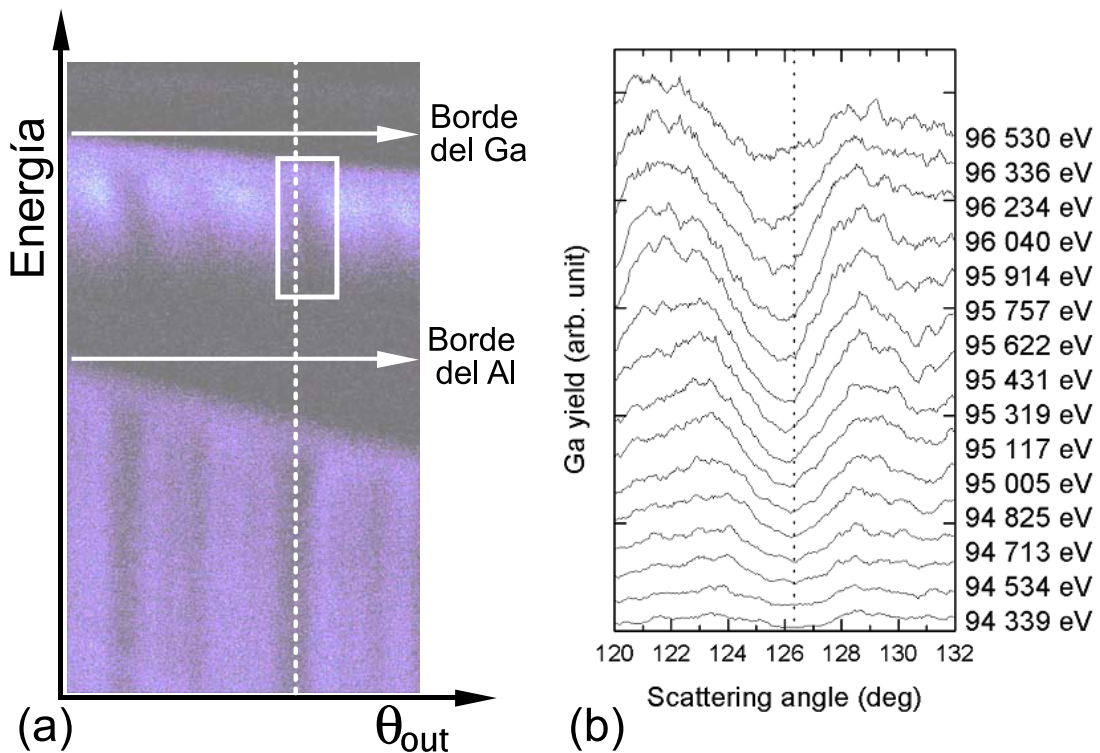


Figura 2.33: (a) Representación del número de iones dispersados en función de la energía y del ángulo de detección, para el caso de la muestra sin recubrimiento. Las zonas más claras representan una intensidad mayor. Figura extraída de la Ref. [150]. (b) Espectros angulares registrados para el rango de energías comprendido entre 96 530 eV (superficie de los QDs) y 94 339 eV (intercara GaN/AlN), que se corresponden aproximadamente con el recuadro mostrado en el panel (a). La línea de puntos indica es una guía visual para comparar el bloqueo en la región del GaN con el del AlN.

La deformación de la nanoestructura se puede cuantificar a través de la ratio c/a , que se obtiene a partir de θ_{out} en la dirección $[1\bar{1}01]$ haciendo uso de la siguiente

expresión:

$$\tan\left(\theta_{\text{out}} + \theta_{\text{in}} - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{c}{a\sqrt{3}}. \quad (2.78)$$

Por tanto, la medida del ángulo de bloqueo característico del Ga en función de la energía permite determinar la deformación en los QDs a diferentes profundidades a lo largo de la dirección de crecimiento. Es preciso aclarar que esta técnica proporciona un valor de c/a promediado en el plano de crecimiento.

En la Figura 2.34 mostramos los resultados experimentales de c/a para distintos valores de E . Estos valores es posible relacionarlos con la profundidad a través del factor dE/dz que discutimos más arriba. Como se puede apreciar, en las tres muestras analizadas la altura de la nanoestructura así estimada arroja un valor mayor que el medido por AFM. En las tres muestras se observa que la ratio c/a tiene un valor ~ 1.67 en la zona de la intercara GaN/AlN, i.e. en la base de la WL, y de forma monótona se aproxima hacia el valor correspondiente al GaN no deformado, llegando incluso a rebasarlo.

En la Figura 2.34(a) el valor experimental representado a través de un símbolo cuadrado es atribuido a la WL. Efectivamente coincide muy aproximadamente con el valor teórico correspondiente a una relajación de tipo biaxial (ver Ec. (1.54)):

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{1 + q e_a^{(0)}}{1 + e_a^{(0)}}\right) \frac{c_0}{a_0}, \quad (2.79)$$

donde a_0 y c_0 son las constantes de red del material relajado, $q = -C_{13}/C_{33}$, y $e_a^{(0)} = -0.024$. Sustituyendo los valores de las constantes elásticas del Apéndice A se obtiene $c/a = 1.69$, que compara muy bien con los resultados experimentales.

Análisis de los resultados experimentales mediante cálculos teóricos

Para profundizar en el análisis de los resultados mostrados en la Figura 2.34 vamos a estudiar la deformación en los puntos cuánticos de las muestras esquematizadas en la Figura 2.31 con ayuda del modelo desarrollado en la Sección 2.2. Hay que advertir que, debido a las condiciones de contorno consideradas al aplicar el método de las inclusiones de Eshelby, la matriz que rodea a la inclusión se extiende infinitamente, y por tanto los efectos de relajación de la superficie libre de la muestra no pueden ser contemplados.

Para obtener la variación de las constantes de red con la posición hemos supuesto que éstas se pueden obtener a partir del tensor de deformaciones de

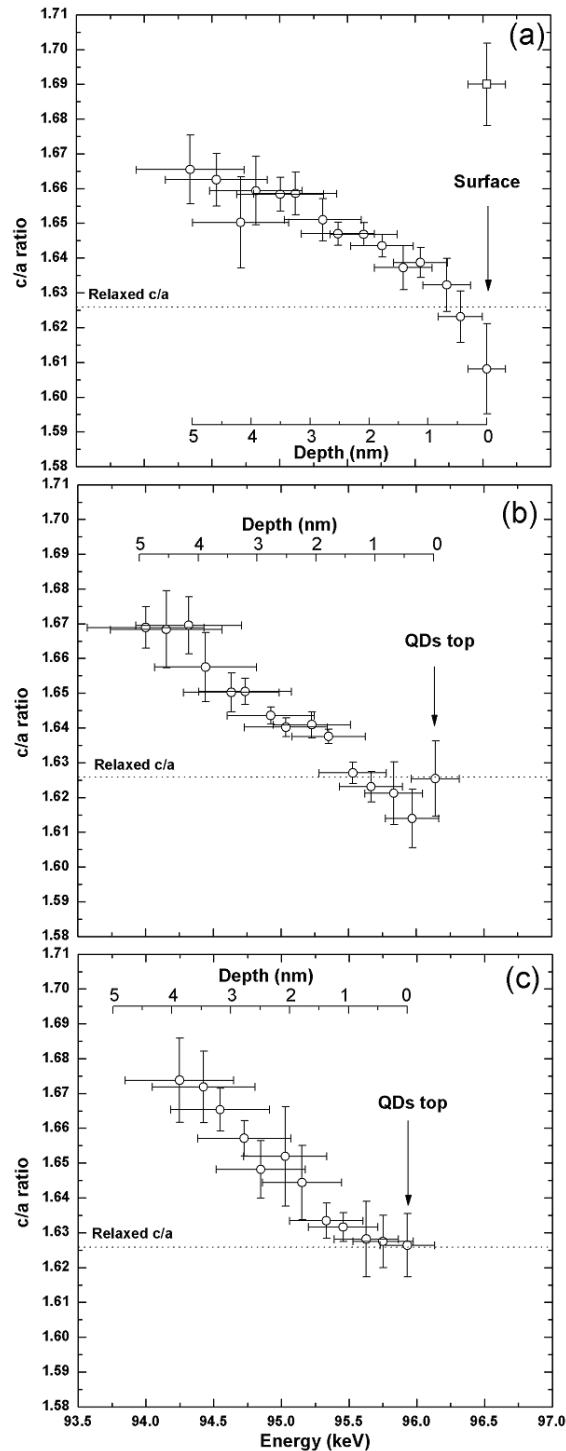


Figura 2.34: Parámetro de red c/a representado en función de la profundidad para la muestra sin cubrir (a) y las que presentan un recubrimiento de 10 MLs (b) y 20 MLs (c). La línea de puntos indica el valor de c/a correspondiente al GaN no deformado. El símbolo cuadrado en (a) situado en 96.5 keV, corresponde al ángulo de bloqueo atribuido a la WL.

la siguiente forma:

$$a(\mathbf{r}) = [1 + e_{\rho\rho}(\mathbf{r})] a_0 \quad (2.80)$$

$$c(\mathbf{r}) = [1 + e_{zz}(\mathbf{r})] c_0 \quad (2.81)$$

A partir de estos valores es posible obtener c/a y estudiar como varía esta ratio en función de la posición en el interior del QD.

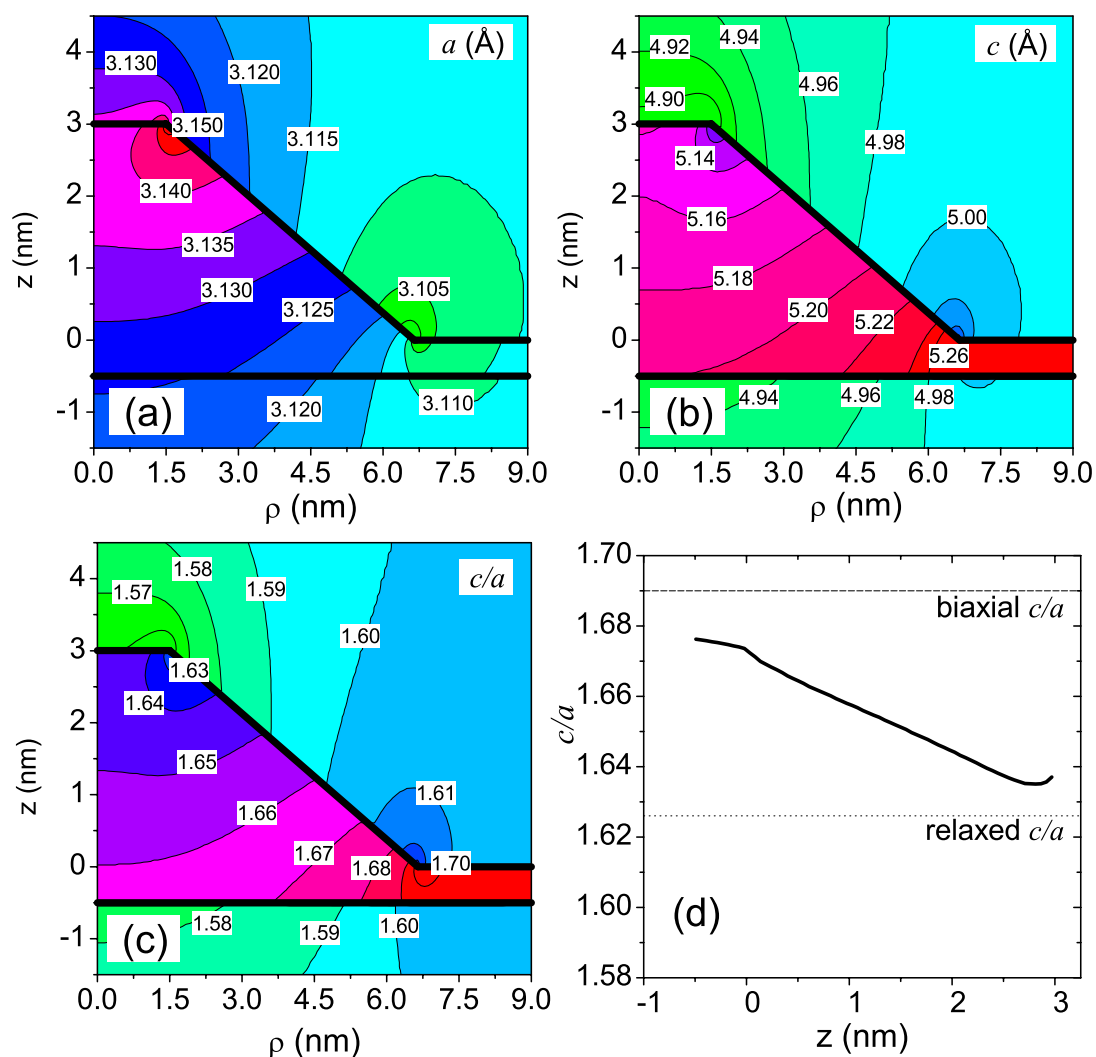


Figura 2.35: Representación bidimensional de contornos de las constantes de red a , (a), y c , (b). En el panel (c) se ha representado la ratio c/a y en el (d) el promedio en el interior del QD para cada valor de z . Téngase en cuenta que $a^{\text{GaN}} = 3.189 \text{ \AA}$ y $c^{\text{GaN}} = 5.185 \text{ \AA}$.

En la Figura 2.35 hemos mostrado los resultados para el QD descrito más arriba. Hemos considerado un único QD, ya que, como vimos en la Figura 2.22, la

deformación de los QDs situados en un mismo plano no tiene un efecto importante. En la Figura podemos reconocer una vez más el comportamiento de la deformación descrito en Secciones anteriores. La constante de red a está comprimida en el interior del QD, mientras que la constante de red c aparece expandida en la base y se va comprimiendo al acercarnos a la superficie superior. Para establecer una comparación más directa con los resultados experimentales de la Figura 2.34 hemos representado en el panel (d) el valor de c/a promediado en la región del QD de GaN para diferentes posiciones en el eje Z . El promedio ha sido calculado sobre secciones transversales perpendiculares al mismo eje, esto es:

$$\overline{\left(\frac{c}{a}\right)} = \frac{1}{\pi R(z)^2} \int_0^{2\pi} d\theta' \int_0^{R(z)} \rho d\rho \frac{c(\mathbf{r})}{a(\mathbf{r})}. \quad (2.82)$$

Debemos tener presente que al llegar a la zona de la WL, $0 > z \geq -0.5$, el radio $R(z)$ se hace infinito, por tanto tendremos una indeterminación en la evaluación de $\overline{(c/a)}$ en esa región. Sin embargo, ya hemos visto que el resultado experimental específico de la WL está de acuerdo con el valor obtenido a través de la expresión (2.79), por lo que resulta razonable hacer una distinción entre la región de la WL alejada de los QDs y la región de la WL situada justo debajo de los mismos. Hemos considerado que integrando hasta $R(z)$ igual a 9.0 nm se obtiene un buen valor para representar a la región de la WL próxima al QD. En la Figura 2.35(d) es posible distinguir esa región en la zona analizada, correspondiendo con la región de mayor profundidad, i.e. menor energía. El valor obtenido no coincide con el valor biaxial a consecuencia de la presencia del QD. Es posible reconocer una región similar en los resultados experimentales de la Figura 2.34. Por otro lado, al aproximarnos a la superficie superior del QD, vemos que el valor de $\overline{(c/a)}$ decrece monótonamente acercándose al valor correspondiente al GaN no deformado, $c/a = 1.63$. Sin embargo, de los valores de a y c mostrados en las Figuras 2.35(a) y 2.35(b), respectivamente, se puede concluir que en realidad el material no está relajado en esa región. Vemos entonces que recurriendo a un modelo para la distribución de la deformación ha sido posible descartar la hipótesis de que la tendencia de $c/a \rightarrow 1.63$ represente una relajación total del GaN en la superficie superior del QD. Debemos mencionar que el valor calculado es siempre mayor que el observado experimentalmente. Atribuimos este desacuerdo, principalmente, a los efectos de relajación de la superficie libre, los cuales no pueden ser reproducidos por nuestro modelo. Obsérvese que en los resultados experimentales dicho valor de $\overline{(c/a)}$ va aumentando con el recubrimiento, lo cual permite pensar que el acuerdo entre la teoría y el experimento podría alcanzarse para una muestra con un recubrimiento mayor. Por otra parte, debemos tener presente que aunque los QD estén libres de

dislocaciones [55], su nucleación se da preferentemente en las proximidades de estos defectos y podrán darse ciertas desviaciones respecto de la deformación intrínseca, que contribuirá a la discrepancia con el modelo teórico.

Hemos visto que la técnica de MEIS se pueden considerar como una herramienta extraordinariamente útil en el estudio de la deformación de SAQDs. Entre las principales ventajas que presenta está técnica frente a las otras analizadas, tenemos que la muestra no requiere de un tratamiento especial y que el análisis de los espectros resulta ser sencillo. A esto se añade la posibilidad de medir los espectros angulares *in situ* durante el crecimiento, con lo que su empleo junto con la técnica RHEED, ofrece una descripción muy detallada del crecimiento epitaxial de semiconductores. Por otra parte, hemos confirmado nuevamente la idoneidad del modelo desarrollado en este capítulo para la interpretación de resultados experimentales en los que la deformación juega un papel destacado.

2.6. Formulación y resolución del problema de la distribución del potencial interno

Como discutimos en la introducción de este Capítulo, el término potencial electrostático interno, o simplemente potencial interno, hace referencia al potencial debido a la polarización piezoeléctrica y a la polarización espontánea. Por lo tanto, otras posibles fuentes de potencial como son impurezas, dopaje, contactos, etc. . . quedarán fuera del estudio realizado en este trabajo. En el Capítulo 1 vimos que dependiendo de la clase cristalina a la que pertenece un material, éste es capaz de exhibir diferentes propiedades, entre las que se encuentran la piezoelectricidad y la posible presencia de una polarización espontánea. Los materiales con estructura cristalina tipo zincblenda únicamente presentan propiedades piezoeléctricas, mientras que aquellos con estructura cristalina tipo wurtzita pueden presentar además una polarización espontánea.

2.6.1. Polarización en semiconductores tipo zincblenda y wurtzita

La polarización se define en la teoría del electromagnetismo como la densidad volúmica de momentos dipolares eléctricos presentes en un material. Pese a ser un concepto fundamental en la ciencia de materiales, no se ha conseguido dar una descripción microscópica precisa hasta la década de los noventa. No obstante, en este

trabajo no realizaremos una descripción de la teoría moderna de la polarización. El lector interesado puede consultar los trabajos pioneros de R. Resta [164], y R. D. King-Smith y D. Vanderbilt [165], así como al artículo monográfico [166].

En todo momento consideraremos que la polarización macroscópica es una propiedad del semiconductor masivo, representada como una magnitud vectorial definida por tres componentes, P_i . En adelante denotaremos la polarización espontánea por \mathbf{P}^{SP} , y la polarización piezoeléctrica por \mathbf{P}^{PZ} , de forma que la polarización total resultará de la adición de las dos: $\mathbf{P}^{\text{Tot}} = \mathbf{P}^{\text{SP}} + \mathbf{P}^{\text{PZ}}$. Mientras que en este trabajo \mathbf{P}^{SP} va a considerarse que es un parámetro, i.e. su valor no va a ser calculado por nosotros, \mathbf{P}^{PZ} puede ser calculada a partir de la deformación derivada en la Sección 2.1. En el marco del modelo electromecánico semiacoplado [70, 167] \mathbf{P}^{PZ} guarda una relación de proporcionalidad con la deformación a través de la siguiente expresión:

$$P_i^{\text{PZ}} = \epsilon_{ikl} e_{kl}, \quad (2.83)$$

donde ϵ_{ikl} son las constantes piezoeléctricas, que se transforman como un tensor de rango tres. Alternativamente, se puede expresar la polarización piezoeléctrica en función del tensor de tensiones:

$$P_i^{\text{PZ}} = d_{ikl} \sigma_{kl}, \quad (2.84)$$

donde d_{ikl} son los módulos piezoeléctricos. Las constantes piezoeléctricas se pueden determinar a partir de los módulos piezoeléctricos y de las constantes elásticas como:

$$\epsilon_{ikl} = d_{imn} C_{mnkl}. \quad (2.85)$$

En el cálculo de problemas particulares es más práctico reducir el número de índices de los tensores piezoeléctricos. Para ello recurriremos a la notación de Voigt [70], que ya fue introducida en la definición de las constantes elásticas de la Sección 2.2, que permite transformar una notación tensorial en otra matricial. El primer índice de las constantes o módulos piezoeléctricos es el mismo en las dos notaciones, y el segundo y tercer índices son reemplazados en la nueva notación por un único índice que varía de 1 a 6, de acuerdo con:

$$\begin{array}{l|cccccc} \text{notación tensorial} & 11 & 22 & 33 & 23,32 & 31,13 & 12,21 \\ \text{notación matricial} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}.$$

Por ejemplo, con esta definición tendremos que la primera componente de la po-

	Zincblenda	Wurtzita
\mathbf{P}^{SP}	0	P_3^{SP}
\mathbf{P}^{PZ}	ϵ_{14}	$\epsilon_{31} = \epsilon_{32}, \epsilon_{33}, \epsilon_{15} = \epsilon_{24}$

Tabla 2.2: Parámetros que definen la polarización en semiconductores tipo zincblenda y wurtzita.

larización se escribirá como:

$$P_1^{\text{PZ}} = \epsilon_{11}e_1 + \epsilon_{12}e_2 + \epsilon_{13}e_3 + \epsilon_{14}e_4 + \epsilon_{15}e_5 + \epsilon_{16}e_6 \quad (2.86)$$

$$= d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + d_{16}\sigma_6. \quad (2.87)$$

La polarización queda expresada en forma compacta como:

$$P_i^{\text{PZ}} = \epsilon_{ij}e_j = d_{ij}\sigma_j. \quad (2.88)$$

Nótese que $\epsilon_{im} = \epsilon_{ijk}$, pero:

$$\begin{cases} d_{im} = d_{ijk} & \text{si } m = 1, 2, 3 \\ d_{im} = 2d_{ijk} & \text{si } m = 4, 5, 6 \end{cases}. \quad (2.89)$$

Esto es debido a la diferencia en la definición de los vectores e_j y σ_j en la notación de Voigt, ver Ec. (2.25) en la Sección 2.2. Este criterio es el más extendido y, en efecto, es utilizado por un gran número de autores dentro del área de nanoestructuras semiconductoras. Por ejemplo, M. Grundmann *et al.* [124], G. Bester y A. Zunger [168], A. Andreev y E. P. O'Reilly [118], y F. Bernardini y V. Fiorentini [169]. Sin embargo, este criterio no es único, ya que el factor 2 se puede introducir también en la definición de ϵ_{ijk} , y por consiguiente ya no se emplea la notación de Voigt. Este criterio es el adoptado por I. Vurgaftman *et al.* [95], y V. A. Fonoberov y A. A. Balandin [170]. Por tanto, es importante conocer qué criterio se ha seguido en la determinación de las constantes piezoeléctricas tabuladas para calcular correctamente el término dependiente de las componentes de la deformación de cizalla. En este trabajo adoptaremos de forma consistente la notación de Voigt, al igual que hicimos en el estudio de la deformación.

Hemos visto que en la definición de la polarización piezoeléctrica intervienen las constantes o módulos piezoeléctricos y que éstos se representan mediante un tensor de rango tres. Eso implica que, en principio, existen 27 componentes independientes. Sin embargo, debido a las simetrías $e_{kl} = e_{lk}$ y $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$, se debe verificar que $\epsilon_{ikl} = \epsilon_{ilk}$ y $d_{ikl} = d_{ilk}$. Por consiguiente, el número de componentes independientes se reduce a 18. Una posterior reducción se consigue en base a los elementos

de simetría característicos de cada una de las clases cristalinas [70]. En la Tabla 2.2 hemos recogido las constantes piezoeléctricas independientes para los dos tipos de semiconductores que estamos estudiando. La polarización espontánea posee, en principio, tres componentes independientes. Sin embargo, se puede demostrar mediante consideraciones de simetría que para la zincblenda las tres componentes son exactamente nulas, y para la wurtzita, únicamente una de ellas, la componente paralela al eje uniaxial [0001], es no nula. De acuerdo con lo expuesto tendremos que la polarización para la zincblenda resulta:

$$\begin{pmatrix} P_1^{\text{Tot}} \\ P_2^{\text{Tot}} \\ P_3^{\text{Tot}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \epsilon_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{14} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{13} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

y para la wurtzita:

$$\begin{pmatrix} P_1^{\text{Tot}} \\ P_2^{\text{Tot}} \\ P_3^{\text{Tot}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_3^{\text{SP}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_{15} & 0 & 0 \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{31} & \epsilon_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{13} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \quad (2.91)$$

2.6.2. Polarización en un punto cuántico

El potencial interno debido a la polarización tiene un efecto muy importante sobre la estructura electrónica de los SAQDs basados en GaN/AlN, tal y como veremos en el Capítulo 3 [82, 118, 171] y es por ello que es preciso disponer de un modelo realista para calcular dicha distribución del potencial. En el sistema InAs/GaAs, sin embargo, las constantes piezoeléctricas son aproximadamente un orden de magnitud inferiores a las del GaN/AlN, con lo que el potencial interno pasa a tener una importancia menor en la descripción de los estados electrónicos confinados. De hecho, en la gran mayoría de los trabajos teóricos sobre SAQDs de InAs/GaAs el potencial piezoeléctrico se considera despreciable en primera aproximación. En adelante consideraremos que el potencial interno en SAQDs basados en InAs/GaAs es despreciable y nos centraremos en el estudio de dicho potencial en SAQDs de GaN/AlN.

Hemos visto que la polarización en materiales tipo wurtzita queda definida a través de la expresión (2.91). En el problema de un punto cuántico es preciso tener en cuenta la presencia de las intercaras que definen la heteroestructura. Por tanto, en principio, hay que expresar las componentes de la polarización en función de los parámetros de los materiales constituyentes mostrados en la Tabla 2.2:

$$P_3^{\text{SP}}(\mathbf{r}) = P_3^{\text{SP}(M)} + (P_3^{\text{SP}(I)} - P_3^{\text{SP}(M)})\chi(\mathbf{r}), \quad (2.92)$$

$$P_i^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{ijk}^{(M)} e_{jk}(\mathbf{r}) + \underbrace{(\epsilon_{ijk}^{(I)} - \epsilon_{ijk}^{(M)})}_{\delta\epsilon_{ijk}} e_{jk}(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}), \quad (2.93)$$

donde hemos empleado los superíndices M e I para indicar los parámetros de la matriz o barrera, e inclusión o QD, manteniendo con ello la coherencia con la notación empleada en la Sección 2.1.

En la Figura 2.36 hemos representado $\mathbf{P}^{\text{PZ}}(\mathbf{r})$ calculada a partir de la Ec. (2.93) para un punto cuántico con geometría de cono truncado y dimensiones: $h_{\text{QD}} = 3.6$ nm, $R_{\text{QD}} = 8.3$ nm y un ángulo entre la base y la superficie lateral de $\alpha = 30^\circ$. La ratio $r_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}}$ correspondiente a esta geometría es 2.3. Este valor también se utilizará en el estudio de la estructura electrónica de QDs de GaN/AlN que realizaremos en el Capítulo 3, y por tanto los resultados de esta Sección, podrán ser aprovechados en la discusión de los resultados de la estructura electrónica de los QDs. Los contornos de la Figura 2.36 representan el valor absoluto de la polarización y las flechas su dirección y su sentido. Por ser la polarización proporcional a la deformación, tendremos que la gráfica es independiente de la escala escogida en la representación. Vemos que el valor máximo de la polarización en el interior del QD se localiza en la región de contacto entre las superficies inferior y lateral del QD. Dicho valor se reduce en dirección al eje del QD y hacia la superficie superior. En la barrera, la polarización es mayor en las superficies superior e inferior del QD y disminuye al considerar puntos cada vez más alejados de la heteroestructura. En la zona próxima al eje, el vector de polarización está orientado en la dirección normal a las superficies superior e inferior del QD. Sin embargo, en la región de la intercara lateral la polarización se orienta aproximadamente paralela a la misma. Sabemos que la densidad de carga superficial se puede calcular como $\sigma_p = \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}}$. Por consiguiente, σ será mayor en las superficies superior e inferior que en la superficie lateral. Por último, es interesante observar que la polarización en el interior del QD es positiva (está orientada paralela al eje Z), mientras que $P_3^{\text{SP}(I)}$ es negativa, como se puede comprobar en la Tabla A.3. Aunque pudiese parecer que los efectos de ambas polarizaciones se compensasen resultando en un potencial interno menor, más adelante veremos que esto no sucede, siendo el potencial total

la suma del potencial espontáneo y del potencial piezoeléctrico.

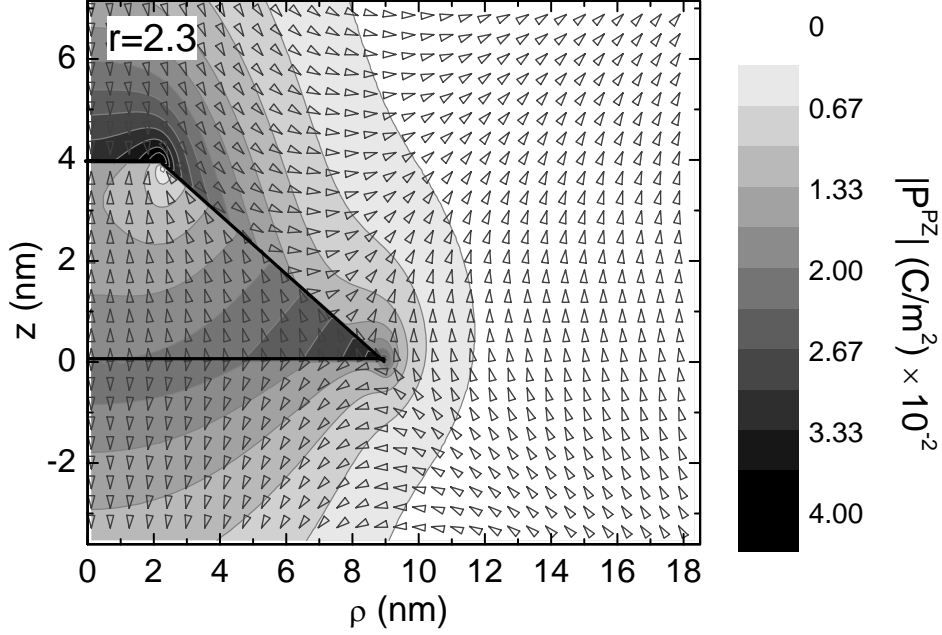


Figura 2.36: Polarización piezoeléctrica en un QD de GaN/AlN con geometría de cono truncado y $r_{\text{QD}} = 2.3$.

Por otro lado, la distribución de la densidad de carga volúmica en el sistema se puede calcular a través de la divergencia de la polarización:

$$\rho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P}^{\text{Tot}}. \quad (2.94)$$

En la Figura 2.37 mostramos ρ_p obtenida por derivación numérica de la polarización mostrada en la Figura 2.36.

2.6.3. Potencial interno en un punto cuántico axisimétrico

En la Sección 1.4 escribimos las ecuaciones fundamentales que permiten relacionar el campo eléctrico y el potencial interno con la polarización en un material dieléctrico. El potencial interno en un material dieléctrico puede ser calculado conociendo su polarización y utilizando las ecuaciones de Maxwell para medios materiales:

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 \nabla^2 \varphi = \nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_p. \quad (2.95)$$

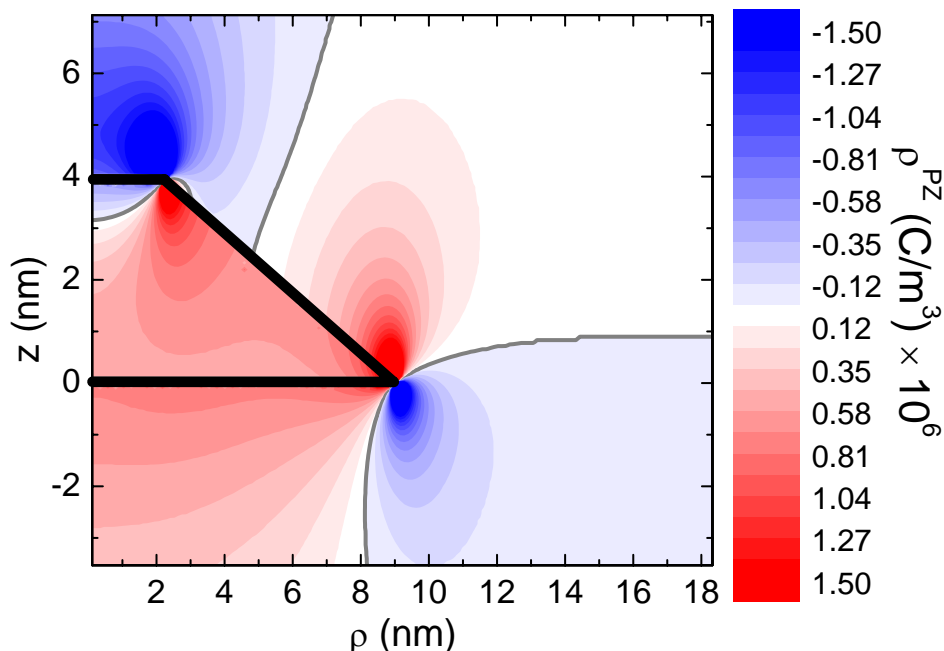


Figura 2.37: Densidad de carga obtenida de la polarización mostrada en la Figura 2.36.

Como \mathbf{P}^{Tot} depende de las componentes del tensor de deformación que conocemos explícitamente en el espacio \mathbf{q} recurriremos a la técnica de la Transformada de Fourier para resolver la Ec. (2.95).

La transformada de Fourier de la polarización viene definida por las siguientes expresiones:

$$\tilde{\mathbf{P}}^{\text{Tot}}(\mathbf{q}) = \tilde{\mathbf{P}}^{\text{SP}}(\mathbf{q}) + \tilde{\mathbf{P}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}), \quad (2.96a)$$

$$\tilde{P}_3^{\text{SP}}(\mathbf{q}) = P_3^{\text{SP}(M)}(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) + (P_3^{\text{SP}(I)} - P_3^{\text{SP}(M)})\tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.96b)$$

$$\tilde{P}_i^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) = \epsilon_{ijk}^{(M)} \tilde{e}_{jk}(\mathbf{q}) + \delta_{ijk} \tilde{e}_{jk}(\mathbf{q}) * \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.96c)$$

donde el símbolo $*$ representa el producto de convolución. Una vez la polarización es conocida, la densidad de carga volúmica se obtiene de forma inmediata:

$$\tilde{\rho}_p(\mathbf{q}) = -i\mathbf{q}\tilde{\mathbf{P}}^{\text{Tot}}(\mathbf{q}). \quad (2.97)$$

Finalmente, es posible obtener la transformada de Fourier del potencial interno en el espacio de Fourier sin más que transformar la Ec. (2.95):

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{q}) = \frac{-i\mathbf{q}}{q^2 \epsilon_0 \epsilon_r} \tilde{\mathbf{P}}^{\text{Tot}}(\mathbf{q}). \quad (2.98)$$

Para simplificar la resolución del problema consideraremos en adelante que $\epsilon_{ijk}^M = \epsilon_{ijk}^I$, i.e. que $\delta\epsilon_{ijk} = 0$, de manera que no consideraremos el producto de convolución en el segundo término de (2.96c) que complicaría enormemente el problema. Esta aproximación puede producir resultados incorrectos en la región de la barrera. Sin embargo, para el cálculo de las propiedades electrónicas que presentaremos en el Capítulo 3 dicho error no será importante ya que los electrones se encuentran confinados en el interior del QD.

El potencial interno de la Ec. (2.98) puede ser dividido en en cuatro contribuciones:

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{q}) = \tilde{\varphi}^{\text{SP}}(\mathbf{q}) + \tilde{\varphi}_{\epsilon_{15}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) + \tilde{\varphi}_{\epsilon_{31}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) + \tilde{\varphi}_{\epsilon_{33}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}). \quad (2.99)$$

Por una parte tenemos la contribución de la polarización espontánea $\tilde{\varphi}^{\text{SP}}(\mathbf{q})$ y por otra la correspondiente a cada una de las tres constantes piezoeléctricas independientes. Teniendo en cuenta las expresiones para el tensor de deformaciones (ver Ec. (2.40)). Las expresiones explícitas de cada contribución son:

$$\tilde{\varphi}^{\text{SP}}(\mathbf{q}) = \frac{(P_3^{\text{SP}(I)} - P_3^{\text{SP}(M)})}{\epsilon_r \epsilon_0} \tilde{\mathbb{I}}_1(\mathbf{q}), \quad (2.100a)$$

$$\tilde{\varphi}_{\epsilon_{15}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) = \frac{\epsilon_{15}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[\left(A_3^{(1)} + A_3^{(3)} \right) \tilde{\mathbb{I}}_3(\mathbf{q}) + \left(A_{\perp}^{(1)} + A_{\perp}^{(3)} \right) \tilde{\mathbb{I}}_{\perp}(\mathbf{q}) \right], \quad (2.100b)$$

$$\tilde{\varphi}_{\epsilon_{31}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) = \frac{\epsilon_{31}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[2e_a^{(0)} \tilde{\mathbb{I}}_1(\mathbf{q}) + A_3^{(1)} \tilde{\mathbb{I}}_3(\mathbf{q}) + A_{\perp}^{(1)} \tilde{\mathbb{I}}_{\perp}(\mathbf{q}) \right], \quad (2.100c)$$

$$\tilde{\varphi}_{\epsilon_{33}}^{\text{PZ}}(\mathbf{q}) = \frac{\epsilon_{33}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[e_c^{(0)} \tilde{\mathbb{I}}_1(\mathbf{q}) + A_3^{(3)} \tilde{\mathbb{J}}_3(\mathbf{q}) + A_{\perp}^{(3)} \tilde{\mathbb{J}}_{\perp}(\mathbf{q}) \right], \quad (2.100d)$$

donde las funciones auxiliares están definidas como:

$$\tilde{\mathbb{I}}_1(\mathbf{q}) = \frac{(-i)q_3}{q^2} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.101a)$$

$$\tilde{\mathbb{I}}_3(\mathbf{q}) = \frac{iq_{\perp}^2 q_3^3}{q^2 (q_3^2 + A_+ q_{\perp}^2) (q_3^2 + A_- q_{\perp}^2)} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.101b)$$

$$\tilde{\mathbb{I}}_{\perp}(\mathbf{q}) = \frac{iq_{\perp}^4 q_3}{q^2 (q_3^2 + A_+ q_{\perp}^2) (q_3^2 + A_- q_{\perp}^2)} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.101c)$$

$$\tilde{\mathbb{J}}_3(\mathbf{q}) = \frac{iq_3^5}{q^2 (q_3^2 + A_+ q_{\perp}^2) (q_3^2 + A_- q_{\perp}^2)} \tilde{\chi}(\mathbf{q}), \quad (2.101d)$$

$$\tilde{\mathbb{J}}_{\perp}(\mathbf{q}) = \tilde{\mathbb{I}}_3(\mathbf{q}), \quad (2.101e)$$

Ahora se puede obtener el potencial interno de un punto cuántico axialmente simétrico expresado en el espacio real calculando las transformadas de Fourier inversas de las funciones que acabamos de definir. Tras la realización de una serie

de cálculos largos y tediosos obtenemos:

$$\mathbb{I}_1(\mathbf{r}) = \mathbb{F}(\mathbf{r}, 1), \quad (2.102a)$$

$$\mathbb{I}_\perp(\mathbf{r}) = - \frac{\mathbb{F}(\mathbf{r}, 1)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_-^2 - 1)} - \frac{\mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_+)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_+^2 - \eta_-^2)} - \frac{\mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_-)}{(\eta_-^2 - 1)(\eta_-^2 - \eta_+^2)}, \quad (2.102b)$$

$$\mathbb{I}_3(\mathbf{r}) = + \frac{\mathbb{F}(\mathbf{r}, 1)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_-^2 - 1)} + \frac{\eta_+^2 \mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_+)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_+^2 - \eta_-^2)} + \frac{\eta_-^2 \mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_-)}{(\eta_-^2 - 1)(\eta_-^2 - \eta_+^2)}, \quad (2.102c)$$

$$\mathbb{J}_\perp(\mathbf{r}) = \mathbb{I}_3(\mathbf{r}), \quad (2.102d)$$

$$\mathbb{J}_3(\mathbf{r}) = - \frac{\mathbb{F}(\mathbf{r}, 1)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_-^2 - 1)} - \frac{\eta_+^4 \mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_+)}{(\eta_+^2 - 1)(\eta_+^2 - \eta_-^2)} - \frac{\eta_-^4 \mathbb{F}(\mathbf{r}, \eta_-)}{(\eta_-^2 - 1)(\eta_-^2 - \eta_+^2)}, \quad (2.102e)$$

con

$$\mathbb{F}(\mathbf{r}, \mu) = \frac{1}{2} \int_0^{h_{\text{QD}}} dz' R(z') \text{sign}(z - z') \mathcal{I}_{0,1}^0(\rho, R(z'), \mu(z - z')), \quad (2.103)$$

Obsérvese que esta integral es la misma que aparecía en la definición de $u_z^{(\pm)}$ en la Ec. (2.44). Finalmente, podemos expresar el potencial interno de forma compacta con las funciones que acabamos de definir. A modo de resumen:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^{\text{SP}}(\mathbf{r}) + \varphi_{\epsilon_{15}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) + \varphi_{\epsilon_{31}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) + \varphi_{\epsilon_{33}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}), \quad (2.104a)$$

$$\varphi^{\text{SP}}(\mathbf{r}) = \frac{(P_3^{\text{SP}(I)} - P_3^{\text{SP}(M)})}{\epsilon_r \epsilon_0} \mathbb{I}_1(\mathbf{r}), \quad (2.104b)$$

$$\varphi_{\epsilon_{15}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_{15}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[\left(A_3^{(1)} + A_3^{(3)} \right) \mathbb{I}_3(\mathbf{r}) + \left(A_\perp^{(1)} + A_\perp^{(3)} \right) \mathbb{I}_\perp(\mathbf{r}) \right], \quad (2.104c)$$

$$\varphi_{\epsilon_{31}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_{31}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[2e_a^{(0)} \mathbb{I}_1(\mathbf{r}) + A_3^{(1)} \mathbb{I}_3(\mathbf{r}) + A_\perp^{(1)} \mathbb{I}_\perp(\mathbf{r}) \right], \quad (2.104d)$$

$$\varphi_{\epsilon_{33}}^{\text{PZ}}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_{33}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[e_c^{(0)} \mathbb{I}_1(\mathbf{r}) + A_3^{(3)} \mathbb{J}_3(\mathbf{r}) + A_\perp^{(3)} \mathbb{J}_\perp(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.104e)$$

Obsérvese que igual que sucedía con los resultados para la deformación de la Sección 2.2, para obtener el potencial es suficiente con realizar unas pocas integrales definidas de funciones analíticas. El límite analítico correspondiente al caso de una inclusión tipo lámina bidimensional resulta de utilidad para poder describir el potencial interno en el interior de un pozo cuántico. Éste se obtiene calculando el

límite de la función $\mathbb{F}(\mathbf{r}, \mu)$ cuando $R_{\text{QD}} \rightarrow \infty$:

$$\mathbb{F}(\mathbf{r}, \mu) \rightarrow \frac{1}{2} [|z - h_{\text{QD}}| - |z|] . \quad (2.105)$$

El potencial interno correspondiente se obtiene al sustituir (2.105) en (2.102) y éstas a su vez en (2.104). Tras la realización de diferentes simplificaciones se obtiene:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{(P_3^{\text{SP}(I)} - P_3^{\text{SP}(M)}) + e_a^{(0)}(2\epsilon_{31} - 2\epsilon_{33}C_{13}/C_{33})}{\epsilon_0\epsilon_r} [|z - h_{\text{QD}}| - |z|] . \quad (2.106)$$

2.7. Potencial interno en un punto cuántico aislado

Las ecuaciones obtenidas en la Sección anterior nos van a permitir estudiar la distribución del potencial interno en un QD tipo wurtzita. En las Figuras 2.36 y 2.37 ya hemos representado la polarización piezoeléctrica y la correspondiente densidad de carga en un QD de GaN/AlN con $r_{\text{QD}} = 2.3$. En la Figura 2.38 hemos representado el potencial interno calculado a partir de las Ecs. (2.104). En esta última representación hemos optado por incluir la capa mojante WL, con la intención de que el estudio se aproxime más a la situación de un QD real. Es importante destacar que la invariancia de escala que exhibía el problema de la distribución de la deformación deja de ser válida en el estudio del potencial interno. De acuerdo con la Ec. (2.95) al aplicar un cambio de escala al QD, el potencial varía proporcionalmente al factor de escala s .

En la Figura 2.38 también presentamos desglosadas las contribuciones al potencial interno de la polarización espontánea (φ^{SP}) y de la polarización piezoeléctrica (φ^{PZ}). En términos cuantitativos, se puede comprobar que la magnitud de φ^{PZ} es, aproximadamente, un tercio de la φ^{SP} y que presenta la misma polaridad, a pesar de que, como vimos en la Figura 2.36, las polarizaciones respectivas en el QD presentan signos opuestos. Pese a resultar φ^{SP} dominante, no se puede concluir que la contribución de φ^{PZ} sea despreciable. Por consiguiente, en todo modelo realista que se pretenda realizar de este sistema, estas dos contribuciones deben ser incluidas. Por otro lado, en términos cualitativos se observa que la variación del potencial en el interior del QD a lo largo de la dirección [0001] es considerablemente mayor que a lo largo de la dirección radial. Más adelante mostraremos cortes a lo largo de las direcciones mencionadas y podremos observar con mayor detalle dicha dependencia. La razón de este comportamiento radica en la orientación del vector de polarización, que al ser aproximadamente paralelo al eje Z hace que el potencial varíe más rápidamente en esa dirección.

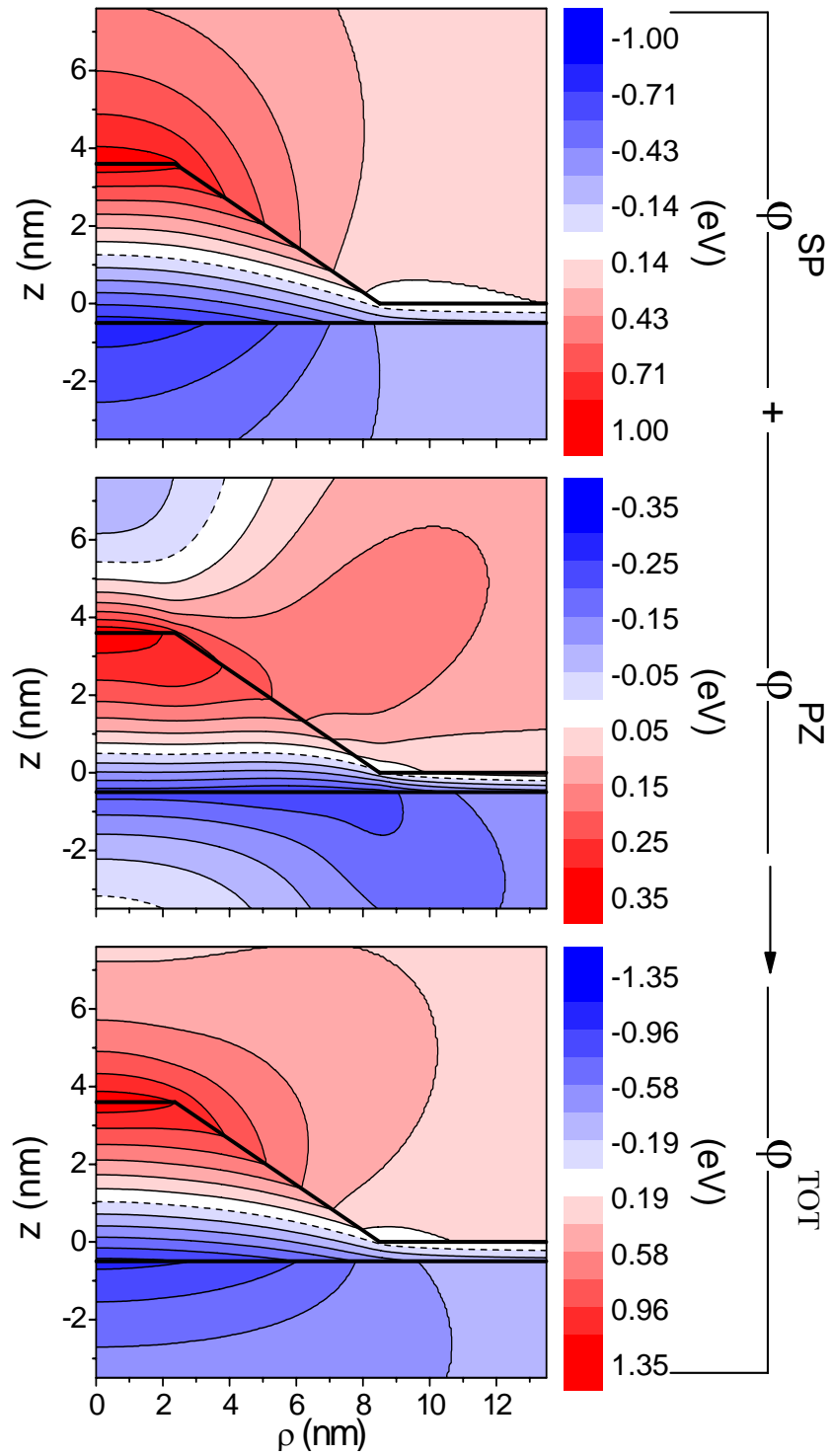


Figura 2.38: Potencial interno expresado en eV para un único QD de GaN/AlN y ratio $r_{\text{QD}} = 2.3$. En el panel superior está representada la contribución espontánea (φ^{SP}), en el medio la contribución piezoeléctrica (φ^{PZ}) y en el inferior el potencial total (φ^{Tot}).

Mientras que el potencial φ^{SP} presenta un comportamiento que recuerda el debido a condensador de placas plano-paralelas, el potencial φ^{PZ} exhibe una distribución más compleja. Esto sucede porque el potencial piezoeléctrico viene determinado por la suma de las contribuciones debidas a las cargas de polarización volúmica ρ_p y superficiales σ_p que como vimos en el apartado 2.6.2 presentan distribuciones no triviales.

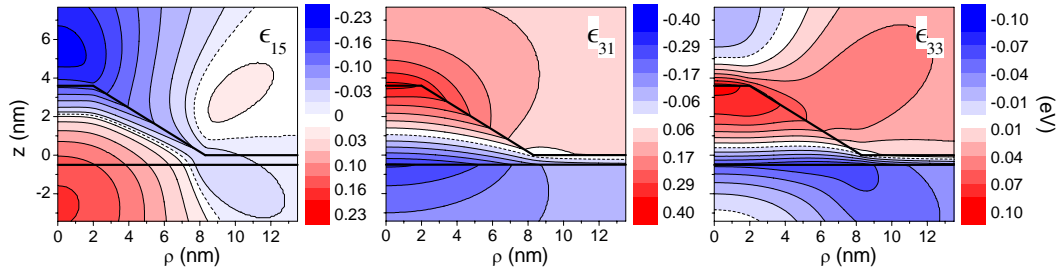


Figura 2.39: Contribuciones al potencial piezoeléctrico etiquetadas según la constante piezoeléctrica que las precede.

Adicionalmente, hemos realizado un estudio para cuantificar el peso relativo de las contribuciones parciales al potencial φ^{PZ} debidas a las tres constantes piezoeléctricas ϵ_{15} , ϵ_{31} y ϵ_{33} (ver Ec. (2.104a)). Cada una de ellas pondera la contribución de la deformación $e_{\rho z}$, $e_{\rho\rho} + e_{\phi\phi}$ y e_{zz} , respectivamente. En la Figura 2.39 hemos representado los potenciales que se obtienen al considerar cada una de estas contribuciones por separado. Las tres presentan un aspecto muy diferente. Es importante resaltar que la componente ϵ_{15} tiene el signo del potencial invertido respecto a las otras dos componentes. Esto significa que el potencial debido a la deformación de cizalla tiende a compensar el potencial debido a las componentes diagonales de deformación.

La dependencia del potencial interno con la forma del QD queda reflejada en los resultados mostrados en la Figura 2.40, donde hemos representado un corte del potencial interno a lo largo del eje axial para puntos cuánticos de igual ratio, $r_{\text{QD}} = 2.3$, y diferentes geometrías. La caída de potencial entre la parte superior e inferior del QD es mayor para el QD cilíndrico y menor para el QD cónico. Esto también puede entenderse teniendo en cuenta la orientación de la polarización. Cuando las intercaras son normales a la polarización, la densidad de carga superficial es máxima y, por consiguiente, también lo será la diferencia de potencial que ésta genera. Como la polarización espontánea es siempre paralela a la dirección de crecimiento, (en nuestro caso, el eje Z), la densidad de carga superficial será mucho mayor en un QD cilíndrico que en uno cónico. El mismo razonamiento sirve para la polarización piezoeléctrica que es aproximadamente paralela al eje Z en la mayor

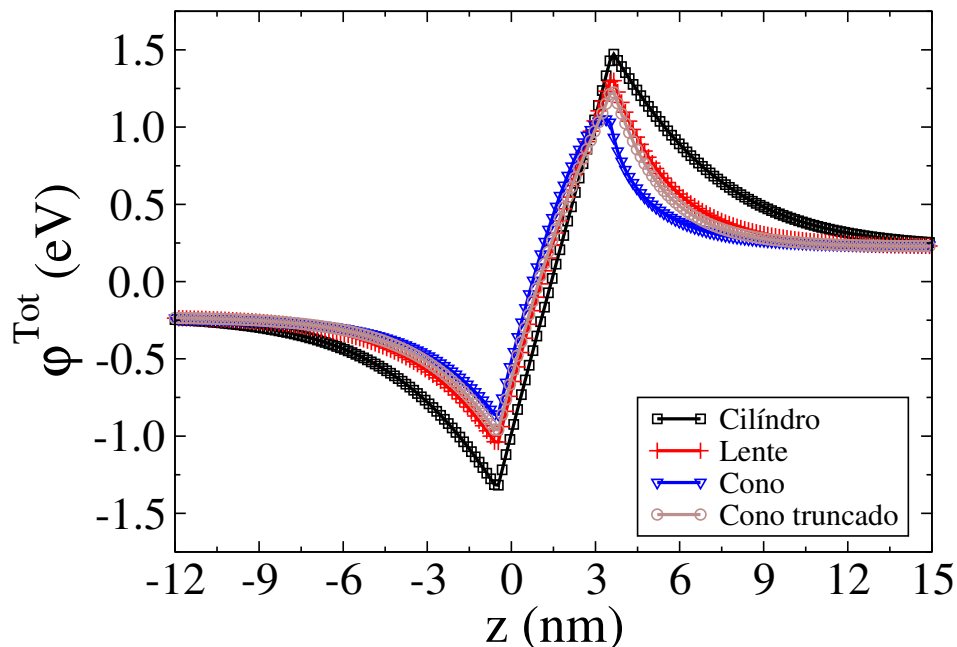


Figura 2.40: Perfiles del potencial interno a lo largo del eje axial del QD para diferentes geometrías.

parte del volumen del QD. Vemos que las otras dos formas consideradas se sitúan entre los dos valores correspondientes a la forma cilíndrica y cónica.

Ahora vamos a analizar la dependencia del potencial interno con la ratio r_{QD} . Para este fin hemos representado en la Figura 2.41 un corte del potencial interno a lo largo del eje axial para diferentes valores de $r_{\text{QD}} = 1.73, 2.3, 3.0, 5.0, 10.0$ e ∞ . La altura del QD y el ángulo formado por la base y la superficie laterales ($\alpha=30^\circ$) se mantienen constantes e iguales a los valores empleados en los cálculos anteriores, de forma que al modificar r_{QD} únicamente estamos considerando variaciones de R_{QD} y R_{Sup} . El valor de $r_{\text{QD}} = 1.73$ es aquel para el que $R_{\text{Sup}} = 0$, i.e. corresponde a la situación en que el cono truncado converge a un cono. El valor de $r_{\text{QD}} = \infty$ es representativo del problema de un pozo cuántico. La gráfica muestra que la caída de potencial en el interior del QD aumenta con la ratio. Además se observa un cambio cualitativo en la forma de las curvas a medida que el QD se hace cada vez más plano. Se puede apreciar que la convergencia al caso de un QW es muy lenta.

En la Figura 2.42 hemos representado la evolución de la caída de potencial en el interior del QD. Se observa que en el rango de r_{QD} comprendido entre 1.73 y 10 la variación es muy rápida. Para valores mayores de r_{QD} se aprecia una evolución más lenta hasta que se alcanza la convergencia al valor característico de un pozo cuántico $\Delta\varphi = 3.64$ eV (ver Ec. (2.106)).

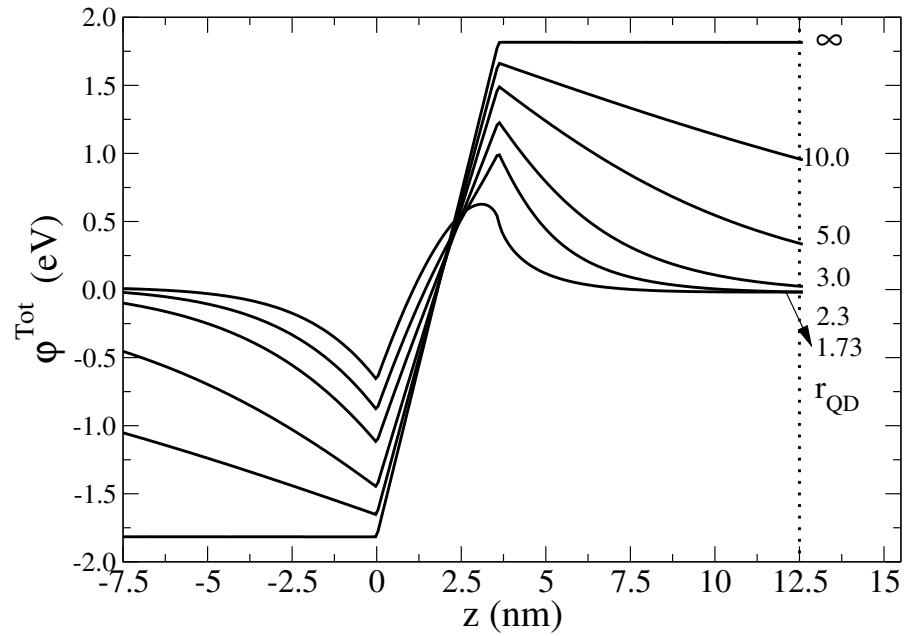


Figura 2.41: Perfiles del potencial interno a lo largo del eje axial del QD para diferentes valores de r_{QD} , indicados por las etiquetas situadas a la derecha de la Figura.

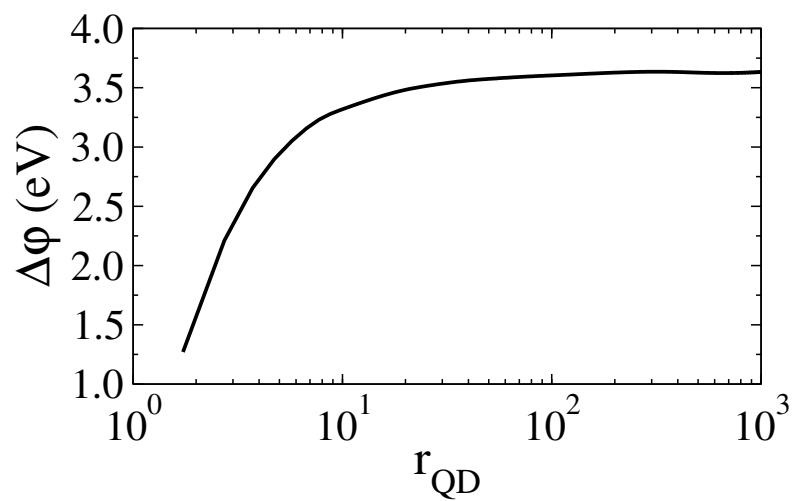


Figura 2.42: Caída de potencial $\Delta\varphi$ en el interior del QD correspondiente a las curvas mostradas en la Fig. 2.41.

Completaremos el análisis del potencial interno en función de r_{QD} estudiando el valor del campo interno a lo largo del eje axial del QD. Para ello hemos diferenciado numéricamente las curvas del potencial interno mostradas en la Figura 2.41, y en la Figura 2.43 mostramos el valor de la componente z del campo. Para la geometría cónica ($r_{\text{QD}} = 1.73$) el valor del campo experimenta un gran cambio en función de z llegando incluso a invertir su orientación. Sin embargo, a medida que el área de la superficie superior se va incrementando, este cambio de orientación desaparece, y el valor del campo aumenta y se hace más homogéneo. Se puede apreciar cómo el campo en la barrera también converge lentamente al valor constante característico de un QW ($r_{\text{QD}} = \infty$), $E_z = 10$ MV/cm (ver Ec. (2.106)). Como ya se ha comentado anteriormente, los puntos cuánticos con $r_{\text{QD}} = 2.3$ tienen una relevancia especial en este trabajo. Hemos realizado una estimación del valor promedio de E^{Tot} en el interior del QD con $r_{\text{QD}} = 2.3$, hallando un valor de ~ 5 MV/cm. Vemos que es aproximadamente la mitad del correspondiente a un QW. Este resultado permite adelantar que las energías de confinamiento en un punto cuántico diferirán significativamente de las correspondientes a un pozo cuántico de igual altura. En el siguiente Capítulo haremos uso de estos resultados.

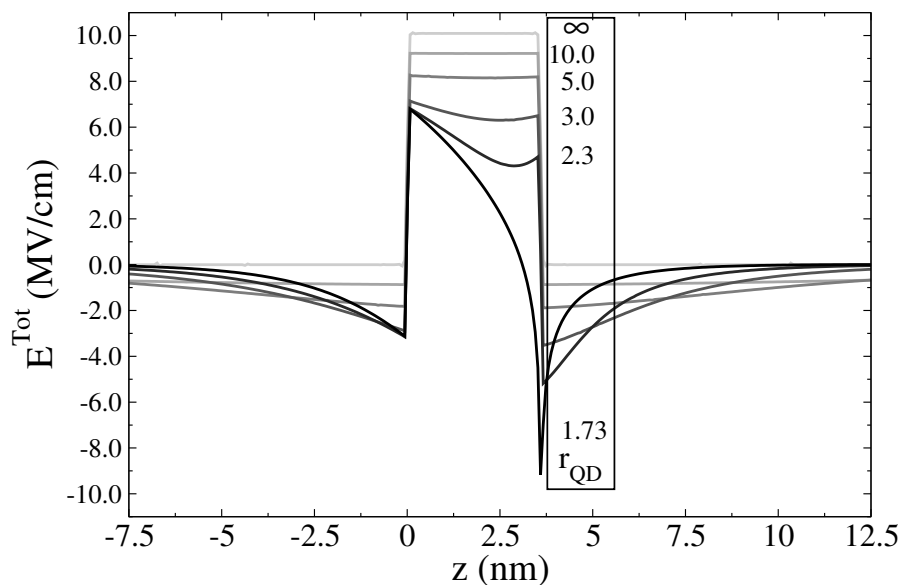


Figura 2.43: Valores de la componente z del campo interno obtenidos a partir de los resultados del potencial interno de la Fig. 2.41.

Finalmente, mostraremos la dependencia del potencial interno con el radio. Como se puede ver en los mapas de contorno de la Figura 2.38, el potencial varía más rápidamente en la dirección Z que en la dirección radial. Para ilustrar claramente cómo varía el potencial en función de ρ hemos representado en la Figura 2.44

cortes del potencial interno para diferentes valores de z . Vemos que la dependencia en el interior del QD sigue aproximadamente una ley parabólica. Este resultado cobrará importancia en la discusión de la estructura electrónica que realizaremos en el Capítulo 3.

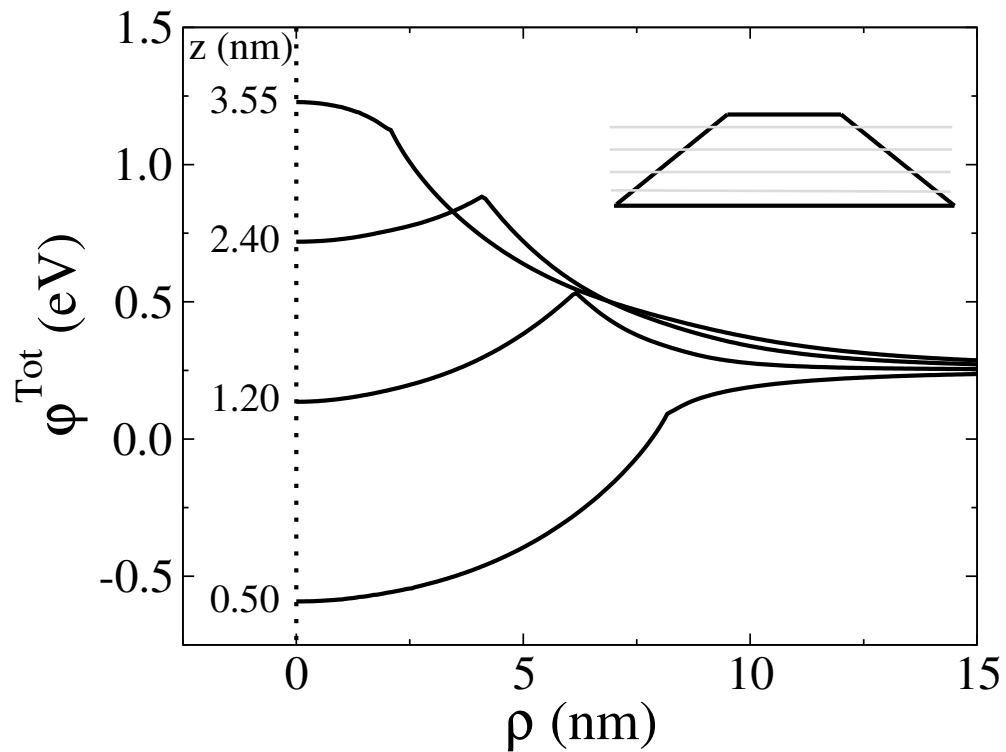


Figura 2.44: Perfiles del potencial interno a lo largo del eje radial para diferentes valores de z correspondientes a un QD con $r_{\text{QD}} = 2.3$.

Capítulo 3

Estructura electrónica de un punto cuántico

El objetivo de este Capítulo es el desarrollo de un modelo teórico que permita el estudio de la estructura electrónica en puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQD). Para ello recurriremos a la aproximación de la masa efectiva junto con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Ambas herramientas teóricas fueron descritas en el Capítulo 1. En todo momento trabajaremos en la aproximación de una única partícula, dejando el análisis de la influencia de la interacción de Coulomb para el Capítulo 4. En la Sección 3.1 haremos un repaso de las propiedades básicas de un sistema confinante tridimensional. Para simplificar lo más posible el tratamiento, inicialmente utilizaremos el modelo de una única banda, de forma que el movimiento de un electrón en un SAQD quedará descrito a través de una única ecuación de Schrödinger. En la Sección 3.2 estudiaremos el impacto del acoplamiento entre las diferentes bandas del semiconductor aplicando los modelos que fueron discutidos en la Sección 1.5. Analizaremos el efecto que tiene este acoplamiento en las energías y funciones de ondas de los electrones confinados y discutiremos la bondad de los diferentes grados de aproximación. Tal y como vimos en el Capítulo 2 estos sistemas presentan una distribución no uniforme de la deformación elástica y del potencial interno. Puesto que nos interesa investigar en primer lugar otros factores sobre la estructura electrónica, como la influencia de la geometría y del acoplamiento entre bandas, en las Secciones 3.1 y 3.2 recurriremos a una serie de aproximaciones que nos permitirán contemplar el efecto de la deformación y del potencial interno en primera aproximación sin necesidad de incluir la formulación completa. Para describir el estado de deformación de la nanoestructura consideraremos que la estructura está deformada biaxialmente, i.e. presenta un estado de deformación característico de sistemas bidimensionales, como es el caso de un pozo

cuántico (véase la Ec. (2.60)). Consideraremos que el efecto del potencial interno únicamente es relevante en la descripción de la estructura electrónica del sistema GaN/AlN y que éste puede ser descrito por el potencial creado por una polarización uniforme paralela a la dirección z . Esta aproximación se ha utilizado en diferentes trabajos en la bibliografía [53]. Esta aproximación está justificada en parte por el hecho de que la componente P_3 de la polarización resulta ser dominante sobre el resto, tal y como se vio en la Sección 2.6. El efecto de la deformación sobre la estructura electrónica será estudiado en la Sección 3.3. En esta parte del trabajo también incluiremos en el modelo el potencial interno inherente a los SAQDs de GaN/AlN que fue descrito en el Capítulo 2. En el Apéndice A se recogen los valores empleados en los cálculos numéricos de este Capítulo de los diferentes parámetros de los materiales. Hemos considerado en todo momento el valor correspondiente a baja temperatura.

Todos los resultados presentados en este Capítulo han sido obtenidos en la representación de electrones. En consecuencia al referirnos a un estado como estado de hueco, estamos refiriéndonos en realidad a un estado de electrón de la banda de valencia.

3.1. Modelo de una única banda

En el Capítulo 1 describimos el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para el cálculo de la estructura electrónica en semiconductores tipo zincblenda y wurtzita, y los diferentes modelos que era posible establecer en función del número de funciones de Bloch del semiconductor masivo empleadas. Sin embargo, a la vez que dicho número de funciones aumenta, también lo hace la complejidad de la formulación matemática del problema. En esta Sección, para describir el QD en el marco de la aproximación de la masa efectiva utilizaremos lo que denominamos en el Capítulo 1 modelo 1×1 o de una única banda. En esta aproximación se limita el desarrollo de la función de onda descrito en la Ec. (1.56) a una única banda j_0 :

$$\Psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r})u_{j_0 0}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

donde $u_{j_0 0}(\mathbf{r})$ es la amplitud de Bloch del estado de dicha banda en $\mathbf{k} = 0$ y $F(\mathbf{r})$ es la correspondiente función envolvente. Eventualmente, este tratamiento se hará por separado para la banda de valencia (i.e. $j_0 = v$) y la banda de conducción (i.e. $j_0 = c$). Aunque está generalmente aceptado que la imagen que ofrece este modelo es, en general, insuficiente para describir de forma fiable la estructura electrónica de un punto cuántico, puede ser considerada como una aproximación “de orden

ceros" a dicho problema. Además, debido a la simplicidad de su formulación, pues requiere resolver una única ecuación de Schrödinger, los resultados que se obtienen de este modelo son fáciles de interpretar. Esto nos permitirá adquirir una intuición sobre el problema del confinamiento electrónico que nos será de gran ayuda en la discusión de los resultados obtenidos cuando tratemos modelos multibanda, i.e. cuando más funciones de Bloch participan del desarrollo de la función de onda.

Tras presentar la formulación del problema y describir el método numérico empleado para su resolución, pasaremos a realizar un análisis de los parámetros más relevantes que intervienen en el modelo. Siguiendo a esta breve introducción, mostramos los resultados que se obtienen para los SAQDs de InAs/GaAs y GaN/AlN.

3.1.1. Formulación del problema

Como explicamos en la Sección 1.6 la ecuación de la masa efectiva que describe el confinamiento en el QD en el marco del modelo de una única banda se escribe en coordenadas cartesianas de la siguiente forma:

$$HF(\mathbf{r}) \equiv [T_x + T_y + T_z + V_{\text{QD}}(\mathbf{r})] F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

donde $F(\mathbf{r})$ es la función envolvente de los estados y E su energía. Cada operador cinético está definido de acuerdo con:

$$T_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{m_0}{m_\alpha(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right), \quad (3.3)$$

Hemos considerado que la masa efectiva $m_\alpha(\mathbf{r})$ puede ser diferente en diferentes direcciones $\alpha = x, y, z$, y que guarda una dependencia con la posición descrita por:

$$m_\alpha(\mathbf{r}) = m_{\text{B},\alpha} + (m_{\text{D},\alpha} - m_{\text{B},\alpha})\chi(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

donde m_{D} y m_{B} son las masas efectivas de la banda j_0 en el material del punto cuántico y de la barrera, respectivamente. La función $\chi(\mathbf{r})$ es la función característica del QD, que fue introducida en la Ec. (2.6) en el estudio de la deformación. A su vez, el potencial de confinamiento viene dado por la Ec. (1.61):

$$V_{\text{QD}}(\mathbf{r}) = E_{\text{B}} + (E_{\text{D}} - E_{\text{B}})\chi(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

siendo E_{B} y E_{D} los bordes de banda en los respectivos materiales. En los resultados generales de los apartados previos al estudio específico de los SAQDs de

InAs/GaAs y GaN/AlN, consideraremos que $E_D = 0$ y $V_0 = E_B$. Esto es, hemos situado el origen de energías en el borde de banda del material del QD y el potencial de confinamiento queda entonces definido por un único parámetro, V_0 . Como se mencionó en el Capítulo 1, los SAQDs obtenidos por el modo de crecimiento Stranski-Krastanov crecen sobre una capa mojanete (en inglés “Wetting Layer”, WL). Ésta puede ser considerada como un pozo cuántico, capaz de confinar electrones en su seno. El espesor típico viene a ser del orden de medio nanómetro [14, 54]. La energía del estado fundamental de la WL fijará el inicio del espectro continuo del Hamiltoniano. En caso de no considerar la WL, el origen del espectro continuo se desplazará a E_B , es decir, al borde de la banda en el material que actúa de barrera.

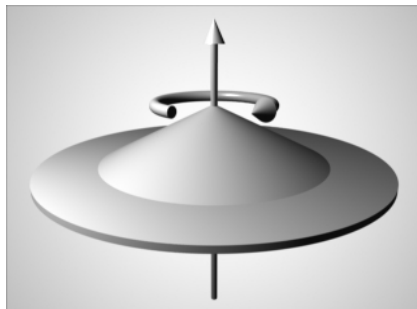


Figura 3.1: Representación esquemática de un QD cónico sobre una porción de WL.

Como se discutió en el Capítulo 1, la geometría elegida para el QD es axiálmente simétrica ($\chi(\mathbf{r}) = \chi(\rho, z)$) y, por consiguiente, a partir de (3.5) $V_{\text{QD}}(\mathbf{r})$ también tendrá esa simetría, i.e. $V_{\text{QD}}(\mathbf{r}) = V_{\text{QD}}(\rho, z)$. En la Figura 3.1 hemos ilustrado de forma esquemática el aspecto de un QD con forma de cono junto con una porción de la WL. Esta elección de la geometría del QD nos permitirá formular el Hamiltoniano del problema de forma que presente únicamente una dependencia explícita en las coordenadas cilíndricas ρ y z . Esto exige que en la Eq. (3.3) debemos imponer además que $m_x(\mathbf{r}) = m_y(\mathbf{r})$. Obviamente, debido a la geometría del QD $m_{xy}(\mathbf{r}) = m_{xy}(\rho, z)$ y $m_z(\mathbf{r}) = m_z(\rho, z)$.

Con todo esto podemos expresar la Ecu. (3.2) en coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z) para revelar la simetría del problema y abordar su resolución:

$$H F(\mathbf{r}) = [T_{\perp} + T_z + V_{\text{QD}}(\rho, z)]F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}), \quad (3.6)$$

donde

$$T_{\perp} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{m_0}{m_{xy}(\rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_0}{m_{xy}(\rho, z)} \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}_z^2 \right), \quad (3.7)$$

y \hat{L}_z es la componente z del momento angular asociado a la función envolvente:

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (3.8)$$

Siempre que se cumplan estas condiciones, H conmutará con \hat{L}_z , la componente z del operador momento angular. Por lo tanto, su autovalor m (en unidades de \hbar) será un buen número cuántico, y podremos clasificar los estados del sistema de acuerdo con él. En tanto en cuanto $[H, \hat{L}_z] = 0$, las autofunciones de la Ec. (3.6) se podrán escribir como:

$$F^{(m)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \mathcal{F}^{(m)}(\rho, z), \quad (3.9)$$

donde la parte dependiente de ϕ ha sido factorizada. Sustituyendo (3.9) en (3.6) encontramos que el operador cinético se puede sustituir por:

$$T_{\perp} \rightarrow T_{\rho}^{(m)} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{m_0}{m_{xy}(\rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m_0}{m_{xy}(\rho, z)} \frac{1}{\rho^2} \frac{m^2}{\hbar^2} \right). \quad (3.10)$$

Por este procedimiento obtenemos una serie de problemas de autovalores independiente para cada valor de m :

$$H F_n^{(m)}(\mathbf{r}) = [T_{\rho}^{(m)} + T_z + V_{\text{QD}}(\rho, z)] F_n^{(m)}(\mathbf{r}) = E_{n,m} F_n^{(m)}(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

donde n representa otros números cuánticos. Obviamente, las soluciones de esta ecuación están doblemente degeneradas en *spin* [172] y en la componente z del momento angular orbital ($\pm m$). Salvo degeneraciones accidentales, los estados con $m = 0$ estarán doblemente degenerados y los estados con $m \neq 0$ tendrán una multiplicidad igual a cuatro. Antes de proceder a la resolución del problema debemos recordar que en adelante consideraremos en todo momento que las masas efectivas son independientes de la posición, i.e. $m_{\alpha}(\rho, z) = m_{\alpha}$. Como se discutió en la Sección 1.6, las condiciones de contorno necesarias para describir correctamente la estructura electrónica de un QD no son únicas, y por esta razón hemos optado por considerar las masas efectivas del material de la barrera iguales a las masas efectivas del material del punto cuántico.

3.1.2. Resolución del problema

En general no es posible resolver la ecuación (3.11) de forma analítica debido a que el potencial $V_{\text{QD}}(\rho, z)$ acopla el movimiento en la dirección Z con el del

plano XY . Para soslayar esta dificultad se puede recurrir a métodos aproximados, como métodos analíticos variacionales o a métodos puramente numéricos. En este trabajo hemos optado por un método “híbrido”, en el que, en primer lugar, desarrollaremos la función envolvente en una serie de funciones base ortogonales con coeficientes a determinar. Al introducir dicho desarrollo en la Ec. (3.11), la resolución de la ecuación diferencial se reduce a un problema matricial de autovalores, que se resuelve numéricamente. Con ello se obtienen los mencionados coeficientes, de forma que podemos reconstruir la función envolvente, y las energías propias del QD. Este método fue implementado con éxito a un problema similar por J. Y. Marzin y G. Bastard [173], aunque una formulación más general y una discusión rigurosa sobre su justificación y validez se puede encontrar en el trabajo de G. A. Baraff y D. Gershoni [174]. Esta estrategia de trabajo ofrece una gran versatilidad a cambio de requerir unos recursos de computación moderados¹. Otros métodos que se emplean con frecuencia para resolver la ecuación de Schrödinger son, por ejemplo, el formalismo de la matriz de transferencia [175], y aquellos en los que se discretiza el espacio (diferencias finitas [124], elementos finitos [176] y elementos de contorno [177]).

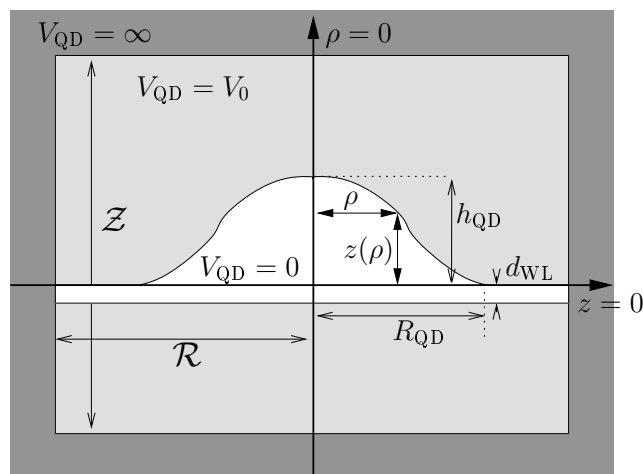


Figura 3.2: Representación esquemática del perfil del punto cuántico en el plano (ρ, z) . Hemos indicado las dimensiones del QD, de la WL y de la caja cilíndrica, así como los correspondientes valores del potencial siguiendo la notación empleada en el texto.

En primer lugar, es necesario escoger un conjunto de funciones base que se ajuste a la geometría del problema. Con frecuencia se emplean ondas planas [178]. Sin embargo, para el estudio de una estructura con simetría cilíndrica estas funciones no resultan ser una buena elección. En su lugar hemos optado por las solu-

¹En principio utilizar un ordenador personal es suficiente para completar un cálculo con éxito.

ciones de (3.11) que se obtienen para una cavidad con forma cilíndrica delimitada por barreras de potencial infinito. Las dimensiones de dicho cilindro deberán ser mayores que las del QD, de forma que las soluciones para los estados confinados en el QD sean independientes de las condiciones de contorno impuestas por la presencia del cilindro. En adelante denominaremos a este cilindro como cilindro de expansión o simplemente caja. En la Figura 3.2 hemos representado esquemáticamente la proyección en el plano (ρ, z) de un QD junto con el cilindro de expansión. Las dimensiones del cilindro están definidas a través del radio \mathcal{R} y la altura \mathcal{Z} . Las dimensiones a especificar en el caso del QD dependerán del perfil $z(\rho)$, e.g. para un cono truncado bastará con fijar el valor de un radio superior R_{sup} , un radio inferior R_{QD} y una altura h_{QD} . Por último, el espesor de la WL está representado por d_{WL} . Las funciones y valores propios de la caja son:

$$\xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \underbrace{\mathcal{N}_\alpha^{(m)} J_m(k_\alpha^{(m)} \varrho)}_{R_{m,\alpha}(\rho)} \underbrace{\sqrt{\frac{2}{\mathcal{Z}}} \sin(\mu\pi\varsigma)}_{Z_\mu(z)}, \quad (3.12)$$

$$E_{\alpha,\mu}^{(m)} = \frac{\hbar^2}{2m_{xy}} \left(\frac{k_\alpha^{(m)}}{\mathcal{R}} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z} \left(\frac{\mu\pi}{\mathcal{Z}} \right)^2, \quad (3.13)$$

donde $\varrho = \rho/\mathcal{R}$, J_m es la función de Bessel de orden m y $k_\alpha^{(m)}$ es su cero número α ($\alpha = 1, 2, \dots$). La constante de normalización está definida como:

$$\mathcal{N}_\alpha^{(m)} = \frac{\sqrt{2}}{\mathcal{R} |J_{m+1}(k_\alpha^{(m)})|}. \quad (3.14)$$

En la parte dependiente de z emplearemos la siguiente notación, $\varsigma = (z/\mathcal{Z} - 1/2)$ y $\mu = 1, 2, \dots$. La función trigonométrica $Z_\mu(z)$ tiene paridad definida: es par para μ impar y viceversa. Es fácil comprobar que se cumple la relación de ortogonalidad:

$$\langle \xi_{\alpha',\mu'}^{(m')} | \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} \rangle = \delta_{m,m'} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{\mu,\mu'}. \quad (3.15)$$

Ahora para resolver la Ec. (3.11) expresaremos la función envolvente del electrón confinado en el potencial $V_{\text{QD}}(\rho, z)$ como una combinación lineal de las funciones base $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r})$:

$$F_n^{(m)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\mu=1}^{+\infty} [A_n^{(m)}]_{\alpha,\mu} \xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r}), \quad (3.16)$$

donde $[A_n^{(m)}]_{\alpha,\mu}$ son los coeficientes que deberemos determinar. Para ello susti-

tuiremos (3.16) en (3.11). Si a continuación multiplicamos ambos miembros de la ecuación por $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)*}(\mathbf{r})$ e integramos en el volumen de la caja, $\mathcal{V}_{\text{Caja}}$, se obtiene el siguiente problema matricial

$$\sum_{\beta,\nu=1}^{+\infty} \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | H | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle [A_n^{(m)}]_{\beta,\nu} = E_{n,m} [A_n^{(m)}]_{\alpha,\mu}, \quad (3.17)$$

donde

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | H | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = \int_{\mathcal{V}_{\text{Caja}}} d^3\mathbf{r} \xi_{\alpha,\mu}^{(m)*}(\mathbf{r}) H \xi_{\beta,\nu}^{(m)}(\mathbf{r}). \quad (3.18)$$

Con ello, hemos transformado la ecuación diferencial en un problema de autovalores matricial. Las expresiones correspondientes a los elementos de matriz se pueden encontrar en el Apéndice D.

Una vez tenemos los estados confinados en el QD correspondiente a las bandas de valencia y de conducción:

$$\Psi_v^{(m_v)}(\mathbf{r}) = F_v^{(m_v)} u_{v0}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\mu=1}^{N_{\mathcal{R}}N_{\mathcal{Z}}} [A_v^{(m_v)}]_{\alpha,\mu} \xi_{\alpha,\mu}^{(m_v)}(\mathbf{r}), \quad (3.19a)$$

$$\Psi_c^{(m_c)}(\mathbf{r}) = F_c^{(m_c)} u_{c0}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\mu=1}^{N_{\mathcal{R}}N_{\mathcal{Z}}} [A_c^{(m_c)}]_{\alpha,\mu} \xi_{\alpha,\mu}^{(m_c)}(\mathbf{r}), \quad (3.19b)$$

podemos obtener el elemento de matriz óptico definido en la Sección 1.7, sin más que sustituir (3.19) en (1.85) y utilizar las propiedades de ortogonalidad de las funciones $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r})$ (ver Ec. (3.15)):

$$|\langle \Psi_c^{(m_c)} | H_{\text{r-m}} | \Psi_v^{(m_v)} \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \delta_{m_c, m_v} \left| \sum_{\alpha,\mu=1}^{N_{\mathcal{R}}N_{\mathcal{Z}}} [A_c^{(m_c)}]_{\alpha,\mu}^* [A_v^{(m_v)}]_{\alpha,\mu} \hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}_{cv} \right|^2. \quad (3.20)$$

Aquí podemos observar la primera regla de selección impuesta por la función envolvente, por la cual las transiciones ópticas se establecen entre estados de igual momento angular orbital m . Por otra parte, como ya mencionamos en la Sección 1.7, la respuesta del sistema a la polarización de la radiación incidente viene gobernada por los elementos de la matriz óptica $\hat{\mathbf{e}}\mathbf{p}_{cv}$. La Ec. (3.20) se utilizará en los apartados 3.1.5 y 3.1.6.

3.1.3. Criterio de elección de los parámetros numéricos

La solución de (3.17) sólo es exacta cuando el número de elementos del conjunto de funciones base es infinito. Así pues, al truncar el desarrollo y considerar un número finito de funciones radiales, $N_{\mathcal{R}}$, y de funciones dependientes de z , $N_{\mathcal{Z}}$, obtendremos una aproximación a los autovalores y autovectores del Hamiltoniano del problema (3.11). El problema de autovalores puede ser resuelto recurriendo a técnicas estándar de diagonalización. En concreto, hemos utilizado las rutinas del paquete de cálculo numérico LAPACK [179]. De la diagonalización de la matriz ya truncada obtendremos los autovalores y los correspondientes autovectores. La convergencia y fiabilidad de las soluciones de nuestro problema quedan pues condicionadas a la elección del conjunto de parámetros \mathcal{R} , \mathcal{Z} , $N_{\mathcal{R}}$, $N_{\mathcal{Z}}$. Por esta razón, analizaremos el impacto de estos parámetros sobre los resultados de la diagonalización.

Para minimizar en la medida de lo posible el impacto de las dimensiones de la caja sobre la estructura electrónica del SAQD, es muy importante determinar \mathcal{R} y \mathcal{Z} con cierto criterio. Del mismo modo $N_{\mathcal{R}}$ y $N_{\mathcal{Z}}$ deberán ser lo suficientemente grandes para que la función de onda del electrón esté bien “construida”². La opción de aumentar el número de funciones indiscriminadamente debe ser descartada, pues el aumento de los recursos de computación, i.e. memoria y tiempo de cálculo, que ello acarrea hacen del modelo una herramienta ineficiente. Por ello, deberemos establecer un criterio que nos permita asignar valores óptimos a los mencionados parámetros. La regla general por la que nos hemos regido es la siguiente:

- $(\mathcal{R}, \mathcal{Z})$: La caja debe tener un tamaño lo mayor posible para que la función de onda de los portadores no se vea significativamente perturbada por el confinamiento adicional debido a su presencia.
- $(N_{\mathcal{R}}, N_{\mathcal{Z}})$: Para conseguir reducir el tiempo de cálculo y la memoria requerida en tareas de almacenamiento, el número de funciones debe ser el mínimo que garantice una precisión determinada.

Lamentablemente cuanto más grandes son las dimensiones de la caja, mayor es el número de funciones que son necesarias para resolver el problema correctamente. Con el fin de ilustrar de forma gráfica la relación entre los diferentes parámetros, hemos realizado un cálculo de la estructura electrónica de un QD variando el tamaño de la caja para diferente número de funciones. Hemos considerado un QD

²De forma análoga a la “construcción” de una función periódica mediante la serie de Fourier con un número finito de términos.

de forma cónica, de altura $h_{\text{QD}} = 3$ nm y radio de la base $R_{\text{QD}} = 8$ nm. Hemos supuesto que la masa efectiva es isotrópica y homogénea $m_{xy} = m_z = 0.05 m_0$ y que el potencial de confinamiento es $V_0 = 1$ eV. En la Figura 3.3 mostramos los resultados obtenidos para el autovalor de menor energía, que constituirá la aproximación al estado fundamental del QD.

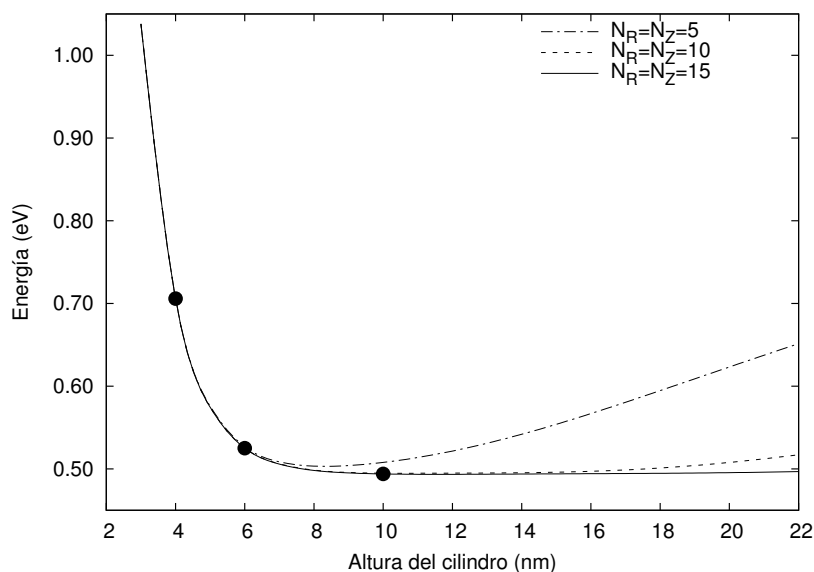


Figura 3.3: Autovalor de menor energía de un QD cónico obtenido para diferentes valores de los parámetros $N_{\mathcal{R}}$, $N_{\mathcal{Z}}$, \mathcal{R} , y \mathcal{Z} . Los tres puntos marcados sobre la línea continua nos indican los estados para los que se representa la función de onda en la Figura 3.4.

El tamaño de la caja fijado inicialmente coincide con las dimensiones del QD, esto es, $\mathcal{R} = 8$ nm y $\mathcal{Z} = 3$ nm. En el cálculo hemos variado las dos dimensiones de la caja manteniendo la relación de escala inicial. Las tres curvas representadas corresponden a tres cálculos con $N_{\mathcal{R}} = N_{\mathcal{Z}} = 5, 10$ y 15 , respectivamente. Todas ellas presentan un mínimo que indica cuál es el tamaño óptimo del cilindro para el número de funciones base escogido, i.e. el tamaño que proporciona la mejor aproximación a la energía del estado fundamental. En la Figura 3.3 se puede comprobar que el error cometido al considerar tamaños de la caja mayores que el óptimo se reduce al aumentar el número de funciones. Ello confiere una cierta libertad para fijar los valores de \mathcal{R} y \mathcal{Z} , cuando trabajamos con un número grande de funciones. En general, el tamaño de la caja óptimo para el cálculo del estado fundamental no coincidirá con el correspondiente al de los estados excitados ya que la distribución espacial de la función de onda asociada a cada estado es diferente. Por lo tanto, una vez hayamos localizado el tamaño de la caja óptimo para el estado de menor energía, el error cometido para los estados excitados aumentará a medida que sus

energía se aproximen a E_B . Si trabajamos con un número razonablemente grande de funciones $N_{\mathcal{R}}, N_{\mathcal{Z}} \gtrsim 15$, podemos aumentar el tamaño de la caja para obtener resultados fiables de los estados excitados.

Para analizar el efecto del tamaño de la caja sobre la función de onda, hemos representado en la Figura 3.4 la proyección en z de la densidad de probabilidad del estado fundamental:

$$|\Psi^{(m)}(z)|^2 = \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi |\Psi^{(m)}(\mathbf{r})|^2, \quad (3.21)$$

para tres tamaños diferentes de la caja. Estos tres casos se corresponden con los puntos marcados sobre la línea continua de la Figura 3.3. La densidad de probabilidad obtenida para el caso de la caja con $\mathcal{Z} = 4$ nm muestra que la función de onda siente mucho el potencial ficticio originado por el cilindro de desarrollo. Al seguir aumentando el tamaño de la caja, el contacto entre las paredes de la caja y la función de onda deja de existir, pasando su distribución espacial a estar determinada únicamente por el confinamiento debido a la presencia del QD. A modo de receta, podemos decir que la extensión de la función de onda fijará el valor mínimo de \mathcal{R} y \mathcal{Z} . Cuanto mayor sea la penetración de la función de onda en la barrera, mayor deberá de ser el tamaño de la caja. En general, los QDs obtenidos experimentalmente suelen presentar una ratio $R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}} > 1$, por lo que la penetración será mayor en la dirección Z que en el plano y la elección de \mathcal{Z} será, más crítica que la de \mathcal{R} . En los resultados que mostraremos a lo largo de todo este trabajo hemos mantenido fijo el número de funciones en $N_{\mathcal{R}} = 20$ y $N_{\mathcal{Z}} = 25$, y se ha realizado un estudio de la convergencia en función de \mathcal{R} y \mathcal{Z} particularizado a cada caso, de forma que el error cometido sea $\lesssim 1$ meV.

3.1.4. Análisis en función de la geometría de la nanoestructura

Una vez hemos fijado un criterio para su elección, pasaremos a analizar el efecto de los parámetros físicos del sistema (forma, dimensiones, ...) sobre la estructura electrónica. La geometría del punto cuántico, además de jugar un papel de gran importancia sobre la energía de confinamiento, va a determinar en gran medida la distribución espacial de la función de onda. Más adelante veremos la importancia que tiene ésta distribución en las propiedades ópticas y en los estados electrónicos de los complejos excitónicos. La forma y el tamaño van a ser las dos variables que definan la geometría del QD. De acuerdo con la Figura 3.2, el perfil del QD puede ser cualquier función $z(\rho)$ que proporcione la altura del QD para cada valor de ρ .

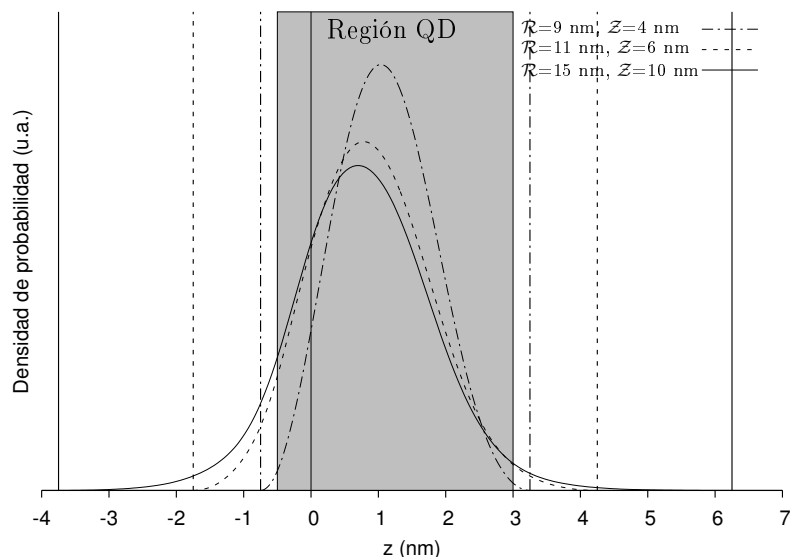


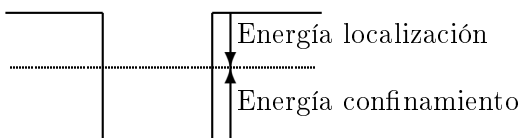
Figura 3.4: Proyección en z de la densidad de probabilidad de un QD cónico para tres tamaños de la caja diferentes que vienen indicados gráficamente por las correspondientes líneas verticales. La zona sombreada se corresponde con la extensión del QD con la WL en la dirección Z .

En este apartado veremos como la forma y las dimensiones afectan a la estructura de los niveles de energía.

A continuación haremos una pequeña discusión acerca de los regímenes de confinamiento que presentan las nanoestructuras. Es bien sabido, que al aumentar el tamaño de un QD la energía de confinamiento³ de los estados electrónicos se reduce. Sin embargo, dependiendo de la relación entre los parámetros que describen la forma del QD, la intensidad del confinamiento puede ser diferente para cada dirección del espacio. A modo de ejemplo, supongamos un QD cilíndrico en el que la masa efectiva pueda ser considerada isótropa. Si en esta estructura se verifica la relación $\hbar_{\text{QD}} \ll R_{\text{QD}}$, el confinamiento vertical será mucho más intenso que el lateral. Esta característica tiene un importante impacto en el esquema de niveles, pues la energía de confinamiento y las energías de cuantización⁴ asociadas al movimiento en la dirección Z serán mucho mayor que las asociadas al movimiento

³Entendemos por energía de confinamiento la diferencia entre la energía de un electrón confinado en un QD y la correspondiente al borde de banda del material del QD. En cambio, la energía de localización la definimos como la diferencia entre la energía del borde de banda del material de la barrera y la energía del electrón confinado.

⁴Diferencia entre la energía de un estado y la del siguiente excitado.



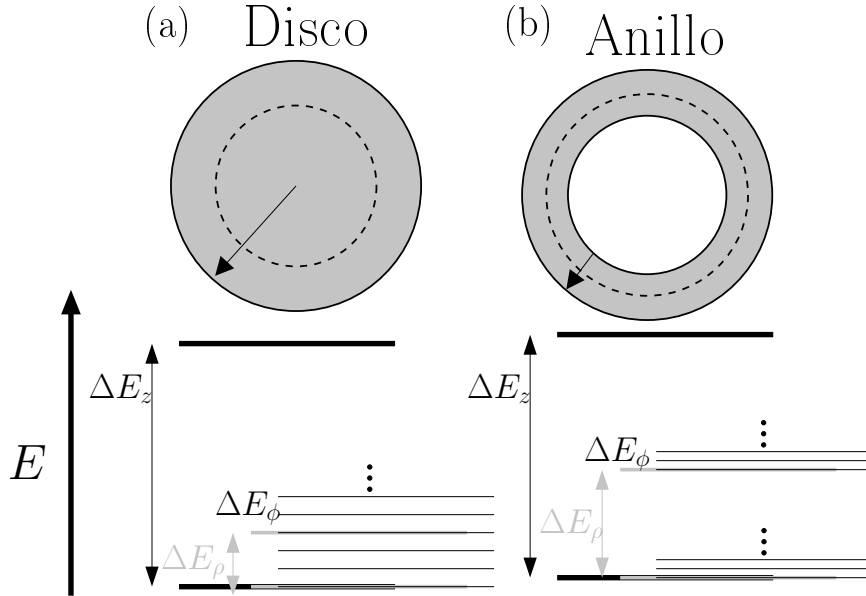


Figura 3.5: Esquema representativo de la estructura electrónica de un punto cuántico con forma de disco y anillo. Las diferentes etiquetas hacen referencia a las energías de cuantización originadas por el confinamiento vertical (ΔE_z), el angular (ΔE_ϕ) y radial (ΔE_ρ).

en el plano xy . En la Figura 3.5(a) hemos representado esquemáticamente esta situación para el caso de un QD con forma de disco, i.e. un cilindro de altura pequeña. Hemos indicado la separación entre niveles, i.e. la energía de cuantización, debida al confinamiento vertical a través de ΔE_z . Para el movimiento en el plano hemos diferenciado la contribución debida al confinamiento angular (ΔE_ϕ) y al radial (ΔE_ρ), que para la geometría cilíndrica están relacionados. Es posible desacoplar estos dos movimientos preservando la simetría de rotación de la estructura si se introduce un parámetro adicional, como el radio interno en el caso de un anillo cuántico. En la Figura 3.5(b) hemos representado un anillo cuántico suponiendo que el radio interno es comparable al radio externo. Bajo estas circunstancias el confinamiento radial aumenta su intensidad y el angular resulta ser menos intenso, por lo que encontramos un esquema de niveles muy diferente. Un estudio exhaustivo de los regímenes de confinamiento en el plano exhibidos por un anillo cuántico se puede encontrar en las Refs. [180, 181, 182].

En la discusión de los resultados recurriremos en ocasiones a los términos *subconjunto vertical*, *radial* y *angular* para referirnos a aquellos estados con igual energía de confinamiento vertical, radial y angular, respectivamente⁵. A modo de ilustración, supongamos un QD cilíndrico para el que la diferencia entre los bordes

⁵En analogía con las subbandas empleadas en la física de pozos cuánticos

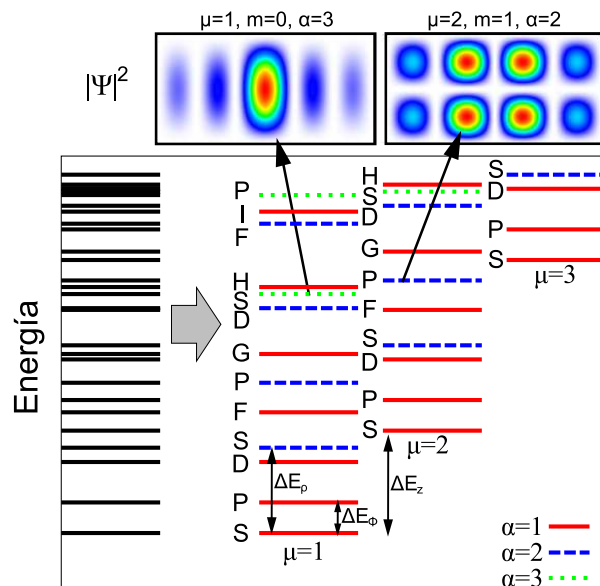


Figura 3.6: Niveles de energía de un QD cilíndrico de paredes infinitas, i.e. $V_0 = \infty$, en el que $h_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}$. La notación empleada para etiquetar cada nivel se explica en el texto. En la parte superior hemos representado la densidad de probabilidad para dos estados.

de banda E_D y E_B es muy grande, siendo factible suponer que $V_0 \rightarrow \infty$. Por simplicidad hemos considerado la masa efectiva isótropa. La estructura electrónica de este sistema se podrá describir entonces a través de las autofunciones y autovalores de cilindro de desarrollo escritas en las Ecs. (3.12) y (3.13) haciendo $\mathcal{R} = R_{\text{QD}}$ y $\mathcal{Z} = h_{\text{QD}}$. En la parte izquierda de la Figura 3.6 hemos representado todos los niveles de energía para un QD cilíndrico con $h_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}$. En la parte derecha de la Figura hemos representado en columnas diferentes los subconjuntos verticales de estados, i.e. aquellos con igual número cuántico $\mu = 1, 2, 3$. En cada columna hemos identificado con un trazo diferente los sucesivos subconjuntos radiales correspondientes a los números cuánticos radiales de estados. Finalmente los subconjuntos angulares de estados se pueden reconocer por estar etiquetados por las letras S, P, D, F, \dots que se corresponden con los números cuánticos angulares $m = 0, 1, 2, 3, \dots$. En este sistema la intensidad del confinamiento radial y vertical caracterizadas por ΔE_z y ΔE_ρ es comparable, y a su vez, significativamente mayor que la correspondiente al confinamiento angular ΔE_ϕ . En la parte superior de la Figura hemos representado la densidad de probabilidad de dos estados. Como se puede observar, el número de máximos a lo largo de los ejes Z y ρ coincide con los números cuánticos μ y α , respectivamente. Ello permite determinar la simetría de la función de onda a través de la inspección de la densidad de probabilidad. Al considerar un QD más realista, i.e. con V_0 finito y $z(\rho)$ arbitrario, estas propiedades de

simetría reflejadas en la Figura 3.6 dejan de ser exactas y la función de onda ya no presenta siempre nodos exactos, sino que en su lugar exhibirá un número diferente de máximos y mínimos. No obstante, en la mayoría de los casos resulta todavía ser una buena aproximación clasificar los estados en los subconjuntos verticales y radiales a partir del número de máximos que presente la función de onda en cada dirección. Ello permite obtener una valiosa información sobre la función de onda, aún cuando se haya reducido la simetría del sistema.

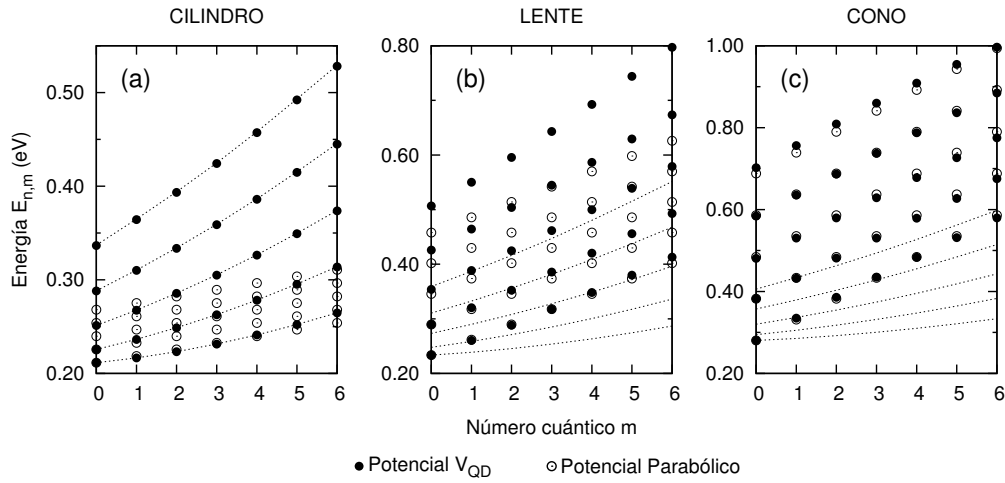


Figura 3.7: Los puntos sólidos indican la energía de los estados $E_{n,m}$ en función de m para tres formas de QDs: cilindro (a), lente (b) y cono (c). Los puntos vacíos se corresponden con las energías de los estados de un potencial parabólico bidimensional. Las líneas representan el confinamiento de un potencial radial bidimensional (ver texto).

Hemos discutido brevemente hasta donde es posible controlar la estructura de niveles de un QD modificando la magnitud de los parámetros que definen su forma, e.g. h_{QD} y R_{QD} . Ahora vamos a completar el análisis fijándonos en el impacto que tiene el perfil del QD sobre la estructura electrónica. Para ello hemos realizado un cálculo sobre tres QDs, con forma de cilindro, lente y cono, de igual altura y radio: $R_{QD} = 8$ nm y $h_{QD} = 3$ nm. Hemos considerado $V_0 = 1$ eV, $m_{xy} = 1.0 m_0$, y $m_z = 0.1 m_0$. Con estas masas efectivas el confinamiento vertical es más intenso que el lateral, de forma que podemos observar más claramente la perturbación introducida en el confinamiento radial y angular cuando modificamos $z(\rho)$. En la Figura 3.7 hemos reproducido las energías $E_{n,m}$ obtenidas para las tres geometrías. De la comparación se desprende que las energías de cuantización radial ($\Delta E_\rho = E_{n,m} - E_{n+1,m}$) y angular ($\Delta E_\phi = E_{n,m} - E_{n,m+1}$) aumentan significativamente al pasar del cilindro al cono. Para facilitar la comprensión de la distribución de niveles obtenida en cada caso, hemos incluido en la Figura el resultado de

dos problemas de confinamiento bidimensional. Por una parte, hemos escogido el potencial de confinamiento correspondiente a un hilo cuántico cilíndrico de radio R_{QD} . Los niveles de energía correspondientes a este problema han sido calculados con nuestro modelos considerando el límite $h_{\text{QD}} \rightarrow \infty$. Las energías halladas han sido representadas a través de líneas de puntos que unen los niveles de energía. Por otra parte, hemos representado los resultados correspondientes a un potencial parabólico bidimensional:

$$V(\rho) = \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2, \quad (3.22)$$

$$\mathcal{E}_{n,m} = \hbar\omega_0[2(n-1) + |m| + 1], \quad (3.23)$$

donde $\omega_0 = (E_{2,0} - E_{1,0})/2$ se ha ajustado convenientemente para facilitar la comparación con el problema del QD. Las energías $\mathcal{E}_{n,m}$ han sido representadas a través de puntos vacíos. Estos resultados muestran que el QD cilíndrico exhibe un confinamiento característico de un hilo cuántico cilíndrico. Sin embargo, los niveles de energía de la lente y el cono se alejan de este comportamiento. Para estos sistemas un potencial parabólico bidimensional resulta ser más representativo. Entonces, aunque el confinamiento vertical sea mucho más intenso que el lateral, no es posible, en todos los casos, considerar desacoplados el movimiento vertical del movimiento en el plano. Por consiguiente, es preciso resolver el problema tridimensional exactamente, o bien, tratar de encontrar un potencial bidimensional efectivo que de cuenta de la variación del confinamiento vertical al variar la posición en el plano, i.e. del acoplamiento entre los dos movimientos.

3.1.5. Resultados numéricos para el sistema InAs/GaAs

En este apartado aplicaremos el modelo de una única banda a puntos cuánticos constituidos por el sistema InAs/GaAs. En la Figura 3.8 se puede observar el alineamiento de los bordes de banda obtenidos a partir de los parámetros recogidos en el Apéndice A siguiendo el procedimiento descrito en la Sección 1.5. Las masas efectivas que emplearemos en este apartado fueron obtenidas en la Sección 1.5. Por completitud las hemos reproducido en la Tabla 3.1. Como primera aproximación al tratamiento de la deformación en un QD vamos a suponer que ésta puede ser considerada homogénea e igual a la correspondiente a un pozo cuántico (i.e., lo que se suele denominar deformación biaxial ver Ec. (1.38) en la Sección 1.5). El efecto que tiene esta deformación sobre la estructura electrónica es un desplazamiento de los bordes de las bandas, tal y como muestra el panel derecho de la Figura 3.8.

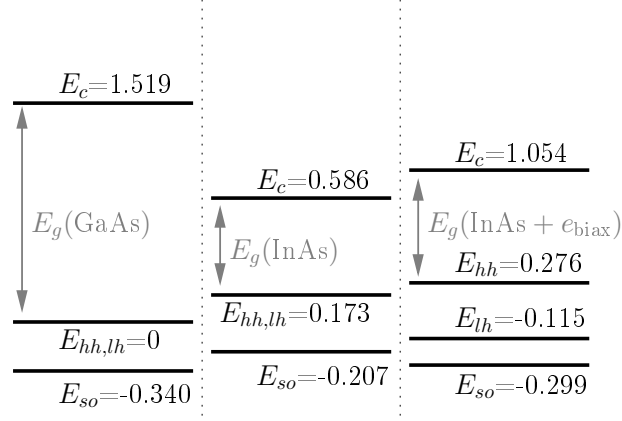


Figura 3.8: Alineamiento de las bandas en la heteroestructura InAs/GaAs para el caso en que el InAs no está deformado (panel central) o presenta una deformación de tipo biaxial (panel derecho). Las energías están expresadas en eV.

Banda	m_z	m_{\perp}
e	0.0724	0.0464
hh	0.3450	0.0710
lh	0.2160	0.0872
so	0.0837	0.2880

Tabla 3.1: Masas efectivas del InAs en presencia de una deformación de tipo biaxial (ver Sección 1.5).

Para estudiar las propiedades electrónicas y ópticas de este sistema hemos resuelto la Ec. (3.11) para un QD lenticular variando h_{QD} entre 2 y 10 nm y dejando fijo el valor del radio de la base, $R_{\text{QD}} = 10$ nm. Este valor ha sido escogido atendiendo a resultados experimentales de la caracterización estructural de estas nanoestructuras y que recogimos en la Tabla 1.2. Hemos estimado interesante estudiar la evolución de la estructura electrónica en función de h_{QD} , porque este parámetro controla el régimen de confinamiento más intenso en el QD y por consiguiente la energías de confinamiento de los estados serán más sensibles a él. Hemos escogido la geometría lenticular para realizar el estudio atendiendo a varias razones. Por una parte, los QD lenticulares no han sido analizados teóricamente tan extensamente como los QD piramidales. Por otra parte, SAQDs con esta geometría han sido caracterizados cuidadosamente mediante técnicas de absorción [183, 184]. En el Capítulo 1 mostramos el espectro de absorción correspondiente (ver Fig. 1.2) y discutimos las principales ventajas de esta técnica frente aquellas en las que interviene la emisión. Más adelante discutiremos los experimentos realizados sobre estas nanoestructuras.

Análisis de la estructura electrónica

En la Figura 3.9 mostramos los niveles de energía obtenidos para los estados de electrón (a) y de hueco (b). Para la realización de este cálculo hemos considerado un tamaño de la caja constante definido según: $\mathcal{R} = \mathcal{Z} = 20$ nm. En el panel (a) hemos indicado el valor del nivel de energía del estado fundamental de electrón asociado a la WL pues, como dijimos anteriormente, los estados cuya energía esté por encima de ese valor pertenecerán al espectro continuo del Hamiltoniano. La energía del estado fundamental de hueco de la WL está localizada $E_{\text{WL}} \sim 0.030$ eV, según la escala empleada en la gráfica. Al estar situada por debajo de la energía mínima considerada en la Figura 3.9(b) no aparece representada. Los estados confinados de hueco provienen de la banda hh (ver Fig. 1.17 del Capítulo 1). En adelante nos referiremos a dichos estados como estados de hueco pesado o hh . De forma análoga denominaremos a los estados de hueco ligero, lh , y a los estados de hueco *spin-órbita*, so . La razón de que no aparezcan estados lh y so radica en los perfiles de banda esquematizados en la Fig. 3.8. Por una parte, los estados so están localizados por debajo del estado fundamental de hueco de la WL y, por otra parte, debido a la deformación biaxial, los estados lh no están confinados, pues el QD actúa como barrera, en lugar de como un pozo cuántico.

Los estados asociados a los niveles de energía de la Figura 3.9 han sido etiquetados utilizando la siguiente notación:

$$N_m m^{n_\rho, n_z}, \quad (3.24)$$

donde $N_m = 1, 2, \dots$ numera los estados para cada m en orden de excitación energética creciente. Como hemos dicho antes el número cuántico m ha sido representado a través de las letras S, P, D, \dots . Con la intención de ofrecer más información sobre los estados confinados hemos determinado el número de máximos que presenta la densidad de probabilidad proyectada sobre los ejes ρ y Z , respectivamente. Los números n_ρ y n_z representan los correspondientes números de máximos menos 1. Con frecuencia, se suele hacer referencia a n_ρ y n_z como *pseudo-números cuánticos*. Dichos números se obtienen de examinar las siguientes expresiones:

$$|\Psi_{n,m}(\rho)|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-Z/2}^{Z/2} dz \Psi_{n,m}^*(\mathbf{r}) \Psi_{n,m}(\mathbf{r}), \quad (3.25)$$

$$|\Psi_{n,m}(z)|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho \Psi_{n,m}^*(\mathbf{r}) \Psi_{n,m}(\mathbf{r}). \quad (3.26)$$

Como ya se discutió en el apartado 3.1.4, el número de máximos proporciona una valiosa información sobre las propiedades de simetría de la función de onda, pues nos indica a qué subconjunto radial o vertical pertenece un determinado estado. La degeneración de spin no ha sido contemplada en la identificación de los estados.

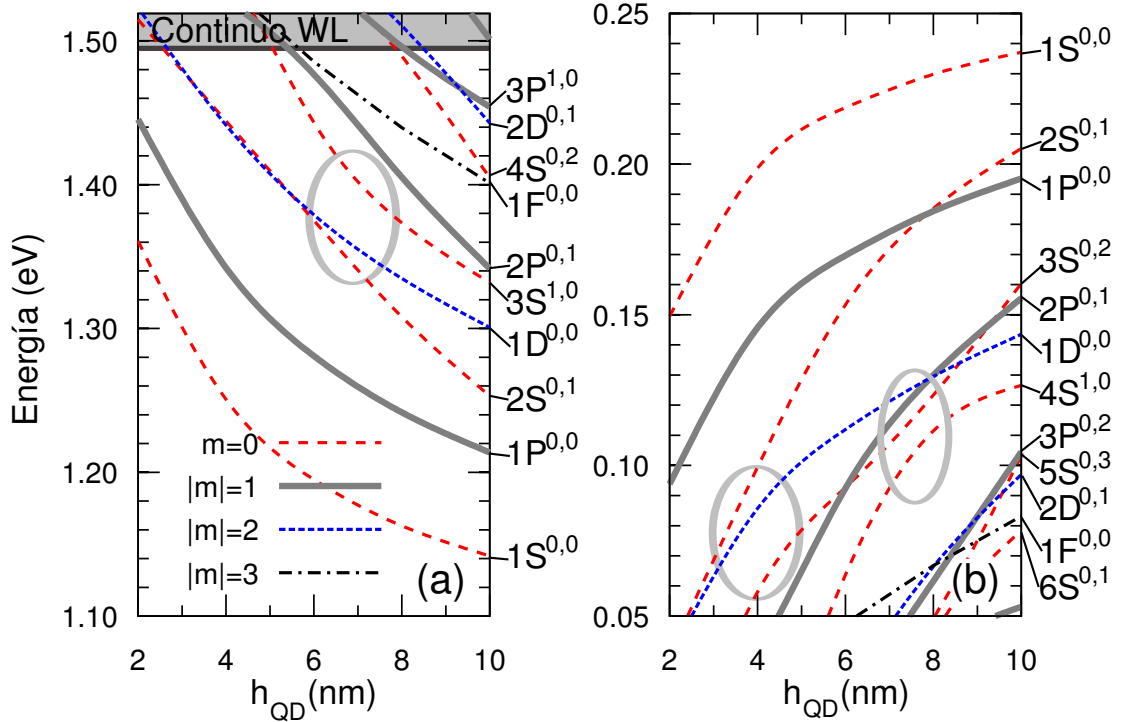


Figura 3.9: Energía de los estados confinados en la banda de conducción (a) y en las de valencia (b). La zona sombreada indica la zona del espectro continuo. Las etiquetas identifican a los estados con $h_{\text{QD}} = 10$ nm.

La energía de confinamiento del estado fundamental de electrón (E_{Conf}^e) y de hueco (E_{Conf}^h) se determina refiriendo las energías de los dos tipos de estados al borde de banda correspondiente:

$$E_{\text{Conf}}^e = E^e - E_c, \quad (3.27a)$$

$$E_{\text{Conf}}^h = E_{hh} - E^h. \quad (3.27b)$$

Para el rango de h_{QD} considerado obtenemos que E_{Conf}^e varía dentro del rango $\sim 300 - 85$ meV y que E_{Conf}^h lo hace dentro del rango $\sim 125 - 35$ meV, para el valor de h_{QD} mínimo y máximo, respectivamente. Es fácil comprobar que la ratio $E_{\text{Conf}}^e/E_{\text{Conf}}^h$ se mantiene aproximadamente constante (~ 2.4) para los valores de h_{QD} considerados, siendo el confinamiento mucho más intenso para los estados de la banda de conducción que para los estados de la banda de valencia. El origen de

este comportamiento atiende a dos razones. Por un lado tenemos que el desalineamiento de las bandas de conducción ($E_c^{\text{GaAs}} - E_c^{\text{InAs}} = 465$ meV) es mayor que el desalineamiento de las bandas de huecos pesados ($E_{hh}^{\text{InAs}} - E_{hh}^{\text{GaAs}} = 276$ meV), y por otro lado tenemos que las masas efectivas son mayores para la banda de huecos pesados que para la banda de conducción ($m_e < m_{hh}$), véase la Tabla 3.1. Como es bien sabido al aumentar la masa efectiva, la energía de confinamiento se reduce aumentando la localización de la función de onda. Todo ello hace que los estados de electrón experimenten un confinamiento más intenso que los estados de hueco hh .

La energía de confinamiento de los estados de electrón se reduce en ~ 225 meV al aumentar h_{QD} entre 2 y 10 nm. Para los estados de hueco, dicha reducción es significativamente menor ~ 85 meV. De este resultado también se desprende que los estados de electrón están más confinados que los estados de hueco. El origen de tal comportamiento también se puede explicar a través de las relaciones entre las barreras de potencial y las masas efectivas.

A continuación realizaremos una discusión comparativa de la intensidad del confinamiento en las diferentes direcciones siguiendo el mismo esquema que en el apartado 3.1.4. Como vimos en dicho apartado, mientras que es posible cuantificar la intensidad del confinamiento angular de forma exacta, únicamente es posible discutir los confinamientos radiales y verticales cualitativamente, a partir de los pseudo-números cuánticos.

Confinamiento vertical: La diferencia en energía entre los estados $1S^{0,0}$ y $2S^{0,1}$ nos permitirá estimar la intensidad del confinamiento vertical. Para el QD con $h_{\text{QD}} = 10$ nm, esta diferencia resulta ser de ~ 110 meV y ~ 35 meV para los estados de las bandas de conducción y valencia respectivamente. Nuevamente se aprecia un régimen de confinamiento diferente entre los dos tipos de estados. Al realizar el mismo estudio en un QD de altura menor, debemos advertir la aparición de diferentes anticruces en los que participan los mencionados estados (ver elipses en las gráficas). Tras estudiar las funciones de onda de los estados correspondientes al QD de menor altura es posible determinar que la diferencia de energía entre $1S^{0,0}$ y $2S^{0,1}$ alcanza un valor máximo de ~ 275 meV para los estados de electrón y de ~ 150 meV para los estados de hueco.

Confinamiento radial: Ahora nos fijaremos en la energía de los estados de electrón $1S^{0,0}$ y $3S^{1,0}$ y los estados de hueco $1S^{0,0}$ y $4S^{1,0}$. Para $h_{\text{QD}} = 10$ nm, encontramos una diferencia de energía igual a ~ 190 meV y ~ 110 meV, respectivamente. Al considerar alturas menores, hay que considerar de

nuevo que los estados participan en anticruces. Para los estados de electrón la diferencia de energía se reduce a ~ 154 meV para $h_{\text{QD}} = 2$ nm. Por otra parte, para los estados de hueco ésta se mantiene en ~ 110 meV para el QD de menor altura. Observamos que en la banda de valencia el confinamiento radial es aproximadamente igual para el rango de alturas estudiado, mientras que en la banda de conducción se observa una reducción importante. Este resultado que en principio puede sorprender, pues hemos considerado R_{QD} constante en todo momento, pone en evidencia que en los estados de electrón existe un acoplamiento mayor entre los movimientos vertical y radial, como se puede comprobar de la comparación de las masas efectivas en las dos direcciones para cada tipo de estado: $m_{e,\perp}/m_{e,z} = 1.56$ y $m_{hh,\perp}/m_{hh,z} = 4.86$. En los huecos la intensidad relativa entre el confinamiento vertical y radial es más diferente que en los electrones.

Confinamiento angular: La separación de energía entre estados con igual N_m y diferente m ($1S^{0,0}$ y $1P^{0,0}$) resulta ser en el QD con $h_{\text{QD}} = 2$ nm igual a ~ 85 meV y ~ 55 meV para los estados de electrón y hueco, respectivamente. Al considerar el QD con $h_{\text{QD}} = 10$ nm, estas diferencias de energía disminuyen a ~ 70 meV y ~ 40 meV, respectivamente. Vemos que la energía de cuantización angular se reduce en ~ 15 meV al reducir h_{QD} , reflejando una débil dependencia con este parámetro.

h_{QD} (nm)	BC		BV	
	2	10	2	10
Conf. angular (meV)	85	70	55	40
Conf. vertical (meV)	> 275	110	150	35
Conf. radial (meV)	154	190	110	110

Tabla 3.2: Energías de cuantización asociadas a los confinamiento angular, vertical y radial, para los estados de la banda de valencia y conducción. Los valores han sido obtenidos del análisis de la Figura 3.9, ver texto.

En la Tabla 3.2 hemos recogido los valores representativos de las diferencias de energías entre estados asociadas a los diferentes tipos de confinamiento. En el QD de menor altura, el confinamiento angular es el de menor intensidad, mientras que el confinamiento vertical resulta ser el más intenso, quedando el confinamiento radial en un valor intermedio. Para el QD de altura mayor, el confinamiento vertical y angular resultan ser comparables y el radial pasa a ser el más intenso, como consecuencia del aumento de la altura del QD.

Aunque el procedimiento seguido presenta ciertas limitaciones, hemos sido capaces de estudiar pormenorizadamente los regímenes de confinamiento en un QD

axialmente simétrico a partir de la representación de los niveles de energía de los estados confinados y del análisis de las funciones de onda. Ello nos ha permitido profundizar en la física del sistema y ver cómo las masas efectivas, las barreras de confinamiento y las dimensiones del QD influyen en las energías de confinamiento.

Análisis de las propiedades ópticas

Una vez concluida la discusión de la estructura electrónica, vamos a pasar a estudiar las propiedades ópticas. En la Figura 3.10 hemos representado los espectros de absorción para diferentes valores de h_{QD} calculados con la Ec. (1.74). Hemos considerado únicamente luz polarizada en el plano, ya que la contribución a la absorción de la luz con polarización paralela a la dirección de crecimiento es despreciable. Téngase en cuenta que al no haber considerado estados de hueco provenientes de las bandas lh y so , las funciones de onda de los estados confinados no tienen carácter $|Z\rangle$ (ver Tabla 1.4) y por tanto la respuesta óptica a un campo $\hat{e}_z \mathbf{p}$ es nula. Todas las transiciones han sido etiquetadas siguiendo la notación:

$$\left[\underbrace{(N_m m^{n_\rho, n_z})}_e, \underbrace{(N_m m^{n_\rho, n_z})}_h \right], \quad (3.28)$$

Las zonas sombreadas indican la región en la que es posible encontrar transiciones entre estados confinados y estados del continuo [185], el límite inferior de la región más oscura coincide con la energía de transición entre el estado fundamental de electrón de la WL y el estado fundamental de hueco del QD: $E_{\text{B-C}}^h = E_e^{\text{WL}} - E_h^{1S^{0,0}}$. La región más clara representa la transición que tiene lugar entre el estado fundamental de electrón del QD y el estado fundamental de hueco de la WL: $E_{\text{B-C}}^e = E_e^{1S^{0,0}} - E_h^{\text{WL}}$. En general, se verifica que $E_{\text{B-C}}^e < E_{\text{B-C}}^h$. Los diferentes espectros muestran un corrimiento hacia el rojo de ~ 300 meV al aumentar h_{QD} . Dicho corrimiento es aproximadamente igual a la suma de la variación de la energía de confinamiento de los estados de electrón y de hueco extraída de la Figura 3.9. Además, también es posible apreciar un considerable aumento del número de transiciones con la altura del QD que se corresponde con la aparición de estados confinados en el interior del QD.

Recordemos que la única regla de selección válida para este sistema era aquella asociada a la simetría axial del problema, i.e. el estado inicial y final deben tener igual m (ver Ec. (3.20)). Sin embargo, en los espectros de la Figura 3.10 se puede observar que las transiciones de mayor intensidad se producen entre los estados de electrón y de hueco con los mismo valores de n_ρ y n_z . Así pues es posible interpretar en términos cualitativos como si n_ρ y n_z se debieran conservar. Únicamente en las

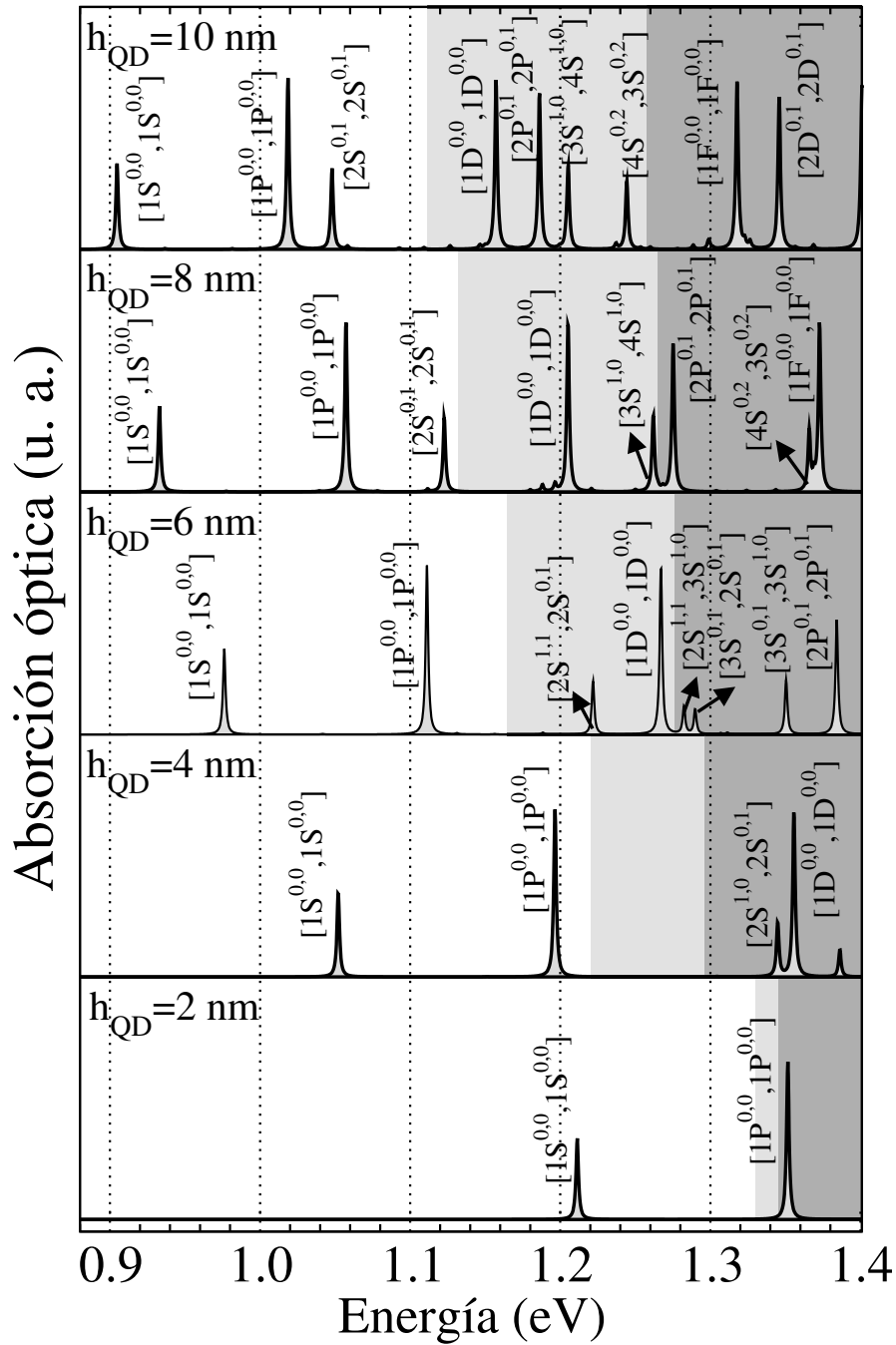


Figura 3.10: Espectros de absorción para luz incidente polarizada de forma circular. Todos los espectros están representados en la misma escala y han sido desplazados verticalmente por claridad. La notación se explica en el texto. Hemos introducido un ensanchamiento homogéneo artificial igual a 2.5 meV. Las zonas sombreadas representan E_{B-C}^e (clara) y E_{B-C}^h (oscura), ver texto

regiones próximas a un anticruce, donde el acoplamiento entre estados es tan fuerte que los números n_ρ y n_z dejan de tener sentido, esta “regla” de selección aproximada deja de cumplirse, e.g. para $h_{\text{QD}} = 4$ nm encontramos una transición $[2S^{1,0}, 2S^{0,1}]$. Otro aspecto que merece ser resaltado es la intensidad relativa entre las diferentes transiciones y los diferentes tamaños. En general las transiciones tipo S tienen una intensidad que es, en la mayoría de los casos, la mitad de las tipo P , D , Esto es debido a la degeneración $\pm m$: los estados con $m = 0$ están doblemente degenerados y aquellos con $m \neq 0$ cuádruplemente, por lo que la relación entre la intensidad de los correspondientes picos es 1:2. Por otra parte, al aumentar la altura del QD no se observan cambios significativos en la intensidad de las transiciones. Esta propiedad revela que, en el marco de nuestro modelo, la eficiencia óptica presenta una gran estabilidad frente a fluctuaciones de altura del QD.

Comparación con resultados experimentales

Tal y como se vio en la Sección 1.2, los QDs obtenidos por el grupo de P. M. Petroff [3] presentan una forma lenticular con un diámetro en la base igual a 20 nm y una altura 6-7 nm (ver Tabla 1.2). La caracterización óptica por técnicas de transmisión y absorción a la que fueron sometidos reveló, entre otras cosas, que la energía de la transición fundamental se localiza ~ 1.1 eV [183, 184]. En la Figura 1.2 reproducimos el espectro de absorción de estas nanoestructuras. Al comparar la energía obtenida experimentalmente con los espectros de la Fig. 3.10 encontramos que, de acuerdo con el modelo, la altura media de los QDs estaría entre 2 y 4 nm. Esta altura es significativamente menor que la reportada experimentalmente. La energía de emisión de un QD de $h_{\text{QD}} = 6$ nm resulta ser ~ 0.97 eV, esto es 130 meV menor que la observada experimentalmente. Por una parte, este origen se puede atribuir a las aproximaciones realizadas hasta este punto (recordemos que se ha excluido del modelo el acoplamiento entre las bandas, la parte inhomogénea de la distribución de la deformación y la interacción de Coulomb). Por otra parte, también puede achacarse a una incorrecta elección de los parámetros estructurales escogidos para describir estas nanoestructuras (forma, tamaño o composición). En secciones posteriores, al incorporar más elementos en el modelo teórico, intentaremos elucidar cuál puede ser el origen de esta discrepancia.

Dejando a un lado la energía de transición del estado fundamental, vamos a analizar otros resultados experimentales. En el espectro de absorción mostrado en la Figura 1.2 se pueden distinguir diferentes picos usualmente atribuidos a transiciones entre estados excitados. La diferencia de energía entre los dos primeros picos resulta ser ~ 85 meV. Por otro lado, las transiciones $[1S^{0,0}, 1S^{0,0}]$ y $[1P^{0,0}, 1P^{0,0}]$

de los espectros de la Figura 3.10 presentan una separación en energía que varía en función de h_{QD} entre ~ 140 meV y ~ 110 meV. Si establecemos como hipótesis que estas dos transiciones corresponden a las dos primeras resonancias de espectro experimental llegamos nuevamente a un desacuerdo entre el valor experimental y el teórico. En el Capítulo 1 se comentó que el espectro de absorción permitía, entre otras cosas, estudiar la intensidad relativa entre la resonancia fundamental y la de los estados excitados. Experimentalmente se observa una relación $\sim 3:5$ entre ambas resonancias. Nuestro modelo predice, sin embargo, una relación 1:2, como se vio en la discusión de la Figura 3.10. En consecuencia, el modelo de una única banda subestima la intensidad de la transición fundamental o sobrestima la de los estados excitados. En Secciones posteriores volveremos sobre estas cuestiones.

Ahora vamos a pasar a discutir las propiedades de las funciones de onda de los estados de electrón y hueco. El estudio experimental de las funciones de onda es extremadamente complicado. En efecto, aunque existen trabajos publicados en los que se ha conseguido realizar la reconstrucción de la función de onda de un electrón en un QD de InAs/GaAs [186, 187], esta tarea sigue representando un reto experimental. Sin embargo, es posible obtener información sobre la función de onda de forma indirecta. El procedimiento más extendido consiste en la determinación de la energía y la fuerza de oscilador de las transiciones ópticas [188] y la posterior determinación del momento dipolar permanente [16].

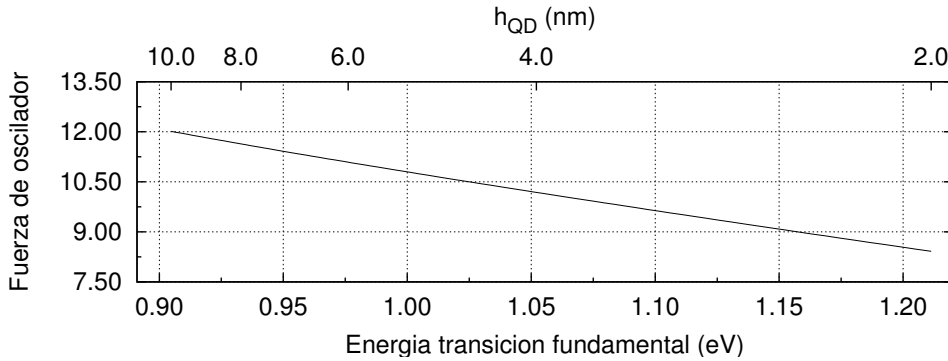


Figura 3.11: Fuerza de oscilador calculada para los QD de la Fig. 3.9 y representada en función de la energía de la transición fundamental.

La definición de la fuerza de oscilador que hemos adoptado en este trabajo para un modelo de una única banda en ausencia de interacción de Coulomb, se escribe como [183]:

$$f = \frac{E_p}{2E_{\text{tr}}} |\langle \Psi_{n,e}^{(m)} | \Psi_{n,h}^{(m)} \rangle|^2, \quad (3.29)$$

donde E_p es la energía de Kane (ver Ec. (1.27)) y $E_{tr} = E_e^{(m)} - E_h^{(m)}$ es la energía de la transición. Vemos que esta magnitud es proporcional al cuadrado del solapamiento de las funciones de onda de los estados de electrón y de hueco, por lo que guarda una estrecha relación con la distribución espacial de las funciones de onda. Un estudio en detalle de f fue realizado por R. Warburton *et al.* [188] sobre muestras crecidas por el grupo de P. M. Petroff [3, 14]. La fuerza de oscilador es calculada a partir de la intensidad integrada de la absorción medida para el estado fundamental. Conociendo la densidad de puntos cuánticos, es posible estimar el número de transiciones que contribuyen a la absorción y a partir de ahí, hallar el valor de la fuerza de oscilador de una única transición. El valor obtenido experimentalmente es $f = 10.9$. En la Figura 3.11 hemos representado el valor de f calculado con nuestro modelo. Debemos recordar que la energía de la resonancia fundamental estaba situada entorno a 1.1 eV. Para esta energía hallamos $f \sim 9.75$. De forma que el error relativo que estamos cometiendo es aproximadamente de un 10 %. Con frecuencia se utiliza el valor de $E_p = 25.7$ eV correspondiente al GaAs por ser este parámetro mejor conocido en este sistema [21, 188], sin embargo, nosotros venimos utilizando el del InAs, $E_p = 22.2$ eV. Al multiplicar el valor teórico de f por $E_p^{\text{GaAs}}/E_p^{\text{InAs}}$ obtenemos $f = 11.3$, reduciéndose el error relativo a un 4 %. Por otra parte, aunque no se ha publicado una estimación del error de f , éste puede ser calculado a partir del error de la medida de la integral de la intensidad (I_A) y de la densidad de QDs (N_{QD}). Sabiendo que $f \propto I_A/(2N_{\text{QD}})$, $I_A = (5.2 \pm 0.2) \times 10^{-6}$ eV, $N_{\text{QD}} = (5 \pm 1) \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ y siguiendo la teoría estándar de propagación de errores llegamos a $f = (10.9 \pm 2)$, i.e. un error relativo de un 18 %. Por lo que el valor mismo de la medida también contiene una gran indeterminación. En cualquier caso esta cantidad, pese al error asociado, puede resultar muy útil en un estudio sistemático de diferentes puntos cuánticos con energías de absorción diferentes. Lamentablemente, hasta donde nosotros sabemos tal estudio no ha sido realizado.

La segunda magnitud relacionada con la función de onda de los estados confinados que vamos a estudiar es el momento dipolar, que se define como asociado a las densidades de carga de los estados de electrón y de hueco que participan en una transición óptica dada. La definición que hemos utilizado es:

$$\mathbf{p}_{eh} = q_e \langle \mathbf{r}_e \rangle + q_h \langle \mathbf{r}_h \rangle = e(\langle \mathbf{r}_h \rangle - \langle \mathbf{r}_e \rangle) = e \mathbf{r}_{eh}, \quad (3.30)$$

donde \mathbf{r}_e y \mathbf{r}_h son los centros de carga de las densidades de probabilidad para los estados del electrón y el hueco, respectivamente, y e es el módulo de la carga del electrón. En la Figura 3.12 (a) hemos representado los valores obtenidos de p_{eh} , $\langle z_h \rangle$ y $\langle z_e \rangle$ para los estados de electrón y de hueco que participan en la transi-

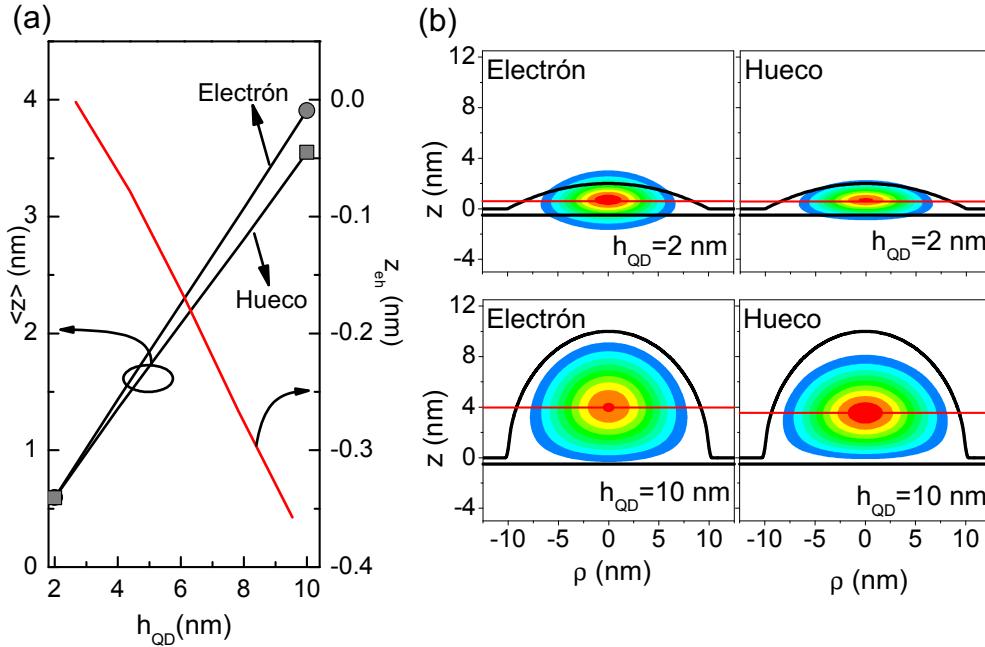


Figura 3.12: En (a) valor esperado de la posición vertical del estado fundamental de electrón y de hueco y de la distancia entre ambos para puntos cuánticos de iguales dimensiones que los estudiados en la Figura 3.9. En (b) densidad de probabilidad del estado fundamental de electrón y de hueco de los QD de mayor y menor tamaño. La línea horizontal representa los puntos marcados en (a).

ción fundamental. Con el fin de ilustrar la distribución espacial de la función de onda hemos representado en el panel (b) la densidad de probabilidad del estado fundamental de los QDs estudiados de mayor y menor tamaño. La línea horizontal indica los valores representados en el panel (a). Para el caso del QD de menor altura, el valor esperado de la posición se localiza en torno a $(h_{\text{QD}} + d_{\text{WL}})/2$. A medida que h_{QD} aumenta, el electrón y el hueco se separan espacialmente localizándose el hueco por debajo del electrón. Ello es debido a que el valor de $m_{hh,z}$ es mayor que $m_{e,z}$, por lo que el estado de hueco está más localizado verticalmente que el de electrón. Además hay que tener en cuenta que el QD es más ancho en la región inferior que en la superior, resultando en una localización de la función de onda del hueco más próxima a la región de la base que la del estado de electrón. En consecuencia, se obtiene un valor negativo de p_{eh} . Sin embargo, esto también conlleva una disminución de la fuerza de oscilador, como se puede comprobar en la Figura 3.11. En efecto, examinando las funciones de onda representadas en el panel (b), vemos que, debido a la penetración del electrón en la barrera, el solapamiento disminuye con el tamaño y por consiguiente el valor de f . Experimentalmente, el

momento dipolar p_{eh} se determina midiendo la energía de emisión en función de un campo eléctrico externo aplicado paralelamente a la dirección de crecimiento [16]. Se puede demostrar por teoría de perturbaciones hasta segundo orden, que la energía del estado fundamental sigue una ley cuadrática:

$$E_{tr}(F) = E_{tr}(0) - p_{eh}F - \beta_{eh}F^2, \quad (3.31)$$

donde E_{tr} es la energía de transición a campo cero, el coeficiente lineal es el momento dipolar y el del cuadrático es la polarizabilidad. Tras realizar un ajuste de los datos experimentales con la Ec. (3.31), es posible determinar p_{eh} . Debemos destacar que un error en la estimación de F lleva necesariamente a un error en la determinación de p_{eh} y β_{eh} .

Los valores hallados por diferentes grupos de investigación en diferentes tipos de QDs, son tanto negativos como positivos. Entre los positivos encontramos $r_{eh} = 0.4$ nm [16], $r_{eh} = 0.5$ nm [189] y $r_{eh} = 0.62$ nm [190]. La explicación de por qué se localiza el hueco por encima del electrón en esos casos, se asocia a la existencia de un gradiente de concentración de indio, que es máxima en la parte superior del QD y decrece en dirección a la base [112, 178, 191]. Sin embargo, un estudio teórico más detallado [192], advierte que debido a la anisotropía inducida por el campo de deformación, para algunas geometrías la energía de transición no tiene una dependencia parabólica con el campo eléctrico. Por consiguiente, la expresión (3.31) deja de ser válida y los resultados del ajuste pueden resultar erróneos. Por otra parte, R. Warburton *et al.* encontraron valores negativos de p_{eh} en el estudio de anillos cuánticos [193]. En dicho trabajo se distinguían tres familias de nanoestructuras según la energía de emisión y, a su vez, tres valores diferentes de r_{eh} : ~ -0.25 nm para una emisión centrada en 1.27 eV, ~ -0.5 para 1.3 eV y finalmente entre -1 y -2.5 para 1.34 eV. Atendiendo a los resultados de nuestro modelo (ver Fig. 3.12), sólo la primera familia estaría de acuerdo con los resultados teóricos aquí mostrados. En la segunda familia la energía de emisión es mayor, y también lo es p_{eh} , comportamiento que resulta anómalo en el marco de nuestro modelo. Mas paradójico es el resultado obtenido para la tercera familia, pues para unas nanoestructuras de altura promedio de 2 nm [163] se obtienen valores de separación electrón-hueco de igual magnitud.

Recientemente Y. M. Park *et al.* han hallado un valor de -0.4 nm en QDs con una emisión ~ 1.0 eV a 300 K [194]. La corrección por la temperatura de la energía obtenida en nuestros cálculos resulta ser de ~ -60 meV, por lo que el valor de r_{eh} asociado sería de -0.6 nm. Por tanto, en este caso nuestro modelo estaría sobrestimando el valor del momento dipolar. Es difícil establecer el origen del

desacuerdo, pues los autores no dan detalles estructurales de los QDs ni facilitan ninguna referencia bibliográfica a la que recurrir. El último resultado experimental de p_{eh} que comentaremos es el obtenido por P. Jin *et al.* [195]. En este trabajo la energía de emisión de las nanoestructuras está centrada en 1.165 eV y el valor hallado para la separación de los portadores es también de -0.4 nm. Nuestro modelo establece un valor aproximadamente igual. Por una parte, puede deberse a que estas muestras han sido crecidas a 460 °C, i.e. a baja temperatura, razón por la cual la migración de indio pueda verse atenuada. Por otra parte, el valor del campo aplicado F ha sido estimado analizando las oscilaciones de Franz-Keldysh en medidas de electroreflectancia, encontrándose una relación no lineal entre el voltaje aplicado y el campo en el interior del dispositivo. En el resto de trabajos se ha considerado una relación lineal característica de un condensador plano-paralelo. Parece pues que el método empleado por P. Jin *et al.* es más preciso que el empleado por otros autores, pues considera las particularidades del dispositivo experimental.

3.1.6. Resultados numéricos para el sistema GaN/AlN

En esta Sección vamos a aplicar el modelo de una única banda al estudio de la estructura electrónica de puntos cuánticos de GaN en una matriz de AlN. Aquí también consideraremos que el QD presenta un estado de deformación uniforme de tipo “biaxial”, definido según las Ecs. (1.54). En el Capítulo 1 se describieron las principales diferencias entre este sistema y el InAs/GaAs. Entre las que mayor impacto tienen en las energías de confinamiento está la presencia del potencial electrostático creado por la polarización espontánea y la polarización piezoeléctrica. Con el objetivo de simplificar, el modelo del QD, en esta Sección no incluiremos el potencial interno exacto correspondiente a esta nanoestructura (ver Sección 2.6). A la vista del aspecto que este potencial adopta en el interior del QD (ver Fig. 2.38) vamos a suponer que el potencial interno vendrá descrito a lo largo de esta Sección por:

$$\varphi^{\text{QD}}(\rho, z) = \frac{F}{2}(|z - d_{\text{WL}}| - |z - z(\rho)|), \quad (3.32)$$

siendo d_{WL} el espesor de la WL y $z(\rho)$ el perfil que da la altura del QD para cada valor de ρ . El parámetro F representa la intensidad del campo eléctrico en el interior del QD a lo largo del eje axial.

En las notas introductorias de los SAQDs de GaN/AlN que dimos en el Capítulo 1, establecimos la distribución de tamaños que iba a ser considerada en los cálculos de la estructura electrónica: allí convinimos en considerar QDs con una forma de cono truncado, una ratio $r_{\text{QD}} = R_{\text{QD}}/h_{\text{QD}} = 2.3$ y un ángulo entre la base y la

superficie lateral $\alpha = 30^\circ$. Por otra parte, en el Capítulo 2 vimos que una vez elegida la forma del QD la distribución del campo interno no depende del tamaño, pero sí de r_{QD} . En la Figura 2.43 representamos el valor del campo interno a lo largo del eje axial para diferentes valores de r_{QD} . Tomando como referencia dicha gráfica, es posible considerar el valor de $F \approx 5$ MV/cm como representativo del campo interno en los SAQDs que vamos a analizar.

Finalmente, la ecuación de Schrödinger que nos permitirá describir la estructura electrónica de estas nanoestructuras será:

$$[H - e\varphi^{\text{QD}}(\rho, z)]F_n^{(m)}(\mathbf{r}) = E_{n,m}F_n^{(m)}(\mathbf{r}), \quad (3.33)$$

donde el Hamiltoniano H fue descrito en la Ec. (3.11).

En el Capítulo 1 se discutieron las razones por las que resulta conveniente considerar despreciable la interacción spin-órbita ($\Delta_2 = \Delta_3 = 0$) para construir un modelo de una única banda en el estudio de heteroestructuras tipo wurtzita. La estructura de bandas del GaN en esta aproximación fue representada en la Figura 1.23. En la Tabla 3.3 hemos recogido los valores numéricos de las masas efectivas del GaN que emplearemos en la resolución de la Ec. (3.33) para obtener los estados de electrón de la banda de conducción y los estados de huecos de las bandas A , B y C .

Banda	m_z	m_\perp
e	0.020	0.018
A	1.961	1.923
B	1.961	0.139
C	0.138	1.961

Tabla 3.3: Masas efectivas correspondientes a las diferentes bandas del GaN, obtenidas utilizando los parámetros del Apéndice A y las Ecs. (1.53).

En la Figura 3.13 hemos representado el potencial $V_{\text{QD}}(\rho, z)$ definido por los bordes de las bandas de conducción y valencia del GaN y el AlN despreciando la interacción spin-órbita. Las diferentes bandas han sido etiquetadas utilizando la notación descrita en el Capítulo 1. Una particularidad de este sistema es que el potencial de confinamiento correspondiente a la banda C está intercalado en el potencial correspondiente a las bandas A y B . Esto significa que, dejando aparte los estados confinados en la WL, el límite continuo de las bandas A y B estará localizado en el entorno del borde de energía de la banda C .

Obviamente, el potencial de confinamiento total asociado a un QD de GaN/AlN debe contemplar también el potencial interno, i.e. $V_{\text{QD}}(\rho, z)^{\text{Tot}} = V_{\text{QD}}(\rho, z) -$

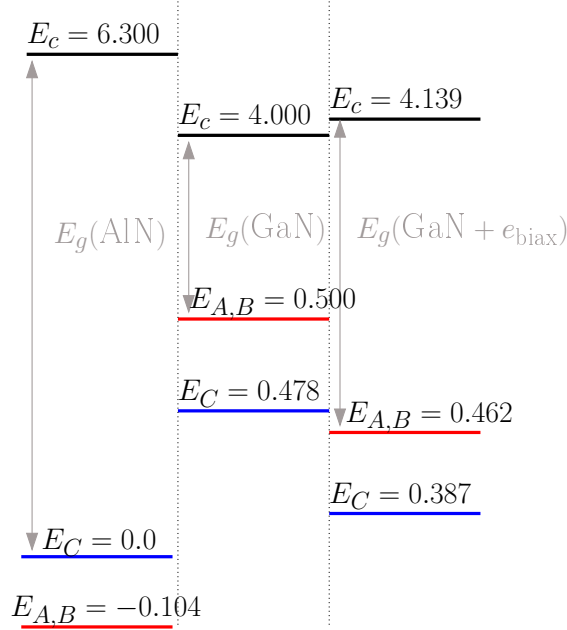


Figura 3.13: Esquema representativo del alineamiento de las bandas del GaN respecto a las del AlN despreciando la interacción *so*. El impacto de una deformación biaxial sobre los bordes de banda del GaN está ilustrado en el panel derecho. Energías expresadas en eV.

$e\varphi^{\text{QD}}(\mathbf{r})$. En la Figura 3.14 hemos representado este potencial para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm considerando un campo interno de 5 MV/cm. Aquí se puede apreciar como en el interior del QD los contornos se aproximan a los correspondientes al potencial interno calculado de forma exacta, véase la Figura 2.38. Sin embargo, vemos que la descripción por este modelo aproximado del potencial en la región de la barrera no es muy adecuada. No obstante, dado que los estados están confinados en el interior del QD, podremos considerar que la descripción del potencial en la barrera desempeña un papel secundario en la descripción del problema.

Tras haber introducido el potencial interno en el modelo de una única banda y haber presentado los valores de los diferentes parámetros de los materiales, podemos pasar a mostrar los resultados numéricos y a su discusión. Antes de realizar el estudio de los QDs de GaN/AlN, hemos estimado interesante realizar una breve descripción de los niveles de energía de un QW basado en este mismo sistema. Ello nos permitirá describir una serie de aspectos relevantes relacionados con el efecto del potencial interno sobre la base de un problema con confinamiento unidimensional, que resulta más fácil de interpretar que el problema tridimensional del QD. Además, aprovecharemos para discutir las energías de emisión asociadas a la WL

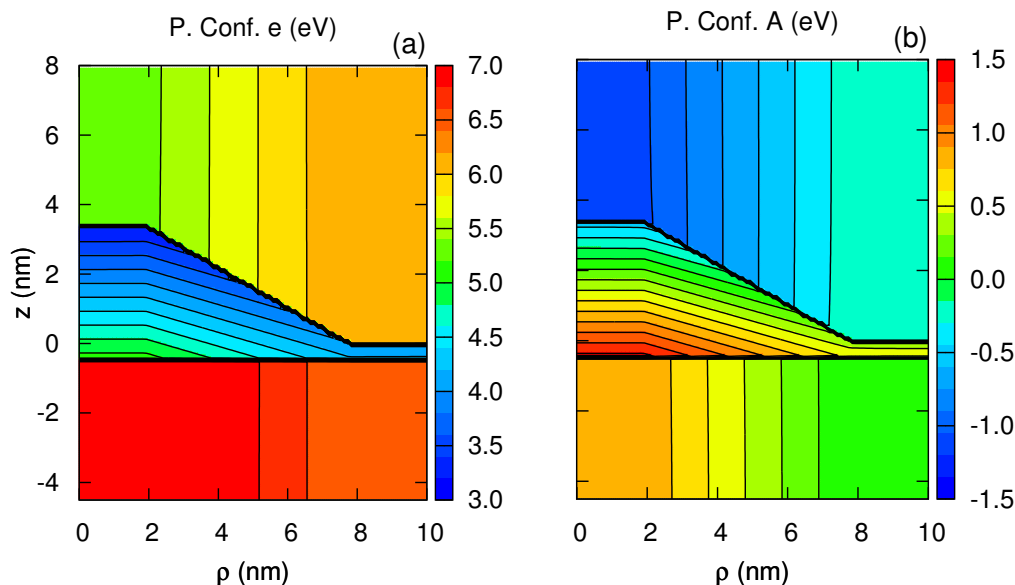


Figura 3.14: Contornos del potencial de confinamiento al que se ven sometidos los estados de electrón de la banda de conducción (a) y hueco de la banda de valencia A (b) por la presencia de un campo interno igual a $F=5$ MV/cm en un QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Valores expresados en eV.

halladas experimentalmente para diferentes muestras y que han sido publicadas en la bibliografía.

Pozo cuántico de GaN/AlN

El pozo cuántico (en inglés “Quantum Well”, QW) de GaN/AlN se describe mediante un modelo teórico que consta de un potencial de confinamiento unidimensional debido al desalineamiento de las bandas, superpuesto con el potencial interno característico de un condensador plano-paralelo. La mayoría de los trabajos publicados sobre el sistema GaN/(Al,Ga)N han sido realizados para pozos cuánticos de GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, donde el contenido de Al es en general menor de 0.3. En particular C. Adelmann *et al.* fabricaron y caracterizaron de forma sistemática una serie de QWs de GaN/AlN con diferentes espesores [196]. En la Figura 3.15 hemos reproducido los valores experimentales de la emisión que obtuvieron en dicha investigación.

Aunque nuestro modelo ha sido desarrollado para describir la estructura electrónica de un QD, es igualmente posible describir un QW introduciendo unas pequeñas modificaciones: en primer lugar hacemos $R_{\text{QD}} = \mathcal{R}$ y posteriormente incrementamos su tamaño hasta que el confinamiento el plano pueda ser considerado despreciable. A continuación, hemos reducido el número de funciones radiales

$N_{\mathcal{R}} = 1$. Con ello, los únicos parámetros relevantes en el modelos son $h_{\text{QD}} + d_{\text{WL}}$, \mathcal{Z} y $N_{\mathcal{Z}}$ y los correspondientes del material. El espesor del QW, $d_{\text{QW}} + d_{\text{WL}}$ viene descrito en el modelo del QD a través de h_{QD} . Al haber reducido el número de funciones radiales, la resolución del problema se puede completar en un espacio de tiempo del orden de decenas de segundos, por lo que para asegurar la bondad de los resultados hemos considerado $N_{\mathcal{Z}} = 50$. Por otra parte, hemos fijado la altura de la caja en 5 nm. Finalmente, hemos calculado el campo interno según (ver Ec. (2.106) del Capítulo 2):

$$F = \frac{P_3^{\text{Tot}}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} = \frac{P_3^{\text{SP}} + 2\varepsilon_{31}e_{xx} + \varepsilon_{33}e_{zz}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (3.34)$$

obteniendo un valor de F igual a 10 MV/cm.

Los resultados obtenidos de nuestro modelo vienen indicados en la Figura 3.15 a través de la línea gris. Como vemos, el desacuerdo entre los datos y nuestros valores es muy grande, siendo de ~ 0.5 eV para el QW de menor espesor y 0.1 para el QW de espesor máximo. Sin embargo, debemos tener en cuenta que los puntos hacen referencia a energías de emisión y los valores obtenidos por nosotros se corresponden con los que se obtendrían en un experimento de absorción. La diferencia existente entre la energía de emisión y la de absorción ha sido estudiada por F. Yang *et al.* en [197] que propone la siguiente fórmula para el corrimiento Stokes: $\Delta E_{\text{tr}} = 0.6 \text{FWHM}$ ⁶. C. Adelman *et al.*, tras analizar los valores obtenidos de FWHM estiman un valor del desplazamiento Stokes de 0.2 eV⁷. Los valores corregidos de las energías se presentan en la Figura 3.15 con una línea negra. Con esta corrección el desacuerdo se reduce en $\sim 50\%$, aunque sigue existiendo una diferencia de cientos de meV para los QW de menor espesor. No vamos a profundizar más en el análisis de estos datos experimentales pues en esa región, la gráfica presenta una pendiente muy pronunciada y el desacuerdo es posible atribuirlo, en gran medida, al error experimental. Baste con decir que una fluctuación de 0.5 ML (ver eje de abscisas superior), se traduce en un cambio de 0.25 eV en la energía de emisión. Tal sensibilidad a la anchura del pozo se debe, en gran parte, a la intensidad del campo interno y, en menor medida, a la intensidad del confinamiento.

A continuación, utilizaremos los resultados de la Fig. 3.15 para estudiar las energías de emisión asociadas a la WL medidas experimentalmente en diferentes muestras de GaN/AlN. Dichas medidas se muestran en el eje de energías de la

⁶Anchura a media altura (FWHM de la terminología inglesa, Full Width at Half Maximum)

⁷Debemos advertir que en [197] no se analizaron datos del sistema GaN/AlN, ni de ningún otro sistema de tipo polar. Por lo que no se ha verificado rigurosamente que la fórmula mostrada en el texto sea válida en este sistema.

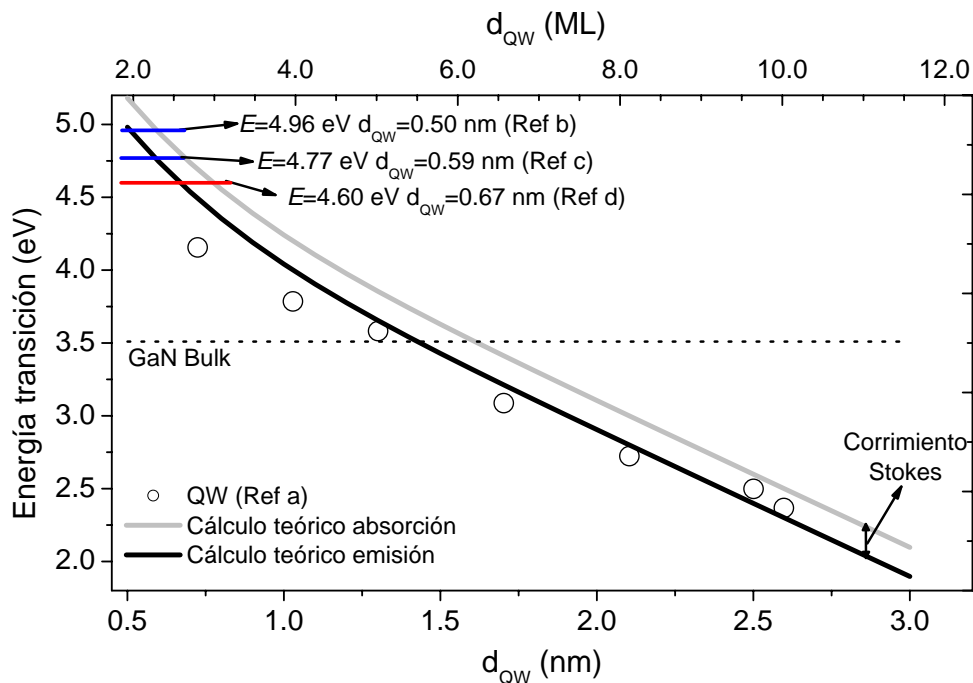


Figura 3.15: Energía de la transición fundamental para QWs de diferentes espesores. Los puntos y las líneas horizontales muestran los valores experimentales obtenidos para las referencias: a [196], b [56], c [52] y d [54]. La curva gris muestra el resultado de nuestro cálculo y la negra representa los mismos valores desplazados según el corrimiento Stokes debido a inhomogeneidades (ver texto).

gráfica. Junto a cada valor de la energía de emisión de la WL hemos indicado el espesor d_{QW} leído sobre la curva teórica. A las tres estructuras bidimensionales el modelo les asocia una anchura de ~ 2 ML (~ 0.5 nm). Este es el valor observado experimentalmente por TEM en la Ref. [54] para la WL con emisión en 4.60 eV. Las otras dos estructuras han sido procesadas por el grupo de Y. Arakawa y en las correspondientes referencias se les asocia un espesor que varía entre 3 y 4 ML. Para estos espesores, sin embargo, el modelo predice unas energías de emisión significativamente menores (desplazadas ~ 0.4 -1 eV respecto al valor experimental). Lamentablemente, no disponemos de más información acerca de las muestras sobre las que investigar este desacuerdo. En adelante, al referirnos a la WL en el sistema GaN/AlN, consideraremos una nanoestructura bidimensional de 2 ML de espesor, ya que el valor experimental de la emisión y el obtenido teóricamente presentan un buen acuerdo.

Con el fin de entender mejor la dependencia de la energía con el espesor del QW, hemos representado las energías de confinamiento del estado fundamental

de electrón y de hueco en la Figura 3.16. Éstas son máximas para el QW más estrecho. Al aumentar d_{QW} se reduce rápidamente y finalmente se hace constante. La pendiente de la curva es más pronunciada para el estado de hueco que para el estado de electrón debido a la gran diferencia existente entre las masas efectivas $m_{z,A} \gg m_{z,e}$. Este comportamiento indica que la influencia del confinamiento cuántico es únicamente relevante para espesores $d_{\text{QW}} \lesssim 1.0$ (1.5) nm para huecos (electrones). En consecuencia, para valores superiores a $d_{\text{QW}} \gtrsim 1.5$ nm la energía de transición se reduce linealmente, siendo la pendiente igual a:

$$\frac{\Delta E_{\text{tr}}}{\Delta d_{\text{QW}}} = -e \frac{P_3^{\text{Tot}}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} = 1 \text{ eV/nm.} \quad (3.35)$$

Este resultado pone de manifiesto una vez más la crítica dependencia de la energía de emisión con el tamaño de la estructura.

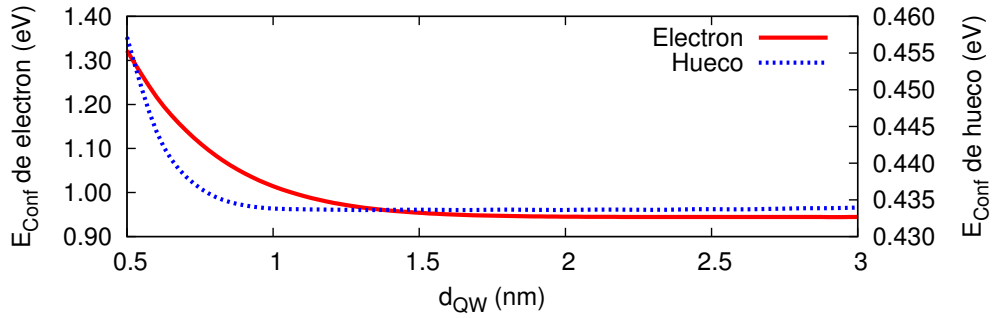


Figura 3.16: Energías de confinamiento del electrón y del hueco en función del espesor del QW.

Punto cuántico de GaN/AlN

Tras haber estudiado el problema del QW pasaremos a tratar el problema del QD. En el Apartado 3.1.1 se dijo que la energía del estado fundamental de la WL, constituía el inicio del espectro continuo del sistema QD+WL. Esto, aunque es cierto para la mayoría de sistemas, no resulta ser así en el caso del GaN/AlN. Para establecer de forma más clara el rango del espectro discreto de energías del QD hemos dibujado en la Figura 3.17 la configuración del potencial de confinamiento para el QD y la WL incluyendo el potencial interno. Las líneas horizontales de puntos indican los límites del espectro discreto para los estados de electrón (E_{Cont}^e) y de hueco (E_{Cont}^h) en cada caso. La línea situada en el mínimo del potencial de confinamiento indica el límite inferior del espectro discreto para los electrones.

Tomando este valor como referencia, es posible determinar la energía de confinamiento del estado fundamental $E_{\text{Conf}}^{e,h}$. El límite superior del espectro discreto será, o bien, el valor del potencial en el material de la barrera, o bien, el estado fundamental de la WL. En cada caso, aquel que esté situado a una energía menor (mayor) constituirá dicho límite. Para la situación mostrada en la Figura, el valor que marca el inicio del espectro continuo es la energía de la barrera ya que la energía de la WL se sitúa por encima.

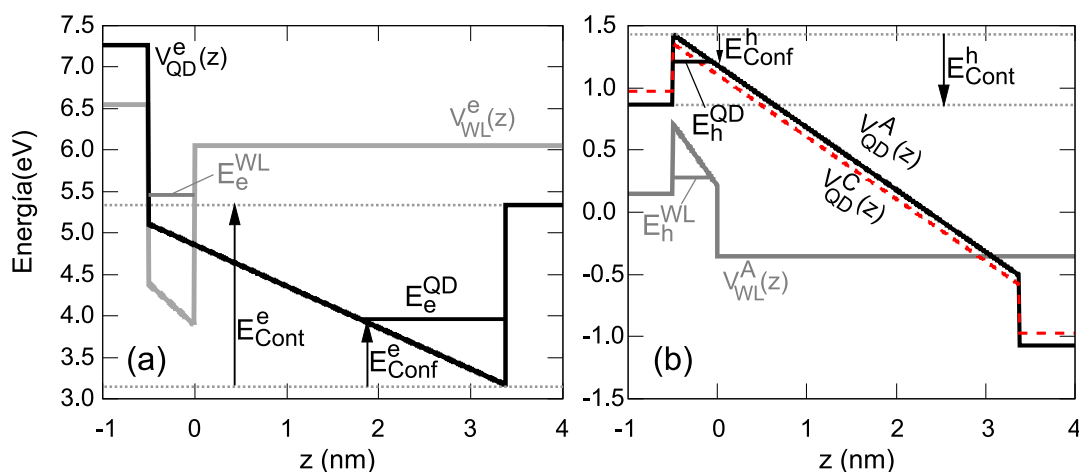


Figura 3.17: Perfiles del potencial de confinamiento de electrones (a) y huecos (b) para el QD y la WL en la dirección del eje axial del QD. En los paneles (a) y (b), V_{QD}^k representa el potencial de confinamiento total del QD correspondiente a la banda k . Este índice toma los valores e para la banda de conducción, y A , B y C para las bandas de valencia. Análogamente, V_{WL}^k representa el potencial de confinamiento correspondiente a la WL. Por otra parte, $E_{e,h}^{\text{QD}}$ y $E_{e,h}^{\text{WL}}$ representan la energía del estado fundamental de la banda de conducción (e), o valencia (h), en el QD y WL, respectivamente. Se ha considerado un QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm.

A diferencia del procedimiento empleado en el sistema InAs/GaAs, ahora hemos expresado el tamaño del cilindro de expansión en función de las dimensiones del QD: $\mathcal{R} = R_{\text{QD}} + 1.5$ nm y $\mathcal{Z} = h_{\text{QD}} + 2.5$ nm. La considerable reducción de estos dos parámetros respecto a los valores empleados en el sistema tipo zincblenda se debe a la localización que exhiben ahora las funciones de onda de los estados confinados, como se puede concluir de la comparación de los valores de las masas efectivas mostradas en las Tablas 1.5 y 3.3, las correspondientes al GaN son aproximadamente un orden de magnitud mayor que las del InAs.

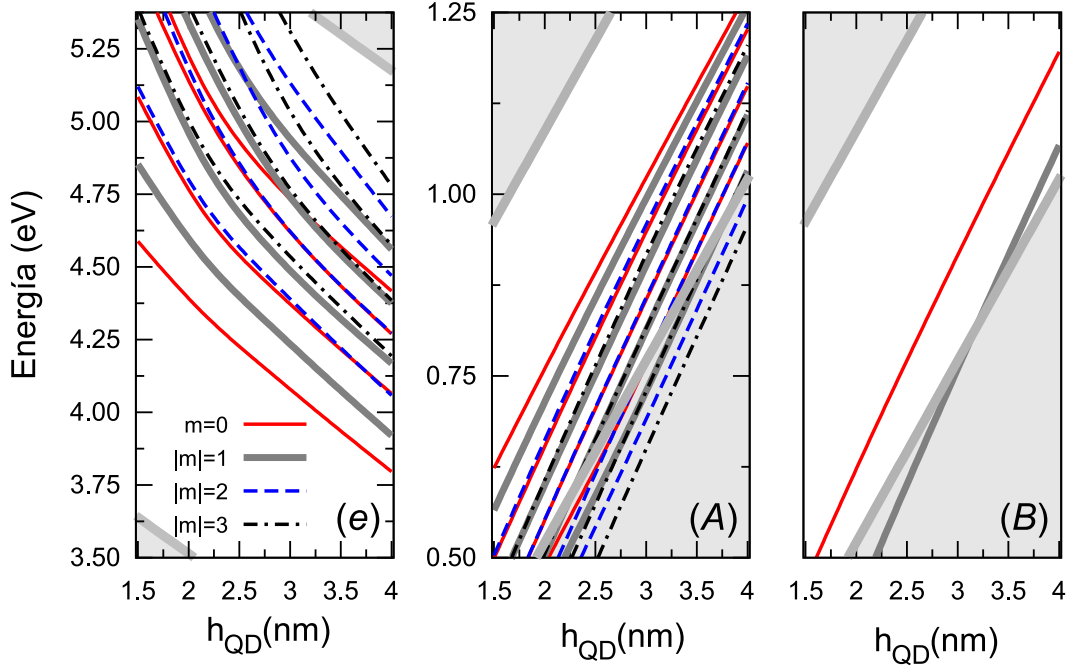


Figura 3.18: Energías de los estados confinados de electrón (e), y hueco asociados a las bandas de valencia A y B . Hemos incluido los cuatro primeros estados de menor energía de confinamiento para los valores de $|m| = 0, 1, 2$ y 3 . Las zonas sombreadas indican el espectro continuo de acuerdo con el esquema de la Figura 3.17.

Análisis de la estructura electrónica

En la Figura 3.18 hemos representado los niveles de energía con $|m| = 0, 1, 2$, y 3 , obtenidos para la distribución de tamaños descrita por el ajuste lineal mostrado en la Figura 1.10. Las zonas sombreadas indican los límites del espectro discreto definidos en la Figura 3.17. No hemos mostrado los estados de hueco correspondientes a la banda C por estar su energía por encima del límite que hemos asignado al espectro discreto. La reducción de la energía de confinamiento debida al aumento de tamaño de ~ 0.85 eV para los estados de electrón y de ~ 0.65 eV para los estados de hueco. Aunque la representación de los niveles de energía mostrada en la Figura 3.18 permite la lectura directa de las energías correspondientes a los estados confinados, resulta complicado discutir aspectos relativos a la intensidad del confinamiento, como se hizo en el sistema InAs/GaAs. Es por ello que realizaremos dicho análisis sobre la representación de la energía de confinamiento mostrada en la Figura 3.19, que ha sido calculada para los estados de electrón y hueco siguiendo la definición de E_{Conf} introducida en la Figura 3.17. Junto a cada panel hemos etiquetado los estados utilizando la misma notación

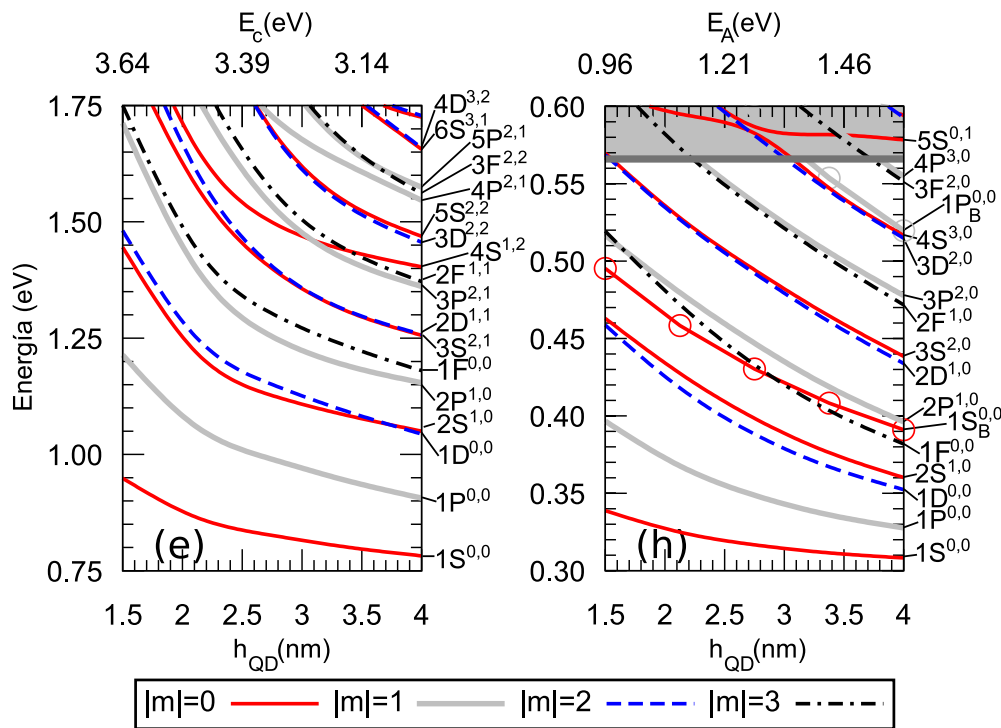


Figura 3.19: Energía de confinamiento de los estados de electrón y de hueco. Los estados de la banda B han sido representados por una línea con puntos para distinguirlos de aquellos asociados a la banda A . La zona sombreada representa el límite del espectro discreto del Hamiltoniano. En el eje de abscisas superior hemos indicado la energía de los bordes de banda E_c y E_A en función de h_{QD} para poder estimar la energía absoluta de los estados mostrados.

que fue introducida en la Figura 3.9. Con ayuda de las etiquetas utilizadas para identificar los estados hemos elaborado la Tabla 3.4, que contiene las energías de cuantización asociadas a los tres tipos de confinamiento. En este sistema el confinamiento radial, tanto para los estados de electrón como de hueco, resulta ser el doble de intenso que el angular, reduciéndose ambos monótonamente al aumentar el tamaño del QD. El confinamiento vertical resulta ser también aquí el más intenso, llegando a ser el doble del confinamiento radial. Comparando con los resultados obtenidos para el sistema InAs/GaAs, observamos que las energías de cuantización son en general mayores en el GaN/AlN. Por una parte, al haber considerado geometrías de menor radio que en el sistema InAs/GaAs es normal que la intensidad del confinamiento radial sea, en general, mayor. Por otra parte, la intensidad del confinamiento vertical se puede explicar por la presencia del campo interno, pues, como se aprecia en la Figura 3.17, el potencial a lo largo de la dirección Z se comporta como un potencial triangular que ejerce un mayor

confinamiento sobre los estados. En su ausencia, la situación sería la opuesta, pues las masas efectivas de las bandas A y B son un orden de magnitud mayores que las de hh y lh en el InAs.

h_{QD} (nm)	BC		BV	
	1.5	4	1.5	4
Conf. angular (meV)	260	130	60	22
Conf. vertical (meV)	1000	500	> 270	270
Conf. radial (meV)	500	250	125	50

Tabla 3.4: Energías de cuantización asociadas a los confinamientos angular, vertical y radial que se desprende del análisis de la Figura 3.19, para los estados de la banda de valencia y conducción.

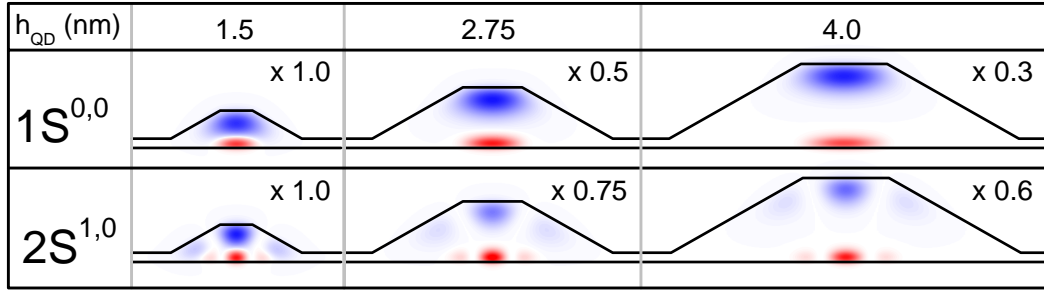


Figura 3.20: Densidad de probabilidad de los estados de electrón (azul) y de hueco (rojo) $1S^{0,0}$ y $2S^{1,0}$ para tres tamaños diferentes del QD. La densidad de probabilidad de los estados de electrón ha sido amplificada un factor 4 por claridad.

Para completar el estudio de la estructura electrónica, hemos representado la densidad de probabilidad de diferentes estados en la Figura 3.20. Hemos escogido para la representación los estados de electrón y de hueco $1S^{0,0}$ y $2S^{1,0}$ para tres tamaños de QDs diferentes. En el QD de menor tamaño las funciones de onda de los estados de electrón y de hueco aparecen ligeramente separadas espacialmente. A medida que el tamaño del QD aumenta, dicha separación se incrementa monótonamente. Paralelamente, la densidad de probabilidad en cada punto se reduce por efecto de la deslocalización. Junto a cada QD hemos indicado el valor del máximo de la densidad de probabilidad normalizado al valor encontrado para el QD de menor tamaño. Comparando los valores obtenidos para el estado $1S^{0,0}$ con los del estado $2S^{1,0}$, observamos que la densidad de probabilidad del estado excitado alcanza un valor mayor que la correspondiente al estado fundamental.

Análisis de las propiedades ópticas

Con el fin de estudiar las propiedades ópticas en este sistema, hemos representado en la Figura 3.21 la absorción óptica calculada con la Ec. (1.74) para cinco

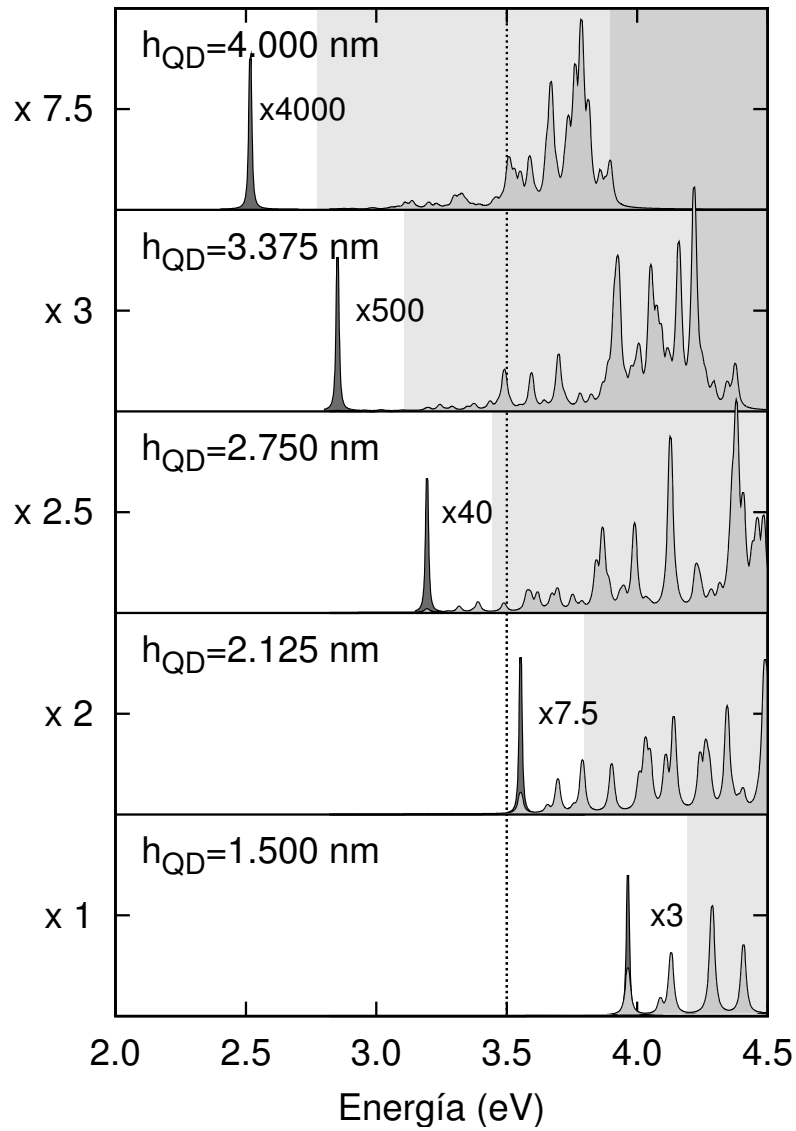


Figura 3.21: Absorción óptica calculada para cinco tamaños diferentes del QD asumiendo la polarización de la luz en el plano. A la izquierda hemos indicado el factor de ampliación aplicado a cada espectro. En cada espectro hemos ampliado la transición fundamental por el factor indicado a la derecha de la resonancia. La línea vertical de puntos indica la posición de E_g^{GaN} . Hemos considerado un ensanchamiento homogéneo igual a 10 meV.

tamaños diferentes contemplados en la distribución mencionada anteriormente. En la parte derecha de cada espectro hemos indicado el valor de h_{QD} . En el cálculo hemos asumido que la luz está polarizada en el plano de crecimiento. Los espectros exhiben una disminución de la intensidad en la región de altas energías por haber excluido del análisis aquellas transiciones en las que intervienen estados del continuo, i.e. únicamente mostramos transiciones entre estados ligados de electrón y de hueco. Las zonas sombreadas indican la posición de los límites $E_{\text{B-C}}^e$ (región clara) y $E_{\text{B-C}}^h$ (región oscura). Para facilitar la comparación entre espectros correspondientes a los QD de diferente tamaño, hemos aplicado el factor de ampliación indicado en el eje de abscisas a cada espectro. Comparando las resonancias obtenidas para un QD con las de otro de mayor tamaño, es posible apreciar que su intensidad se reduce considerablemente. Por ejemplo, las cuatro primeras resonancias encontradas para los QDs con $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm y $h_{\text{QD}} = 2.125$ nm apenas son distinguibles para el QD con $h_{\text{QD}} = 2.75$ nm. En cada espectro hemos ampliado la transición fundamental para poder comparar su intensidad, por una parte, con la del resto de transiciones y, por otra, con las de espectros de QD de diferente tamaño. La intensidad de la transición fundamental sufre una atenuación de aproximadamente tres ordenes de magnitud entre el QD de menor tamaño y el de mayor tamaño. Sin embargo, la intensidad de las transiciones de alta energía varía aproximadamente un orden de magnitud. El desplazamiento hacia el rojo con el tamaño del QD llega a ser en los casos estudiados de ~ 1.45 eV y se puede interpretar en términos del efecto Stark originado por el campo interno. Obsérvese que cuando el QD es suficientemente grande la energía de emisión puede ser observada por debajo del gap del GaN sin que ello signifique que no existan efectos de confinamiento. En términos generales, el impacto del campo interno es análogo, en primera aproximación, al efecto de un campo externo uniforme aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento [198].

En la Figura 3.22 hemos representado la región de baja energía del espectro de absorción correspondiente al QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. En esta representación es posible distinguir las diferentes transiciones ópticas y, por consiguiente, analizar tanto los estados que las componen, como la intensidad relativa entre resonancias. El espectro muestra el progresivo aumento de la intensidad de las resonancias con la energía de transición, que ya fue mencionado al comentar la Figura 3.21. Esto se debe, por una parte, a la participación de estados degenerados con una multiplicidad mayor, como sucedía en el InAs, y por otra parte, a la mayor deslocalización de la función de onda de aquellos estados con energía de confinamiento mayor, que en el caso particular del GaN/AlN supone paradójicamente un aumento de la fuerza de oscilador. Por ejemplo, la transición $[1P^{0,0}, 1P^{0,0}]$ presenta una intensi-

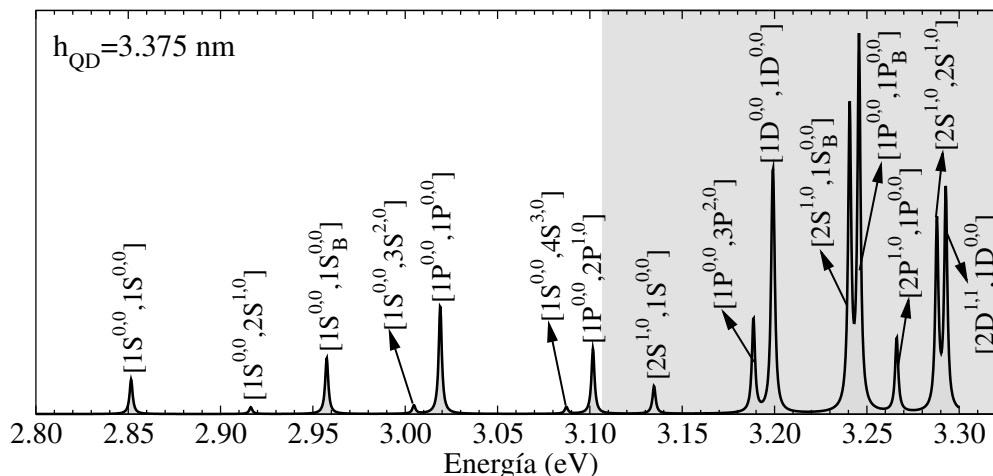


Figura 3.22: Región de baja energía del espectro de absorción óptica del QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. La notación es la misma que fue empleada en la Figura 3.10. Hemos considerado un ensanchamiento inhomogéneo igual a 1 meV para apreciar con mayor detalle las múltiples resonancias.

dad que resulta ser superior al doble de la exhibida por la transición fundamental. Aquí debemos recordar que los estados con $|m| \neq 0$ tienen una multiplicidad igual a cuatro y aquellos con $m = 0$ igual a 2. Sin embargo, la transición $[1D^{0,0}, 1D^{0,0}]$ resulta ser el doble de intensa que la transición $[1P^{0,0}, 1P^{0,0}]$, y aquí la multiplicidad de los estados tipo P y D es igual. Por otra parte, las transiciones entre estados de electrón y de hueco con números n_ρ y n_z diferentes (ver Ec. (3.24)) presentan una intensidad relativa a las transiciones con números n_ρ y n_z iguales significativamente mayor que en el caso del sistema InAs/GaAs.

Comparación resultados experimentales

Vamos a realizar un intento de analizar los resultados experimentales de la energía de emisión recogidos en la Tabla 1.3 mediante el modelo de una única banda que hemos desarrollado. Como veremos, este modelo presenta serias limitaciones, por lo que la discusión que haremos a continuación más que dar cuenta de los resultados cuantitativos servirá fundamentalmente de introducción a los diferentes experimentos en los que la fotoluminiscencia ha sido medida. En la Figura 3.23 hemos representado los máximos de la energía de emisión medida en experimentos de fotoluminiscencia en muestras de QDs cuya relación radio/altura se ajusta a la distribución de tamaños aquí considerada ($r_{\text{QD}} = 2.3$, ver también la Tabla 1.3 y la Figura 1.10 del Capítulo 1). Para facilitar la comparación con los resultados teóricos, hemos representado la energía calculada para la transición fundamental.

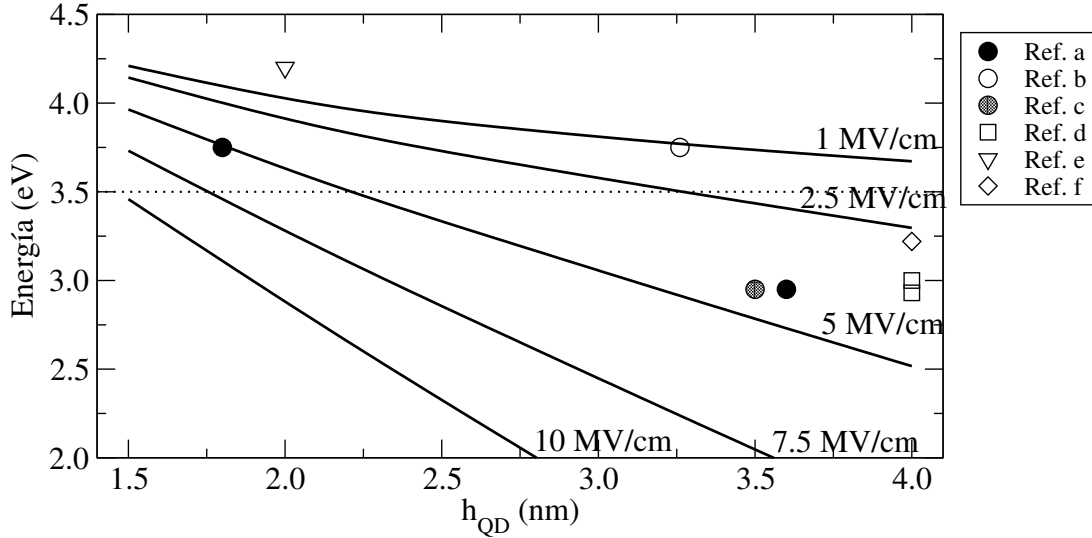


Figura 3.23: Energía de la transición fundamental calculada para cinco valores del campo interno F diferentes. Los puntos hacen referencia a diferentes valores experimentales de la Tabla 1.3: Referencias: a [53], b [54], c [55], d [60], e [56], f [57]. La línea horizontal indica E_g^{GaN} .

Dado el carácter ajustable que tiene el parámetro F en esta parte del trabajo, hemos incluido en la Figura el resultado obtenido para cinco valores distintos: 1, 2.5, 5, 7.5 y 10 MV/cm. Ello nos permitirá descartar aquellos valores del campo interno que no guarden ninguna relación con las energías de emisión características de este sistema. En efecto, atendiendo a los resultados mostrados en la Figura, es posible concluir, que los valores de $F > 5$ MV/cm no son representativos de puntos con $r_{\text{QD}} = 2.3$. Por otra parte, comparando la separación entre las curvas para los diferentes valores de h_{QD} considerados es posible estimar el impacto del campo interno en función del tamaño. Como se puede apreciar es mucho mayor para puntos grandes que para pequeños.

A continuación, comentaremos la comparación con los diferentes resultados experimentales en función del grupo de investigación responsable de los mismos:

- Las energías de emisión obtenidas por Y. Arakawa y colaboradores corresponden a las referencias [56, 57]. La diferencia respecto a la energía de transición obtenida para $F = 5$ MV/cm, valor de referencia empleado a lo largo de esta Sección, resulta ser muy grande, del orden de ~ 0.65 eV en los dos casos. Aunque es cierto, que no disponemos de mucha información estructural sobre estas muestras, tampoco parece plausible atribuir el desacuerdo hallado a una eventual indeterminación en la altura de la nanoestructura: Para ningún valor de h_{QD} se alcanza una energía de transición de 4.2 eV medida en la

Ref. [56] y la altura que correspondería de acuerdo con el modelo al QD con emisión en 3.22 eV, medida en la Ref. [57] es de 2.6 nm. Esto supondría un error relativo de un 35% en la determinación de la altura, que no parece posible, dado que su caracterización ha sido realizada por AFM. Alternativamente, podemos preguntarnos cuál sería el valor del campo interno de estas nanoestructuras predicho por nuestro modelo, encontramos que resulta ser de $\lesssim 1$ MV/cm para el que presenta la emisión de alta energía y ~ 2.5 MV/cm para el que la presenta de baja energía. A partir de los resultados del campo interno mostrados en la Figura 2.43, observamos que para esos valores de F no encontramos ningún r_{QD} que presente un campo interno aproximadamente constante en el interior del QD. Para $r_{\text{QD}} < 2.3$ el valor del campo varía muy rápidamente a lo largo del eje axial del QD.

El desacuerdo hallado puede ser atribuido a un intercambio de Al proveniente de la barrera con el Ga del QD. Debemos recordar que en el crecimiento por MOCVD la temperatura del sustrato es de ~ 950 °C (véase la Tabla 1.3). Bajo estas condiciones resulta factible suponer que se favorezca el mencionado intercambio de material. Lamentablemente no disponemos de información relativa al coeficiente de difusión del Al en el GaN. En cualquier caso, consideramos que esta hipótesis resulta ser la más razonable. A lo largo del trabajo no volveremos a estudiar las propiedades de estas muestras ya que, debido a la presencia de Al en seno de la nanoestructura requeriría un estudio más específico de la deformación, el potencial interno y, por último, de las propiedades electrónicas.

- A continuación estudiaremos la emisión de los QD procesados por el grupo de B. Daudin y colaboradores, representada en la Figura 3.23 mediante los símbolos circulares. En la Figura se aprecia un razonable acuerdo entre el resultado teórico para $F = 5$ MV/cm y los datos correspondientes a las Refs. [53, 55]. Aunque los QD de mayor tamaño presenten una desviación de ~ 0.2 eV respecto de la curva teórica, estimamos que éste es un buen resultado dada la simplicidad del modelo y la dependencia tan crítica de la energía de transición con el tamaño. No se puede decir lo mismo de la energía medida en la Ref. [54], la cual está ~ 1 eV por encima del valor teórico. El valor del campo interno que predice el modelo para este QD sería de 1 MV/cm, más próximo al que asociamos para una de las muestras de Y. Arakawa. Sin embargo, los argumentos esgrimidos allí no resultan ser válidos aquí, pues la muestra ha sido crecida por MBE siguiendo el mismo procedimiento que en las otras tres caracterizadas ópticamente por el mismo grupo. En secciones posteriores abordaremos el análisis de este valor de la emisión, una

vez elaboremos un modelo más sofisticado que contemple el acoplamiento multibanda, el efecto de la deformación y el potencial interno calculados a través de la formulación desarrollada en el Capítulo 2.

- Por último discutiremos las energías de emisión obtenidas por el grupo de J. Massies y colaboradores en la Ref. [60]. El desacuerdo con el valor teórico resulta ser de ~ 0.5 eV. Su origen no se puede atribuir a una indeterminación en la altura de los QD, ya que en estas muestras la caracterización estructural ha sido realizada por HRTEM, técnica que resulta ser muy precisa. También retomaremos el análisis de estos resultados en la Sección 3.3, una vez el modelo empleado para el estudio de la estructura electrónica haya sido mejorado.

3.2. Modelo multibanda

En el modelo de una única banda introducido en la Sección 3.1 consideramos que toda la información de la estructura de bandas del cristal podía ser representada por un único parámetro, la masa efectiva. Aunque la imagen ofrecida por dicho modelo ha servido para explicar de forma satisfactoria muchas de las propiedades de dispositivos semiconductores basados en pozos cuánticos [199], no es evidente que dicho esquema sea también válido para el estudio de puntos cuánticos autoensamblados. En esta Sección extenderemos el marco teórico desarrollado hasta este punto, considerando un mayor número de funciones de Bloch acopladas para la descripción de la función de onda de un electrón en el material. Para esta tarea recurriremos al método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en combinación con la aproximación de la masa efectiva en la forma descrita en la Sección 1.6. Este procedimiento nos permitirá definir varios modelos multibanda para el estudio de la estructura electrónica de los puntos cuánticos. Con ello conseguiremos una descripción más exacta de las propiedades de estas nanoestructuras y podremos identificar las limitaciones del modelo de una única banda.

3.2.1. Formulación del problema

En este apartado describiremos la implementación de la aproximación de la masa efectiva junto con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para el estudio de puntos cuánticos autoensamblados. Siguiendo el procedimiento presentado en la Sección 1.6 la función

de onda de los estados electrónicos del QD se puede escribir de la siguiente forma:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_k F_k(\mathbf{r})u_{k0}, \quad (3.36)$$

donde $F_k(\mathbf{r})$ es la función envolvente asociada a la amplitud de Bloch u_{k0} . La ecuación que determina estas funciones de onda y las energías de confinamiento fue introducida en la Ec. (1.60) de la Sección 1.6 y la reescribiremos aquí de nuevo:

$$\sum_j \left[\hat{H}_{kj}(-i\nabla_z) \right] F_j(\mathbf{r}) = E F_k(\mathbf{r}), \quad (3.37)$$

La forma del operador matricial diferencial \hat{H}_{kj} se obtiene, en ausencia de deformación, recurriendo al Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, $H^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$, de las Ecs. (B.2) y (B.4) y haciendo $\mathbf{k} \rightarrow -i\hbar\nabla$. El modelo multibanda más general que consideraremos en este trabajo es el que viene definido por el modelo 8×8 del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ descrito en la Sección 1.5 para el estudio de la estructura electrónica de un semiconductor masivo. Por lo que el rango máximo del operador matricial diferencial \hat{H}_{kj} será igual a ocho. Partiendo de la formulación general del problema, resulta fácil implementar cualquiera de los otros modelos que fueron descritos en la Sección 1.5, e.g. 6×6 , 4×4 , etc. . . . Las amplitudes de Bloch u_{k0} serán por consiguiente las funciones del centro de la zona de Brillouin u_k recogidas en las Tablas 1.4 y 1.6.

El potencial de confinamiento del punto cuántico aparece ahora en la Ec. (3.37) descrito implícitamente por la dependencia con la posición de los parámetros empleados en la definición de los bordes de las diferentes bandas consideradas en el modelo:

$$X(\mathbf{r}) = X^B + (X^D - X^B)\chi(\mathbf{r}), \quad (3.38)$$

donde X representa E_c , E_v y Δ_0 para semiconductores tipo zincblenda y E_c , E_v , Δ_1 , Δ_2 y Δ_3 para semiconductores tipo wurtzita. Los índices D y B indican la región del QD y de la barrera, respectivamente.

Al igual que en la Sección anterior, aquí también vamos a suponer que el QD se encuentra en un estado de deformación de tipo “biaxial”. Si existe una deformación el operador \hat{H}_{kj} deberá incorporar además la contribución del Hamiltoniano de Bir y Pikus, H^{BP} , ver Ecs. (B.3) y (B.5). Este Hamiltoniano presenta una dependencia con la posición a través de las componentes del tensor de deformaciones $e_{ij}(\mathbf{r})$, que están definidas por la Ec. 1.38 para materiales tipo zincblenda y la Ec. 1.54 para materiales tipo wurtzita. El resto de parámetros que definen $H^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ y H^{BP} (parámetros de Luttinger, potenciales de deformación, etc. . . .) serán considerados independientes de la posición, i.e. constantes en toda la heteroestructura e iguales

al valor que toman en el material que constituye el QD, tal y como se discutió en la Sección 1.6.

Luego, la ecuación que define el modelo multibanda (MB) que debemos resolver quedará expresada como:

$$\sum_j H_{kj}^{\text{MB}}(\mathbf{r}) F_j(\mathbf{r}) = \sum_j \left[H_{kj}^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + H_{kj}^{\text{BP}}(\mathbf{r}) \right] F_j(\mathbf{r}) = E F_k(\mathbf{r}). \quad (3.39)$$

El campo interno es fácil de implementar en el formalismo de la masa efectiva. Basta con expresar el potencial interno $\varphi(\mathbf{r})$ en forma de un operador matricial diagonal de igual rango que $H_{kj}^{\text{MB}}(\mathbf{r})$ e incluirlo en la Ec. (3.39).

Como paso previo a la resolución de la Ec. (3.39), resulta conveniente formular el problema de forma que se pueda aprovechar la simetría de revolución de la geometría elegida para describir el punto cuántico. En el modelo de una única banda de la Sección 3.1 expresamos la función de onda de un electrón confinado de forma que fuese autofunción de \hat{L}_z . Esto permitió simplificar significativamente la resolución del problema (véase la Ec. (3.11)). En la aproximación multibanda el problema resulta ser conceptualmente más complicado, pues ahora la función $\Psi(\mathbf{r})$ viene determinada por varias funciones envolventes que cumplen el sistema de Ecs. diferenciales de la Ec. (3.39). El formalismo que hemos implementado en este trabajo, que permite aprovechar las propiedades de simetría del QD incluso en presencia de acoplamiento multibanda, se debe a K. J. Vahala y P. C. Sercel [200, 201]. A continuación repasaremos brevemente los elementos principales de este procedimiento.

Debido a la simetría axial del QD resulta razonable expresar la función envolvente en términos de funciones con una componente z del momento angular orbital bien definida:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_k \sum_m F_{m,k}(\mathbf{r}) u_k = \sum_k \sum_m \frac{1}{2\pi} e^{im\phi} \mathcal{F}_{m,k}(\rho, z) u_k, \quad (3.40)$$

donde hemos incluido una suma en m puesto que ésta es la forma más general que la solución puede adoptar. Las funciones de Bloch u_k presentan una proyección bien definida de la componente z del momento angular total $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$, como se puede comprobar fácilmente recurriendo a las Tablas 1.4 y 1.6. Por lo tanto, siguiendo a K. J. Vahala y P. C. Sercel, en virtud de la teoría del momento angular es posible definir un momento angular total $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{j}}$ definido como la suma del momento angular orbital de la función envolvente y el momento angular total de las funciones u_k . La componente z de este nuevo momento angular total se escribe

como $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{j}_z$ y sus estados propios vendrán definidos por el número cuántico $M = m + j_z$. Podemos construir ahora una función envolvente con componente z del momento angular total M bien definida:

$$\Psi^{(M)}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^8 F_{m,k}^{(M)}(\mathbf{r}) u_k = \sum_{k=1}^8 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \mathcal{F}_{m,k}^{(M)}(\rho, z) u_k, \quad (3.41)$$

donde la suma en m de la Ec. (3.40) ha sido suprimida, ya que para cada banda k la función envolvente tiene determinado su momento angular por $m = M - j_z$.

Resta por verificar que $[H^{\text{MB}}, \hat{J}_z] = 0$, de manera que podamos estar seguros de que las autofunciones de H^{MB} se pueden elegir con momento angular definido M y por tanto tienen la forma (3.41). En general, el conmutador $[H^{\text{MB}}, \hat{J}_z]$ es distinto de cero. Esto se debe a que la simetría del cristal es menor que la del grupo de rotaciones alrededor del eje axial del QD (C_∞). Para “aumentar” la simetría del Hamiltoniano se realizan una serie de aproximaciones. En la Sección 1.5 ya se despreciaron los términos originados por la ausencia de centro de simetría en la estructura cristalina, así como el término H_{kso} (ver Ec. (1.18)). Se puede demostrar que bajo estas aproximaciones $[H^{\text{MB}}, \hat{J}_z] = 0$ en el caso de la wurtzita. Sin embargo, el Hamiltoniano correspondiente a la zincblenda todavía incorpora una serie de términos que no permiten la introducción de M como un buen número cuántico. Para superar esta dificultad se recurre en la literatura a la aproximación axial, introducida por M. Altarelli *et al* [202], consistente en considerar que $(\gamma_2 - \gamma_3)/2$ es mucho menor que $(\gamma_2 + \gamma_3)/2$ y por tanto puede ser considerada despreciable su contribución en aquellos elementos de $H^{k\cdot p}$ donde aparecen ambos términos (ver Ec. (B.2)). Análogamente, en el Hamiltoniano de Bir y Pikus se desprecia la contribución de aquellos términos que contienen a $(D_u - D'_u)/2$ (ver Ec. (B.3)).

Con estas aproximaciones se consigue que $[H^{\text{MB}}, J_z] = 0$, y por tanto las autofunciones de H^{MB} tienen un momento angular definido y se pueden escribir de la forma (3.41). Por consiguiente, la ecuación de Schrödinger (3.39) se transforma en:

$$\sum_{j=1}^8 H_{kj}^{\text{MB}} F_{m,j}^{(M)}(\mathbf{r}) = E^{(M)} F_{m,k}^{(M)}(\mathbf{r}), \quad (3.42)$$

y para cada valor de M tenemos una familia de estados independientes. Dada la simetría del problema, todos los estados solución de (3.42) están doblemente degenerados en $\pm M$.

Ya hemos visto que la función de onda de momento angular M se puede expresar mediante de la Ec. (3.41), i.e. como una combinación lineal de ocho funciones de Bloch $\{u_k, k = 1, \dots, 8\}$ con las correspondientes funciones envolventes $\{F_{m,k}^{(M)}\}_{k=1}^8$.

		Zincblenda								Wurtzita									
		k	1	2	3	4	5	6	7	8	1	2	3	4	5	6	7	8	
M	j_z	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	m	0	1	-1	0	1	2	0	1	0	1	-1	1	0	2	0	1	0	1
$-\frac{1}{2}$	m	-1	0	-2	-1	0	1	-1	0	-1	0	-2	0	-1	1	-1	0	-1	0
$\frac{3}{2}$	m	1	2	0	1	2	3	1	2	1	2	0	2	1	3	1	2	1	2
$-\frac{3}{2}$	m	-2	-1	-3	-2	-1	0	-2	-1	-2	-1	-3	-1	-2	0	-2	-1	-2	-1
$\frac{5}{2}$	m	2	3	1	2	3	4	2	3	2	3	1	3	2	4	2	3	2	3
$-\frac{5}{2}$	m	-3	-2	-4	-3	-2	-1	-3	-2	-3	-2	-4	-2	-3	-1	-3	-2	-3	-2
$\frac{7}{2}$	m	3	4	2	3	4	5	3	4	3	4	2	4	3	5	3	4	3	4
$-\frac{7}{2}$	m	-4	-3	-5	-4	-3	-2	-4	-3	-4	-3	-5	-3	-4	-2	-4	-3	-4	-3

Tabla 3.5: Valor de la componente z del momento angular orbital de las funciones envolventes que intervienen en el desarrollo de la función de onda $\Psi^{(M)}$. El índice k fue empleado en la Sección 1.5 para identificar las funciones de Bloch.

Cada una de estas funciones está caracterizada por una proyección z del momento angular orbital m : $m = M - j_z$. En la Tabla 3.5 mostramos los valores que toma m para diferentes M tanto en sistemas tipo zincblenda como wurtzita teniendo en cuenta la forma de las funciones de Bloch. Dado que los números cuánticos M , m y j_z están relacionados entre sí, en lo sucesivo suprimiremos m de la notación de la función envolvente.

En la discusión de los resultados numéricos de la estructura electrónica de los QD, hablaremos con frecuencia del *carácter* de la función de onda o del estado, para referirnos al peso relativo que tiene una función de Bloch u_k en su combinación lineal (3.41). Para su determinación es conveniente recurrir a la siguiente definición del *proyector* sobre la función u_k :

$$\mathcal{P}_{u_k} = |u_k\rangle \langle u_k|, \quad (3.43)$$

cuyo valor esperado resulta ser:

$$P_{u_k} = \langle \Psi^{(M)} | \mathcal{P}_{u_k} | \Psi^{(M)} \rangle = \int d^3 \mathbf{r} |F_k^{(M)}(\mathbf{r})|^2. \quad (3.44)$$

Obviamente, se verifica que:

$$\sum_{k=1}^8 P_{u_k} = 1. \quad (3.45)$$

Diremos que el estado $\Psi^{(M)}(\mathbf{r})$ tiene un carácter u_k ponderado por P_{u_k} . Como los estados tienen en general una componente que es significativamente mayor que el resto, nos referiremos a ella como componente dominante. En el texto expresaremos P_{u_k} como un porcentaje sobre la suma de las proyecciones.

Por último, queremos señalar que en adelante ya no haremos uso de los “pseudonúmeros cuánticos” n_ρ y n_z definidos en la Sección anterior. Ahora tendremos ocho funciones envolventes y cada una de ellas presenta, en general, valores diferentes de n_ρ y n_z , lo cual hace inviable una discusión en términos de ellos.

3.2.2. Resolución del Problema

Vamos a abordar la resolución de la ecuación (3.42) con el mismo método numérico que empleamos en el modelo de una única banda y está descrito en el Apartado 3.1.2. El primer paso consiste en expresar la función envolvente de la Ec. (3.41) como una combinación lineal de las funciones base $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r})$ definidas en la Ec. (3.12):

$$F_k^{(M)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^{N_{\mathcal{R}}} \sum_{\mu=1}^{N_{\mathcal{Z}}} [A_k^{(M)}]_{\alpha,\mu} \xi_{\alpha,\mu}^{(m)}(\mathbf{r}), \text{ donde } m = M - j_z. \quad (3.46)$$

A continuación sustituiremos (3.46) en (3.42), y tras multiplicar por la izquierda por $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)*}(\mathbf{r})$ e integrar, conseguimos transformar el sistema de ecuaciones diferenciales en un problema de autovalores:

$$\sum_{j=1}^8 \sum_{\beta=1}^{N_{\mathcal{R}}} \sum_{\nu=1}^{N_{\mathcal{Z}}} \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | H_{ij}^{\text{MB}} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle [A_j^{(M)}]_{\beta,\nu} = E^{(M)} [A_i^{(M)}]_{\alpha,\mu}. \quad (3.47)$$

Este problema puede ser resuelto por técnicas de diagonalización estándar. En el Apéndice D mostramos los detalles relativos al cálculo de los elementos de matriz. Resulta fácil comprobar que la Ec. (3.47) se reduce a 8 ecuaciones del tipo (3.17) cuando se considera el acoplamiento entre las diferentes bandas del semiconductor como nulo, i.e. si $H_{ij}^{\text{MB}} = 0$ para $i \neq j$.

Aquí también resulta necesario realizar un análisis de los parámetros del método numérico: \mathcal{R} , \mathcal{Z} , $N_{\mathcal{R}}$ y $N_{\mathcal{Z}}$. La discusión realizada en la Sección anterior sobre los parámetros $N_{\mathcal{R}}$ y $N_{\mathcal{Z}}$ es igualmente válida en esta Sección. En lo concerniente a \mathcal{R} y \mathcal{Z} , debemos tener en cuenta que en el desarrollo de la función de onda $\Psi^{(M)}(\mathbf{r})$ intervienen, en el caso más general contemplado en este trabajo, ocho funciones envolventes. En consecuencia, es posible que la distribución espacial de dichas funciones sea diferente en cada caso y, por tanto, no es evidente a priori que las dimensiones del cilindro de desarrollo puedan resultar óptimas para las diferentes envolventes. Sin embargo, en todos los casos estudiados hemos encontrado un mínimo de energía al resolver el problema en función de \mathcal{R} y \mathcal{Z} (para $N_{\mathcal{R}}$ y $N_{\mathcal{Z}}$

fijas), lo cual es indicativo de la existencia de unas dimensiones óptimas para la caja.

De forma análoga a como procedimos en la Sección 3.1, vamos obtener el elemento de matriz óptico en el modelo multibanda desarrollado en la presente Sección. Para ello debemos sustituir (3.46) en (3.41), y éste a su vez en (1.85). Tras desarrollar los sumatorios, agrupar los términos e invocando a las propiedades de ortogonalidad de las funciones $\xi_{\alpha,\mu}^{(m)}$ obtenemos:

$$|\langle \Psi_c^{(M_c)} | H_{r-m} | \Psi_v^{(M_v)} \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left| \sum_{k,k'} \delta_{m_c, m_v} \sum_{\alpha,\mu}^{N_{\mathcal{R}} N_{\mathcal{Z}}} [A_{c,k'}^{(M_c)}]_{\alpha,\mu} [A_{v,k}^{(M_v)}]_{\alpha,\mu} \bar{\mathbf{P}}_{k',k}^{\hat{e}} \right|^2. \quad (3.48)$$

Resulta interesante buscar una regla de selección en la que intervenga el número cuántico M . Ello se consigue inspeccionando las expresiones (1.89) de la matriz óptica, de donde se obtiene:

$$\bar{\mathbf{P}}_{k',k}^{\hat{e}_{\pm}} = \begin{cases} \neq 0 & \text{si } j'_z = j_z \pm 1 \\ = 0 & \text{si } j'_z \neq j_z \pm 1 \end{cases}, \quad (3.49a)$$

$$\bar{\mathbf{P}}_{k',k}^{\hat{e}_z} = \begin{cases} \neq 0 & \text{si } j'_z = j_z \\ = 0 & \text{si } j'_z \neq j_z \end{cases}, \quad (3.49b)$$

donde j_z y j'_z son la componente z del momento angular total de las funciones u_k y $u_{k'}$ respectivamente. Con este resultado y sabiendo que $m = M - j_z$ se obtiene la siguiente expresión para el elemento de matriz de H_{r-m} :

$$|\langle \Psi_c^{(M_c)} | H_{r-m} | \Psi_v^{(M_v)} \rangle|^2 = \left(\frac{eA_0}{m_0} \right)^2 \left\{ \begin{array}{l} \delta_{M_c, M_v \pm 1} \\ \delta_{M_c, M_v} \end{array} \right\} \times \left| \sum_{k,k'} \left\{ \begin{array}{l} \bar{\mathbf{P}}_{k',k}^{\hat{e}_{\pm}} \\ \bar{\mathbf{P}}_{k',k}^{\hat{e}_z} \end{array} \right\} \sum_{\alpha,\mu}^{N_{\mathcal{R}} N_{\mathcal{Z}}} [A_{c,k'}^{(M_c)}]_{\alpha,\mu} [A_{v,k}^{(M_v)}]_{\alpha,\mu} \right|^2. \quad (3.50)$$

En consecuencia, obtenemos las siguientes reglas de selección:

- Para un campo de radiación polarizado en el plano XY (\hat{e}_{\pm}) la componente z del momento angular total de los estados inicial y final de las transiciones ópticas diferirán en una unidad ($M_c = M_v \pm 1$).
- Para el caso de polarización paralela a la dirección de crecimiento (\hat{e}_z) el valor de M se debe conservar ($M_c = M_v$).

3.2.3. Resultados para el sistema InAs/GaAs

En este apartado vamos a aplicar la formulación desarrollada en el Apartado 3.2.1 al estudio de QDs basados en el sistema InAs/GaAs. Ello nos permitirá revisar los resultados obtenidos en la Sección 3.1 y analizar el impacto que tiene el acoplamiento entre las bandas del semiconductor masivo en la estructura electrónica de un QD. Aquí también consideraremos que los QDs presentan una forma lenticular con radio igual a 10 nm y una altura que varía entre 2 y 10 nm. En todos los cálculos mostrados en este apartado hemos considerado $\mathcal{R} = \mathcal{Z} = 20$ nm. Los diferentes modelos que vamos a emplear fueron descritos en la Sección 1.5.

En la Figura 3.24 hemos representado los niveles de energía obtenidos para los estados de la banda de conducción y de la banda de valencia. En cada gráfica hemos indicado el modelo que ha sido empleado en el cálculo de las energías. En adelante nos referiremos en ocasiones al modelo de una única banda como modelo 1×1 . Todos los estados han sido etiquetados a través de la componente z del momento angular total, M , y a consecuencia de la generación de Kramers están degenerados en $\pm M$, por lo que su multiplicidad será igual a dos. Los estados de electrón obtenidos por el modelo 1×1 son iguales a los obtenidos en los modelos 4×4 y 6×6 , pues en todos ellos se considera la banda de conducción desacoplada de la banda de valencia. Los estados correspondientes al modelo 1×1 también han sido etiquetados con M , de esta forma se facilita la comparación entre las energías de los estados obtenidos a través de los diferentes modelos. En la Figura 3.25 hemos representado los niveles de energía correspondientes al QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm (marcados por la línea vertical en la Figura 3.24). En esta Figura hemos etiquetado cada estado recurriendo a una notación similar a la empleada en la Sección anterior:

$$N_M |\tilde{m}|_{2|M|}, \quad (3.51)$$

donde ahora $N_M = 1, 2, \dots$ numera los estados para cada M en orden de excitación energético creciente y \tilde{m} es la proyección z del momento angular orbital de la función envolvente correspondiente a la componente dominante del estado. En lugar de representar el valor numérico de \tilde{m} emplearemos las letras S, P, D, \dots , tal y como hicimos en la Sección 3.1.

Para ilustrar el procedimiento seguido en la determinación las etiquetas antes descritas, nos fijaremos en los dos primeros niveles de energía excitados de la banda de valencia correspondientes al modelo 8×8 , i.e. los estados etiquetados por $1P_5$ y $1P_1$. Por ser los primeros estados con $|M| = 5/2$ y $1/2$, les corresponde $N_M = 1$. Considerando la degeneración de Kramers, cada uno de los niveles está doblemente degenerado. Para determinar el valor de \tilde{m} es necesario conocer primero la compo-

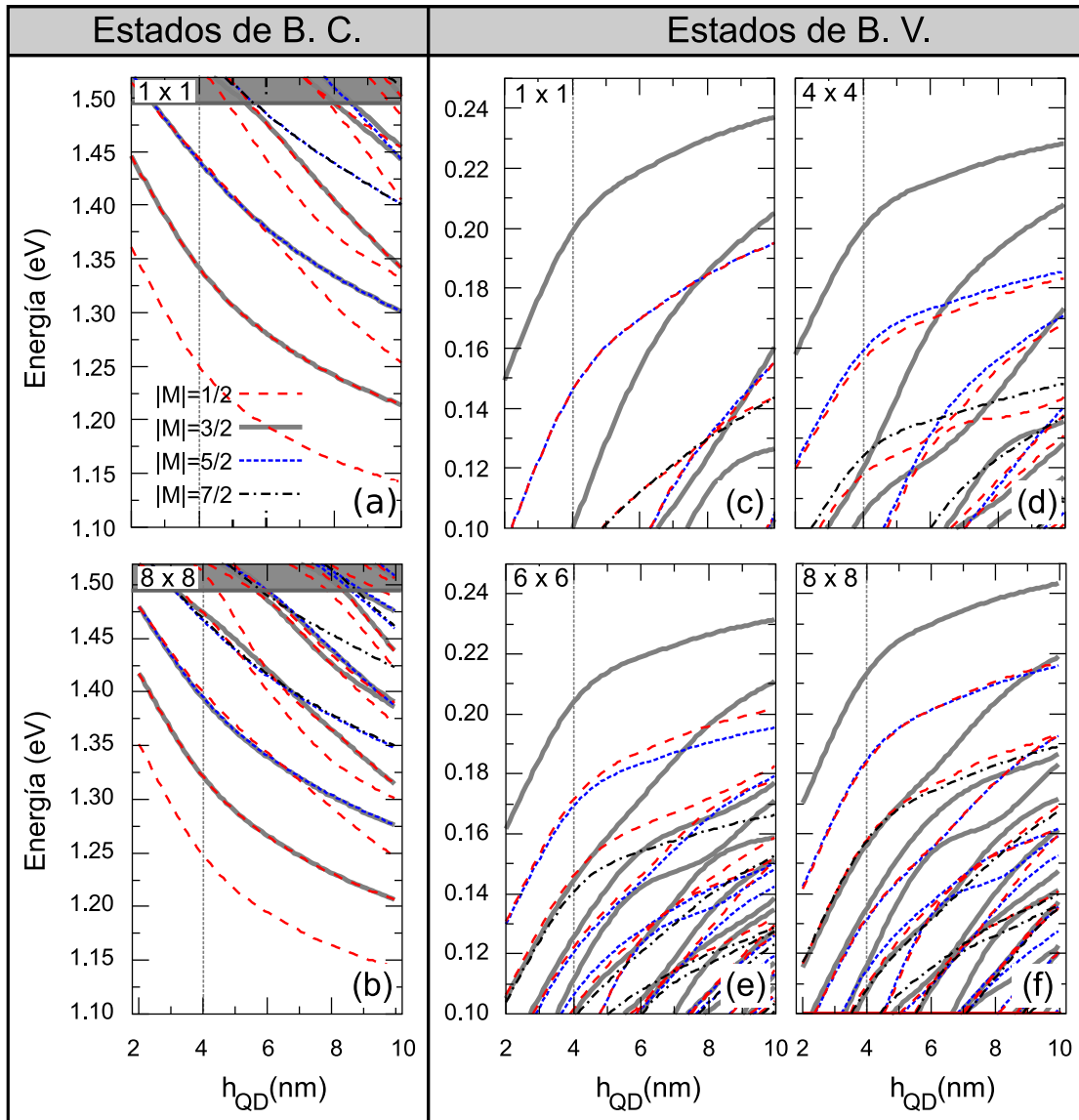


Figura 3.24: Niveles de energía de un QD de InAs/GaAs en función de h_{QD} calculados mediante los diferentes modelos multibanda. La línea vertical discontinua indica la altura elegida para analizar los estados individualmente en la Fig. 3.25.

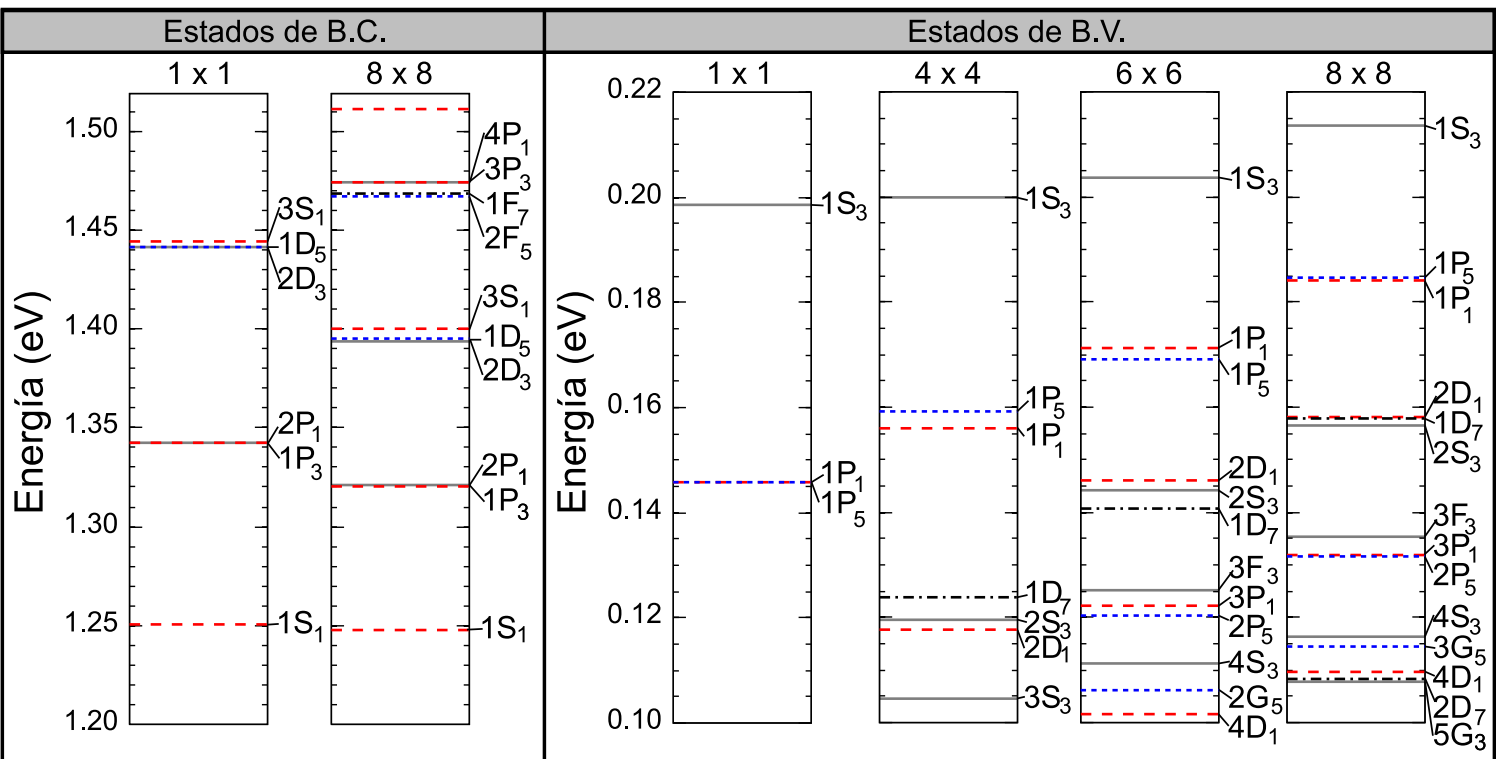


Figura 3.25: Niveles de energía para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm, obtenidos utilizando los diferentes modelos multibanda. Las etiquetas se explican en el texto.

nente u_k dominante de cada estado. En la Tabla 3.6 mostramos los valores de P_{u_k} obtenidos para los cuatro estados. Por inspección, es posible identificar el valor de j_z de la componente dominante. El valor de m de cada función envolvente que multiplica a la función de Bloch puede ser determinado recurriendo a la fórmula $m = M - j_z$. En la columna de la derecha mostramos los valores de \tilde{m} hallados. En la totalidad de los estados confinados estudiados en esta Sección la componente dominante es la función de Bloch de las bandas denominadas de hueco pesado ($hh \uparrow$ ó $hh \downarrow$).

	$u_k: e \uparrow$	$e \downarrow$	$hh \uparrow$	$lh \uparrow$	$lh \downarrow$	$hh \downarrow$	$so \uparrow$	$so \downarrow$	
M	$j_z: \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	\tilde{m}
$\frac{1}{2}$	0.02	0.00	0.90	0.03	0.03	0.00	0.00	0.02	-1
$-\frac{1}{2}$	0.00	0.02	0.00	0.03	0.03	0.90	0.02	0.00	1
$\frac{5}{2}$	0.02	0.00	0.92	0.03	0.02	0.00	0.00	0.01	1
$-\frac{5}{2}$	0.00	0.02	0.00	0.02	0.03	0.92	0.01	0.00	-1

Tabla 3.6: Valores de P_{u_k} para las componentes del estados de hueco de menor energía con $M = \pm 1/2$ y $\pm 5/2$. En la columna de la derecha se encuentra el m de la función envolvente asociada a la componente dominante (\tilde{m}).

Análisis de las energías de los estados de la banda de conducción

Como se indicó anteriormente, los resultados de los estados de electrón obtenidos por los modelos 1×1 , 4×4 y 6×6 son idénticos. Nos centraremos, por tanto, en la comparación con los resultados del modelo 8×8 . En primer lugar, se observa que el estado fundamental apenas se ve perturbado por el acoplamiento con las bandas de valencia para los diferentes valores de h_{QD} considerados. Esto es un poco inesperado, dado el pequeño valor del gap en el InAs. Sin embargo, se puede entender al menos en parte, porque la deformación “biaxial” considerada incrementa el valor del gap (ver Fig. 3.8). Por otro lado, es preciso recordar que el modelo 1×1 se utiliza la masa ajustada a las bandas obtenidas del modelo 8×8 (procedimiento que fue descrito en la Sección 1.5). Las energías de cuantización presentan una ligera reducción respecto a las obtenidas con el modelo 1×1 . El confinamiento angular, que fue definido la Sección anterior, se ve reducido en ~ 25 meV y ~ 10 meV, para los QD de menor y mayor altura, respectivamente. Esto conlleva que un mayor número de estados estén confinados en el seno del QD cuando su tamaño aumenta. En un estudio anterior, O. Stier *et al.* [203] encontraron que las energías de confinamiento obtenidas por un modelo 8×8 eran muy diferentes de las obtenidas por M. Grundmann *et al.* recurriendo a la aproximación de una única banda [124]. Este resultado contrasta con lo aquí expuesto. Sin embargo,

hay que tener en cuenta que en [124] emplearon como masa efectiva de la banda de conducción la correspondiente al semiconductor masivo sin deformar, i.e. $0.023 m_0$. Es por ello que encontraban en el modelo 1×1 energías de confinamiento y de cuantización mucho mayores, así como un reducido número de estados confinados.

En la Sección 3.1 vimos que los niveles del energía del modelo 1×1 estaban degenerados en $\pm m$ y en $\pm j_z$. Sin embargo, en el modelo multibanda, los niveles de energía únicamente están degenerados en $\pm M$. Por consiguiente, los niveles que estaban cuádruplemente degenerados en el modelo 1×1 , estarán ahora desdoblados formando un doblete de niveles doblemente degenerados. Obsérvense por ejemplo las parejas de estados $1P_3$ y $2P_1$, y $1D_5$ y $2D_3$, en los esquemas de niveles de la Figura 3.25. En todos los casos hemos comprobado que el desdoblamiento es $\lesssim 1$ meV, por lo que con frecuencia diremos que tales conjuntos de niveles aparecen *cuasi-degenerados*.

También es posible apreciar que los estados de la banda de conducción se agrupan en conjuntos, especialmente para tamaños del QD pequeños, i.e. $h_{\text{QD}} < 6$ nm. Fijándonos en el valor de \tilde{m} correspondiente a los estados mostrados en la Fig. 3.25 se observa que están dispuestos siguiendo un “patrón” característico de un problema de confinamiento parabólico bidimensional. En este problema los niveles de energía están definidos por dos números cuánticos, $n = 1, 2, \dots$ y $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (ver Ec. (3.22)), y se disponen formando “capas”⁸ que en la bibliografía se suelen identificar por las letras s, p, d, \dots [204]. En la Figura 3.26 hemos representado gráficamente la disposición de los niveles de energía en función de m . Comparando los valores de \tilde{m} asignados a los estados del QD y los de m propios de los estados del potencial parabólico, se evidencia la relación entre ambos problemas. En la Sección 3.1 se discutió que un potencial armónico resultaba ser una buena aproximación en el estudio de QD con forma de lente y de cono (ver apartado 3.1.4). Aquí no trataremos de representar el confinamiento de un QD de InAs/GaAs a través de un potencial armónico bidimensional, únicamente pretendemos ilustrar la relación existente entre los dos problemas. La modelización de un QD mediante un potencial armónico bidimensional ha sido utilizada extensivamente [29, 175, 188, 204]. Sin embargo, únicamente se ha demostrado su validez rigurosamente en una comparación con un modelo de una única banda [175]. Nuestros resultados muestran que en un modelo multibanda la disposición de los niveles de energía de los estados de la banda de conducción también puede ser interpretada, en primera aproximación, en base a los resultados de un modelo de confinamiento parabólico.

⁸Conjuntos de estados de igual energía.

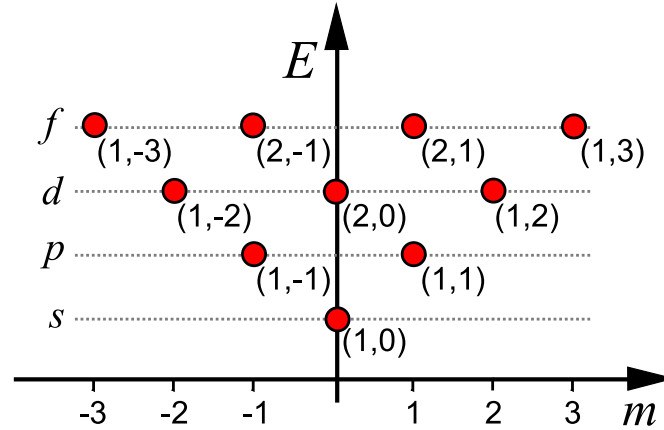


Figura 3.26: Esquema de los niveles de energía característicos de un problema de confinamiento parabólico bidimensional. Cada nivel ha sido etiquetado con los dos números cuánticos: (n,m) . Cada conjunto de estados degenerados constituyen las capas s , p , d , \dots

Análisis de las energías de los estados de la banda de valencia

En este apartado comparamos los estados confinados de la banda de valencia obtenidos mediante los diferentes modelos multibanda:

- El efecto del acoplamiento entre las bandas hh y lh se puede estimar comparando los resultados mostrados en los paneles (c) (modelo 1×1) y (d) (modelo 4×4) de la Figura 3.24 y los correspondientes de la Figura 3.25. La energía del estado fundamental difiere en 10 meV entre ambos modelos. Las energías de cuantización experimentan una reducción que resulta en un aumento del número de estados confinados dentro del rango de energías considerado. Por otra parte, se observa un desdoblamiento de los niveles de energía que estaban degenerados en $\pm\tilde{m}$ en el modelo 1×1 igual a 3 meV para los estados $1P_5$ y $1P_1$, y 6 meV para los estados $1D_7$ y $2D_1$. Estos desdoblamientos son significativamente mayores que los obtenidos para los estados de la banda de conducción, lo cual no debe sorprender debido a la proximidad en energía de las bandas hh y lh en el modelo 4×4 comparada con la energía del gap fundamental (véanse las Figuras 1.20).
- En el panel (e) de la Figura 3.24 mostramos los niveles de energía correspondientes al modelo 6×6 . Al incorporar el acoplamiento con la banda so se observa nuevamente una reducción de las energías de cuantización. Aunque resulta difícil estimar la magnitud de dicha reducción, debido al gran número de estados que aparecen ahora confinados, sí que es posible decir que, en términos cualitativos, el impacto del acoplamiento con la banda so resulta ser

más importante que el acoplamiento entre las bandas $hh - lh$. Este cambio no es sólo atribuible a la incorporación de la banda so en el modelo. Hay que tener también presente que en el modelo 6×6 los bordes de las bandas hh y lh están más próximos que en el modelo 4×4 , como se puede comprobar en la Figura 1.20. Recordemos que este efecto tenía su origen en los elementos no diagonales dependientes de la deformación excluidos “a mano” del Hamiltoniano de Bir y Pikus al definir el modelo 4×4 (ver Ec. (B.3)). Dada esta anomalía, no resulta recomendable el empleo del modelo 4×4 en presencia de deformación siempre que los estados excitados sean de interés. Finalmente, ahora que aparecen más estados dentro del rango de energías considerado en la Figura 3.25 es posible reconocer aquí también la estructura de “capas” tipo s, p, d, \dots , descrita para los estados de la banda de conducción⁹. A medida que la altura del QD aumenta, dicha estructura de estados se perturba fuertemente llegando a ser totalmente irreconocible para $h_{\text{QD}} > 6$ nm.

- El modelo 8×8 es el más preciso que se puede implementar en el marco teórico desarrollado en este trabajo. La energía de confinamiento del estado fundamental es inferior a las obtenidas por el resto de modelos. Aquí también se observa una reducción de la energía de cuantización de los estados, aunque no tan importante como en los casos estudiados anteriormente. Además se puede apreciar una reducción del desdoblamiento de los estados con igual $|\tilde{m}|$, aunque continua siendo complicado identificar las capas de estados que fueron descritas al describir los estados de la banda de conducción para QD con $h_{\text{QD}} > 6$ nm. Estos resultados le confieren una mayor fiabilidad al modelo 8×8 frente a los modelos 4×4 y 6×6 antes descritos, viniendo a confirmar la conclusión a la que llegamos en la discusión de la estructura electrónica del InAs masivo en la Sección 1.5 (véase la Figura 1.20). En adelante nos centraremos únicamente en los resultados obtenidos del modelo 8×8 .

Análisis del carácter de las funciones de onda

Vamos a proceder ahora a analizar el impacto del acoplamiento multibanda dentro del modelo 8×8 sobre las funciones de onda. Para ello hemos calculado la proyección de la función de onda de cada estado sobre las funciones de Bloch (ver Ec. (3.44)) y mostramos los resultados en la Figura 3.27. La proyección ha sido representada a través de puntos dispuestos sobre las curvas de los niveles de energía. El tamaño del punto representa la magnitud de la proyección. Los estados

⁹Debemos tener en cuenta que los estados con $M > 7/2$ no han sido mostrados en las Figuras. Es por ello que en la Figura 3.25 no aparece el estado $1F_9$ en la capa f .

confinados considerados en la Figura presentan en todos los casos un carácter bien definido, i.e. todos ellos presentan un P_{u_k} superior al 75%. Dicho carácter es e (funciones de Bloch u_1 ó u_2) para los estados de la banda de conducción y hh (funciones de Bloch u_3 ó u_6) para los estados de la banda de valencia. Es por ello que en la Figura hemos considerado únicamente las proyecciones sobre las componentes minoritarias.

En los estados de la banda de conducción se observa que las proyecciones sobre las funciones de Bloch de las bandas hh y lh son, significativamente mayores que sobre las funciones de Bloch de la banda so . Sin embargo, en ningún caso superan el $\sim 10\%$. También es posible apreciar en la Figura un aumento de las proyecciones con el orden de excitación energética de los estados. Por otra parte, para un mismo estado los valores de las proyecciones permanecen aproximadamente constantes para el rango de alturas barrido, salvo en aquellos estados que participan en anticruces. En los estados de la banda de valencia, la proyección sobre las funciones de Bloch de la banda e es prácticamente despreciable, menor a un 3%. Llama la atención este resultado, pues hemos visto que las energías se han visto perturbadas apreciablemente al pasar del modelo 6×6 al modelo 8×8 . Finalmente, la proyección asociada a las bandas de lh y so llega a alcanzar en los estados excitados un 20% y un 10%, respectivamente. Un acoplamiento con las bandas de valencia lh y so de esta magnitud resulta ser razonable, si tenemos en cuenta que sus bordes de banda para el InAs deformado se sitúan por debajo del borde de la banda hh en el GaN, i.e. en el espectro continuo del Hamiltoniano H^{MB} (ver Fig. 3.8).

Análisis de las propiedades ópticas

En la Figura 3.28(a) mostramos los espectros de absorción óptica para cinco valores diferentes de h_{QD} . Únicamente hemos representado los espectros correspondientes a absorción con luz polarizada en el plano de crecimiento. La absorción de luz polarizada a lo largo del eje Z no ha sido representada por ser su intensidad muy débil. Debemos recordar que únicamente las funciones de Bloch asociadas a las bandas lh y so presentan una componente tipo $|Z\rangle$ (ver Tabla 1.4). Teniendo esto presente y sabiendo que las proyecciones de las funciones de onda de los estados de la banda de valencia sobre dichas funciones de Bloch son, en general, menores a un 20%, se entiende por qué la absorción con luz polarizada z es despreciable en el rango de energías mostrado. Dado el gran número de transiciones distinguibles, en esta ocasión no hemos incluido las etiquetas por claridad visual. En los paneles

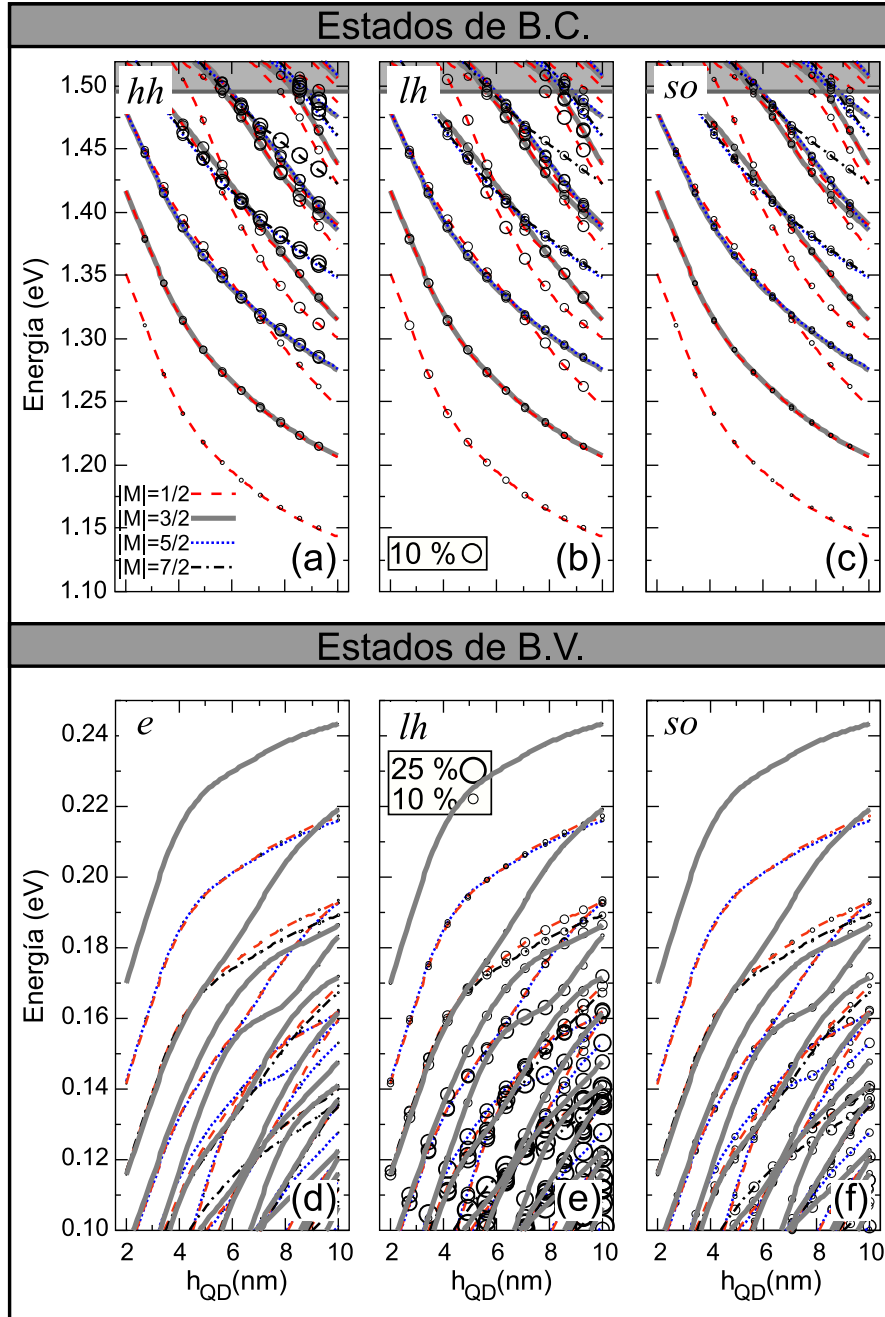


Figura 3.27: En el panel superior se han representado los niveles de energía de los estados de la banda de conducción. La proyección de cada estado sobre las funciones de Bloch correspondientes a las bandas hh (a), lh (b) y so (c), ha sido representada a través de puntos con un tamaño proporcional a la magnitud de la proyección. A modo de referencia visual, en la gráfica (b) se ha incluido un punto, cuyo tamaño corresponde a una proyección de un 10%. En el panel inferior se han representado los estado de la banda de valencia junto con las proyecciones correspondientes a la bandas e (d), lh (e) y so (f). En panel (e) se han incluido dos puntos de tamaño correspondiente a proyecciones de 25% y 10% que sirven de referencia.

(b) y (c) hemos realizado un estudio en detalle de los espectros correspondientes a los QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm y 8 nm, respectivamente.

En los espectros se aprecia un aumento de las transiciones permitidas respecto de los resultados obtenidos con el modelo 1×1 (ver Fig. 3.10). Este incremento del número de picos es atribuible a: (i) la reducción de la energía de cuantización en los estados excitados y (ii) la “relajación” de la regla de selección para m del modelo de una única banda. Al estar cada estado compuesto por ocho funciones envolventes en lugar de una única, resulta entonces posible que un estado de la banda de valencia pueda ser excitado, con diferente probabilidad, a un número mayor de estados de la banda de conducción. A modo de ejemplo, supongamos un estado de hueco con $M_h = 3/2$ cuyas componentes mayoritarias sean 80% u_3 y 20% u_5 . En la Tabla 3.5 comprobamos que el m de las funciones envolventes asociadas a estas componentes es: $m = 0$ y 2, respectivamente. En consecuencia, será posible que promocióne a estados de la banda de conducción con $\tilde{m}=0$ ó 2, siempre que $M_e = M_h - 1 = 1/2$ ó $M_e = M_h + 1 = 5/2$ dependiendo de la polarización. En estos espectros es posible reconocer la estructura de “capas” s , p , d , ... que fue descrita más arriba. Para el QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm, tenemos que la capa s está constituida por la transición $[1S_1, 1S_3]$, la capa p por $[1P_3, 1P_5]$ y $[2P_1, 1P_1]$, la capa d por $[2D_3, 2D_1]$, $[1D_5, 1D_7]$ y $[3S_1, 2S_3]$, y la capa f por $[2F_5, 3F_3]$, $[4P_1, 3P_1]$ y $[3P_3, 2P_5]$. Un análisis similar se puede realizar para el QD con $h_{\text{QD}} = 8$ nm. Por otra parte, mientras que la energía de la transición fundamental muestra un pequeño corrimiento (entre ~ 30 meV y ~ 5 meV) respecto del valor obtenido en el modelo 1×1 , las transiciones excitadas sí que presentan mayores diferencias. La separación en energía entre la transición $[1S_1, 1S_3]$ y las transiciones $[1P_3, 1P_5]$ y $[2P_1, 1P_1]$ varía entre ~ 90 meV y ~ 105 meV. Esto es, una reducción superior a 20 meV respecto de los resultados obtenidos en el modelo 1×1 .

Finalmente, también es posible apreciar que las intensidades relativas entre los picos ya no guardan la relación 1:2 que fue discutida en la Fig. 3.10. Ahora la relación entre la intensidad de la transición fundamental y la correspondiente a la primera excitada varía entre 3:5 y 4:5 al aumentar la altura. Para otro tipo de transiciones, la intensidad llega a igualarse, por ejemplo aquellas en las que intervienen estados tipo D . Este cambio entre la relación de intensidad de las transiciones es un efecto del acoplamiento multibanda, que además de romper la degeneración entre los estados con igual m , como ya ha sido discutido, también reduce la proyección de cada estado sobre las funciones de Bloch respecto del 100% que corresponde al modelo 1×1 .

En esta Sección no analizaremos los resultados experimentales introducidos en la Sección 3.1. Hemos trasladado esta tarea a la Sección 3.3, de forma que la

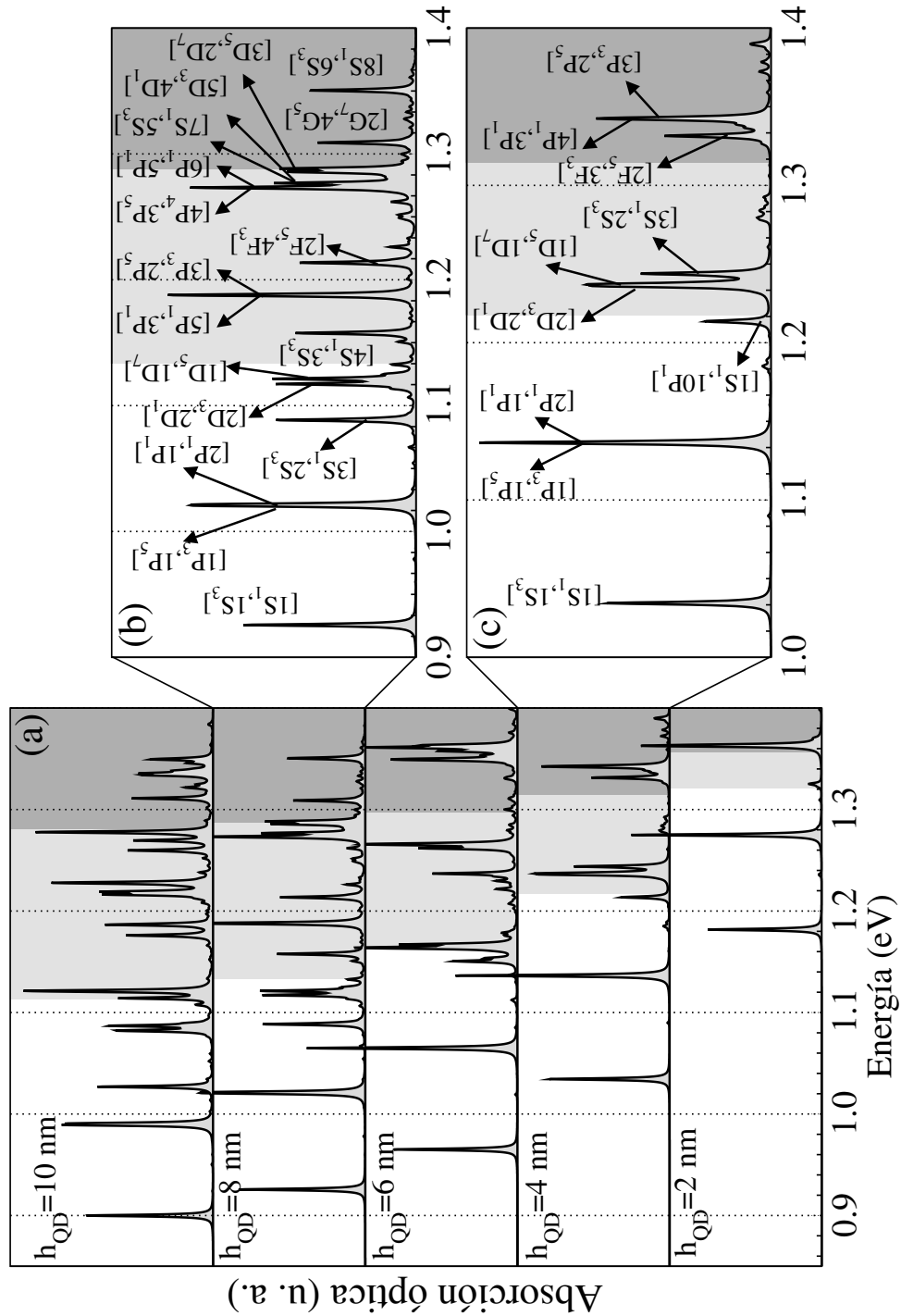


Figura 3.28: Espectros de absorción óptica calculados a partir de los resultados del modelo 8×8 . Se ha considerado un ensanchamiento inhomogéneo de 2 meV. La identificación de los estados que participan en las transiciones ópticas ha sido realizada recurriendo a la etiqueta $[N_e|\tilde{m}_e|_{2|M_e}], [N_h|\tilde{m}_h|_{2|M_h}]$. Las zonas sombreadas indican la región en la que es posible encontrar transiciones entre estados confinados y estados del continuo (ver Fig.3.10).

discusión correspondiente se hará conjuntamente con los resultados obtenidos al incluir la distribución inhomogénea de la deformación. Sin embargo, podemos decir brevemente que el modelo 8×8 resuelve algunas de las limitaciones identificadas del modelo 1×1 , como es la reducción del espaciado entre las transiciones dominantes del espectro de absorción y de la relación entre las intensidades de los picos del espectro.

3.2.4. Resultados para el sistema GaN/AlN

En este apartado revisaremos el estudio de la estructura electrónica de puntos cuánticos basados en el sistema GaN/AlN considerando el acoplamiento multibanda. Al igual que hicimos en el apartado dedicado al sistema InAs/GaAs, aquí también vamos a comparar los resultados obtenidos por diferentes modelos que fueron descritos en la Sección 1.5: los modelos 3×3 , 6×6 y 8×8 . En los cálculos que mostraremos a continuación, el tratamiento de la deformación y de los campos internos ha sido abordado de forma idéntica a como se indicó en la Sección 3.1. En la realización de los cálculos hemos considerado un cilindro de desarrollo de dimensiones $\mathcal{R} = R_{\text{QD}} + 1.5 \text{ nm}$ y $\mathcal{Z} = h_{\text{QD}} + 2.5 \text{ nm}$.

En ausencia de interacción spin-órbita ($\Delta_2 = \Delta_3 = 0$) las funciones de onda en $\mathbf{k} = 0$ de las bandas de valencia A , B , y C coinciden con el conjunto de funciones de Bloch $\{u_i, i = 1, 6\}$ empleadas en el desarrollo de la función de onda de un electrón en un semiconductor masivo tipo wurtzita (véase la Sección 1.5, donde se explicó el formalismo del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ adaptado a semiconductores tipo wurtzita con detalle). En los modelos 6×6 y 8×8 que incluyen la interacción spin-órbita ($\Delta_2 \neq 0$ y $\Delta_3 \neq 0$) las funciones de onda en $\mathbf{k} = 0$ de las bandas de valencia A , B , y C pasan a ser una combinación lineal del conjunto de funciones de Bloch $\{u_i, i = 1, 6\}$ (veáanse las Ecs. (1.48)). Sin embargo, para mantener la coherencia con la notación empleada en etiquetar los estados obtenidos por los diferentes modelos y evitar con ello la proliferación de notaciones definidas *ad-hoc*, mantendremos la denominación de las bandas empleada hasta ahora

$$\begin{aligned} A &\longleftrightarrow u_3, u_6, \\ B &\longleftrightarrow u_4, u_7, \\ C &\longleftrightarrow u_5, u_8, \end{aligned}$$

incluso para analizar modelos que incluyen la interacción spin-órbita.

En la Figura 3.29 hemos representado las energías de confinamiento correspon-

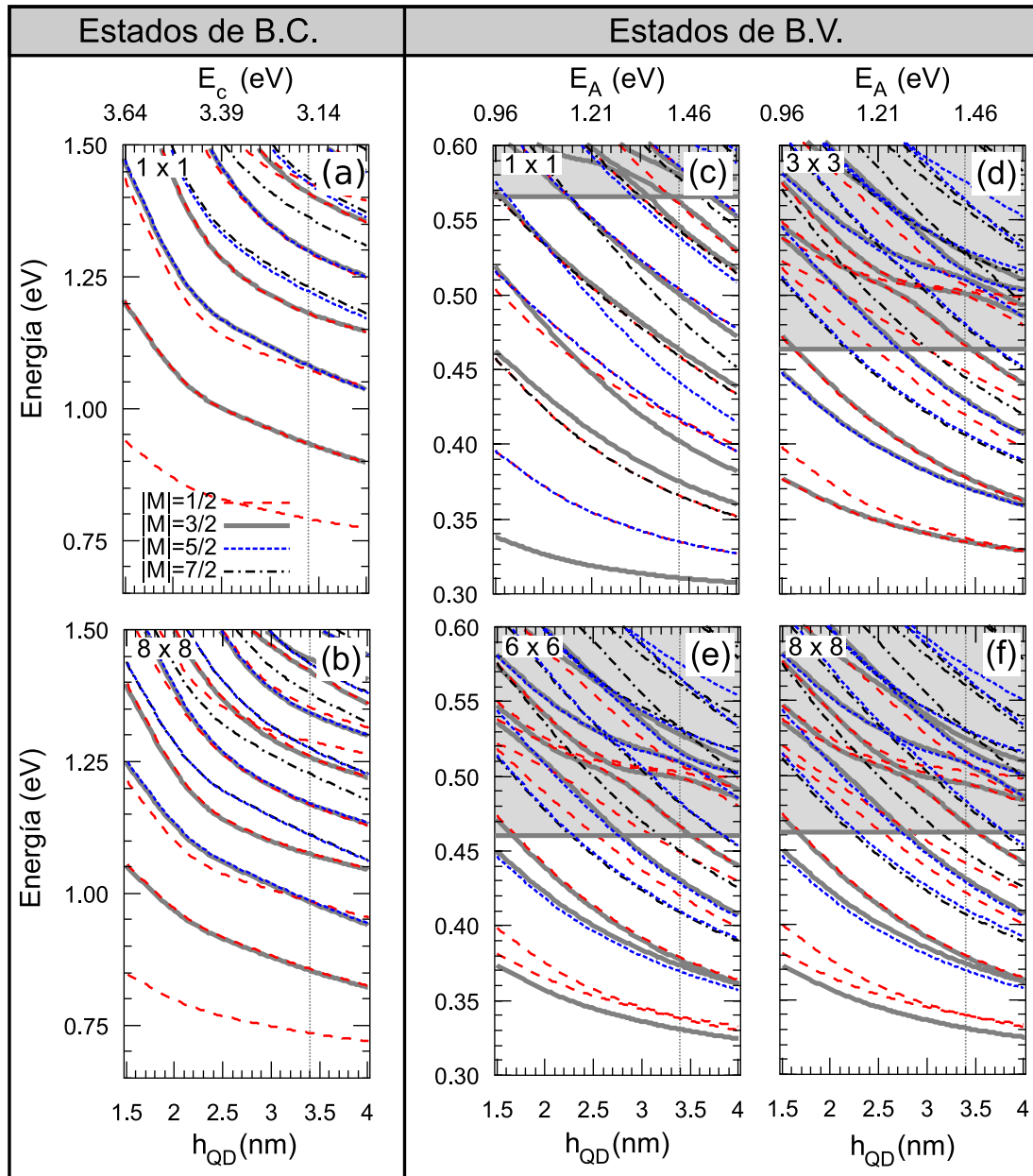


Figura 3.29: Energías de confinamiento en función del tamaño del QD obtenidas por diferentes modelos multibanda. La línea vertical indica la altura elegida para representar los niveles de energía individualmente en la Fig. 3.30. En el eje de abscisas superior hemos indicado la energía de los bordes de banda E_c y E_A en función de h_{QD} para poder estimar la energía absoluta de los estados mostrados.

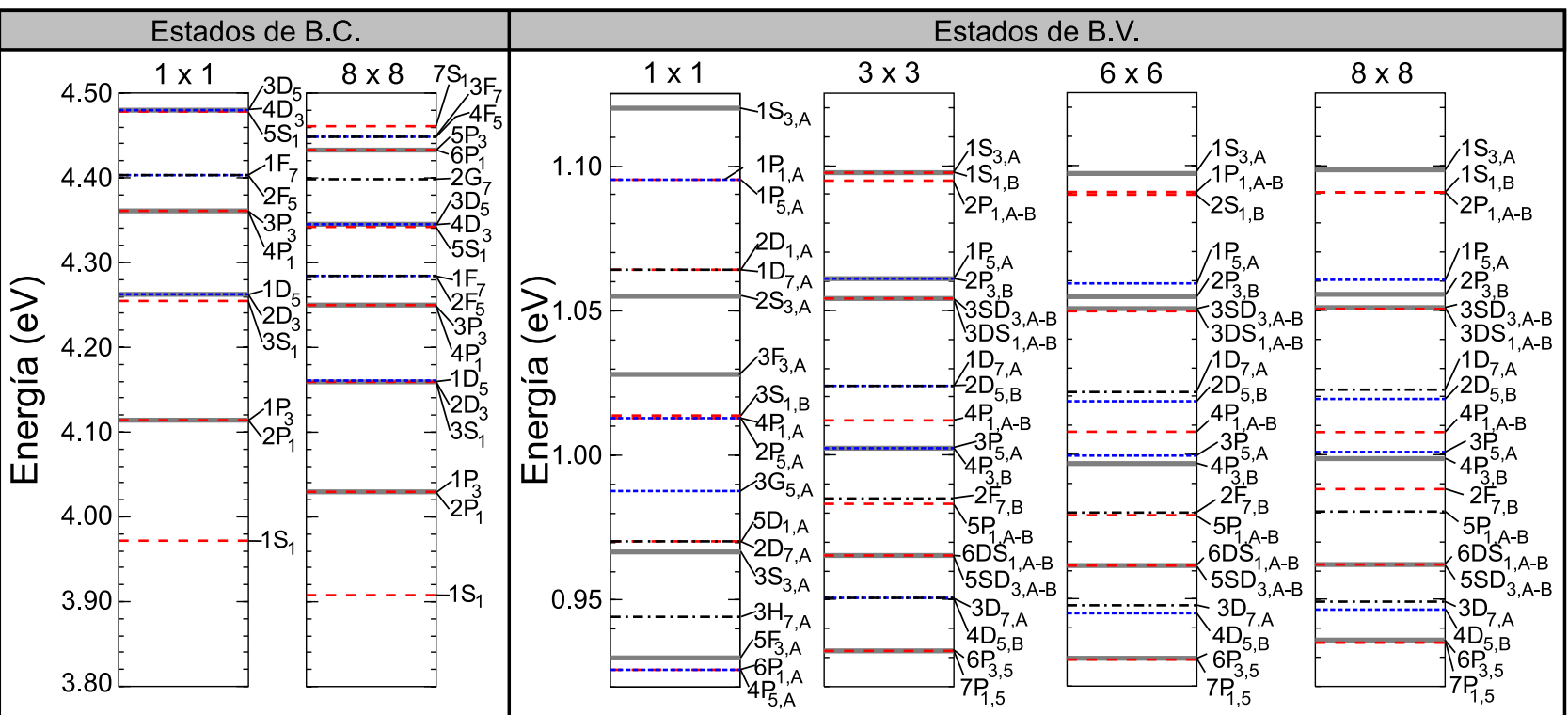


Figura 3.30: Niveles de energía absoluta para un QD de altura $h_{QD} = 3.375$ nm obtenidos por diferentes modelos multibanda. Las etiquetas se explican en el texto.

dientes a los estados confinados de conducción y de valencia con $|M| < 9/2$ ¹⁰ En cada una de las gráficas incluidas en la Figura hemos empleado un modelo diferente para el cálculo de la estructura electrónica. En los paneles (a) y (b) mostramos las energías de los estados de conducción. Los paneles del (c) al (f) muestran los resultados obtenidos para los estados de valencia. El límite del espectro continuo no aparece representado en los paneles (a) y (b), por estar situado a una energía superior a la máxima considerada en la representación. Por contra, en los paneles (c) al (f) sí ha sido incluido: en el modelo 1×1 se ha situado en el valor de $V_{\text{QD}}^A(z)$ en la barrera, como hicimos en la Sección 3.1, y en los modelos 3×3 , 6×6 y 8×8 se ha situado en el valor de $V_{\text{QD}}^C(z)$ en la barrera.

En la Figura 3.30 hemos representados los niveles de energía para el QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm obtenidos por los diferentes modelos. Los estados de conducción han sido etiquetados con la misma notación que fue empleada en la Figura 3.25. Mientras que para los estados de valencia, hemos tenido que introducir unas ligeras modificaciones en la notación que allí fue empleada. La componente dominante de los estados de hueco en el sistema InAs/GaAs era hh , i.e. $j_z = 3/2$. En el sistema GaN/AlN estos estados presentan, en general, un alto grado de mezcla de las componentes A y B (i.e. $j_z = 3/2, 1/2$), como veremos más adelante. Entonces, la etiqueta debe incluir además de M , el carácter dominante del estado. Además, existen estados con una proyección $P_{u_3} \approx P_{u_4} \approx 50\%$ (ó $P_{u_6} \approx P_{u_7} \approx 50\%$), los cuales no siempre presentan un valor de \tilde{m} definido. Estas particularidades nos han obligado a introducir una notación diferente para estados con una componente dominante y con dos componentes dominantes. Para el primer caso, hemos empleado:

$$N_M |\tilde{m}|_{2|M}, i,$$

donde el índice $i = A, B, C$ indica el carácter de la banda dominante. Para el segundo caso, de fuerte mezcla entre componentes A y B , utilizamos la notación:

$$N_M |\tilde{m}_A \tilde{m}_B|_{2|M}, A-B.$$

Cuando \tilde{m}_A es igual a \tilde{m}_B únicamente hemos indicado una de ellas.

A continuación procederemos con el análisis de las energías halladas por los diferentes modelos. Estudiaremos en primer lugar, los estados de la banda de conducción, y en segundo lugar, los estados de la banda de valencia.

¹⁰En el resto del trabajo hemos suprimido la representación de los niveles de energía absoluta en función del tamaño del QD, pues como se pudo comprobar en la Figura 3.18 de la Sección 3.1, esta representación no proporcionaba mucha información. En el eje de abscisas superior de la Figura 3.29 hemos indicado la energía de los bordes de banda E_c y E_v que sumados a las energías de confinamientos facilitan las energías absolutas de los estados.

Análisis de las energías de los estados de la banda de conducción

De la comparación de los paneles (a) y (b) de la Figura 3.29 se puede determinar la influencia de las bandas de valencia en las energías de los estados de conducción. En términos generales, se observa que el modelo 1×1 reproduce cualitativamente los resultados obtenidos por el modelo 8×8 . En términos cuantitativos, sin embargo, se aprecia una reducción de la energía de confinamiento de los niveles de energía en el modelo 8×8 : El estado fundamental aparece desplazado hacia el rojo ~ 100 meV para el QD de menor tamaño y ~ 60 meV para el QD de mayor tamaño. Las energías de cuantización también experimentan una reducción respecto de los resultados del modelo 1×1 . Así, la separación entre el nivel de energía del estado fundamental y el correspondiente al primero excitado varía entre 210 meV y 105 meV, para los dos tamaños extremos de la distribución, mientras que en el modelo 1×1 estas dos cantidades eran iguales a 265 meV y 125 meV, respectivamente. Esta energía de cuantización está íntimamente relacionada con el confinamiento angular, que por tanto ve reducida su intensidad en la aproximación multibanda. El análisis de los estados excitados a mayor energía revela las mismas conclusiones.

En la Figura 3.30 podemos reconocer la estructura de capas s , p , d , \dots , que se introdujo en la descripción del sistema InAs/GaAs. Conviene señalar que las energías de los estados asignados a las capas f y g no aparecen tan próximas como sucedía en el sistema InAs/GaAs. Aquí también hemos cuantificado el desdoblamiento de los estados de igual \tilde{m} pertenecientes a una misma capa y hemos comprobado en todos los casos que es $\ll 1$ meV, en contraste con los desdoblamientos hallados para el sistema InAs/GaAs, que eran del orden de 1 meV.

Análisis de las energías de los estados de la banda de valencia

Los diferentes modelos implementados nos van a permitir estudiar el efecto sobre los niveles de la banda de valencia del acoplamiento entre las funciones de Bloch $\{u_i\}$. En primer lugar, trataremos la cuestión relativa a la validez de la aproximación de una única banda. Para ello vamos centrarnos en los parecidos y diferencias de los resultados obtenidos por los modelos 1×1 y 3×3 . De la Figura 3.29 se desprende que, en términos generales, la estructura de niveles obtenida por los dos modelos es muy diferente. Por una parte, en el modelo multibanda la energía del estado fundamental aparece desplazada hacia altas energías entre 36 meV y 20 meV, para el QD de menor y mayor tamaño, respectivamente. Para el resto de estados excitados no es posible establecer una relación entre los estados hallados en uno y otro caso. Este hecho resulta más evidente en la representación

de la Figura 3.30. En los estados correspondientes a la aproximación de una única banda es posible reconocer la estructura de capas tipo potencial parabólico bidimensional, que también exhibían los estados de conducción. Sin embargo, los estados obtenidos por el modelo 3×3 aparecen en una disposición que no guarda ninguna semejanza con tal estructura de capas. Además, es posible apreciar que muchos de los estados del modelo 3×3 presentan una componente dominante B , situación que no aparecen en los estados del modelo 1×1 . Obsérvese, por ejemplo, que el estado de menor energía de la banda B ($3S_{1,B}$) aparece ~ 100 meV por encima del estado fundamental. A la vista de estos resultados, es posible concluir categóricamente que la aproximación de una única banda no es adecuada en el estudio de la banda de valencia del sistema GaN/AlN.

En segundo lugar, resulta interesante investigar el efecto de la interacción spin-órbita. Para ello haremos una comparación de los resultados obtenidos con los modelos 3×3 y 6×6 . Debido a la reducida magnitud del término de interacción ($\Delta_2 = \Delta_3 = 5$ meV en el GaN) en términos generales, los niveles de energía no sufren una perturbación significativa. Sí que es apreciable, sin embargo, que diferentes estados aparecen degenerados en el modelo 3×3 y la interacción spin-órbita rompe dicha degeneración. Antes de continuar con la discusión de los resultados, es importante identificar el origen de esta degeneración. En la Tabla 1.6 se puede comprobar que las funciones de Bloch u_k tienen la componente z de spin, s_z , bien definida. Por consiguiente, al considerar $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$ en el modelo 3×3 los estados obtenidos tienen una componente de s_z bien definida y, en consecuencia, la degeneración en $\pm M$ se traduce en una degeneración de spin: $\pm s_z$. Si recuperamos la definición de M y j_z , resulta inmediato comprobar que existirá un momento angular orbital total bien definido, que llamaremos L :

$$M = m + j_z = m + m_l + s_z \equiv L + s_z \quad (3.52)$$

Entonces, los estados estarán degenerados en $\pm L$ y en $\pm s_z$ y, por ende, aquellos con $L = 0$ tendrán una multiplicidad igual a dos y aquellos con $L \neq 0$ igual a cuatro. Los estados $1S_{3,A}$ y $1S_{1,B}$ tienen $|L| = 1$ y es por ello que aparecen degenerados. Por otra parte, el estado $2P_{1,3-4}$ tiene $L = 0$, razón por la cual aparece solo en la gráfica. La interacción spin-órbita introducida en el modelo 6×6 es responsable del desdoblamiento de todos aquellos estados que aparecen degenerados en los resultados del modelo 3×3 . En la representación de la Figura 3.30 se puede apreciar con mayor detalle la magnitud de la rotura de la degeneración. Tras realizar un análisis cuantitativo de los resultados numéricos, hemos observado que el desdoblamiento es máximo para el estado fundamental (~ 7.5 meV) y, en general, menor para los estados excitados, para los que hemos encontrado valores comprendidos entre 1

meV y 5 meV. En conclusión, la interacción spin-órbita introducida en el modelo 6×6 perturba los estados confinados en ~ 10 meV como máximo. Es por ello, que el modelo 3×3 ofrece una razonablemente correcta descripción de la estructura electrónica de la banda de valencia. Sin embargo, se debe tener en cuenta que la degeneración introducida al considerar $\Delta_2 = \Delta_3 = 0$ introducirá un error en las propiedades ópticas calculadas a partir de los resultados hallados por este modelo.

Por último, vamos a comentar la influencia de la banda de conducción en las energías de los estados de valencia comparando los modelos 6×6 y 8×8 . Fijándonos en los paneles (e) y (f) de la Figura 3.29, únicamente se aprecian diferencias para los estados con una energía de confinamiento muy grande y, aún así, los desplazamientos relativos de los niveles de energía no son significativamente grandes, del orden de unos pocos meV. La inspección de la Figura 3.30 confirma estas conclusiones. Por consiguiente, tanto en términos cuantitativos como cualitativos, el acoplamiento con la banda de conducción puede ser considerada como una corrección mínima a la estructura electrónica obtenida por el modelo 6×6 .

Análisis del carácter de las funciones de onda

A continuación estudiaremos la influencia del acoplamiento entre las bandas del semiconductor sobre las funciones de onda. Al igual que hicimos en el sistema InAs/GaAs, aquí también recurriremos a las proyecciones sobre las funciones de Bloch como herramienta de análisis. En la Figura 3.31 mostramos las proyecciones sobre las funciones de Bloch correspondientes a las bandas A , B y C ¹¹, de los estados de conducción (paneles (a), (b) y (c)) y de los estados de valencia (paneles (d), (e) y (f)). En adelante presentaremos sólo los resultados del modelo 8×8 .

La proyección de los estados de conducción sobre las bandas de valencia es menor a un 5% en el rango de energías analizado. En la Figura se puede apreciar que la proyección sobre las bandas A y B es, en general, menor que sobre la banda C . Al igual que sucedía en el sistema InAs/GaAs, la contribución de las bandas de valencia aumenta con la energía de confinamiento del estado y permanece aproximadamente constante para los diferentes tamaños que han sido considerados.

Los resultados concernientes al carácter de los estados de la banda valencia difieren sustancialmente de los hallados para el sistema InAs/GaAs. A partir del análisis de los estados realizado en la Figura 3.31, ya no se puede afirmar de forma general que en el sistema GaN/AlN los estados tengan un único carácter dominante. La contribución de la banda de conducción sobre los estados de hueco no

¹¹Las proyecciones han sido calculadas sumando sobre las dos orientaciones de spin de las funciones de Bloch, i.e. $P_A \equiv P_{u_3} + P_{u_6}$, $P_B \equiv P_{u_4} + P_{u_7}$ y $P_C \equiv P_{u_5} + P_{u_8}$.

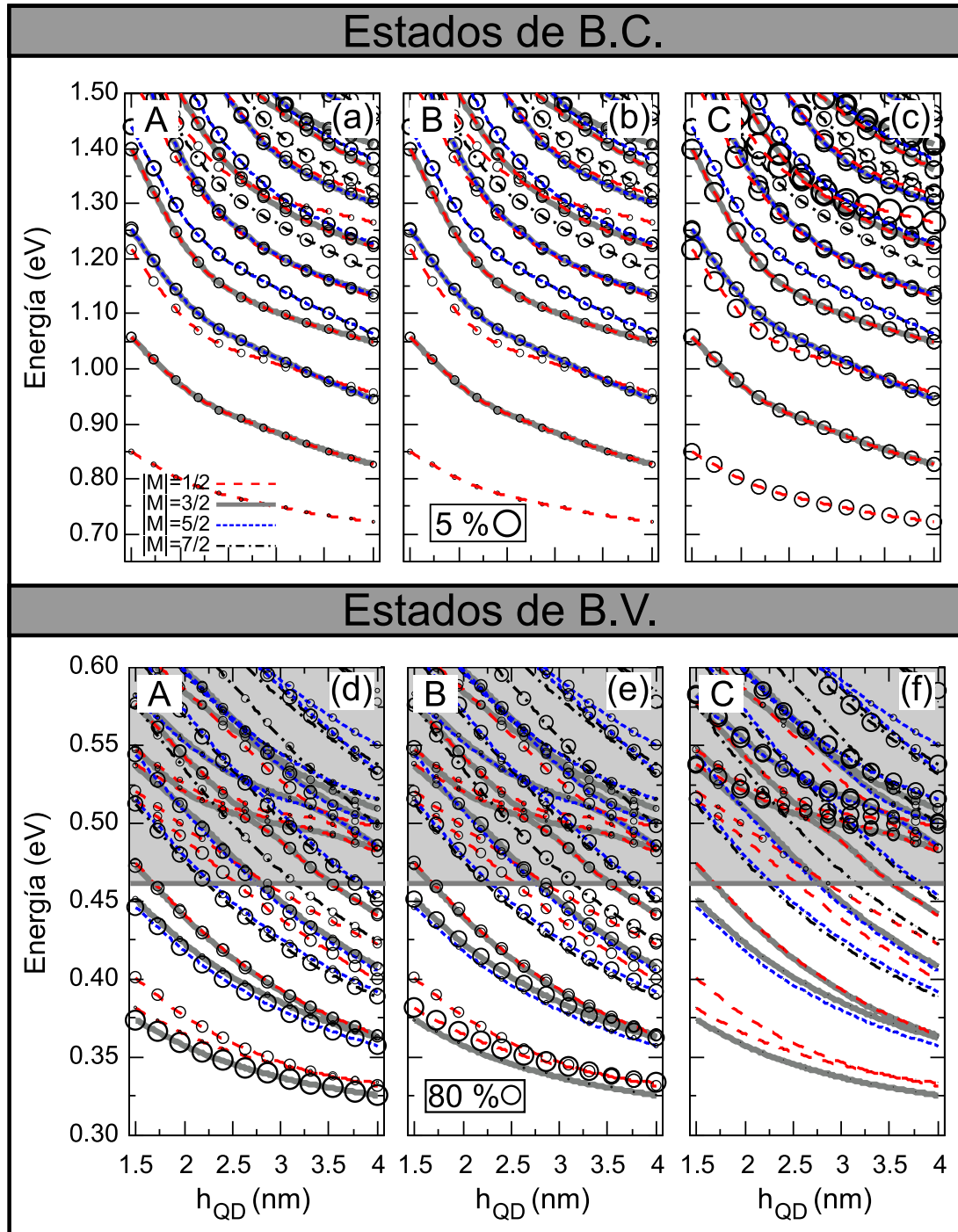


Figura 3.31: Figura similar a la Fig. 3.27. Los estados de conducción y de valencia han sido proyectados sobre las funciones de Bloch correspondientes a las bandas A, B, y C.

ha sido mostrada en la Figura 3.31 por ser menor a un 0.5 %. Vemos que los caracteres A y B resultan ser dominantes en los estados de la zona de baja energía de confinamiento. En dicha región el carácter C resulta ser menor de un 5 %. Así la región próxima al estado fundamental está compuesta por tres estados, que fueron etiquetados como $1S_{3,A}$, $1S_{1,B}$, y $2P_{1,A-B}$ en la Figura 3.30. El primero de ellos presenta una componente A igual a $\sim 85 - 90$ %, dependiendo del tamaño del QD. Para el segundo estado la componente dominante pasa a ser B , con una proyección aproximadamente igual que la del estado $1S_{3,A}$ sobre A . Finalmente, el estado $2P_{1,A-B}$ presenta una proyección próxima al ~ 50 % sobre las funciones A y B . Estos tres estados son característicos de la banda de valencia de los QDs de GaN/AlN y no tienen su análogo en el sistema InAs/GaAs. En los estados excitados también es posible reconocer esta particular distribución del carácter de los estados, i.e. o bien presentan un carácter A ó B , o bien presentan un carácter aproximadamente igual A y B . Para energías de confinamiento mayores a ~ 0.50 eV, se aprecia la aparición de estados con una componente C significativa. El hecho de que aparezca la contribución de la banda C a una energía tan alta se debe, fundamentalmente, a la masa efectiva $m_{z,C}$ que es mucho menor que $m_{z,(A,B)}$ (ver Tabla 3.3). Al ser el confinamiento vertical muy intenso y las masas efectivas asociadas a las diferentes bandas a lo largo de la dirección z tan diferentes, se obtienen unas energías de confinamiento muy distintas para las diferentes componentes de la función de onda de los estados electrónicos. Esto tiene importantes consecuencias en el estudio de las propiedades ópticas, pues el borde de absorción exhibirá una dependencia crítica con la polarización de la radiación incidente. En el siguiente epígrafe ilustraremos este asunto.

Análisis de las propiedades ópticas

En el estudio de las propiedades ópticas del sistema GaN/AlN nos fijaremos únicamente en el QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. El efecto del tamaño de la nanoestructura sobre los espectros de absorción fue discutido en la Figura 3.21 en el marco del modelo 1×1 . En esta Sección nos centraremos, en primer lugar, en el análisis de la absorción óptica obtenida a partir de los modelos 3×3 y 6×6 . Con ello pretendemos completar la discusión relativa al efecto de la interacción spin-órbita que se inició con la comparación de la Figuras 3.29(d) y 3.29(e). Seguidamente realizaremos un estudio detallado del espectro de absorción de los QDs de GaN/AlN a partir de los resultados del modelo 8×8 .

En las Figuras 3.32(a) y 3.32(b) mostramos los resultados obtenidos por los modelos 3×3 y 6×6 , respectivamente. En esta representación hemos considerado

que la luz esta polarizada en el plano de crecimiento. Con ayuda de las etiquetas que identifican cada transición, es posible establecer una correspondencia con los estados electrónicos que participan en cada caso. En el modelo 6×6 las energías de transición aparecen desplazadas ~ 10 meV hacia el azul, debido al impacto que tiene la interacción spin-órbita sobre las energías de los estados de hueco (ver Fig. 3.30). Por otra parte, es posible apreciar que algunas de las transiciones del panel (a) aparecen en el panel (b) en forma de doblete. El desdoblamiento que da origen a estas parejas de picos se debe a la rotura de la degeneración en $\pm L$ descrita en la discusión de la Figs. 3.29 y 3.30. Salvo las transiciones que han sufrido un desdoblamiento por efecto de la interacción spin-órbita, el resto exhiben una intensidad de la absorción comparable. En consecuencia, los resultados obtenidos a través de los modelos 3×3 y 6×6 son cualitativamente equivalentes. La necesidad de la inclusión o la exclusión de la interacción spin-órbita en el modelo teórico depende de la resolución espectral del experimento óptico que se pretenda estudiar. En efecto, cuando se considerara una anchura inhomogénea de ~ 10 meV apenas se pueden apreciar las diferencias entre ambas aproximaciones.

En la Figura 3.33 hemos representado los espectros de absorción obtenidos a partir de las energías y funciones de onda correspondientes al modelo 8×8 . En los paneles (a) y (b) hemos representado la absorción para una polarización de la radiación incidente perpendicular o paralela a la dirección de crecimiento, respectivamente. Al comparar el espectro del panel (a) con el correspondiente al obtenido por el modelo 6×6 , encontramos que el borde de absorción aparece desplazado ~ 70 meV hacia el rojo. Este desplazamiento es atribuible a la modificación de energía del estado de electrón pues, como se vio en la Figura 3.30, el estado fundamental de huecos es poco sensible al acoplamiento entre las bandas de valencia y conducción. Hemos comentado que el entorno del estado fundamental de la banda de valencia está compuesto por tres estados separados entre sí unos pocos meV: $1S_{3,A}$, $1S_{1,B}$ y $2P_{1,A-B}$. Sin embargo, en el entorno de la transición fundamental únicamente aparecen dos transiciones. En efecto, debido al valor de \tilde{m} , el estado $2P_{1,A-B}$ conecta con los estados de electrón $2P_1$ y $1P_3$, razón por la cual estas transiciones aparecen desplazadas ~ 130 meV hacia el azul respecto del borde de absorción. Este resultado es importante, pues si fuese posible resolver esta transición en un experimento se obtendría una estimación de la distancia entre los estados de electrón $1S_1$ y el par cuasi-degenerado $2P_1$ y $1P_3$, ya que los tres estados de hueco que participan en estas transiciones están muy próximos en energía. Con ello se podría obtener una valiosa información sobre la estructura electrónica del QD.

Por otra parte, en el entorno de las transiciones $[1P_3, 1P_{5,A}]$ y $[2P_1, 2P_{3,B}]$ es

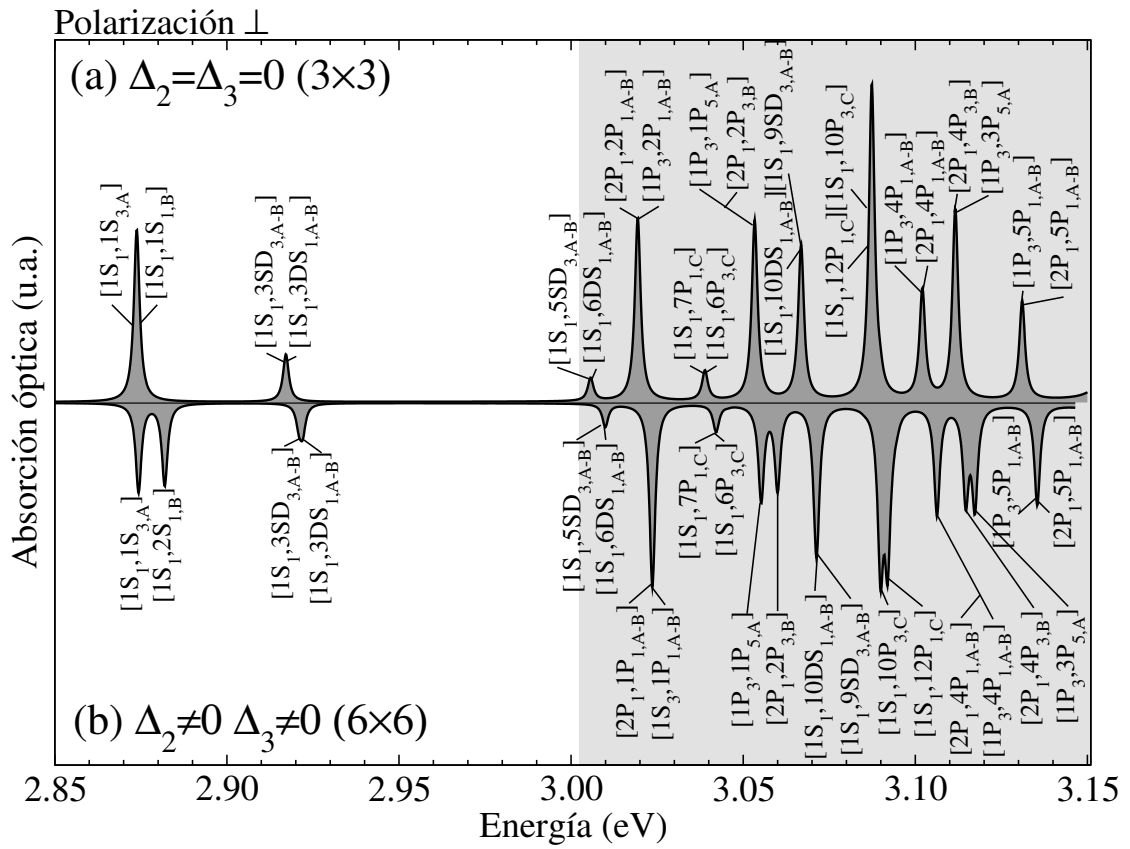


Figura 3.32: Espectro de absorción óptica para un QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. En (a) se ha considerado la estructura electrónica obtenida por del modelo 3×3 ($\Delta_{so} = 0$), y en (b) por del modelo 6×6 ($\Delta_{so} \neq 0$). Ambos espectros han sido representados utilizando la misma escala para el eje de ordenadas. Los estados han sido identificados con las etiquetas introducidas en la Fig. 3.30. La zona sombreada indica el continuo de transiciones E_{B-C}^e . La anchura homogénea considerada ha sido de 1 meV.

posible encontrar a las transiciones $[2P_1, 2P_{1,A-B}]$ y $[1P_3, 2P_{1,A-B}]$. En consecuencia, no es posible reconocer en el espectro de absorción de este sistema la estructura de capas que fue identificada en el sistema InAs/GaAs. Es por ello que la región del espectro en la que participan estados excitados exhibe una estructura interna más compleja que la hallada para el sistema InAs/GaAs. Recordemos que esta cuestión, fue planteada en el Capítulo 1. Allí vimos que al aumentar la potencia de excitación en un experimento de PL sobre QD de InAs/GaAs (ver Fig. 1.3) era posible resolver transiciones entre estados excitados, mientras que en un experimento similar realizado sobre QD de GaN/AlN (ver Fig. 1.13) dichas transiciones no resultaban ser tan evidentes. Si excluimos del análisis la dispersión de tamaños, que es posible que sea muy diferente en ambos sistemas, a partir de los resultados obtenidos en este apartado es posible explicar por qué el sistema GaN/AlN no presenta una estructura de picos como el sistema InAs/GaAs en función de la potencia. En la Sección 3.3 profundizaremos en esta cuestión.

En la Figura 3.33(b) mostramos el espectro correspondiente a la polarización paralela a la dirección de crecimiento (polarización \parallel). El borde de absorción se sitúa ~ 110 meV por encima del hallado para la polarización \perp . Esto se debe a que los estados con una componente C se localizan aproximadamente a esta energía respecto del estado fundamental de la banda de valencia. Como ya ha sido comentado en otras ocasiones, las funciones de Bloch asociadas a la banda C (u_5 y u_8) tienen un carácter $|Z\rangle$ (ver Tabla 1.6) y es por ello que únicamente se puede dar un proceso de absorción con polarización \parallel si participan estados de hueco con una componente C significativa. En transiciones de más alta energía la intensidad aumenta significativamente. Esto se debe a la participación de estados de hueco excitados, i.e. de energía de confinamiento mayor, que como vimos en la Figura 3.31, presentan una componente C mayor. Debemos advertir que estos resultados deben ser considerados con cautela, ya que la mayoría de los estados de hueco implicados en el transiciones ópticas están situados a una energía mayor del límite del espectro continuo del QD indicado en la Fig. 3.29. Es por ello que en la Sección 3.3 revisaremos estos resultados y las conclusiones.

3.3. Efecto de la deformación y campos internos

En las Secciones anteriores analizamos la estructura electrónica de un punto cuántico auto-ensamblado recurriendo a una descripción simplificada de la distribución de la deformación y del potencial electrostático interno. Por una parte, consideramos que la deformación del QD podía ser descrita a través de una deformación biaxial, característica de una lámina bidimensional. Por otra parte, consid-

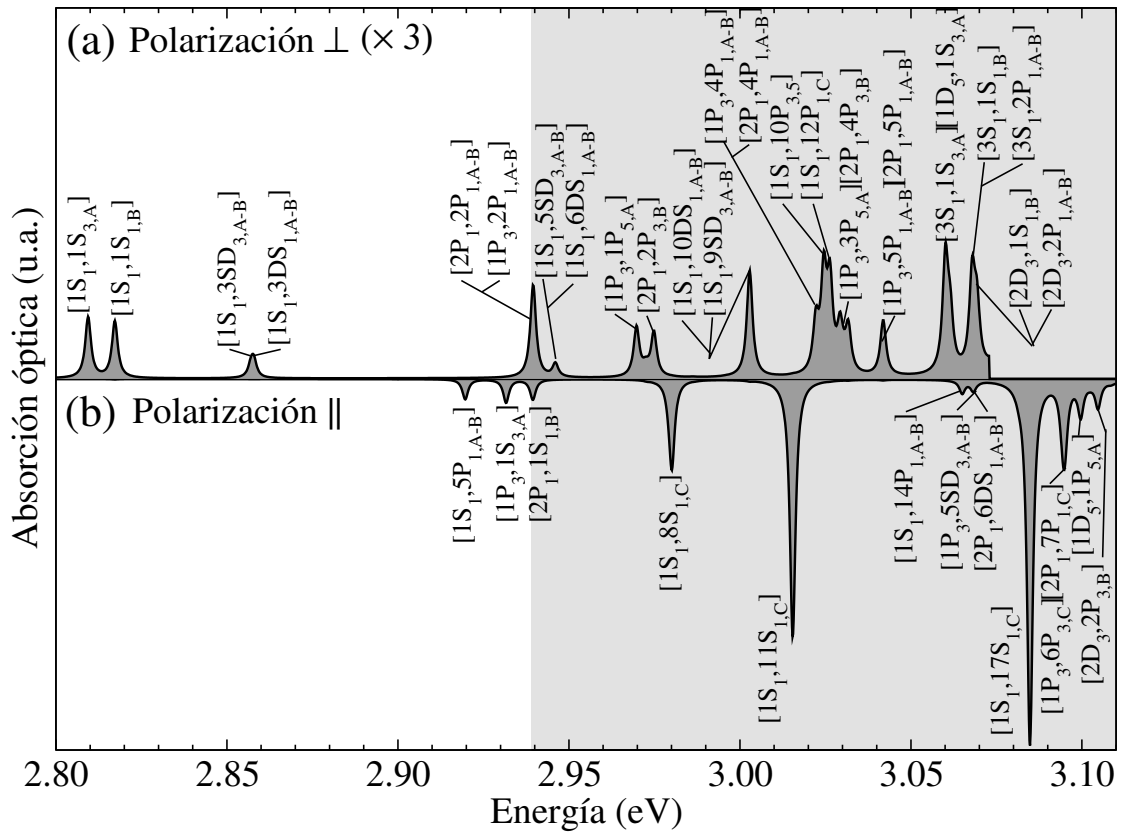


Figura 3.33: Espectro de absorción óptica para el QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Se ha considerado la estructura electrónica obtenida del modelo 8×8 . Se ha distinguido entre radiación polarizada perpendicularmente (a) y paralelamente (b) a la dirección de crecimiento. Ambos espectros han sido representados utilizando la misma escala en el eje de ordenadas. Por claridad se ha aplicado un factor 3 de ampliación a la curva mostrada en el panel (a). La zona sombreada indica la localización de $E_{\text{B-C}}^c$. Se ha considerado una anchura homogénea igual a 1 meV.

eramos apropiado modelizar el potencial interno mediante una formula sencilla con un parámetro (el campo interno) ver Ec. (3.32). En esta Sección abandonaremos esta descripción simplificada de los campos de deformación y del potencial interno, para incorporar la formulación completa desarrollada en el Capítulo 2. De los diferentes modelos discutidos en la Sección 3.2, hemos empleado en esta Sección el modelo 8×8 , ya que proporciona los resultados más exactos.

Los cambios que hay que introducir en la formulación de la Sección 3.1 para contemplar la distribución espacial realista de la deformación y del potencial electrostático interno se reducen a:

1. Ahora los elementos de H^{BP} deberán contemplar las expresiones del tensor de deformaciones e_{ij} derivadas en la Sección 2.2.
2. El potencial interno $\varphi_{\text{QD}}(\mathbf{r})$ vendrá descrito por las expresiones obtenidas en la Sección 2.7.

Aunque conceptualmente fácil, esta mejora del modelo implica gran cantidad de trabajo computacional, ya que será necesario evaluar los elementos de matriz:

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m')} | H_{ij}^{\text{BP}} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle \quad \text{y} \quad \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m')} | \varphi(\rho, z) | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle. \quad (3.53)$$

En el caso particular de un problema elástico axisimétrico los elementos del Hamiltoniano de Bir y Pikus se pueden expresar en función de las componentes del tensor de deformaciones $e_{\text{SUM}}(\rho, z) = e_{\rho\rho}(\rho, z) + e_{\phi\phi}(\rho, z)$, $e_{zz}(\rho, z)$, $e_{\text{DIF}}(\rho, z) = e_{\rho\rho}(\rho, z) - e_{\phi\phi}(\rho, z)$ y $e_{\rho z}(\rho, z)$. Las definiciones auxiliares de la Ec. (B.1) dependientes de la deformación quedan entonces expresadas como:

$$\text{tr}(e) = e_{\text{SUM}} + e_{zz}, \quad (3.54a)$$

$$\tilde{e} = e_{\text{DIF}} - 2e_{zz}, \quad (3.54b)$$

$$\hat{e} = e_{\text{DIF}}, \quad (3.54c)$$

$$e_{\pm} = e^{\pm i\phi} e_{\rho z}, \quad (3.54d)$$

$$e_{\pm\pm} = e^{\pm i2\phi} e_{\text{DIF}}. \quad (3.54e)$$

3.3.1. Resultados para el sistema InAs/GaAs

En este apartado analizaremos en primer lugar la estructura electrónica y las propiedades ópticas de QDs de igual geometría que la considerada en las Secciones 3.1 y 3.2. A continuación retomaremos la discusión de los resultados experimentales iniciada en la Sección 3.1.

Análisis de la estructura electrónica

Tras resolver la ecuación de Schrödinger de la Ec. (3.42), obtenemos la estructura electrónica mostrada en la Figura 3.34. En la Figura 3.34(a) mostramos los niveles de energía correspondientes a los estados de electrón. De la comparación con la Figura 3.24 se puede concluir que el impacto de la deformación inhomogénea es pequeño, ya que únicamente es apreciable un pequeño corrimiento hacia el azul ~ 5 meV de los niveles. En la Figura 3.34(b) hemos representado los niveles de energía correspondientes al QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm y hemos etiquetado cada estado utilizando la notación empleada en la Sección 3.2. Nuevamente es posible reconocer la agrupación de los estados confinados en capas tipo *s*, *p* y *d*. El gran parecido hallado entre los resultados obtenidos en esta Sección y los obtenidos en la Sección 3.2 es fácil de explicar. En primer lugar hay que tener en cuenta que en el Hamiltoniano H^{BP} los elementos que acoplan las bandas de conducción y las de valencia son nulos. En consecuencia, serán los elementos diagonales aquellos que tengan un mayor peso sobre la estructura electrónica de la banda de conducción del QD. En la Ec. (B.3) se puede comprobar que dichos elementos son proporcionales a la componente hidrostática de la deformación e_h . Fijándonos ahora en la expresión que define a e_h como muestra la Ec. (2.56), e_h toma el mismo valor que en la aproximación biaxial empleada en Secciones anteriores. Es por ello que el impacto de la deformación inhomogénea sobre los estados de la banda de conducción es tan pequeño, pues únicamente se ven afectados indirectamente por la perturbación de los estados de hueco.

Por otra parte, en la Figura 3.34(c) mostramos la energía de los estados confinados de hueco. El impacto que tiene la deformación sobre estos estados es muy importante y no es sencilla su interpretación. En la Figura 3.34(d) hemos representado los niveles de energía del QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm. Hemos incluido también los correspondientes al QD con $h_{\text{QD}} = 10$ nm en la Figura 3.34(e), ya que serán de ayuda en la discusión de los resultados. A continuación expondremos las particularidades de la estructura electrónica de la banda de valencia que estimamos más relevantes.

1. La energía de los estados ha experimentado una reducción de ~ 100 meV, respecto de los resultados obtenidos al considerar únicamente la deformación homogénea de los QD (ver Fig. 3.24).
2. Al aumentar la altura del QD, el número de estados confinados dentro del rango de energías considerado experimenta un importante incremento.

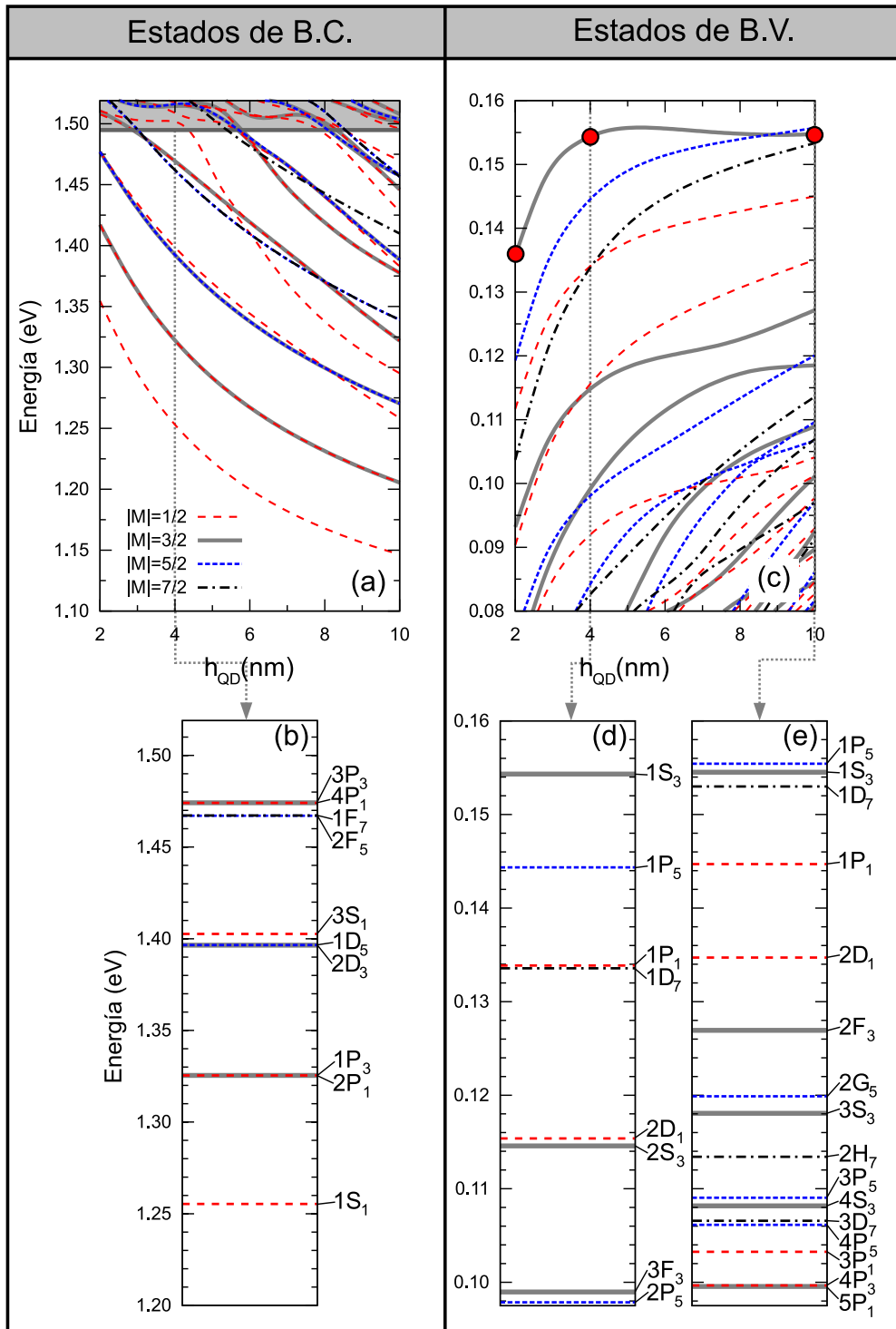


Figura 3.34: Niveles de energía de los estados de electrón (a) y huecos (c) con $|M| < 9/2$ obtenidos tras incorporar el efecto de la deformación inhomogénea en el modelo teórico. En el panel (b) mostramos los estados de electrón correspondientes al QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm y, en los paneles (d) y (e) los estados de hueco para los QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm y $h_{\text{QD}} = 10$ nm, respectivamente.

3. La estructura de capas que era reconocible en los estados de hueco de la Figura 3.25 ya no es posible identificarla aquí.
4. La dependencia con h_{QD} de los estados próximos al estado fundamental resulta ser muy diferente. Mientras que los estados $1P_5$ y $1D_7$ presentan una pendiente muy pronunciada para valores de h_{QD} grandes, ésta se reduce para el estado $1P_1$ y finalmente se aproxima a cero para $1S_3$.
5. El estado $1S_3$ exhibe un máximo de energía para $h_{\text{QD}} \sim 4$ nm. Para valores de h_{QD} mayores presenta una dispersión aproximadamente plana con la altura del QD.
6. El estado fundamental pasa de ser $1S_3$ a $1P_5$ para una altura del QD ~ 9 nm.

Para completar la información de la estructura electrónica, hemos representado la densidad de probabilidad de diferentes estados de conducción y de valencia en la Figura 3.35. Por una parte, los estados de electrón exhiben una distribución que puede ser interpretada en los mismo términos que las densidades de probabilidad discutidas en la Sección 3.1. Vemos que los estados tipo S presentan un lóbulo central, mientras que los estados tipo P , D y F presentan un mínimo en el entorno del eje axial y dos lóbulos que se desplazan hacia las paredes laterales del QD conforme \tilde{m} aumenta. A su vez, es posible comprobar la semejanza entre los pares de estados *cuasi-degenerados*: $(2P_1, 1P_3)$, $(2D_3, 1D_5)$ y $(2F_5, 1F_7)$.

Por otra parte, en el estudio de los estados de hueco hemos considerado dos alturas diferentes, al igual que hicimos en la Figura 3.34. Ello nos permitirá discutir algunas de las particularidades encontradas en el esquema de niveles, a la luz de la información obtenida de la función de onda. En el QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm se aprecia una distribución de la densidad de probabilidad que difiere de la observada en los estados de electrón. Dejando a un lado la menor penetración en la barrera debido al mayor confinamiento característico de los estados de hueco, se observa que los estados con $\tilde{m} \neq 0$ experimentan una mayor “compresión” hacia los extremos laterales del QD. Al pasar a analizar los resultados obtenidos para el QD con $h_{\text{QD}} = 10$ nm, se evidencia que el perímetro de la base del QD actúa como un pozo para los estados de hueco. El estado $1S_3$ que presentaba un máximo en la zona central del QD para $h_{\text{QD}} = 4$ nm, exhibe un mínimo en la misma región para $h_{\text{QD}} = 10$ nm, pasando a estar el máximo de probabilidad en las paredes laterales de la nanoestructura. Observamos que el estado $3S_3$, que presenta una energía de confinamiento mayor, vuelve a presentar un máximo de probabilidad en la zona central del QD. Esto no sucede para los estados con $\tilde{m} \neq 0$, los cuales siguen

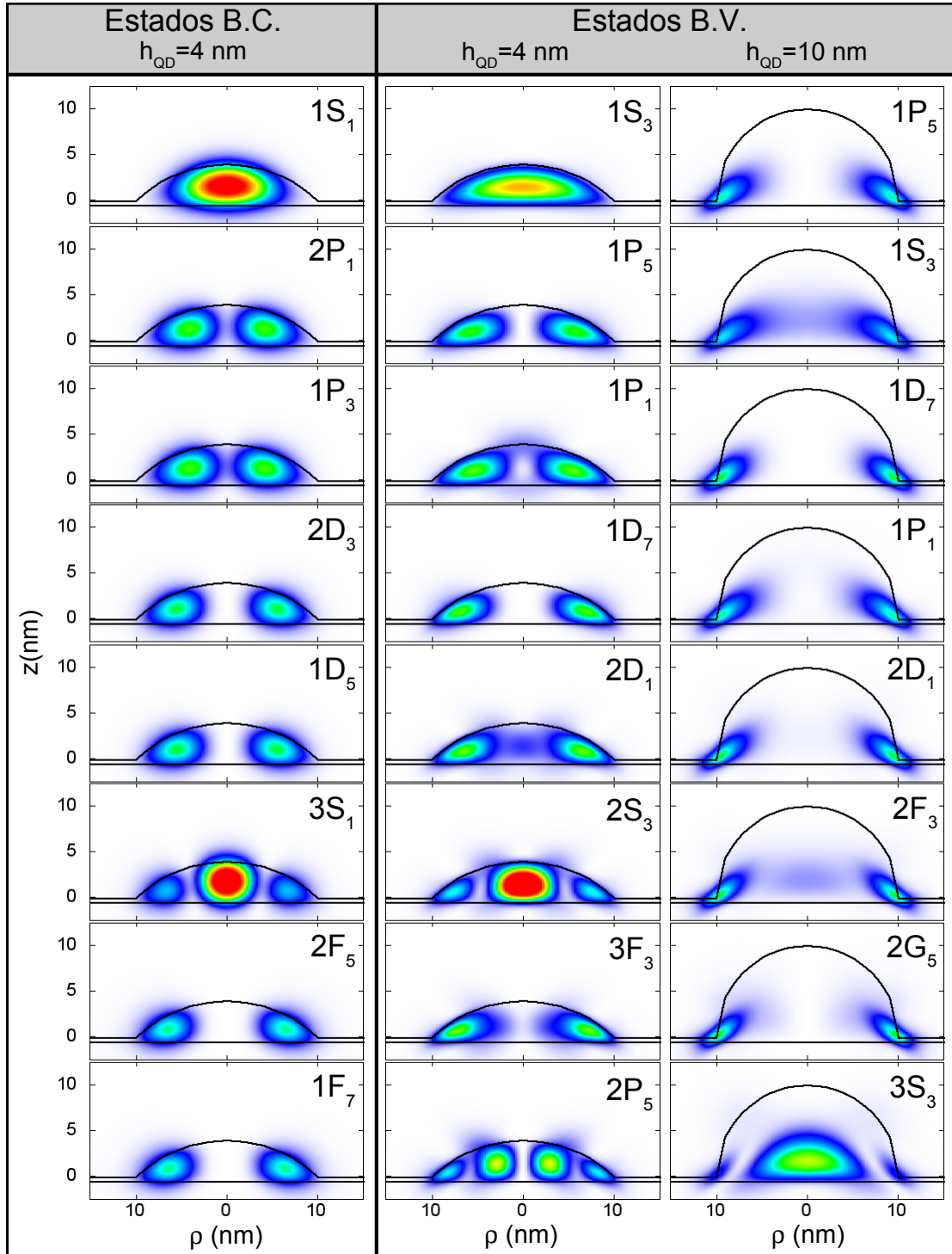


Figura 3.35: Densidad de probabilidad de los primeros ocho estados de la banda de conducción y valencia para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 4 \text{ nm}$. Para los estados de hueco también ha sido considerado un QD de altura $h_{\text{QD}} = 10 \text{ nm}$. En todas las representaciones se ha considerado la misma escala de color.

presentado el máximo de probabilidad en la región alejada del centro. Únicamente el estado $2F_3$ presenta una densidad de probabilidad apreciable en la zona del eje, por lo que debe existir una componente cuya función envolvente asociada presente $m = 0$. Este resultado es indicativo de que el acoplamiento entre las bandas de valencia del semiconductor parece cobrar mayor importancia todavía cuando se considera la deformación inhomogénea.

En la Figura 3.36 hemos representado las proyecciones de los estados confinados de la banda de valencia sobre las funciones de Bloch correspondientes a las bandas hh , lh y so . El cálculo ha sido realizado siguiendo el mismo procedimiento descrito en la Sección 3.2. Es posible apreciar que los estados incluidos en la figura presentan un carácter dominante hh cuando la altura del QD es pequeña, $\lesssim 5$ nm. Al aumentar la altura tanto la contribución de las componentes lh como so aumenta. Para $h_{\text{QD}} = 10$ nm los estados próximos en energía al estado fundamental presentan una contribución $\sim 25\%$ de la banda lh y $\sim 10\%$ de la banda so . También se puede observar que el peso de estas bandas aumenta para los estados excitados. Al comparar con los resultados que obtuvimos en la Sección 3.2 (ver Fig. 3.27) encontramos que la contribución de las componentes hh y lh ha aumentado significativamente por efecto de la deformación inhomogénea. Por otra parte, tanto al considerar la deformación homogénea, como inhomogénea, el grado de mezcla entre componentes aumenta con la energía de confinamiento de los estados. Los resultados de las proyecciones de los estados de conducción no han sido mostrados por ser cualitativamente iguales a los obtenidos en la Figura 3.27.

Como hemos visto, la inclusión de la deformación inhomogénea en nuestro modelo ha tenido un impacto importante en la estructura electrónica (tanto en niveles de energía como en las funciones de onda) de la banda de valencia. Establecer el origen de este comportamiento no es una tarea sencilla, debido a la complejidad que ha adquirido el modelo. Comenzaremos por el análisis del estado $1S_3$, que es el estado fundamental para $h_{\text{QD}} < 9$ nm. Deseamos entender por qué la energía de este estado resulta ser poco sensible a la altura del QD para valores de $h_{\text{QD}} \gtrsim 5$ nm, y por qué el lóbulo central que exhibe el estado para $h_{\text{QD}} = 4$ nm se convierte en dos lóbulos localizados en el perímetro de la zona inferior del QD cuando su altura alcanza los 10 nm. En la Figura 3.37 hemos representado las proyecciones de la función de onda sobre los ejes Z y ρ junto con un corte del potencial de confinamiento efectivo para la banda hh . Este potencial, que viene dado por la variación espacial del borde de la banda hh , ha sido calculado diagonalizando $H^{\text{MB}}(\mathbf{k} = 0)$ (ver Ec. (3.39)) en cada punto \mathbf{r} teniendo en cuenta la deformación inhomogénea ($e_{ij} \rightarrow e_{ij}(\mathbf{r})$). Aunque no es posible demostrar rigurosamente que el potencial así obtenido sea el mismo que sienten los estados confinados por la presencia del QD,

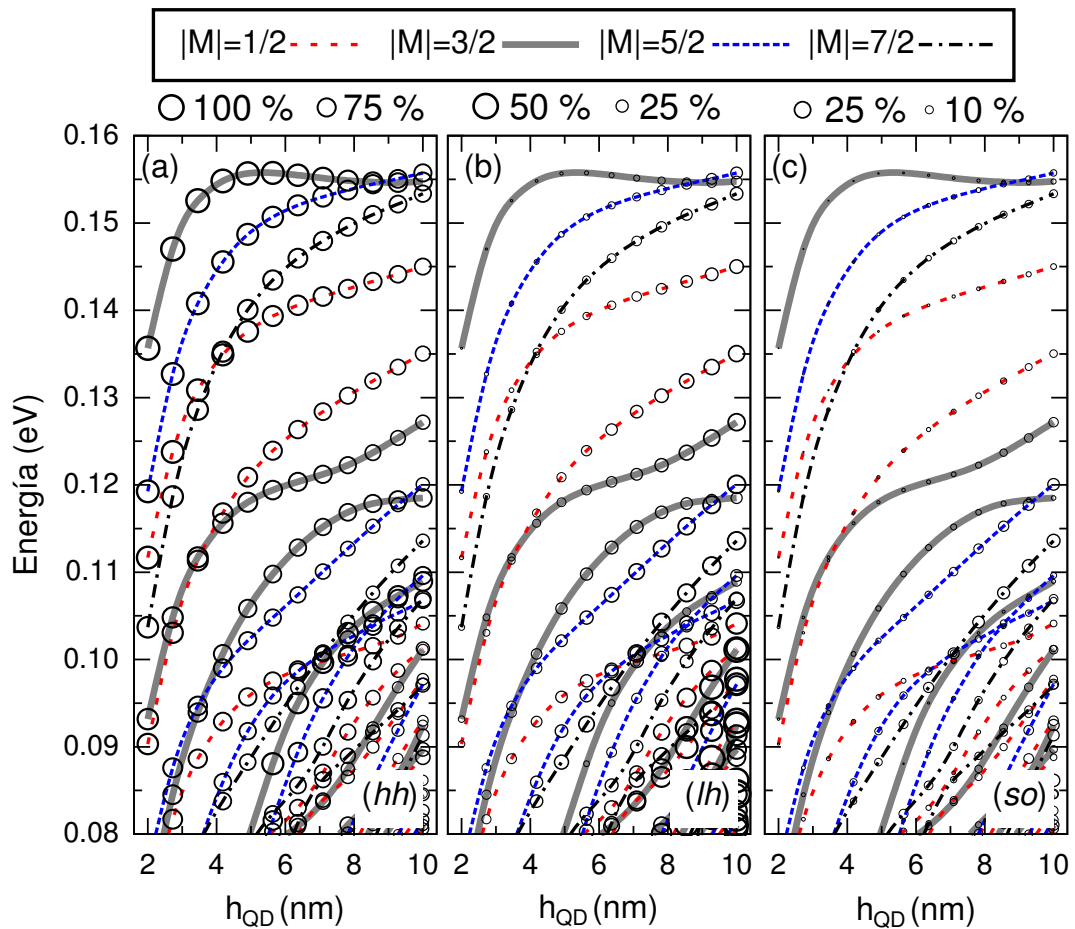


Figura 3.36: Proyección de los estados de hueco sobre las funciones de Bloch correspondientes a las bandas de hh (a), lh (b) y so (c). El tamaño de los puntos representa en cada caso el valor de la proyección. Por claridad, hemos empleado en cada figura una escala diferente (indicada en la parte superior) para indicar el valor de la proyección.

sí que resulta útil su descripción con fines ilustrativos. En la bibliografía es posible encontrar diferentes trabajos en los que este potencial efectivo ha sido empleado con el mismo propósito [66, 191, 205]. En los paneles (a), (c) y (e) se aprecia que al aumentar h_{QD} la función de onda se localiza en la región inferior del QD y que la separación entre la energía del estado y el máximo de potencial se reduce progresivamente. Por consiguiente, se puede considerar que el estado está cada vez menos confinado y más localizado, como cabría esperar a partir de los resultados obtenidos en Secciones anteriores. Sin embargo, curiosamente el máximo de potencial experimenta un desplazamiento hacia bajas energías. Por consiguiente, el aumento de la energía del estado como consecuencia de la reducción del confinamiento, se compensa con un desplazamiento del potencial hacia bajas energías, resultando en una aparente “independencia” de la energía del estado con h_{QD} .

Todavía resta explicar por qué el estado fundamental se localiza en la región alejada del eje axial del QD. En los paneles (b), (d) y (f) es posible apreciar la forma que adopta el potencial efectivo de confinamiento en la dirección ρ . Vemos que en la región de la barrera el potencial cada vez toma valores de mayor energía, de forma que para $h_{\text{QD}} = 10$ nm se crea un máximo de potencial en la zona de la intercara del QD. En consecuencia, la función de onda pasa progresivamente de estar localizada en la zona central del QD a estarlo en la zona de la intercara lateral. Este efecto ha sido identificado en trabajos publicados recientemente [205, 206], en el curso de la escritura de este trabajo de tesis. Los autores han denominado a este tipo de potencial efectivo de confinamiento, como potencial de tipo “corona”, pues en una reconstrucción tridimensional recuerda este elemento ornamental [206]. En otras geometrías también se ha observado la localización del estado de hueco en las intercaras laterales de la nanoestructura [191].

Este cambio en el potencial de confinamiento radial también nos permite entender por qué los estados de hueco $1P_5$ y $1D_7$ son tan sensibles a las variaciones de altura para valores mayores a 6 nm. Al presentar estos estados un valor de $\tilde{m} > 0$ el máximo de probabilidad de la función de onda se localiza en la región del máximo del potencial efectivo, resultado en una energía de confinamiento del estado próxima o incluso **inferior** a la del estado $1S_3$. En otras palabras, resulta energéticamente más favorable acomodar un estado con $\tilde{m} > 0$ en este potencial que uno con $\tilde{m} = 0$. Este tipo de transiciones, en las que el estado fundamental aumenta el valor de su momento angular orbital, ha sido observada en puntos cuánticos tipo-II [207] y en anillos cuánticos [208] bajo la influencia de un campo magnético externo aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento. Es por ello, que sería interesante incorporar el efecto de un campo magnético en nuestro modelo. Esto nos permitiría investigar si en puntos cuánticos lenticulares se dan estas

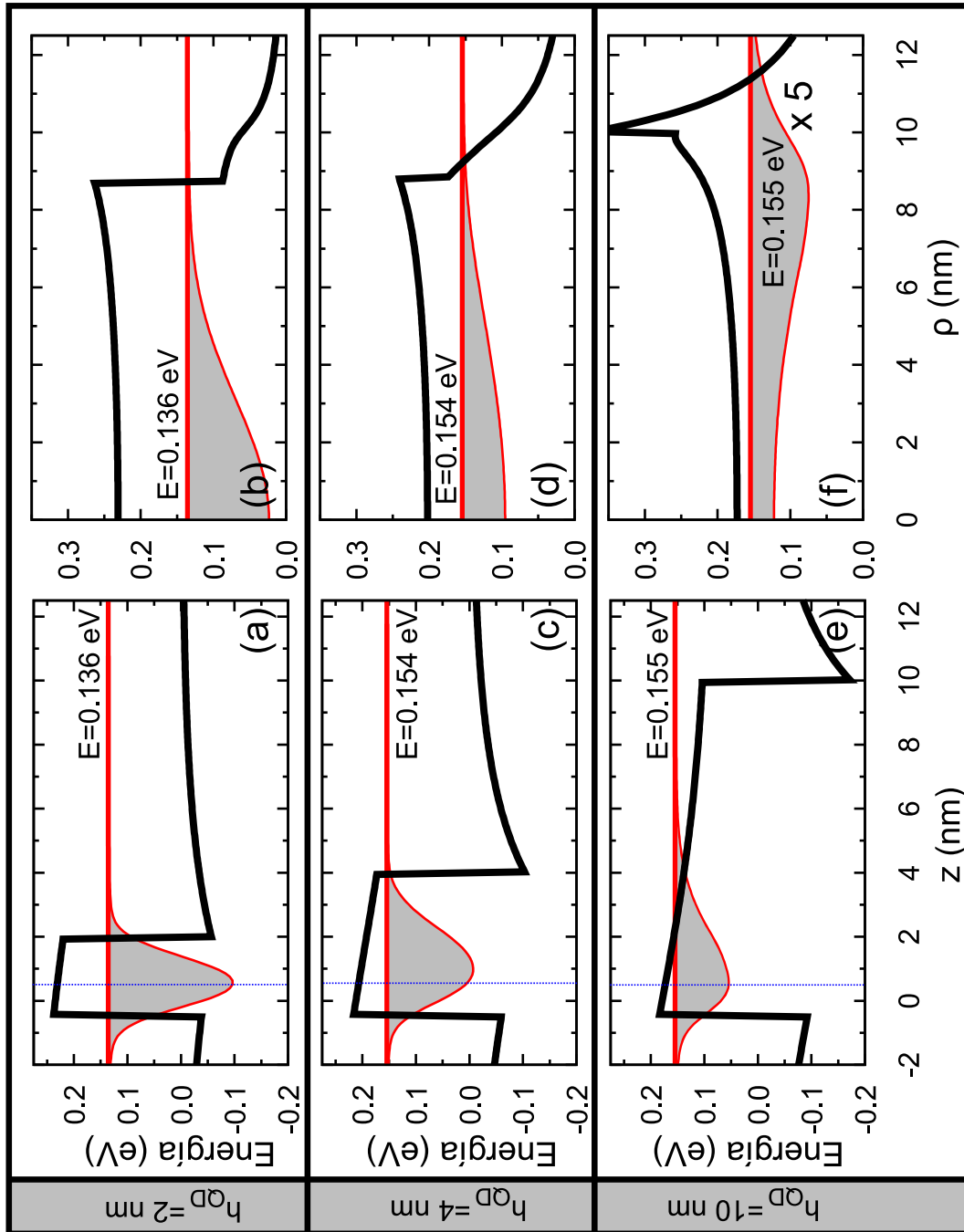


Figura 3.37: Proyecciones de las funciones de onda del estado $1S_3$ sobre los ejes Z y ρ para diferentes alturas del QD: $h_{\text{QD}} = 2, 4$ y 10 nm (ver puntos en la Fig. 3.34(c)). Junto a cada representación hemos incluido un corte del potencial de confinamiento efectivo descrito en el texto. Para realizar los cortes hemos considerado $\rho = 0$ en (a), (c) y (e) y $z = 5$ nm en (b), (d) y (f) (línea vertical en (a), (c) y (d)).

transiciones. Por otro lado, no tenemos constancia de que este tipo de transiciones hayan sido predichas como consecuencia de una modificación de la geometría del QD.

La argumentación expuesta no permite explicar, sin embargo, por qué el estado $1P_1$ que también presenta $\tilde{m} > 0$ tiene una energía de confinamiento ~ 50 meV por encima de la correspondiente al estado $1S_3$. Ahora bien, si nos fijamos en el peso de las diferentes componentes de Bloch, comprobamos que este estado presenta una contribución $\sim 25\%$ de la función de Bloch lh cuya función envolvente presenta $m = 0$. En los estados $1P_5$ y $1D_7$ ninguna de las componentes de huecos minoritarias presenta $m = 0$. Por consiguiente, es posible interpretar que la componente minoritaria de $1P_1$ con $m = 0$ es responsable de que este estado tenga una dependencia de la energía con h_{QD} diferente de la exhibida por $1P_5$ y $1D_7$.

A la vista de los resultados de la estructura electrónica de la banda de valencia de los QDs de InAs/GaAs tampoco sorprende que se haya perdido la estructura de capas s , p , d , ... que fue descrita en la Sección 3.2. En efecto, la estructura de capas es característica de un problema de confinamiento debido a un potencial parabólico, y como vimos en la Sección 3.1, es posible identificarla en un QD para el que la intensidad de confinamiento vertical aumenta con ρ . A la vista de los cortes del potencial de confinamiento efectivo mostrados en la Figura 3.37, vemos que la presencia de la distribución de la deformación inhomogénea hace que el potencial parabólico no resulte ser aquí una buena aproximación.

Análisis de las propiedades ópticas

En la Figura 3.38 hemos representado los espectros de absorción obtenidos a partir de la estructura electrónica presentada más arriba. En el panel (a) mostramos una secuencia de espectros en función de la altura del QD. En los paneles (b) y (c) hemos reproducido el detalle en la región de baja energía de los espectros correspondientes a los QD de altura 8 nm y 4 nm, respectivamente. Los estados que participan en las transiciones ópticas han sido etiquetados siguiendo la misma notación que fue empleada en la Figura 3.28. Al aumentar el valor de h_{QD} el espectro de absorción se desplaza hacia el rojo y aumenta significativamente el número de transiciones que contribuyen al espectro, que además experimentan una reducción de la intensidad. Para una altura dada las transiciones dominantes de cada espectro presentan una intensidad parecida. En los espectros mostrados en los paneles (b) y (c), se puede comprobar la validez de las reglas de selección derivadas en la Sección 3.2, con algunas excepciones, como se puede comprobar en la transición

$[1S_1, 2F_3]$ para el QD con $h_{\text{QD}} = 8$ nm, que no verifica la conservación de \tilde{m} . Ello es debido a incremento del acoplamiento entre las bandas de hh y lh .

El impacto de la deformación inhomogénea en las propiedades ópticas puede ser estimado a partir de la comparación con la Figura 3.28(a)¹². Las diferencias tienen su origen en los estados de la banda de valencia del QD. En primer lugar, es apreciable el desplazamiento hacia el azul de todos los espectros en ~ 100 meV. En segundo lugar, la estructura del espectro en forma de transiciones asociadas a capas s , p , d , \dots , experimenta una “degradación” a medida que h_{QD} aumenta: Mientras que tal estructura es identificable en los espectros de los QD de altura 2 nm y 4 nm, ya no lo es en los espectros correspondientes a QDs con $h_{\text{QD}} > 6$ nm. Como consecuencia también de la desaparición de la estructura de capas en la banda de valencia, el desdoblamiento de los picos con $\tilde{m} > 0$ pertenecientes a una misma capa se ha incrementado. Compárese, por ejemplo, la separación entre las transiciones $[2P_1, 1P_1]$ y $[1P_3, 1P_5]$, ó $[2D_3, 2D_1]$ y $[1D_5, 1D_7]$ en los espectros de las Figuras 3.28 y 3.38. Por otra parte, ha aumentado considerablemente el número de transiciones de poca intensidad. Este hecho es más llamativo para los QD de mayor altura y se atribuye el aumento de las transiciones “permitidas” al incremento del acoplamiento entre las componentes de la función de onda, tal y como se mostró en la Figura 3.36. Ahora, los estados de hueco ya no presentan un \tilde{m} claramente dominante y pueden conectar con más estados de electrón.

Comparación con resultados experimentales

En este apartado retomaremos la discusión iniciada en la Sección 3.1, en la que diferentes resultados experimentales fueron analizados con ayuda del modelo de una única banda. Ahora realizaremos un análisis análogo sirviéndonos de los resultados obtenidos en la Sección 3.2 y en la presente, es decir con el modelo multibanda 8×8 con deformación biaxial y deformación inhomogénea. Tras realizar un estudio detallado del espectro experimental de absorción óptica, reproducido en la Figura 1.2, pasaremos a estudiar la fuerza de oscilador y el momento dipolar permanente de la transición fundamental.

En los espectros de absorción mostrados en la Figura 3.38 hemos introducido un ensanchamiento artificial de las transiciones ópticas representado a través de una función Lorentziana. Ello permite identificar las transiciones ópticas y así poder analizar la estructura interna del espectro de absorción. Sin embargo, para realizar la comparación con el espectro de absorción medido experimentalmente (ver Fig. 1.2) se hace necesaria la introducción del ensanchamiento inhomogéneo.

¹²Obsérvese que las escalas del eje de abscisas de las Figuras 3.28 y 3.38 son diferentes.

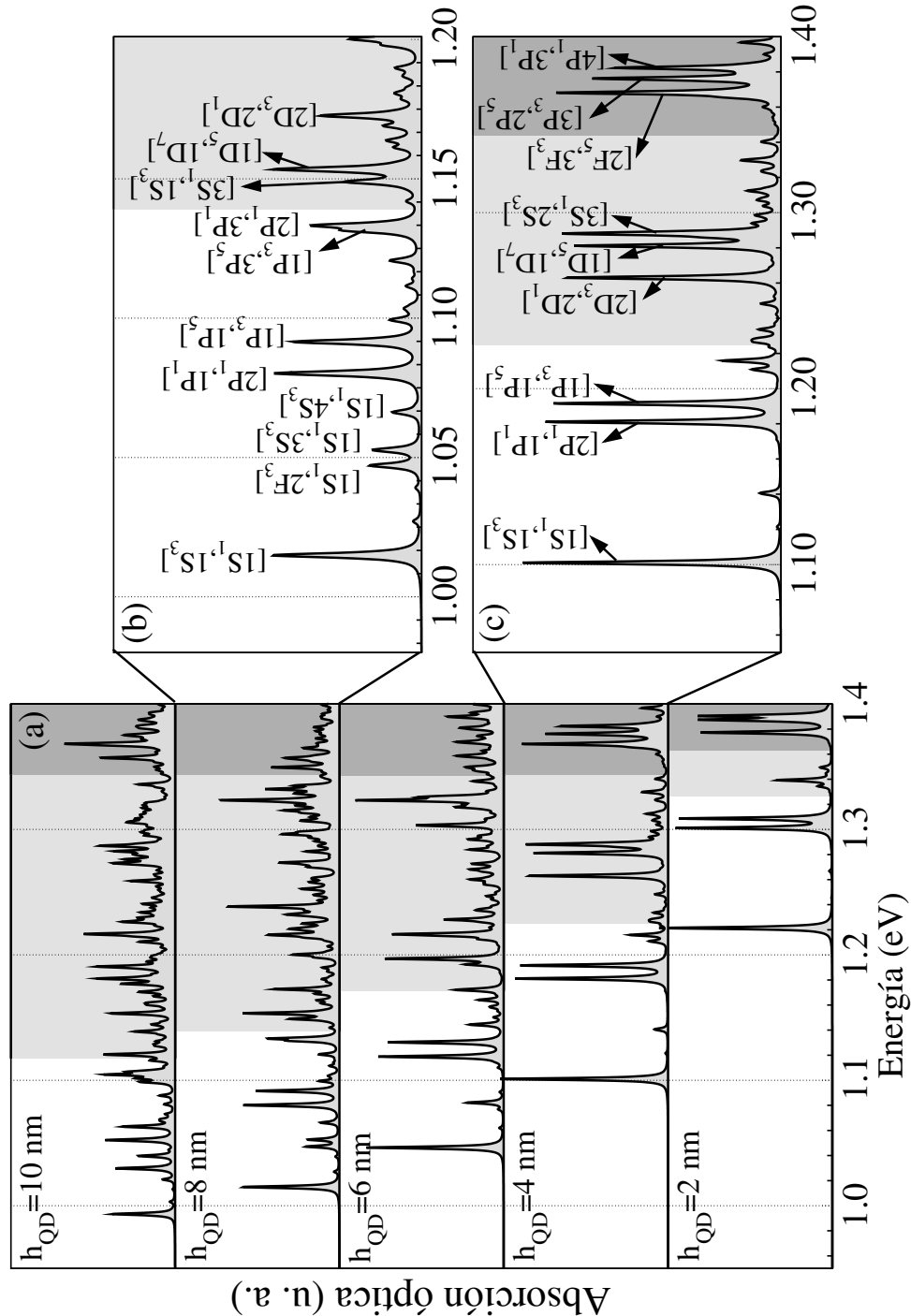


Figura 3.38: Espectros de absorción óptica correspondientes a cinco QD de InAs/GaAs de diferente altura (a). En la parte izquierda de la Figura se muestra el detalle de los espectros del QD con $h_{\text{QD}} = 8$ nm (b) y $h_{\text{QD}} = 4$ nm (c). Las transiciones han sido etiquetadas utilizando la misma notación que fue empleada en la Fig. 3.28. Obsérvese que el intervalo de energías analizado en (b) ha sido reducido por claridad, debido al elevado número de transiciones permitidas. Las zonas sombreadas indican la región en la que es posible encontrar transiciones entre estados confinados y estados del continuo (*Ídem* que en Fig. 3.10). Se ha considerado un ensanchamiento inhomogéneo igual a 2 meV.

Una primera aproximación a este problema consiste en describir las transiciones ópticas a través de una distribución normal o Gaussiana (ver Ec. (1.75)). En la Figura 3.39 hemos agrupado por columnas los espectros obtenidos de los modelos de una única banda (1×1), de ocho bandas (8×8) y finalmente de ocho bandas con deformación inhomogénea ($8 \times 8D$), para cinco valores de h_{QD} diferentes. En esta ocasión hemos considerado un ensanchamiento Gaussiano con FWHM igual a 30 meV. En cada gráfica hemos reproducido el espectro experimental con una línea gris, cuya intensidad ha sido normalizada a la del espectro correspondiente al QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm obtenido por el modelo $8 \times 8D$. Hemos escogido éste como referencia por ser el que mayor semejanza presenta con el espectro experimental. El valor de FWHM ha sido fijado de forma que la transición fundamental de la curva teórica reproduzca el ensanchamiento de la transición fundamental de la curva experimental (ver flecha).

Hemos realizado la comparación de los diferentes resultados fijándonos en la siguientes características de los espectros ópticos: (i) posición de la transición fundamental, (ii) espaciado entre los picos asociados a transiciones entre estados excitados (iii) densidad de estados ópticamente activos:

- (i) La energía de la transición fundamental obtenida por los tres modelos presenta pequeñas diferencias en el QD con $h_{\text{QD}} = 2$ nm. No sucede lo mismo en puntos cuánticos de mayor altura: Los modelos 1×1 y 8×8 proporcionan un valor similar y el modelo $8 \times 8D$ conduce a una energía menor. La transición fundamental del espectro experimental está localizada en 1.1 eV. El espectro teórico que mejor se ajusta a este resultado es el correspondiente al QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm obtenido por el modelo $8 \times 8D$. De los modelos 1×1 y 8×8 se extraería que la altura debe ser sensiblemente menor a 4 nm (entre 2 nm y 4 nm).
- (ii) La estructura de picos exhibida por el espectro experimental es también reconocible en los espectros teóricos. Es por ello que resulta razonable establecer que su origen está en transiciones entre estados excitados. Del análisis de los espectros de absorción óptica realizado sobre los resultados mostrados en las Figuras 3.10, 3.28 y 3.38 podemos concluir que la separación de los picos de mayor intensidad viene gobernada, fundamentalmente, por la separación entre las capas s , p , d , ... de los estados de conducción. Por otra parte, también se ha discutido que la separación entre diferentes capas está asociada al confinamiento angular y radial ejercido por la nanoestructura, y por ende, son especialmente sensibles a variaciones de R_{QD} y no tanto a variaciones de h_{QD} . Sin embargo, la separación entre los mencionados picos no es igual para

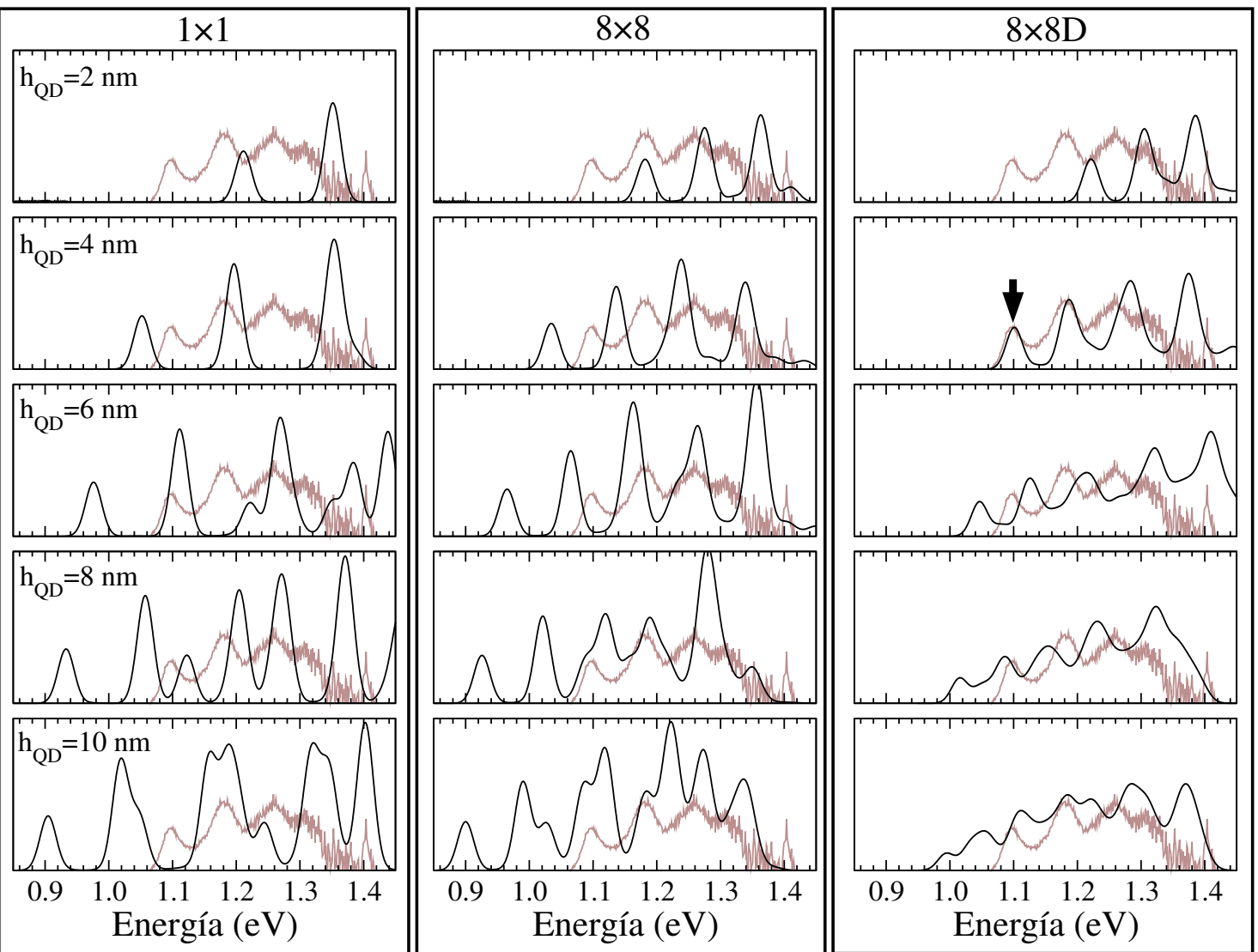


Figura 3.39: Espectros de absorción obtenidos de los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$. El espectro de absorción experimental de la Fig. 1.2 ha sido representado con línea gris. Su intensidad ha sido normalizada a la exhibida por la transición fundamental del espectro indicado mediante una flecha. Todos los espectros teóricos han sido representados con la misma escala en el eje de ordenadas.

los tres modelos. Los valores promedio hallados son ~ 130 meV, ~ 100 meV y ~ 90 meV para los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$, respectivamente. En el espectro experimental las tres primeras resonancias están separadas ~ 80 meV. Por lo tanto el modelo que mejor reproduce este valor es el $8 \times 8D$. Sin embargo, falta por cuantificar la separación entre niveles debida a variaciones de R_{QD} . Este problema lo abordaremos más adelante.

En la parte de alta energía del espectro experimental es posible distinguir un cuarto pico. Éste presenta dos anomalías frente al resto de picos. Por una parte, la distancia en energía respecto al tercer pico es significativamente menor que la distancia relativa entre el resto de picos. Por otra parte, su intensidad es menor que la correspondiente al segundo y tercer pico, lo cual no es esperable ya que las capas de mayor energía poseen una densidad de estados también mayor. En la discusión que realizan los autores del experimento acerca de la absorción en puntos cuánticos, únicamente contemplan en el espectro la presencia de tres picos [184]. Atendiendo a estas razones, ignoraremos la presencia de este último pico en el resto de apartados.

- (iii) En el análisis de las propiedades ópticas abordado en apartados precedentes hemos visto que el número de estados ópticamente activos era mayor para el modelo $8 \times 8D$ que para el modelo 1×1 . Esto se traduce en la aparición de un mayor número de transiciones ópticas de pequeña intensidad que acaban generando una absorción *cuasi-continua* de fondo cuando se considera el ensanchamiento. Dicho fondo también se reconoce en el espectro de absorción experimental. De los tres modelos considerados, el $8 \times 8D$ es el que mejor lo describe.

En la Figura 3.40 hemos superpuesto los espectros teóricos correspondientes al QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm junto con el espectro experimental, desplazándolos en cada caso en el eje de abscisas de forma que coincida la energía de la transición fundamental de todos ellos. Esta representación ilustra de forma más clara que los modelos 1×1 y 8×8 sobrestiman la separación entre los picos, mientras que el modelo $8 \times 8D$ reproduce ésta de forma más precisa. Este modelo también reproduce una absorción de fondo mayor que los otros modelos, aunque todavía es menor que la exhibida por el espectro experimental. Las transiciones entre el continuo de la WL y los estados confinados en el QD no han sido contempladas en estos cálculos, no obstante, su localización para el modelo $8 \times 8D$ fue estimada en la Figura 3.38. Para el QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm estas transiciones están localizadas alrededor de 1.22 eV, i.e. 120 meV por encima de la transición fundamental, por lo que no explicaría la señal hallada entre los dos primeros picos. Cabe decir que

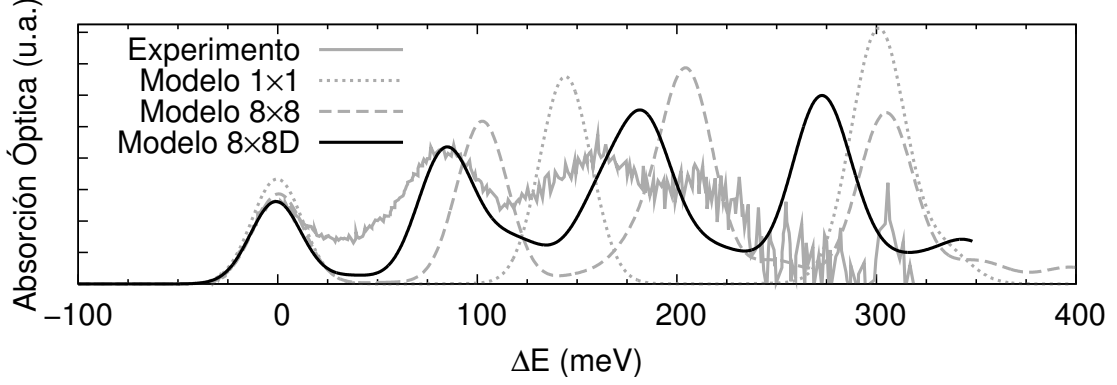


Figura 3.40: Espectros de absorción del QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm obtenidos experimental y teóricamente. Los espectros han sido desplazados de forma que coincida la energía de su transición fundamental.

la WL de la muestra analizada no ha sido caracterizada explícitamente, aunque su energía de absorción está localizada en las proximidades de 1.4 eV [184, 188]. Dicha energía resulta ser inferior a la estimada por nuestro modelo, ~ 1.45 eV, por lo que, en principio, sería razonable considerar un espesor mayor que el considerado. Por consiguiente también resulta factible esperar una contribución de transiciones entre el discreto y el continuo a energías menores a 1.22 eV.

En los espectros mostrados en la Figuras 3.39 y 3.40 se ha contemplado un ensanchamiento artificial de la FWHM igual a 30 meV. Dicho valor ha sido escogido de forma que la curva teórica reproduzca fielmente la transición fundamental hallada experimentalmente. Con el fin de profundizar en el estudio de este sistema, hemos realizado una aproximación alternativa a la descripción del ensanchamiento inhomogéneo. Considerando como hipótesis de partida que dicho ensanchamiento tiene su origen en la dispersión de tamaños de la nanoestructura, supondremos que la altura puede ser descrita mediante una distribución normal o Gaussiana, manteniendo fijo el valor de R_{QD} en 10 nm. Este tipo de consideraciones resultan ser razonables, ya que, como vimos en el Capítulo 1, R_{QD} presentaba una dispersión pequeña y además, la energía de transición es más sensible a la altura que al radio, debido a que la intensidad del confinamiento es mayor en la dirección vertical. Sea entonces la siguiente distribución de alturas de los QD:

$$H(h_{\text{QD}}) = \frac{1}{\sqrt{\sigma^2 2\pi}} \exp\left(-\frac{(h_{\text{QD}} - \overline{h_{\text{QD}}})^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3.55)$$

donde la media viene representada por $\overline{h_{\text{QD}}}$ y la desviación estándar por σ . En esta distribución la anchura total a media altura es $\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma$. La correspon-

diente expresión para la absorción promediada sobre esta distribución será:

$$\bar{\alpha}(E) = \int H(h_{\text{QD}})\alpha(E; h_{\text{QD}}) dh_{\text{QD}}, \quad (3.56)$$

donde $\alpha(E; x)$ representa la absorción debida a un QD de altura x . En la Figura 3.41 hemos representado la absorción $\bar{\alpha}(E)$ considerando $\overline{h_{\text{QD}}} = 4$ nm y tres valores diferentes de σ . Los tres espectros teóricos han sido normalizados a la intensidad de la transición fundamental del espectro experimental.

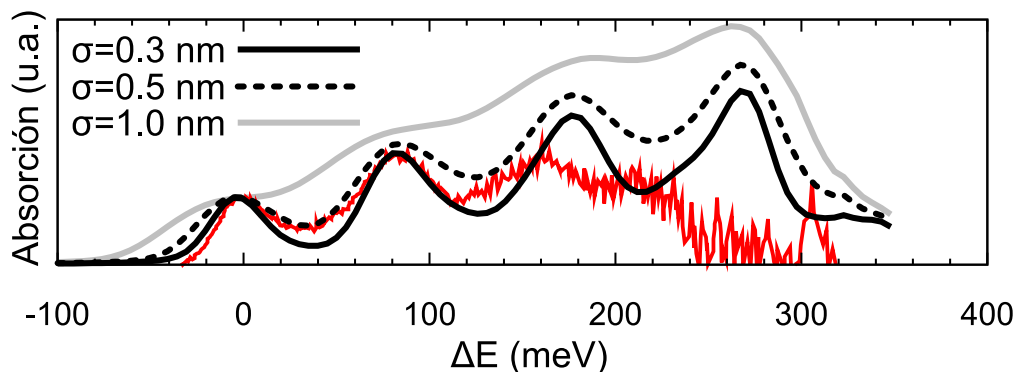


Figura 3.41: Absorción promediada sobre una distribución normal de alturas centrada en $\overline{h_{\text{QD}}} = 4$ nm y diferentes valores de la desviación estándar σ . Los espectros teóricos han sido normalizados a la intensidad de la transición fundamental del espectro experimental.

En la Figura es posible apreciar el ensanchamiento de los picos dominantes del espectro debido a la dispersión de tamaños. Es posible apreciar que los valores de σ 0.3 nm y 0.5 nm ajustan bastante bien la señal de absorción de los dos primeros picos. Para valores mayores de σ , el espectro pierde progresivamente la estructura de picos transformándose en una banda de absorción *cuasi-continua*. A partir de este resultado se puede considerar que la altura fluctúa dentro de un intervalo igual al valor de FWHM asociado a σ , i.e. entre 0.7 nm y 1.3 nm. Una vez más queda constancia del importante papel de la espectroscopía óptica en el estudio de nanoestructuras semiconductoras, pues en combinación con un modelo teórico ha permitido realizar una estimación de la dispersión de alturas de los QD que participan en la absorción.

A continuación retomaremos la discusión de los resultados correspondientes a la fuerza de oscilador y al momento dipolar. En la Figura 3.42 hemos representado la fuerza de oscilador de la transición fundamental obtenida a través de los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$. El valor experimental de ésta magnitud vimos que era de 10.9. Es posible apreciar en la gráfica que, al considerar únicamente la

parte homogénea de la deformación, la fuerza de oscilador crece monótonamente con la altura de la nanoestructura, mientras que al incluir el efecto de la deformación inhomogénea, la fuerza de oscilador crece para altura menores a 4 nm y decrece para altura mayores. Este tipo de comportamiento no debe sorprender, pues, como vimos el apartado anterior, la función de onda del estado de hueco fundamental tiende a localizarse en los extremos laterales del QD a medida que h_{QD} crece (ver Fig. 3.35). El cambio de región de localización de la función de onda del hueco resulta en un acoplamiento máximo entre las funciones de onda de los dos portadores, traduciéndose en un máximo en la curva de la fuerza de oscilador. De nuestro cálculo hemos concluido que la altura de QDs modelizado más plausible resultaba ser $h_{\text{QD}} = 4$ nm. Para este valor, encontramos $f \sim 7.5$, i.e. encontramos un desacuerdo de un 30 % entre las dos estimaciones. Sin embargo, debemos recordar que en la Sección 3.1 se comentó que en la determinación experimental se empleó el parámetro E_p del GaAs. Corrigiendo el valor teórico por el cociente $E_p^{\text{GaAs}}/E_p^{\text{InAs}}$ (ver eje de ordenadas derecho) obtenemos un valor de $f \sim 8.7$, que está más próximo al valor experimental, aunque el error relativo respecto al valor experimental es de un 20 %.

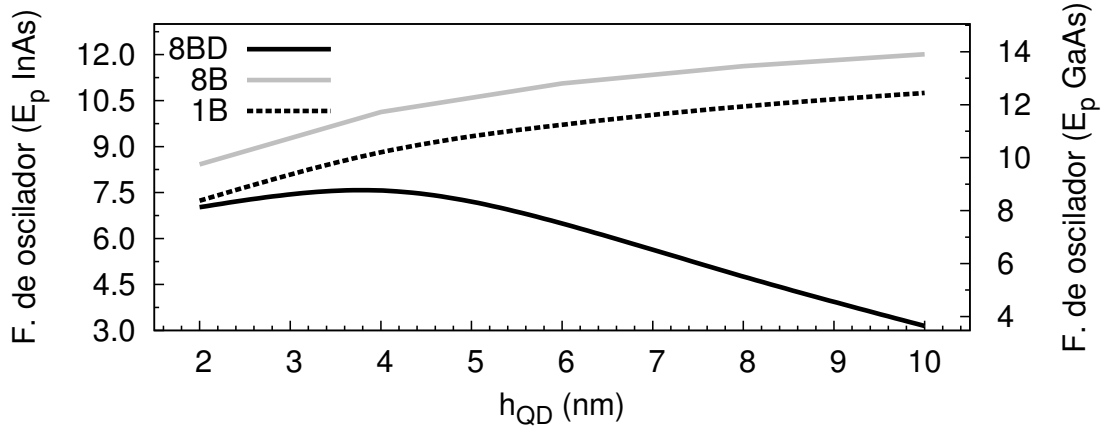


Figura 3.42: Fuerza de oscilador de la transición fundamental obtenida a través de los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$. En el eje de ordenadas izquierdo hemos calculado f empleando el valor de E_p del InAs y en el eje derecho el del GaAs.

En la Figura 3.43 hemos representado la distancia z_{eh} (ver Ec. (3.30)), que es proporcional al momento dipolar, obtenida por los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$. Nuevamente, el impacto de la deformación inhomogénea sobre los resultados de z_{eh} es muy importante. Mientras que los modelos 1×1 y 8×8 predicen una separación entre los estados de electrón y de hueco menores a 5 Å, la deformación inhomogénea extiende dicho valor hasta los 3 nm. Tan particular comportamiento

puede ser explicado a partir de la representación mostrada en la Figura 3.36, donde se aprecia cómo el hueco tiende a localizarse en la región próxima a la base del QD a medida que h_{QD} aumenta. En la Sección 3.1 vimos que los valores experimentales representativos de este tipo de nanoestructuras eran $z_{eh} = -0.4$ nm [194, 195]. Los modelos 1×1 y 8×8 predicen una altura de ~ 9 nm para un QD que exhiba dicho valor de z_{eh} de ese orden, mientras que el modelo $8 \times 8D$ reduce el valor de dicha altura a ~ 4.5 nm. Este resultado es más coherente con el análisis del espectro de absorción y de la fuerza de oscilador.

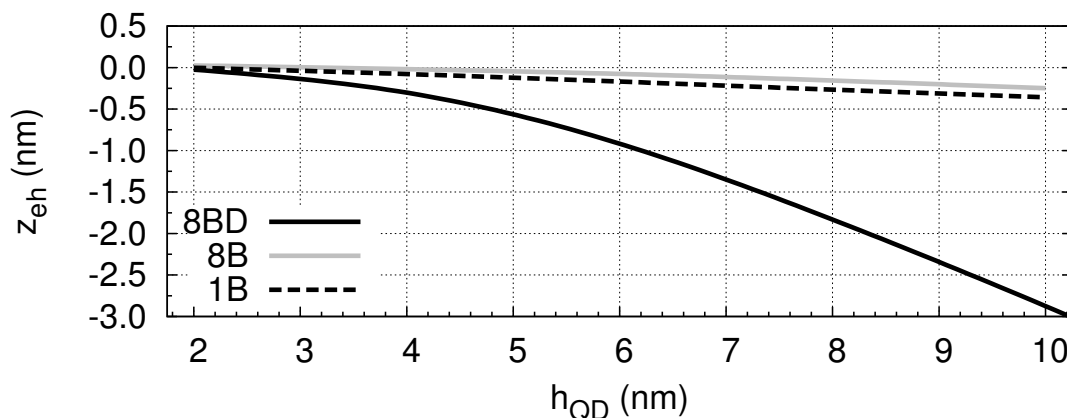


Figura 3.43: Valor esperado de la distancia entre los estados fundamentales de electrón y de hueco mediante los modelos 1×1 , 8×8 y $8 \times 8D$.

A continuación estudiaremos cuál es el impacto de R_{QD} y de la composición del QD.

Análisis en función de R_{QD}

En este apartado estudiaremos las propiedades electrónicas y ópticas de un QD en función de su radio R_{QD} utilizando para ello el modelo desarrollado en esta Sección. Hemos visto que la altura del QD que mejor reproduce los resultados experimentales era de ~ 4 nm, de manera que fijaremos dicho valor y analizaremos un rango de valores de R_{QD} comprendido entre 7.5 nm y 12.5 nm. Con ello estamos considerando un intervalo de R_{QD} alrededor de 10 nm, que es la fluctuación típica medida en estas nanoestructuras, tal y como vimos en el Capítulo 1.

En la Figura 3.44 mostramos los niveles de energía de los estados confinados de electrón y de hueco correspondientes a los cuatro primeros valores de $|M|$. La energía del estado fundamental de electrón experimenta una reducción de 25

meV al aumentar el radio en el rango considerado. Para los estados excitados dicha reducción es mayor, siendo igual a 75 meV para los estados de la capa p y 100 meV para los de la capa d . Por otra parte, la energía de cuantización, o separación entre niveles, varía entre 100 meV y 50 meV para el R_{QD} menor y mayor respectivamente. Recordemos que en la Figura 3.34(a) estudiamos la dependencia de los niveles de energía con h_{QD} . Allí vimos que en el rango de alturas considerado la variación en energía de los estados era ~ 200 meV. Así se confirma nuevamente que la intensidad del confinamiento vertical es significativamente mayor que la intensidad del confinamiento en el plano. Por otra parte, la energía de cuantización, o separación entre niveles, podía ser considerada independiente de h_{QD} e igual a ~ 60 meV. Así se confirma también que la dependencia de tal separación entre estados está relacionada con las dimensiones laterales de la nanoestructura.

La energía de confinamiento de los cuatro primeros estados de hueco sufre un incremento igual a 25 meV en el rango de R_{QD} estudiado. Para los estados excitados el incremento de energía también aumenta. La energía de cuantización en estos estados resulta ser ~ 10 meV y, en contra de lo que cabría esperar, permanece aproximadamente constante para los diferentes valores de R_{QD} considerados. Este comportamiento tiene su origen en la deformación inhomogénea del QD, tal y como hemos podido comprobar tras repetir este cálculo contemplando únicamente la deformación biaxial. Aunque estos resultados no serán mostrados, sí que podemos decir que hemos observado una variación de la energía de cuantización de ~ 10 meV como consecuencia de la variación de R_{QD} .

Una vez hemos comprobado que el impacto del parámetro R_{QD} en la estructura electrónica no es tan importante como h_{QD} , pasaremos a analizar las propiedades ópticas. El principal interés de este análisis es comprobar la perturbación introducida en la separación entre los picos de los estados excitados del espectro de absorción y su comparación con la separación hallada experimentalmente. Para ello hemos representado en la Figura 3.45 los espectros de absorción correspondientes a cinco QDs de radio diferente junto con el experimental. Dado que el corrimiento hacia bajas energías de los diferentes espectros puede ser deducido a partir de los niveles mostrados en la Figura 3.44, hemos optado por desplazarlos en el eje de abscisas de forma que la transición fundamental quede alineada con la del espectro experimental. Con ayuda de las líneas verticales es posible comparar la posición de los diferentes picos en función de R_{QD} . Mientras que la posición del segundo pico está bien reproducida por el QD con $R_{\text{QD}} = 10$ nm, es el QD con $R_{\text{QD}} = 11.25$ nm aquel que reproduce mejor la posición del tercer pico. Por consiguiente el valor de R_{QD} de los QD analizados experimentalmente queda acotado por nuestro modelo entre 10 nm y 11.25 nm. De este resultado podemos concluir que el valor de el

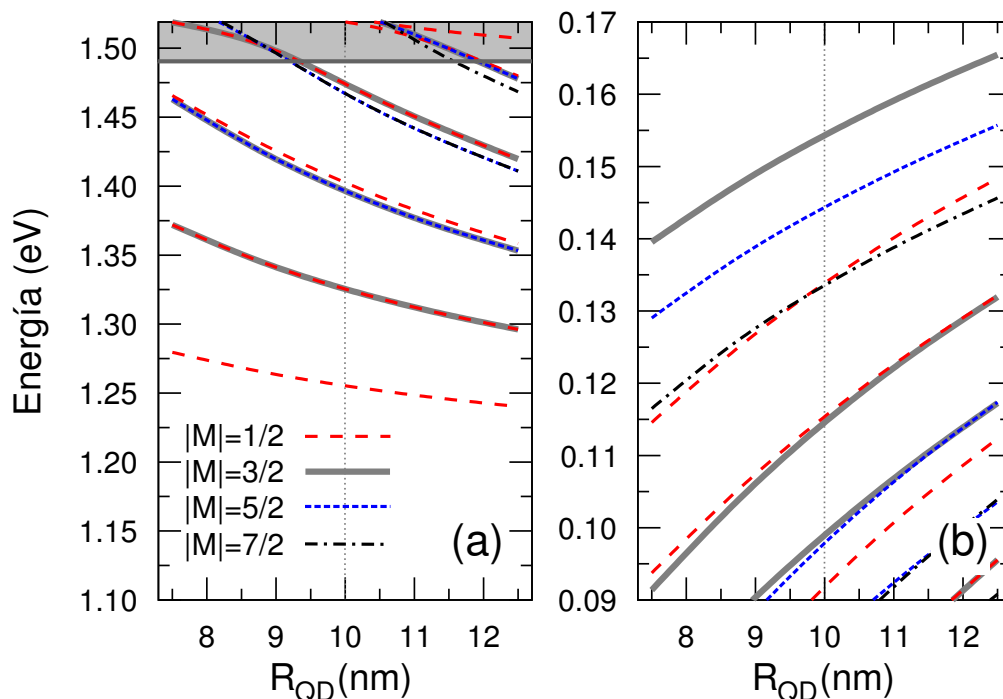


Figura 3.44: Niveles de energía de los estados de electrón (a) y de hueco (b) con $|M| < 9/2$ correspondientes a un QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm en función de R_{QD} .

radio empleado en los cálculos realizados hasta este punto ha resultado estar bien estimado.

Análisis de la composición del QD

Al hablar de la composición del QD InAs/GaAs estamos haciendo referencia a la concentración relativa de In y Ga en el interior de la nanoestructura. En adelante supondremos que el QD está compuesto por una aleación de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, mientras que seguiremos considerando que la barrera está compuesta únicamente por GaAs. El tratamiento de este problema presenta serias dificultades de carácter fundamental. En principio, si la concentración de Ga en el interior del QD es muy pequeña, e.g. un 1 %, su presencia se puede considerar despreciable. Sin embargo, a medida que la sustitución de In por Ga aumenta, es importante conocer cómo se distribuyen los cationes en la nanoestructura. Cuando la estructura electrónica se describe a través de métodos atómicos, es común encontrar un estudio de las propiedades del QD en función de configuraciones aleatorias que describen la distribución de los cationes en el interior del QD [85, 206]. Este tipo de estudio está fuera del alcance de nuestro modelo. En su lugar, consideraremos que el material

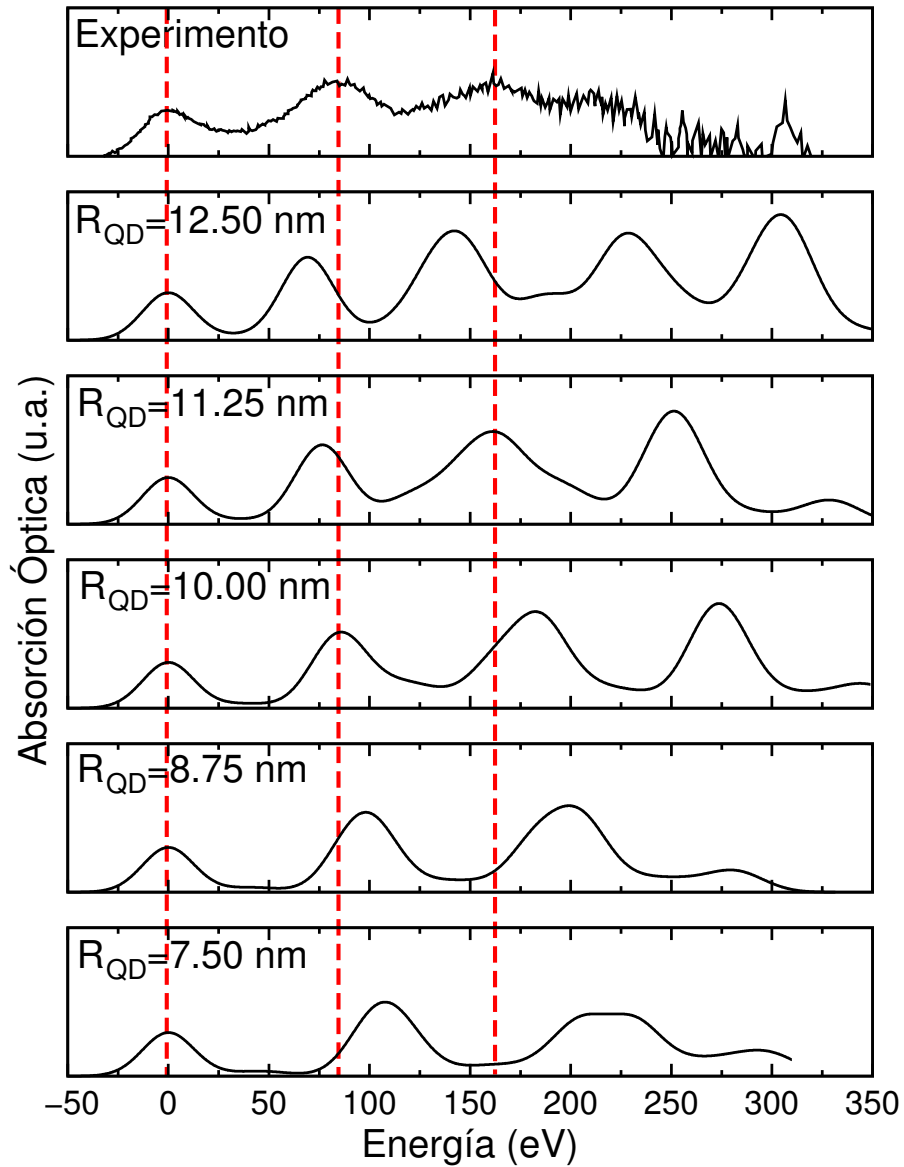


Figura 3.45: Diferentes espectros de absorción calculados para los QDs considerados en la Fig. 3.44. En la parte superior se ha representado el espectro experimental. Las líneas discontinuas son una guía visual para facilitar la comparación de la energía de separación entre picos. Las curvas teóricas han sido desplazadas en el eje de abscisas de forma que la energía de absorción del estado fundamental coincida con la hallada experimentalmente. En estos espectros se ha considerado un ensanchamiento inhomogéneo de 30 meV.

del QD puede ser descrito a través de los parámetros del semiconductor masivo de composición $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. En la Tabla A.1 del Apéndice A mostramos los valores de los parámetros en función x , i.e. la concentración de In. Este procedimiento tiene un uso muy extendido en la bibliografía especializada.

En la Figura 3.46 mostramos las energías de los estados confinados en función de h_{QD} para los cuatro primeros valores de $|M|$, considerando dos concentraciones de In diferentes, $x = 0.75$ y $x = 0.5$. Los estados de la banda de conducción muestran un comportamiento cualitativamente igual al estudiado en la Figura 3.34. Cuantitativamente se aprecia un incremento de las energías de confinamiento. Dicho incremento varía entre 50 meV y 75 meV para $x = 0.75$ y entre 110 meV y 175 meV para $x = 0.5$. Este aumento de las energías también conlleva una reducción del número de estados confinados, como es apreciable de la comparación de las diferentes figuras implicadas. Por otro lado, la separación energética entre las capas $s-p$ y $p-d$ experimenta una sensible reducción a medida que x disminuye. Al pasar de $x = 1.0$ a $x = 0.75$ dicha reducción ha sido estimada en ~ 10 meV y ~ 5 meV, para $s-p$ y $p-d$, respectivamente. Al reducir la concentración de 0.75 a 0.5, la reducción viene a ser del mismo orden aproximadamente.

Los estados de la banda de valencia sí que exhiben diferencias cualitativas respecto del sistema compuesto por InAs puro. En primer lugar, ya no es apreciable el máximo del estado $1S_3$, ni el cambio de M del estado fundamental para $h_{\text{QD}} \approx 9$ nm. Sin embargo, del análisis realizado sobre las funciones de onda (no mostrado) podemos decir que la localización sigue dándose preferentemente en las zona inferior y cercana a las paredes laterales del QD para las nanoestructuras de mayor altura. Las diferencias se deben fundamentalmente a la reducción de la deformación del QD en valor absoluto, como consecuencia de la reducción del desacuerdo de malla entre el material del QD y el de la barrera. La energía de los estados sufre una reducción respecto de las halladas para el QD de InAs puro: para $x = 0.75$ encontramos una variación de 42.5 meV y 20 meV y para $x = 0.5$ de 75 meV y 60 meV, dependiendo de la altura del QD. Comprobándose que la dependencia de la energía de los estados no guarda una relación de proporcionalidad con la concentración x .

A continuación estudiaremos el impacto de la composición en las propiedades ópticas. En la Figura 3.47 hemos representado los espectros de absorción correspondientes a cinco valores diferentes de h_{QD} para $x = 0.75$ y $x = 0.5$. Para los dos valores de x considerados es apreciable la estructura de picos de los espectros. Este resultado era esperable tras comprobar que la banda de conducción preserva una estructura de capas. El número de picos dominantes ha disminuido respecto al número obtenido en el QD de InAs puro como consecuencia de la reducción del

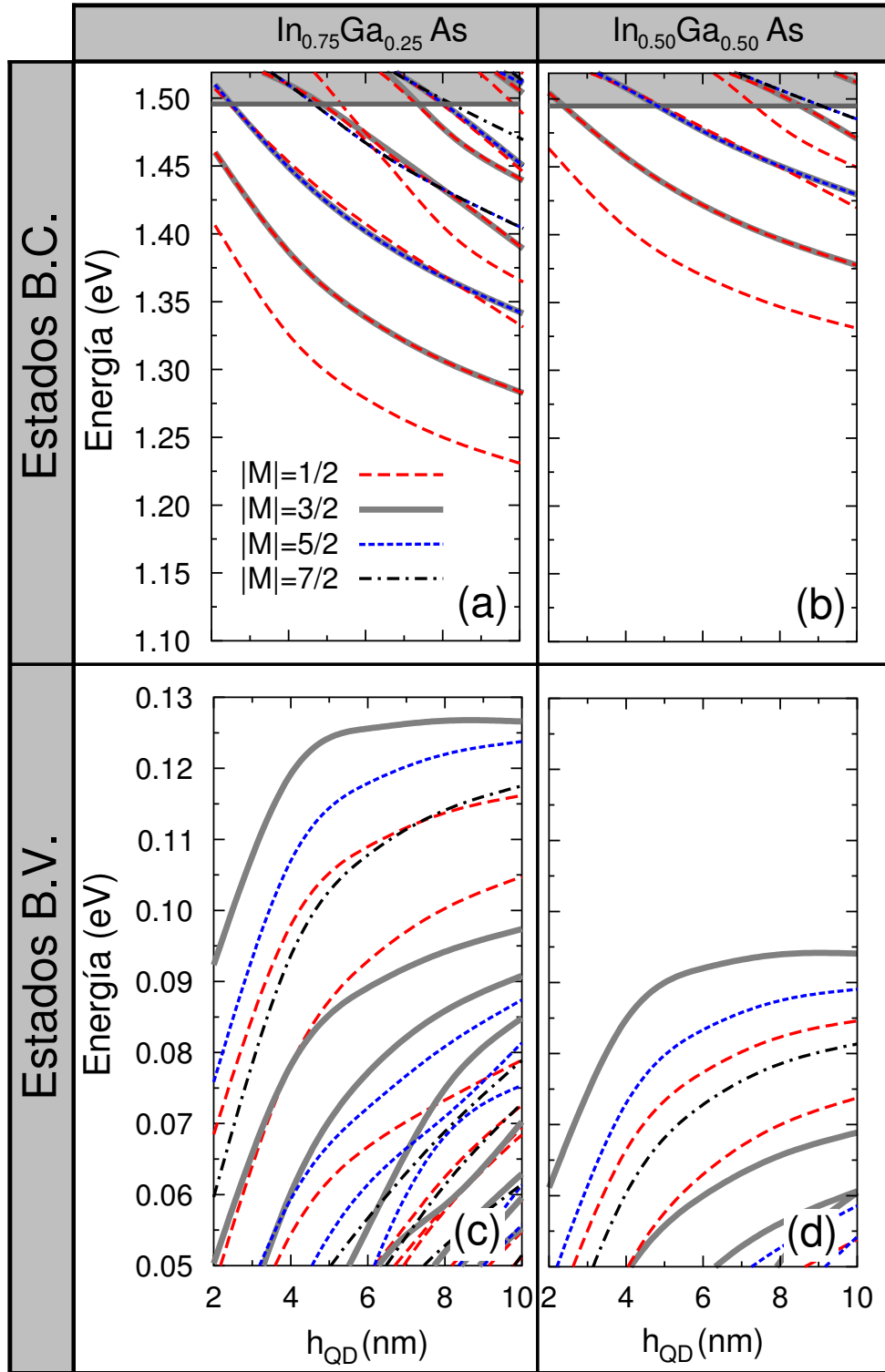


Figura 3.46: Niveles de energía de un QD de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ correspondientes a los primeros cuatro valores de $|M|$ de los estados confinados. En la primera columna se ha considerado $x = 0.75$ y en la segunda $x = 0.5$.

número de estados de conducción discutida en la Figura 3.46. Para $x = 0.5$ no se observa ninguna transición por debajo de 1.2 eV. Dado que esta energía difiere en 100 meV respecto del valor hallado experimentalmente, estimamos que dicha concentración no es compatible con los QDs caracterizados ópticamente en la Ref [184]. En cambio, al considerar $x = 0.75$ se pone de manifiesto la compatibilidad con el resultado experimental. Debemos recordar que la corrección excitónica no ha sido contemplada en estos cálculos, por lo que resulta razonable realizar una estimación de la transición fundamental de decenas de meV por encima de la experimental.

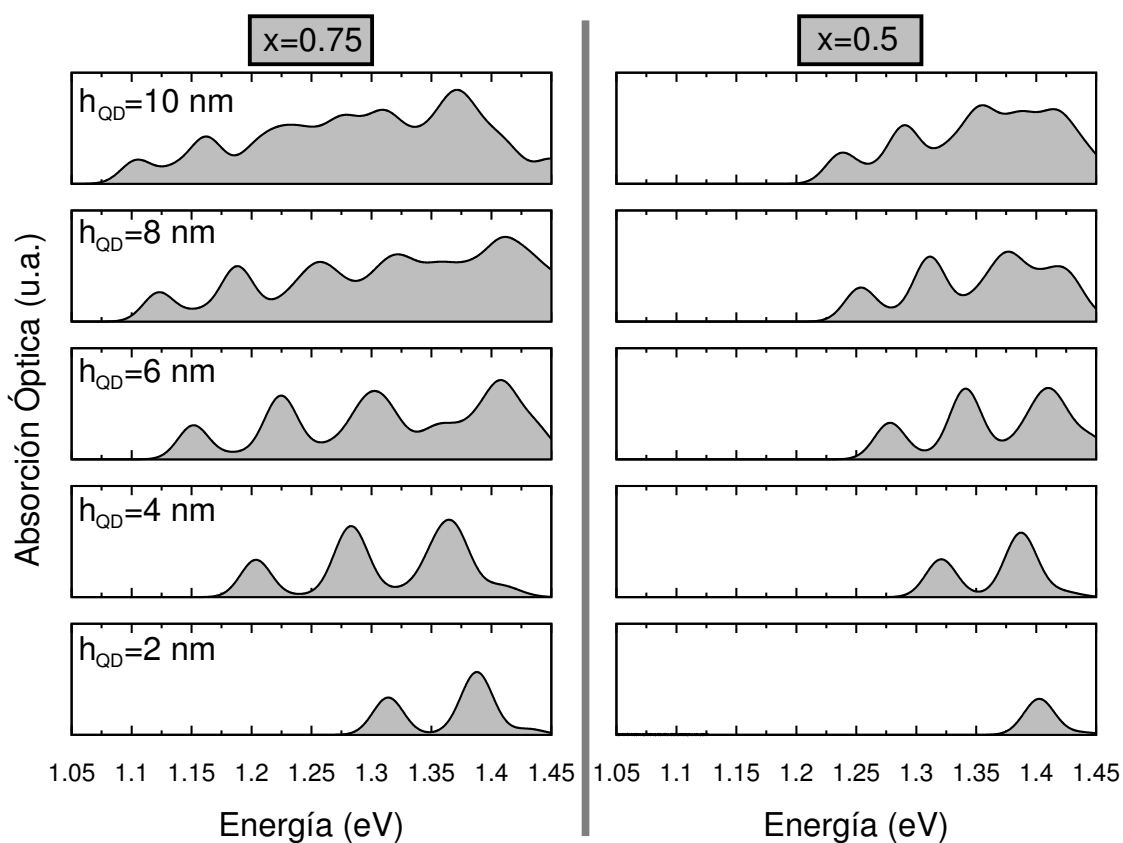


Figura 3.47: Espectros de absorción de puntos cuánticos de diferentes alturas considerando la concentración de In igual a $x = 0.75$ y $x = 0.5$. Las transiciones han sido ensanchadas artificialmente con una curva Gaussiana con FWHM de 30 meV.

De los espectros mostrados en la Figura 3.47 consideramos que el correspondiente a una composición $x = 0.75$ y una altura de 6 nm muestra un parecido mayor con el espectro experimental. Para facilitar la comparación hemos reproducido en la Figura 3.48 dicho espectro junto con el experimental desplazado en el eje de abscisas de forma que coincida la transición fundamental. Además hemos incluido el espectro de absorción correspondiente al InAs puro. Para describir el

ensanchamiento inhomogéneo hemos realizado un promedio sobre una distribución Gaussiana de alturas de la nanoestructura en lugar de suponer un ensanchamiento artificial. El procedimiento seguido ha sido el mismo que fue empleado en la Fig. 3.41. En el caso del InAs puro hemos considerado $\overline{h_{\text{QD}}} = 4$ nm y $\sigma = 0.3$ nm, y en el caso del $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ $\overline{h_{\text{QD}}} = 6$ nm y $\sigma = 0.6$ nm. En los dos casos hemos elegido el espectro que mejor reproduce el pico asociado a la transición fundamental. Vemos que la curva teórica correspondiente al $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ reproduce la posición de los picos de la curva experimental con una precisión de ± 10 meV. También es posible apreciar que la intensidad de los picos ha quedado bien descrita. Por otra parte tenemos que la curva correspondiente al InAs puro reproduce fielmente la posición de los dos primeros picos, introduciendo un error de ~ 20 meV para el tercero, y la intensidad de los dos primeros

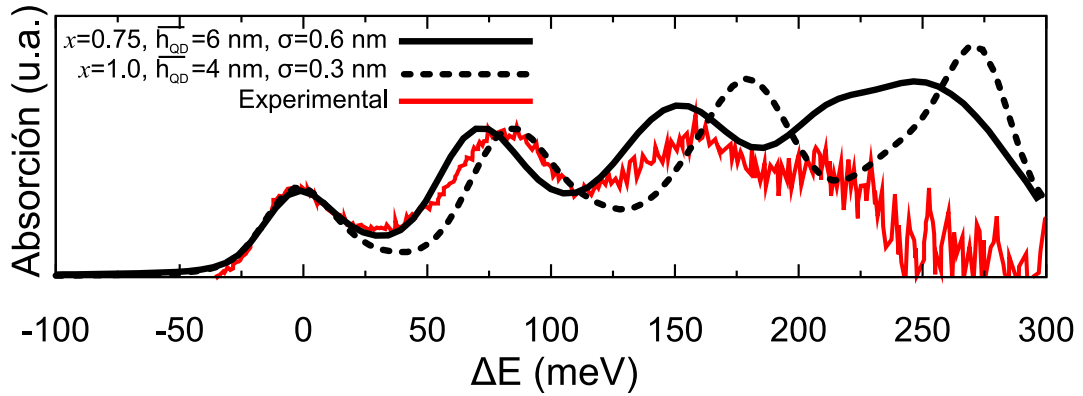


Figura 3.48: Espectros de absorción teóricos para QDs de InAs puro y $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ que presentan una distribución Gaussiana de alturas caracterizadas por $\overline{h_{\text{QD}}} = 4$ nm y $\sigma = 0.5$ nm, y $\overline{h_{\text{QD}}} = 6$ nm y $\sigma = 0.5$ nm, respectivamente. En segundo plano ha sido reproducido el espectro experimental. Todos los espectros han sido desplazados de forma que coincida la energía de la transición fundamental y su intensidad ha sido normalizada a la de la transición fundamental.

Este estudio nos ha permitido conocer cuál es el impacto de la incorporación de Ga en el interior del QD en la estructura electrónica y en las propiedades ópticas. De la comparación con el espectro de absorción experimental, el modelo no permite establecer sin ambigüedad qué conjunto de parámetros describen exactamente los QDs analizados. Hemos visto que considerando QDs de InAs puro, la altura que mejor reproduce tanto el espectro de absorción como la fuerza de oscilador y el valor del momento dipolar es $h_{\text{QD}} = 4$ nm. Sin embargo, al considerar los QDs de $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ el valor de la altura óptima resulta ser $h_{\text{QD}} = 6$ nm. Los valores de la fuerza de oscilador y de z_{eh} para estos QDs son 8.22 (considerando E_p^{GaAs}) y -0.6 nm, respectivamente. Estos valores también resultan ser compatibles con los resultados experimentales. Aunque un análisis más detallado de la composición y

de la geometría sería deseable para conseguir resolver qué conjunto de parámetros es más representativo. También se pueden interpretar estos resultados como que las muestras sometidas a diferentes análisis contienen tanto QDs de InAs puro como QDs de $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ cada uno de ellos con una distribución de alturas diferente.

En cualquier caso hemos visto que todos los elementos incluidos dentro de nuestro modelo permiten describir de forma razonable diferentes resultados experimentales en los que QDs de InAs/GaAs han sido objeto de investigación. Las discrepancias encontradas en la predicción de las energías, del orden de decenas de meV, pueden corresponder a pequeñas variaciones de x , de R_{QD} y de d_{WL} . También debemos recordar que el método desarrollado está orientado hacia la optimización de los recursos de computación, de forma que tanto su ejecución como el procesamiento de la salida sea rápida de realizar, y no hacia la exactitud del cálculo. Es por ello que debemos dar más valor a los resultados relativos al comportamiento del sistema que a la precisión con la que han sido obtenidos.

3.3.2. Resultados para el sistema GaN/AlN

En este apartado vamos a estudiar el impacto de la distribución de la deformación inhomogénea y el potencial interno electrostático en la estructura electrónica de puntos cuánticos de GaN/AlN. Como paso previo a la descripción y discusión de la estructura electrónica, estimamos conveniente mostrar la configuración final del potencial de confinamiento al que están sometidos los electrones en estas nanoestructuras. En la Figura 3.49 hemos representado dicho potencial correspondiente a la banda de conducción y a la banda A de un QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. El procedimiento seguido para su obtención es el mismo que fue descrito para los QD de InAs/GaAs, consistente en diagonalizar el Hamiltoniano $H^{\text{MB}}(\mathbf{k} = 0)$ para cada punto \mathbf{r} , teniendo en cuenta la deformación inhomogénea del QD ($e_{ij}(\mathbf{r})$) y el potencial interno ($\varphi(\mathbf{r})$). El término H^{BP} no tiene un papel tan relevante en este sistema como en el InAs/GaAs, debido principalmente a la intensidad del campo interno. En la Figura únicamente es posible distinguir un único mínimo (máximo) localizado en el parte superior (inferior) del QD, que serán responsables del confinamiento del electrón (hueco) en esa región. Sin embargo, cuando la contribución del potencial interno es excluida del cálculo, es posible apreciar la perturbación del potencial de confinamiento por la presencia de la deformación inhomogénea. Desde el punto de vista práctico, dicha perturbación únicamente tendría un papel relevante en el caso de que el campo interno hubiese sido “apantallado” completamente.

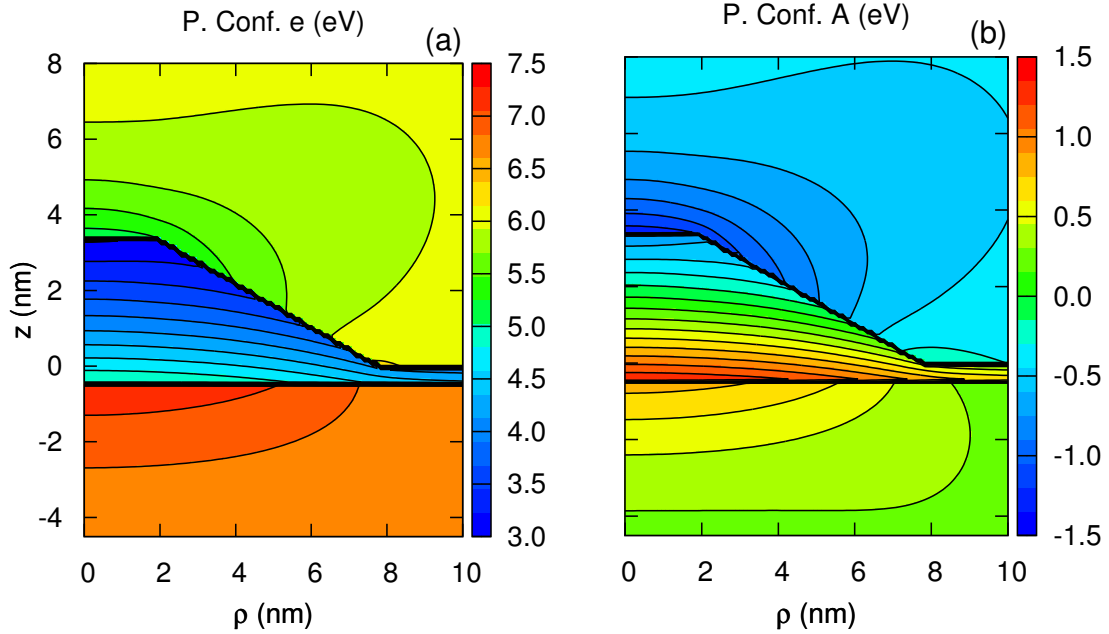


Figura 3.49: Potencial de confinamiento de la banda de conducción (a) y de la banda A (b). El origen de energías ha sido fijado en el borde de la banda de valencia del AlN. El QD representado tiene una altura igual a $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm.

En la Figura 3.50 hemos realizado una representación análoga a la incluida en la Figura 3.17. En ella mostramos el valor del potencial de confinamiento a lo largo el eje axial para el QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm, junto con el potencial de confinamiento correspondiente a la WL. Debido a la forma que adopta el potencial interno en la nanoestructura y su entorno, los límites del espectro continuo del Hamiltoniano H^{MB} ya no están definidos por los bordes de banda del AlN, sino por la energía de los estados confinados en la WL (compárese en ambas Figuras la magnitud de E_{Cont}^e y E_{Cont}^h). Este resultado es especialmente relevante para la estructura electrónica de la banda de valencia, pues con esta redefinición, el espectro discreto cubre un rango de energías significativamente mayor que los casos analizados en la secciones precedentes.

En los paneles (a) y (b) de la Figura 3.51 hemos representado las energías de confinamiento de los estados de electrón y de hueco en función del tamaño del QD, respectivamente. En los paneles (c) y (d) hemos representado los niveles de energía de los estados confinados en el QD de altura 3.375 nm. Cada uno de ellos ha sido etiquetado con la notación introducida en la Figura 3.30.

A continuación compararemos estos resultados con los presentados en la Sección 3.2 en los que se empleó una aproximación simplificada para la distribución de la deformación y del potencial interno. Para evitar posibles confusiones, de-

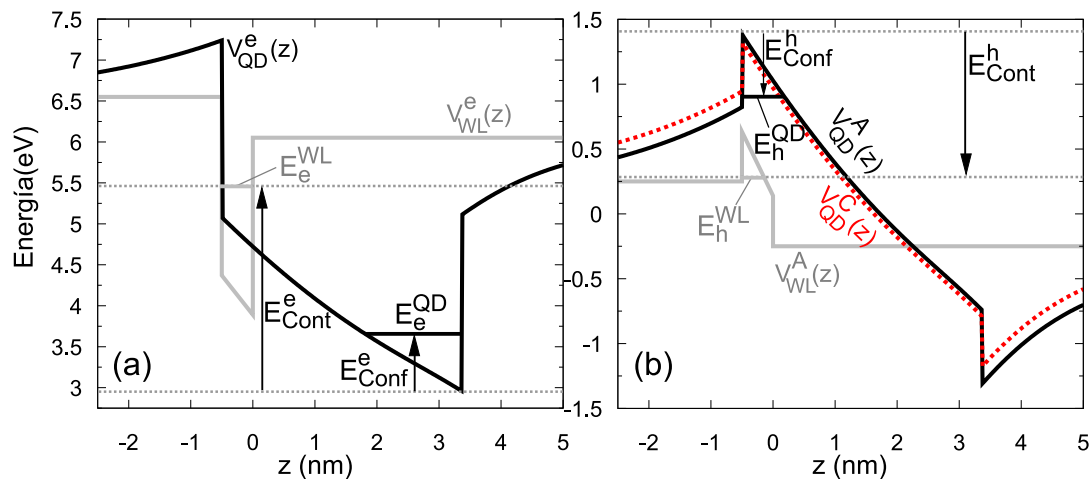


Figura 3.50: Potencial de confinamiento en $\rho = 0$ correspondiente a la bandas de conducción (a) y a las bandas A y C (b). La notación fue definida en la Figura 3.17.

nominaremos al modelo desarrollado en esta Sección como $8 \times 8D$. Al comparar la Figura 3.29(b) con la Figura 3.51(a) vemos que la dependencia de la energía de confinamiento de los estados de electrón en función de h_{QD} descrita por los modelos 8×8 y $8 \times 8D$ es muy parecida. Las energías de confinamiento del estado fundamental apenas difieren unas decenas de meV ($\sim 20 - 30$ meV). Para los estados excitados de las capas p y d la diferencia de energía es aproximadamente igual. Es posible llegar a conclusiones similares a partir de la comparación de los niveles de energía de las Figuras 3.30 y 3.51(c).

Tras realizar la comparación de las energías de confinamiento de los estados de la banda de valencia de las Figuras 3.29(f) y 3.51(b) comprobamos que los estados obtenidos por el modelo $8 \times 8D$ presentan una energía de confinamiento ~ 150 meV mayor que los obtenidos por el modelo 8×8 . Esta diferencia en la energía de confinamiento es razonable ya que la dependencia del potencial interno con ρ es superlineal (como se vio en la Figura 2.44), mientras que en el modelo 8×8 es constante entre $\rho = 0$ y $\rho = R_{\text{Sup}}$ y lineal entre $\rho = R_{\text{Sup}}$ y la superficie lateral del QD (veáanse las Figuras 3.14 y 3.49). Este resultado contrasta con el obtenido para los estados de la banda de conducción. Esta diferencia en la energía de confinamiento no fué observada en los estados de conducción, ya que al estar confinados en la región superior del QD, su confinamiento radial es más intenso y su energía de confinamiento no es tan sensible a la forma del potencial. Por otro lado, vemos que las energías de cuantización entre los estados del entorno del estado fundamental son aproximadamente constantes e iguales a ~ 7 meV para los diferentes tamaños considerados. En los estados de energía de confinamiento mayor se aprecia la apari-

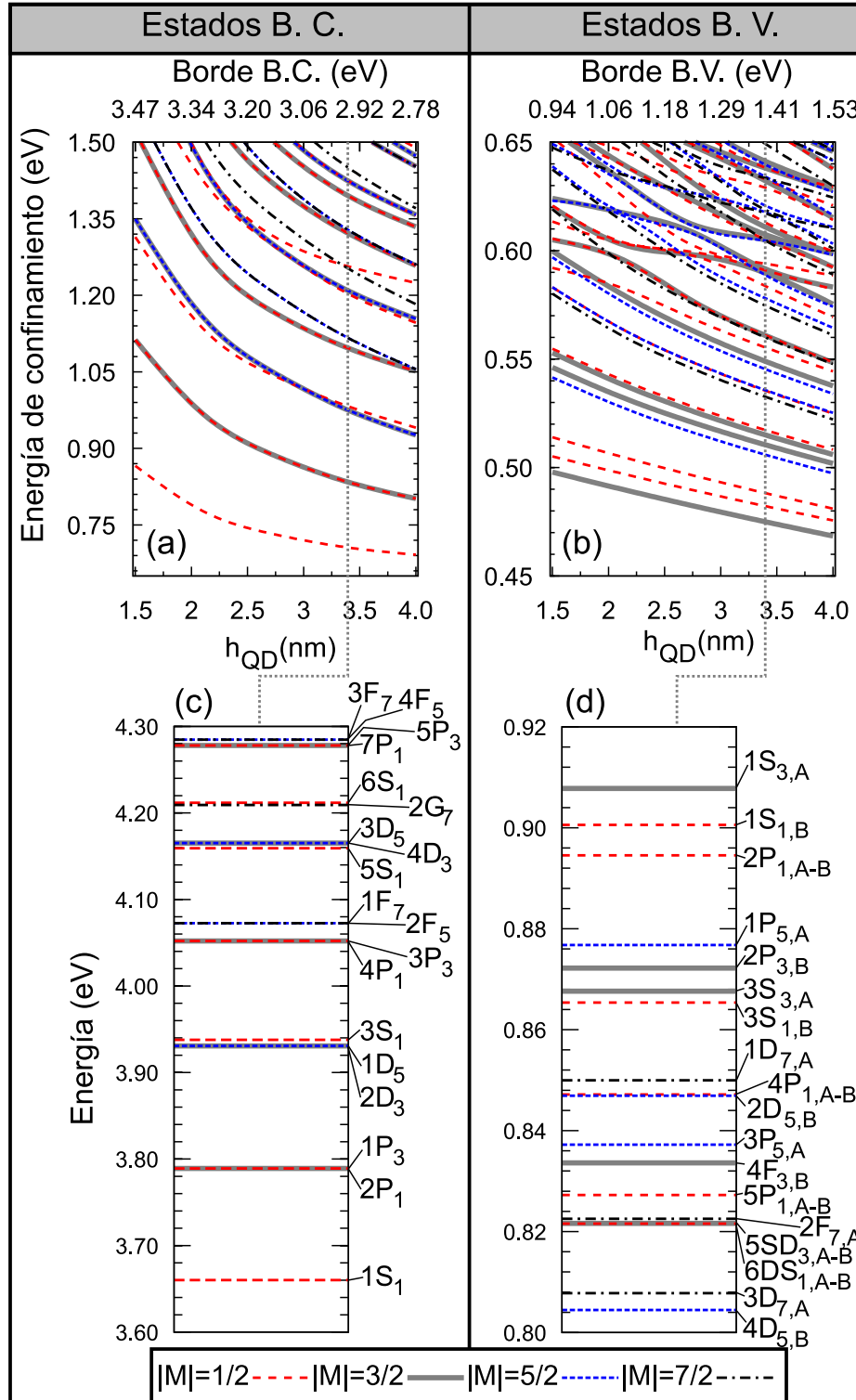


Figura 3.51: Energía de confinamiento en función del tamaño del QD correspondientes a los estados de electrón (a) y de hueco (b) para los cuatro primeros valores de $|M|$. En los paneles (c) y (d) hemos representado las energías de los estados confinados en el QD con $h_{QD} = 3.375$ nm. Cada estado ha sido etiquetado con la notación que fue empleada en la Fig. 3.30.

ción de un importante número de anticruces. El estudio de las proyecciones de las funciones de onda de los estados sobre las función de Bloch ha revelado que la aparición de los anticruces está relacionada con el aumento de la componente de la banda C . Los resultados no serán mostrados por ser cualitativamente idénticos a los obtenidos en la Figura 3.31 empleando en modelo 8×8 .

Las diferencias halladas entre los resultados obtenidos por el modelo 8×8 y $8 \times 8D$ no se pueden atribuir a la presencia de la distribución de la deformación inhomogénea o a la del potencial interno de forma independiente. Esto ha sido comprobando implementando dos modelos auxiliares. En el primero de ellos hemos partido del modelo 8×8 y en lugar de considerar la deformación biaxial hemos considerado su distribución de forma exacta. En el segundo de ellos también hemos partido del modelo 8×8 pero hemos considerado el potencial interno exacto en lugar de la aproximación de la Ec. (3.32). Aunque los resultados no serán mostrados, hemos comprobado que para la correcta descripción de los estados de valencia es preciso contemplar las dos contribuciones conjuntamente.

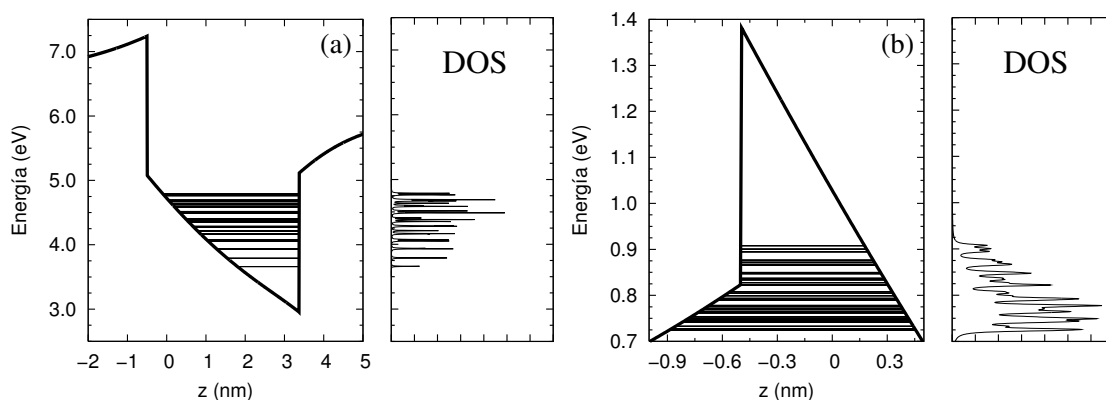


Figura 3.52: Niveles de energías de los 100 primeros estados de electrón (a) y de huecos (b) junto con el perfil del potencial de confinamiento en el eje axial. A la derecha de cada representación hemos incluido la densidad de estados (DOS).

En la Figura 3.52 hemos reproducido la posición de los niveles de energía de los 100 primeros estados de electrón y de hueco en el potencial de confinamiento correspondiente al QD de altura 3.375 nm. Esta representación nos permitirá visualizar la distribución de niveles de energía característica de este sistema. Por completitud hemos incluido la densidad de estados considerando un ensanchamiento artificial de 5 meV. Los estados de electrón se distribuyen en un rango de energía de ~ 1.5 eV y los estados de hueco se distribuyen en una ventana de energía de ~ 200 meV. Este resultado no debe sorprender, pues como vimos en la Figura 3.51

las energías de cuantización de los estados de la banda de valencia era considerablemente menores que las halladas en los estados de la banda de conducción. Al estudiar las propiedades ópticas de los QD podremos comprobar las implicaciones que tiene tener dos “regímenes” de confinamiento tan diferentes en la banda de conducción y la banda de valencia.

Para completar el estudio de la estructura electrónica, hemos agrupado en la Figura 3.53 la representación de la densidad de probabilidad de los ocho primeros estados de electrón y de hueco. Hemos considerado dos tamaños diferentes del QD, uno con $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm, y otro con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Ello nos va a permitir visualizar la diferente localización que experimenta la función de onda de los estados por la presencia del potencial interno. Los estados de electrón se localizan en la región superior del QD. Esto hace que la función de onda no ocupe todo el volumen del QD, sino que únicamente sienta el confinamiento de la zona superior de la nanoestructura. Dado que en este tipo de nanoestructuras $R_{\text{Sup}} < R_{\text{QD}}$ el confinamiento radial y angular efectivo al que están sometidos los estados de conducción es mayor del que cabría esperar contando únicamente con los valores de R_{QD} . Por ejemplo, en la Figura 3.51(a) se puede comprobar que en el QD de GaN/AlN con $h_{\text{QD}} = 4.0$ nm la energía de cuantización entre las capas *s* y *p* es ~ 120 meV. En la Figura 3.34(a) se observa que en un QD de InAs/GaAs de dimensiones $h_{\text{QD}} = 4$ nm y $R_{\text{QD}} = 10$ nm la energía de cuantización es ~ 60 meV. Vemos entonces que pese a ser la masa efectiva de la banda de conducción menor en el InAs que en el GaN, las energías de cuantización son aproximadamente dos veces menores. Por consiguiente, se puede concluir, que los estados de conducción experimentan un confinamiento radial y angular mayor en los QD de GaN/AlN que en los QD de InAs/GaAs. Por otra parte, los estados de hueco se localizan en la región de la WL. La función de onda no ocupa todo el volumen del QD, quedándose localizada en el centro de la nanoestructura. Además, la distribución de la densidad de probabilidad es muy parecida en los QD con $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm y $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. La explicación de este comportamiento radica en la dependencia del potencial interno con ρ que, como hemos dicho, es superlineal (ver Fig. 2.44). Respecto a los resultados obtenidos para los QD de InAs/GaAs, vemos que ahora el confinamiento tipo anillo ya no está presente. Este resultado ya fue adelantado al describir el potencial de confinamiento de la Figura 3.49(b).

Análisis de las propiedades ópticas

En este apartado abordaremos el estudio de las propiedades ópticas que se derivan de la estructura electrónica descrita en el apartado anterior. En la Figura

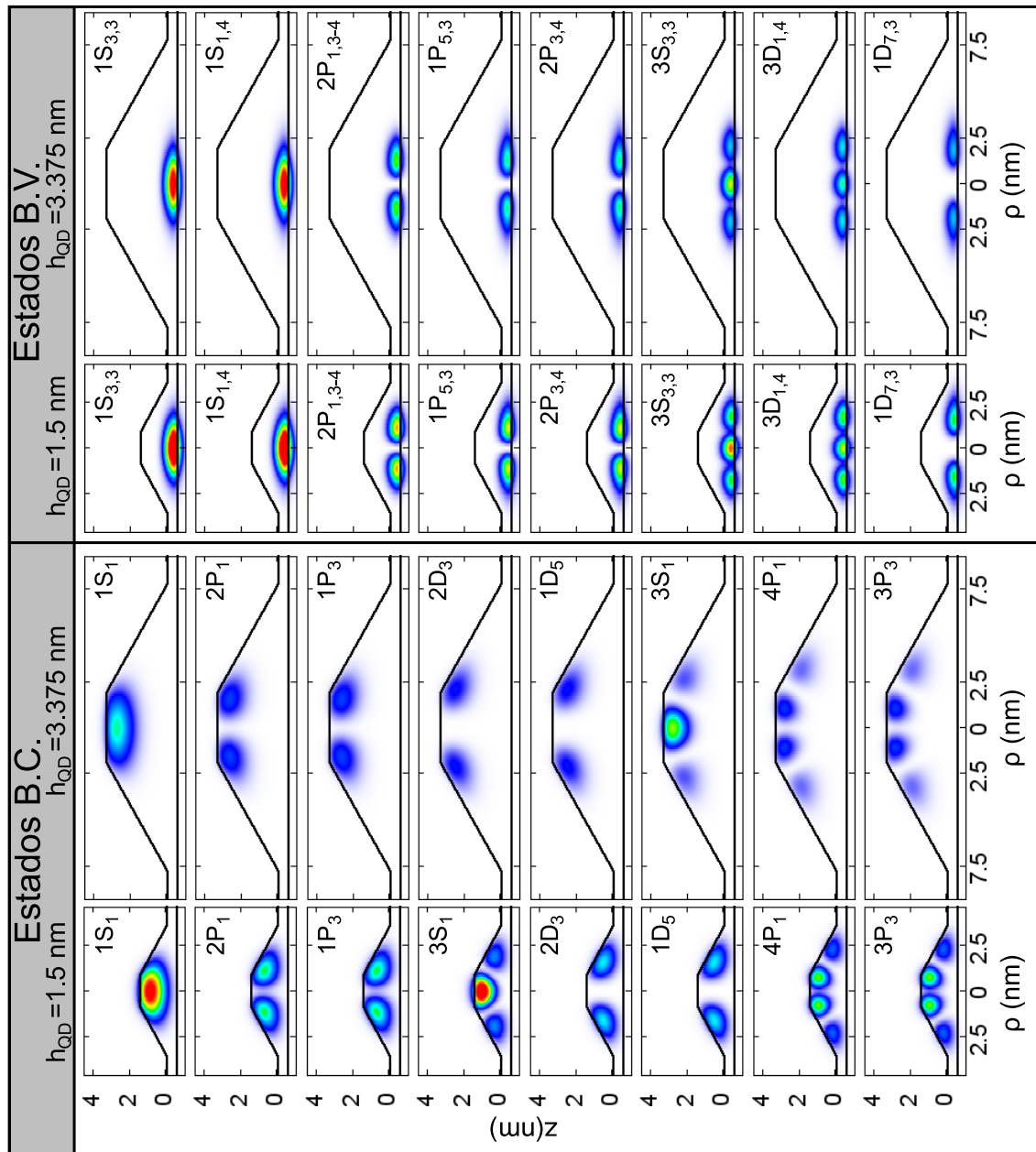


Figura 3.53: Representación de la densidad de probabilidad correspondiente a los ocho primeros estados de electrón y de hueco. Se han considerado dos tamaños diferentes del QD, con $h_{\text{QD}} = 1.5 \text{ nm}$ y $h_{\text{QD}} = 3.375 \text{ nm}$

3.54 hemos representado los espectros de absorción óptica para un QD de igual tamaño que el considerado en la Figura 3.33, i.e. el QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. En el panel (a) hemos considerado luz polarizada en el plano (\perp) y en el panel (b) luz polarizada en la dirección de crecimiento (\parallel). Las transiciones han sido etiquetadas utilizando la misma notación que se introdujo en la Sección anterior. La intensidad del espectro correspondiente a la polarización \perp ha sido multiplicada por un factor 5, de forma que ambos espectros puedan ser representados con la misma escala del eje de ordenadas.

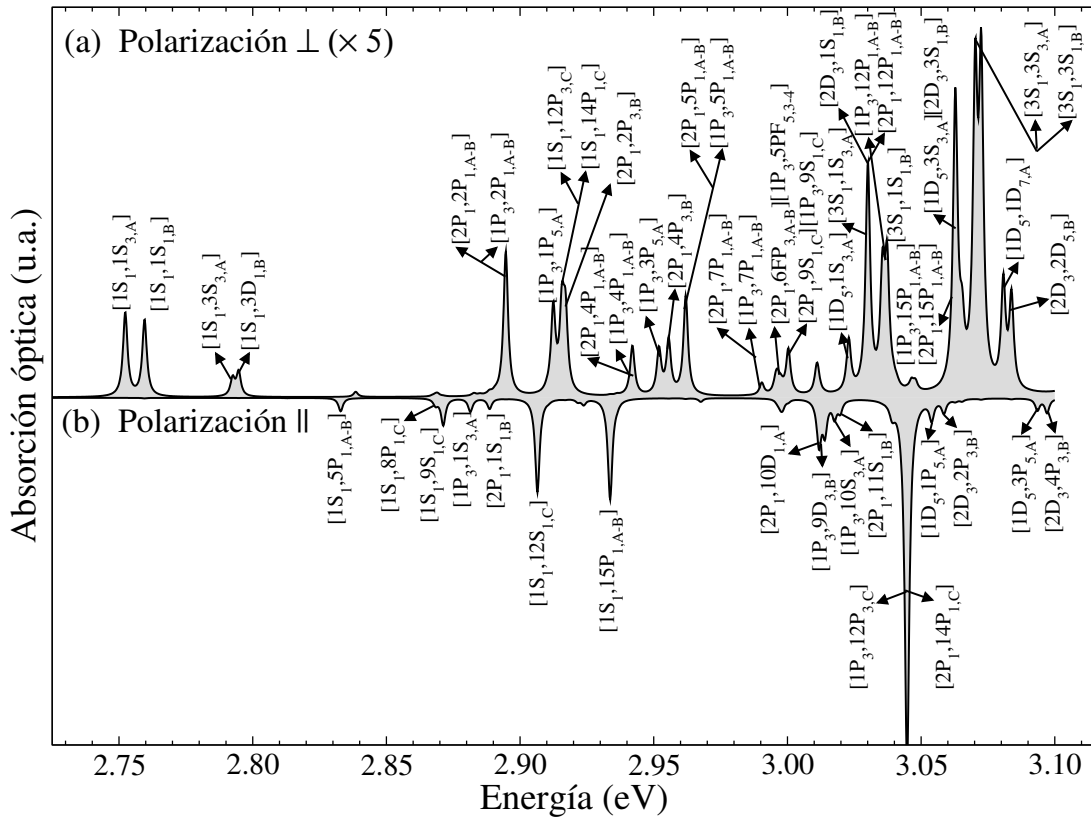


Figura 3.54: Espectro de absorción óptica del QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm para luz polarizada en el plano de crecimiento (a) y en z (b). Las transiciones han sido etiquetadas utilizando la misma notación que fue empleada en la Figura 3.33.

A continuación discutiremos los resultados para las dos polarizaciones de forma independiente:

Polarización \perp : La energía de la transición fundamental está desplazada ~ 50 meV hacia bajas energías respecto al valor hallado por el modelo 8×8 (ver Fig. 3.33). Este resultado confirma el acierto en la elección del parámetro F utilizado en el modelo 8×8 de la Sección 3.2. Las transiciones ópticas

con energía inferior a 2.90 eV son reproducidas con muy buena aproximación por el modelo 8×8 . No encontramos el mismo acuerdo para las transiciones con energía mayor a 2.90 eV: Aunque es posible identificar en la Figura 3.54 la mayoría de las transiciones etiquetadas en la Figura 3.33, también es cierto que las energías y la intensidad relativa de las mismas resulta ser muy diferente. Estos resultados indican que el modelo 8×8 sólo resulta apropiado para describir las transiciones de menor energía.

En cuanto a la estructura global del espectro se refiere, comprobamos nuevamente que es imposible identificar una estructura de picos bien definidos asociada a la estructura de capas s , p , d , etc... de los estados de electrón. Por ejemplo, los estados de electrón correspondientes a la capa p , $1P_3$ y $2P_1$, pueden ser identificados en diferentes transiciones entre ~ 2.89 eV y ~ 3.06 eV, rango en el cual coexisten con transiciones en las que intervienen estados de electrón de la capa d . Este resultado está directamente relacionado con la densidad de estados mostrada en la Figura 3.52. Allí vimos que los 100 primeros estados de hueco se distribuían en una ventana de ~ 200 meV, en consecuencia, en un rango de energías de esa magnitud será posible encontrar transiciones ópticas en las que intervenga un mismo estado de electrón.

Polarización \parallel : La absorción para luz polarizada \parallel aparece desplazada ~ 100 meV hacia bajas energías respecto al borde de absorción correspondiente a la polarización \perp . Vemos que el número de transiciones dominantes identificadas en las Figuras 3.33(b) y 3.54(b) es igual a tres en los dos casos. Para esta polarización también encontramos que la eficiencia cuántica de los procesos de absorción y emisión aumenta con la energía de confinamiento de los estados implicados. Sin embargo, los estados de hueco que participan en las transiciones son distintos dependiendo de que modelo haya sido considerado para su descripción. Esta discrepancia entre los resultados obtenidos por los dos modelos era esperable, ya que en las transiciones importantes con polarización \parallel participan los estados de hueco con una proyección sobre las funciones de Bloch de la banda $C \gtrsim 10\%$. Sabemos que estos estados están en la región poblada de anticruces de la Figura 3.51(b). Dado que en el modelo 8×8 dichos estados tenían una energía que caía dentro del espectro continuo del Hamiltoniano deben ser considerados con escepticismo. Por tanto, el modelo 8×8 no resulta ser apropiado para la correcta caracterización de las propiedades ópticas con polarización \parallel .

Antes de seguir avanzando en las propiedades ópticas de estas nanoestructuras estimamos conveniente clarificar la estructura general del espectro de absorción

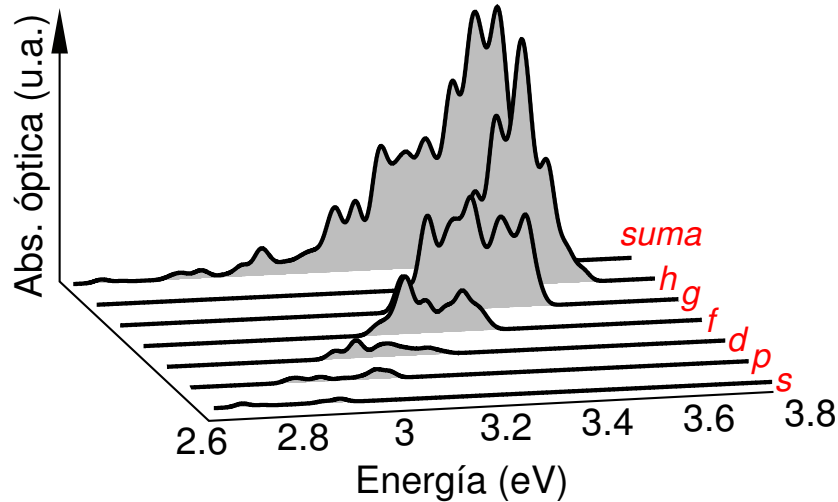


Figura 3.55: Espectros de absorción óptica en los que se ha considerado como estados finales a los estados de electrón pertenecientes a las capas s , p , d , ... de forma independiente. En el espectro más alejado se ha representado la suma de todos ellos. Las curvas han sido representadas en perspectiva por claridad.

en un sistema ensanchado inhomogéneamente. Para ello hemos representado en la Figura 3.55 los espectros de absorción descompuestos en sus contribuciones parciales, en las que únicamente participan los estados de electrón pertenecientes a una determinada capa. Hemos considerado una anchura inhomogénea de tipo Gaussiano con una FWHM igual a 30 meV. En el cálculo de los diferentes espectros hemos considerado 200 estados de hueco. En un sistema real el espectro de absorción total sigue creciendo a energías mayores, sin embargo, debido a que hemos considerado un número finito de estados de electrón y de hueco, los diferentes espectros exhiben una energía de corte artificial, por encima de la cual ya no tiene lugar ninguna transición óptica. En primer lugar, se puede comprobar en esta Figura el incremento en la señal de absorción conforme la energía de confinamiento de los estados de hueco aumenta. Por ejemplo, vemos que la absorción debida a la capa s es completamente despreciable frente a la absorción en la capa h . En segundo lugar se aprecia que los espectros de absorción asociados a cada una de las capas no presentan una distribución de tipo normal. Además, esta representación también deja patente el solapamiento existente entre la absorción de las diferentes capas. Todo ello hace extremadamente complicado la identificación de los espectros individuales en el espectro total. Por consiguiente, podemos concluir que lamentablemente la espectroscopía óptica puede no ser tan clarificadora en el estudio de la estructura electrónica de sistemas de QDs de GaN/AlN como sí lo era en el estudio de QDs de InAs/GaAs.

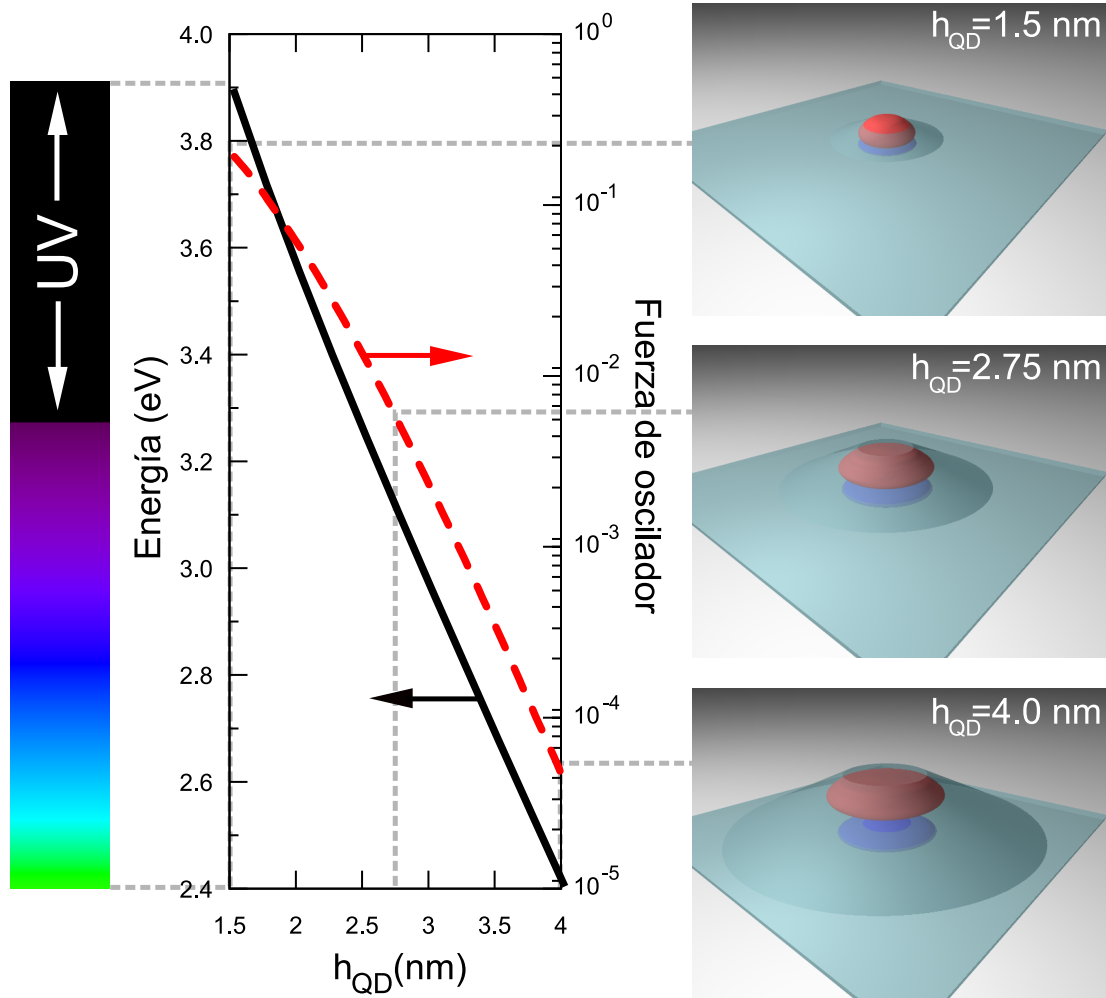


Figura 3.56: Energía de la transición fundamental y fuerza de oscilador asociada en función del tamaño del QD. A la izquierda ha sido representado el color correspondiente a cada energía de emisión. A la derecha ha sido representada una reproducción tridimensional de la densidad de probabilidad de los estados fundamentales de electrón (rojo) y hueco (azul).

Finalmente, vamos a estudiar dos propiedades que tienen un comportamiento particular en estas nanoestructuras, el color de la emisión y la fuerza de oscilador. En la Figura 3.56 hemos representado en una misma gráfica la energía de la transición fundamental y la fuerza de oscilador asociada. Aunque la importante variación de la energía de emisión con el tamaño del QD ya ha sido discutida en puntos anteriores, aquí queremos hacer énfasis en las posibilidades de estas nanoestructuras como emisores de luz policromática. Junto a la escala de energía hemos representado el color asociado a cada energía de transición. En la Figura se puede apreciar que los QDs de menor tamaño emiten en el ultravioleta, y a medida que su tamaño aumenta cubren un rango de colores que comprende del violeta al verde. En la Figura 1.11 mostramos una imagen en color de la emisión de QDs de GaN/AlN extraída de la Ref. [58], que cubría el espectro del rojo al azul, pudiéndose conseguir por tanto la emisión de luz blanca. Los tamaños de las nanoestructuras considerados en los cálculos de la Figura 3.56, no consiguen cubrir el mismo espectro. Sería necesario seguir incrementando la altura para conseguir emisión en el rango rojo del espectro. Vemos, por consiguiente, que el potencial electrostático interno confiere a estas nanoestructuras un grado de libertad adicional a tener en cuenta en la ingeniería de puntos cuánticos. Sin embargo, dicho grado de libertad presenta un serio inconveniente y es la reducida eficiencia cuántica de este sistema. La fuerza de oscilador pone en evidencia que la eficiencia de los procesos de emisión y absorción en los QDs de menor tamaño es un orden de magnitud menor que en los QDs de InAs/GaAs (ver Fig. 3.42). Para las nanoestructuras de mayor tamaño dicha eficiencia se reduce de forma aproximadamente exponencial llegando a reducirse en cuatro ordenes de magnitud. En la Figura 3.56 se puede contemplar una reproducción tridimensional de la densidad de probabilidad de los estados de electrón y hueco para QDs de diferente tamaño. La apreciable separación espacial entre ambas funciones de onda es responsable de la reducción de la fuerza de oscilador.

Comparación con resultados experimentales

Tras haber descrito el modelo que contempla la deformación inhomogénea, el potencial electrostático interno y el acoplamiento entre las bandas del semiconductor masivo procederemos a revisar algunos de los resultados experimentales que fueron introducidos en la Sección 3.1. En este apartado excluirémos del análisis los resultados correspondientes a Y. Arakawa y colaboradores. Como ya se dijo, la explicación más plausible para justificar la valor de la energía de emisión en sus muestras pasa por asumir una difusión de Al en el interior de la nanoestructura, situación que no será contemplada en este trabajo.

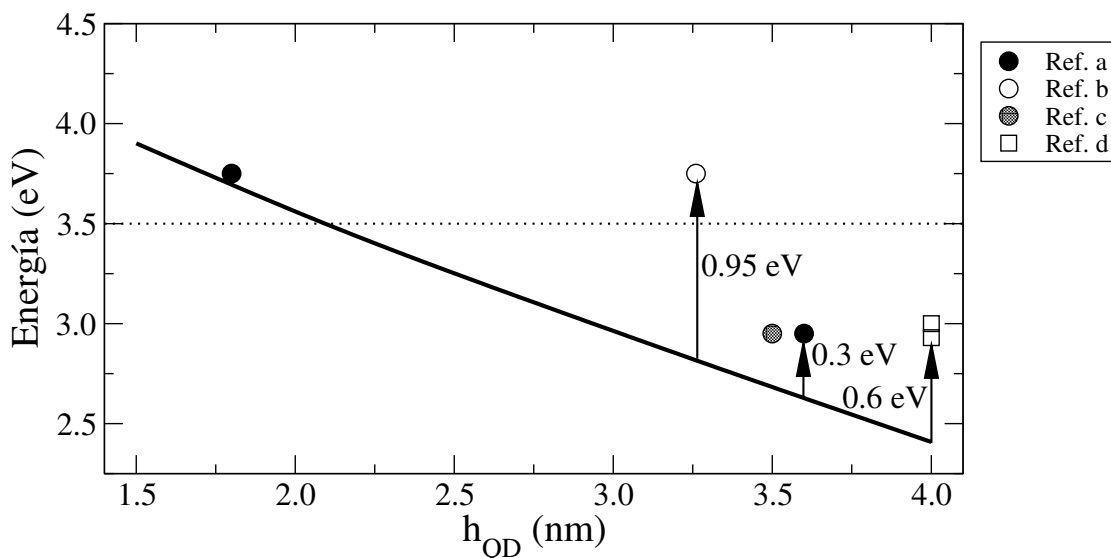


Figura 3.57: Energía de la transición fundamental obtenida mediante el modelo $8 \times 8D$. Los puntos hacen referencia a diferentes valores experimentales de la Tabla 1.3: Referencias: a [53], b [54], c [55] y d [60].

En la Figura 3.57 mostramos una representación similar a la incluida en la Figura 3.23, donde se pueden identificar las energías de emisión de diferentes muestras con QDs de GaN/AlN, junto con la energía de la transición fundamental calculada teóricamente. El desacuerdo con los resultados experimentales correspondientes a los QDs de mayor tamaño persiste aún con el modelo $8 \times 8D$. En la Figura hemos indicado la desviación respecto de los valores teóricos de las diferentes muestras que serán consideradas, que cubre un rango de valores comprendido entre ~ 0.95 eV y ~ 0.3 eV. El origen de tal desencuentro no se puede atribuir a un único factor, ni tampoco se puede esperar que sea común a todas las muestras. En cualquier caso, queda claro que la desviación de los resultados teóricos no tenía su origen ni en el acoplamiento entre las bandas del semiconductor masivo, ni en la descripción exacta de la deformación inhomogénea y del potencial interno. En esta parte del trabajo trataremos de explicar esta discrepancia en base a otras razones. Empezaremos realizando un análisis del impacto que tienen en la energía de transición fundamental los parámetros R_{QD} y h_{QD} que definen la geometría del QD. Seguidamente realizaremos una estimación del efecto del apilamiento vertical, ya que muchas de las muestras caracterizadas ópticamente han sido crecidas en forma de una superred de QDs. Finalmente, abordaremos el estudio de la emisión considerando una distribución normal de tamaños y otra bimodal, i.e. una distribución de tamaños que se puede considerar como la suma de dos distribuciones normales centradas en dos tamaños del QD diferentes.

Análisis del tamaño del QD Una fuente importante de error tiene su origen en la determinación del tamaño del QD. Como ya hemos comentado en apartados anteriores, a consecuencia de la gran intensidad del campo interno en el interior de estas nanoestructuras, pequeñas fluctuaciones en la determinación de los parámetros que definen la geometría del QD pueden llevar a importantes variaciones de las energías de transición.

Para poder visualizar de forma más intuitiva la dependencia que guarda la energía de emisión de la transición fundamental con los parámetros que definen el tamaño, hemos realizado en la Figura 3.58 un mapa de contornos en el que se han barrido diferentes valores de R_{QD} y h_{QD} . El ángulo que forma la base del QD con su superficie lateral se ha considerado constante e igual a $\alpha = 30^\circ$. Por esta razón, en alguna ocasión el radio superior puede resultar negativo, pasando entonces a representar el QD a través de un cono sin truncar, para lo cual es preciso modificar α . La línea negra indica el límite entre el QD cónico y el QD cónico truncado.

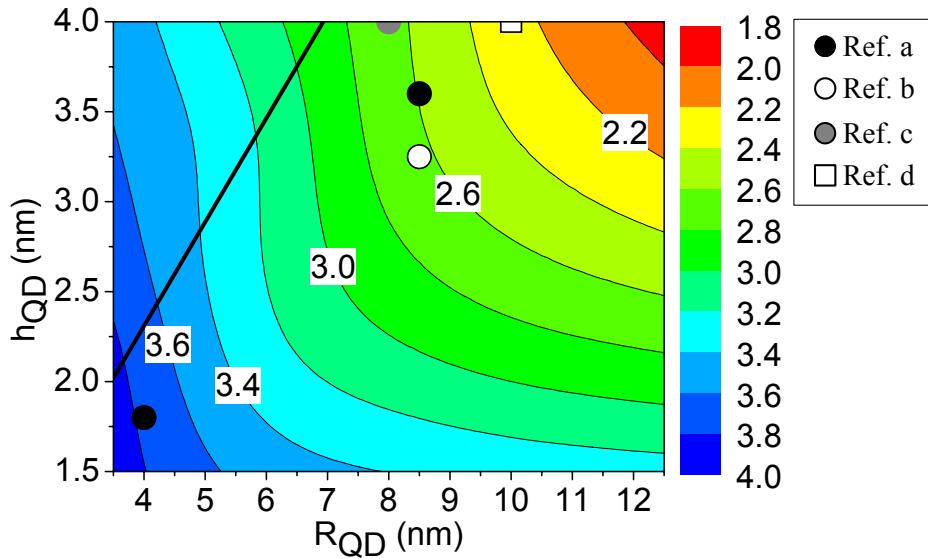


Figura 3.58: Energía de la transición fundamental para diferentes tamaños de QDs de GaN/AlN. La línea continua indica la región en la que el radio superior del cono truncado es cero. Sobre los contornos hemos representado el tamaño de los QDs cuya energía de emisión ha sido representada en la Figura 3.57. Recordemos que las Refs. son: a [53], b [54], c [55] y d [60].

Por inspección de la gráfica podemos comprobar que:

- Si $h_{\text{QD}} \ll R_{\text{QD}}$ (zona inferior derecha de la gráfica), las líneas de contorno son aproximadamente paralelas al eje de abscisa, lo que significa que la energía es más sensible a las variaciones de h_{QD} que a las de R_{QD} .

- Si $h_{\text{QD}} \approx R_{\text{QD}}/2$ (zona superior de la gráfica), las líneas de contorno pasan a ser paralelas al eje de ordenadas, indicando que en esta zona de la gráfica R_{QD} es más crítico que h_{QD} .
- En la zona intermedia podemos reconocer un punto de inflexión, indicativo de la transición entre los dos regímenes antes descritos.

Los puntos situados sobre el mapa de contornos indican el tamaño nominal de los QDs cuyas energías de transición se indicaron en la Figura 3.57. Fijándonos en los QDs de mayor tamaño, observamos que para aproximarse a los valores de la emisión obtenidos experimentalmente sería preciso considerar una variación de R_{QD} ó h_{QD} de ~ 2 nm en las muestras de las Refs. [53] y [55]. En términos relativos implica considerar un error muy grande en la determinación de h_{QD} , del cual no tenemos constancia. De hecho, F. Widmann *et al.* sí que publicaron en [53] el error de la medida de h_{QD} , siendo: $h_{\text{QD}} = 1.8 \pm 0.2$ y 3.6 ± 0.4 . Trasladando el error de h_{QD} a la gráfica, encontramos una indeterminación en la energía de ± 30 meV y ± 60 meV. Comprobamos que no es lo suficientemente grande como para explicar el desacuerdo entre la teoría y el experimento, aunque tampoco es despreciable. Por otra parte, variaciones de R_{QD} podrían dar cuenta de las energías observadas, sin embargo no disponemos de ninguna estimación del error cometido en la medida de R_{QD} . Para los QDs de las Refs. [54] y [60] será necesario considerar variaciones demasiado grandes con las dimensiones de los QDs, incompatible con la caracterización estructural de los mismos, para que fuese capaz de explicar el desacuerdo. Todo ello nos lleva a descartar los posibles errores en la determinación de R_{QD} y h_{QD} como única fuente del origen del desencuentro entre los resultados de nuestro modelo y las energías de emisión experimentales.

Análisis del impacto del apilamiento vertical Como se mostró en la Tabla 1.3, las muestras de las Refs. [53], [55] y [60] constaban de varias capas de puntos cuánticos formando una superred. Aunque el modelo elaborado para obtener los estados electrónicos no es aplicable a una superred, a la vista de los resultados para el potencial interno mostrados en el Capítulo 2, podemos hacer un razonamiento cualitativo sobre el impacto que tendrá el apilamiento sobre las energías de la transición fundamental. A partir de un corte del potencial interno a lo largo del eje axial como el mostrado en la Figura 2.40 e invocando al principio de superposición podemos establecer que el campo interno en un apilamiento de QDs suficientemente próximos tendrá una intensidad menor que el correspondiente a un QD aislado. Es esperable,

por tanto, que al disminuir el grosor de la capa espaciadora empleada en el crecimiento de superredes de QDs, la energía de emisión se verá desplazada hacia el azul respecto del caso en el que únicamente se haya considerado una única capa.

En este punto podemos realizar una estimación del impacto del apilamiento a partir de la variación de la distancia entre el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia, que guarda una dependencia con el tamaño del QD como consecuencia de la presencia del potencial interno. Adoptando la notación empleada en la Figura 3.50 tendremos que

$$E_g = V_{\text{QD}}^e(h_{\text{QD}}) - V_{\text{QD}}^A(d_{\text{WL}}), \quad (3.57)$$

donde E_g representa ahora el gap efectivo. Empleando la formulación del Capítulo 2 y el principio de superposición realizaremos un cálculo de $V_{\text{QD}}^e(z)$ y $V_{\text{QD}}^A(z)$ para el QD central de un apilamiento de 20 QDs. Consideraremos que los bordes de banda del QD central son representativos de los correspondientes al resto de QDs. La variación de E_g en función del espesor de la capa espaciadora nos proporcionará una primera estimación de la energía de emisión característica de las muestras de superredes de QDs analizadas.

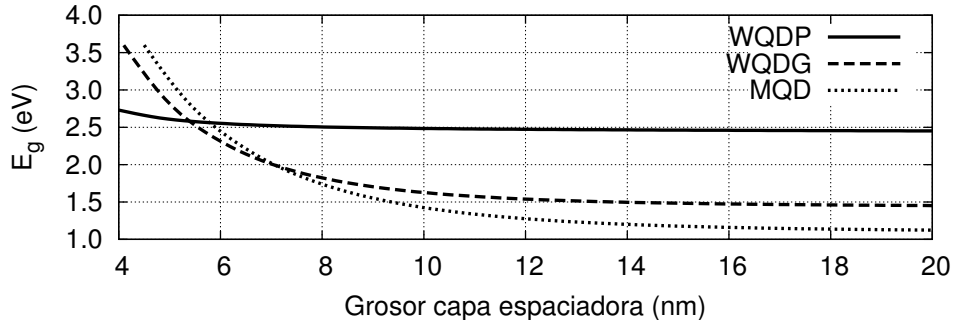


Figura 3.59: Valor de E_g en función del grosor de la capa espaciadora en un sistema de QDs de GaN/AlN apilados. WQDP y WQDG hacen referencia a los QDs con $h_{\text{QD}} = 1.8$ nm y $h_{\text{QD}} = 3.6$ nm de la Ref. [53], respectivamente. MQD hace referencia a las muestras de la Ref. [60].

En la Figura 3.59 mostramos los resultados correspondientes a las muestras de las Refs. [53] y [60]. Los resultados correspondientes a la muestra de la Ref. [55] no han sido mostrados por ser cualitativamente equivalentes a los aquí considerados. Por otra parte la muestra de la Ref [54] se puede considerar que está compuesta por una única capa. Para referirnos a las diferentes muestras hemos introducido la siguiente nomenclatura: WQDP y WQDG, que hacen referencia a los QDs con $h_{\text{QD}} = 1.8$ nm y $h_{\text{QD}} = 3.6$ nm de la

Ref. [53], respectivamente; y MQD, que hace referencia a las muestras de la Ref. [60]. Para realizar la comparación consideraremos que el valor de E_g correspondiente a un QD aislado es aproximadamente igual que el valor de E_g para el valor máximo del espesor. El espesor de la capa espaciadora, en adelante D , correspondiente a las muestras WQDP y WQDG no fue estimado por F. Widmann *et al.* en [53]. Sin embargo, A. D. Andreev y E. P. O'Reilly adoptaron como valor $D = 12.0$ nm. En un análisis realizado por nosotros de la Figura 1 que aparece en la Ref. [53], el valor del espesor es significativamente menor: $D \sim 8.5$ nm. La variación de E_g en la muestra WQDP varía entre 20 meV y 45 meV para D variando entre 12.0 nm y 8.5 nm, respectivamente. En la gráfica se puede apreciar que para WQDP la variación de E_g depende muy poco de los valores considerados de grosor de la capa espaciadora. Para WQDG la situación es la opuesta debido al mayor tamaño de estos últimos. Por otra parte, en la muestra WQDG la correspondiente variación de E_g comprende el intervalo 90-290 meV. Vemos entonces que puede resultar plausible atribuir la desviación entre la teoría y el experimento de la Figura 3.57 al acoplamiento del potencial interno y de la deformación entre los diferentes QD del apilamiento. En las muestras MQD el valor de la capa espaciadora es igual a 6–7 nm. Al comprobar la variación de E_g sobre la curva encontramos que el desplazamiento es igual a ~ 1.1 eV, y el resultado teórico correspondiente al apilamiento correspondería en una energía de emisión significativamente más alta que la reportada experimentalmente. No obstante, debemos tener en cuenta que cuando $D \rightarrow h_{\text{QD}}$, E_g depende críticamente de D . En efecto, para $D \approx 8$ nm encontramos que la variación de E_g es ~ 600 meV, que muestra una mayor compatibilidad con la desviación hallada en la Figura 3.57.

Análisis de la distribución de tamaños del QD Hemos visto que el análisis del impacto del apilamiento ha permitido explicar de forma razonable por qué el modelo del QD aislado subestimaba las energías de emisión de diferentes muestras de QDs. Sin embargo, todavía falta por clarificar la energía de emisión de la muestra correspondiente a la Ref. [54], representada a través de un punto blanco en la Figura 3.57. El estudio del espectro de PL correspondiente a esta muestra presenta algunos problemas que deben ser tenidos en cuenta. En primer lugar, la muestra no fue caracterizada estructuralmente. El tamaño que le ha sido asignado en este trabajo (ver Tabla 1.3) se tomó de una estimación del diámetro (17 nm) realizada por F. Widmann *et al.* a partir de la energía de emisión. Teniendo en cuenta además que en otras muestras analizadas en el mismo trabajo observaron un valor de la ratio

$r_{\text{QD}} = 2.6$, nosotros hemos considerado una altura igual a 3.25 nm. Vemos entonces que el procedimiento seguido para fijar el tamaño de los QDs no ha resultado ser riguroso.

En la misma referencia [54] sí que se puede encontrar la caracterización estructural detallada de otro conjunto de muestras, que consisten en 20 capas de QDs separadas por 5 nm de AlN, i.e. un espesor de la capa espaciadora muy pequeño. En la Figura 3.60 hemos reproducido la Figura 9(b) de la misma referencia, en la que se observa un histograma que representa una distribución de alturas *bimodal*, ya que presenta dos máximos. Los autores también observaron que r_{QD} era, en un buen grado de aproximación, constante en todos los QDs estudiados e igual a 2.6. En base a esto, de la Figura 3.60 se puede extraer la distribución de tamaños de la muestra. Consideraremos que el espectro de PL publicado puede ser considerado representativo de este otro conjunto de QDs.

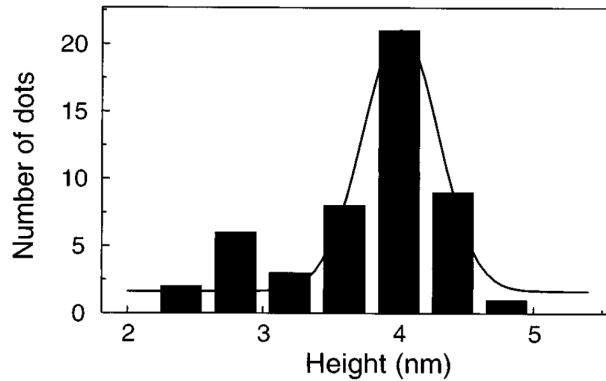


Figura 3.60: Numero de puntos cuánticos en función de la altura. El análisis ha sido realizado por F. Widmann *et al.* utilizando la técnica AFM en [54].

Recordemos que el aspecto novedoso en el sistema GaN/AlN es la fuerte dependencia de la fuerza de oscilador en este sistema¹³. A continuación procederemos a ilustrar la particular dependencia de la intensidad de la emisión con la distribución de tamaños y la fuerza de oscilador mediante un sencillo cálculo. En adelante describiremos la intensidad de emisión a través de la relación

$$I(E) = N_{\text{QD}}(E) f(E), \quad (3.58)$$

¹³Compárense los resultados de la fuerza de oscilador del sistema InAs/GaAs, Fig. 3.42, con los del sistema GaN/AlN, Fig. 3.56. Mientras que en el primero la fuerza de oscilador toma valores comprendidos entre 3.0 y 7.5, en el segundo lo hace entre 0.2 y 4.5×10^{-5} .

donde $N_{\text{QD}}(E)$ es una función que determina el número de QDs cuya energía de la transición fundamental es igual a E y $f(E)$ representa la fuerza de oscilador de la transición fundamental en función de su energía. A partir de un ajuste del histograma de la Figura 3.60 utilizando una superposición de dos distribuciones normales obtenemos el número de QDs en función de la altura, $N_{\text{QD}}(h_{\text{QD}})$. Por otra parte, hemos realizado un cálculo de la estructura electrónica para QDs con una ratio $r_{\text{QD}} = 2.6$ en un rango de alturas h_{QD} igual al considerado en la Figura 3.60. Ello nos permite expresar h_{QD} en función de la energía de emisión de la transición fundamental, $h_{\text{QD}}(E)$, y así obtener $N_{\text{QD}}(E) = N_{\text{QD}}(h_{\text{QD}}(E))$ y $f(E) = f(h_{\text{QD}}(E))$. Finalmente, obtenemos la curva de emisión representada en la Figura 3.61. En la misma Figura hemos indicado mediante una línea vertical de puntos la energía de la transición fundamental correspondiente a un QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm (2.2 eV), que corresponde al máximo de la distribución de la Figura 3.60. Así mismo, hemos indicado mediante una línea sólida la energía correspondiente al máximo del espectro de PL.

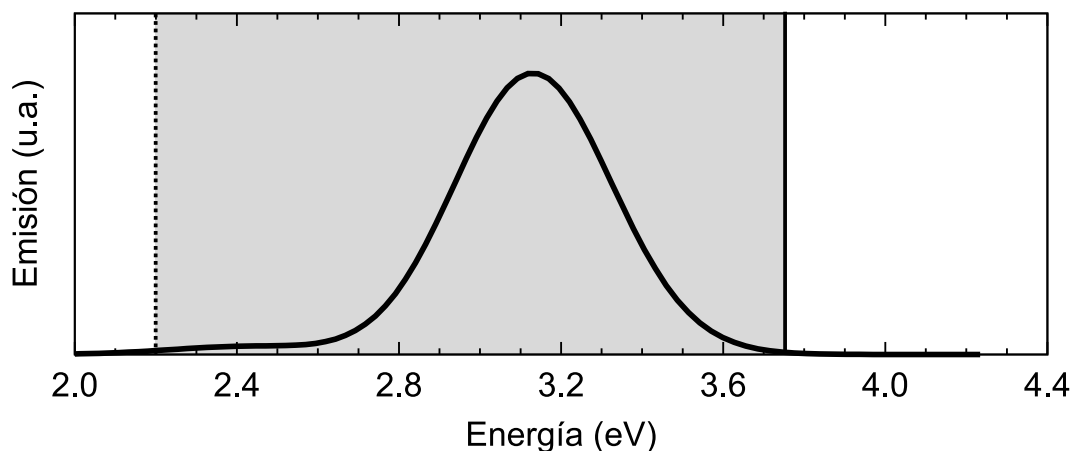


Figura 3.61: Emisión calculada para la distribución de QDs de la Figura 3.60. La línea vertical de puntos indica la energía de la transición fundamental correspondiente a un QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm, y la línea vertical continua a la localización del máximo del espectro de PL.

El máximo de la emisión calculada teóricamente se encuentra localizado en ~ 3.13 eV, esto es, ~ 930 meV hacia altas energías respecto al valor de la energía de transición de un QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm. Sin embargo, sigue estando localizado a una energía ~ 620 meV por debajo del máximo de espectro de PL medido experimentalmente. Este desacuerdo entre la teoría y el experimento no puede atribuirse a ninguno de los aspectos analizados en puntos anteriores, lo que nos hace pensar que el espectro de PL no es representativo de una

muestra con una distribución de tamaños como la correspondiente a la Figura 3.60. Dejando a un lado la discusión relativa al acuerdo entre los resultados teóricos y experimentales, este análisis nos ha permitido comprobar como en SAQDs de GaN/AlN la energía del máximo de la emisión no se corresponde con la emisión de un QD cuyas dimensiones coinciden con el máximo de la distribución de tamaños.

La relación no trivial del espectro de emisión con la distribución de tamaños que se desprende del resultado de la Fig. 3.61 puede hacer pensar que la discusión de los experimentos de la Ref. [53] debe revisarse. Esto viene a indicar que además de la localización de los máximos de la distribución de tamaños también es relevante la forma de la distribución. Para ello hemos considerado que las dos muestras de QDs estudiadas por F. Widmann *et al.* en la Ref. [53] (puntos sólidos en la Figura 3.57) exhiben distribuciones normales centradas en $h_{\text{QD}} = 1.8$ nm y $h_{\text{QD}} = 3.6$ nm con una desviación estándar igual a $\sigma = 0.2$ nm. Las curvas teóricas que representan los espectros de emisión ahora se muestran en la Figura 3.62.

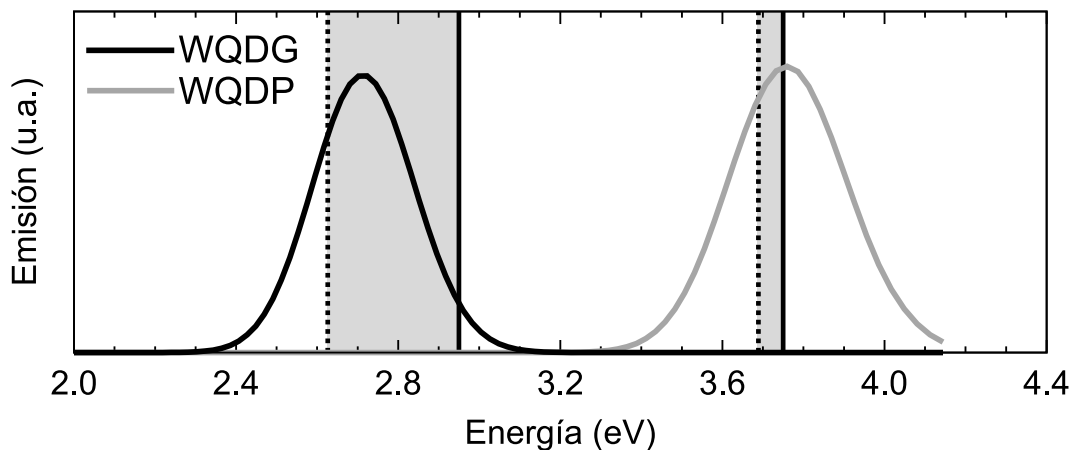


Figura 3.62: Emisión correspondiente a los QDs estudiados por F. Widmann *et al.* en la Ref. [53] considerando la distribución de tamaños de tipo normal con una desviación estándar $\sigma = 0.2$ nm. WQDP y WQDG indican los QDs con $h_{\text{QD}} = 1.8$ nm y $h_{\text{QD}} = 3.6$ nm, respectivamente. Las líneas verticales de puntos indican la energía de la transición fundamental para un QD con la altura del centro de la distribución. Las líneas verticales continuas indican el valor de la emisión del espectro de PL. La intensidad de las dos curvas ha sido normalizada.

En esta representación también hemos indicado la energía de la transición fundamental del QD cuyo tamaño se corresponde con el del máximo de la distribución de tamaños. Al comparar este valor con el pico de la intensidad, observamos que para el QD de mayor tamaño la corrección respecto a la

estimación realizada en la Figura 3.57 es de ~ 100 meV y ~ 60 meV para los QDs grande y pequeño, respectivamente. Con ello comprobamos que al considerar una distribución de tamaños normal el pico de la intensidad de la emisión se desplazada hacia el azul. Siendo el desplazamiento mayor para los QDs grandes que para los pequeños. Cuando se incrementa el valor de la desviación estándar hemos observado que dicho desplazamiento también aumenta. Obsérvese también que la FWHM del espectro de emisión es ~ 200 meV, valor que resulta ser representativo de los hallados experimentalmente y que recogimos en la Tabla 1.3.

Todos los resultados obtenidos en esta parte del trabajo vienen a confirmar que el espectro de emisión de un conjunto de QDs de GaN/AlN no sólo tiene una fuerte dependencia con el tamaño promediado de la nanoestructura, sino que también con la distribución de tamaños de los QDs en la muestra. Es por ello que la forma usual de “etiquetar” una muestra de QDs a través del tamaño de las nanoestructuras que aparecen en una proporción mayor resulta en este caso incompleta. Como hemos visto, conocer únicamente el máximo de la distribución de tamaños puede llevar a conclusiones erróneas acerca de las propiedades ópticas del conjunto de nanoestructuras. Resulta por tanto de capital importancia una caracterización estructural precisa de las muestras de QDs para establecer correctamente la relación entre las propiedades ópticas y las propiedades estructurales.

Capítulo 4

Complejos excitónicos en puntos cuánticos

Los resultados obtenidos en el Capítulo 3 no contemplan la atracción Coulombiana entre los electrones y/o los huecos que pueden estar presentes simultáneamente en el punto cuántico y, por consiguiente, presentan un error de carácter fundamental. En este Capítulo introduciremos la formulación que nos permitirá superar las limitaciones impuestas por la aproximación de un único electrón.

Dependiendo de las propiedades del sistema, la corrección introducida en las energías de transición por la interacción entre un electrón y un hueco puede ser del orden de 10 meV hasta 100 meV. Por ejemplo en un QD de InAs/GaAs resulta ser de $\sim 20 - 30$ meV y en el caso de QD de GaN/AlN varía entre $\sim 30 - 100$ meV. Es habitual encontrar en la bibliografía trabajos teóricos en los que la interacción de Coulomb es despreciada. Obviamente, no se puede justificar dicha aproximación en términos de la magnitud de la corrección. Se suele argüir, en cambio, que la exactitud de los resultados numéricos no es el principal objetivo de la investigación.

En la introducción, realizada en el Capítulo 1, sobre las propiedades de los SAQDs de InAs/GaAs se describieron diferentes técnicas experimentales que tienen como objetivo la caracterización óptica de un único punto cuántico. Éstas han permitido resolver la estructura interna de las resonancias encontradas en los espectros de absorción, fotoluminiscencia, etc. . . . Con ello se abre la puerta al estudio de la interacción electrostática entre las cuasi-partículas confinadas en el interior de la nanoestructura. Por consiguiente, la inclusión del potencial de Coulomb en el Hamiltoniano del QD no solo resulta interesante para estimar el valor de la corrección en las energías de transición, sino que también va a permitir analizar toda una nueva familia de experimentos.

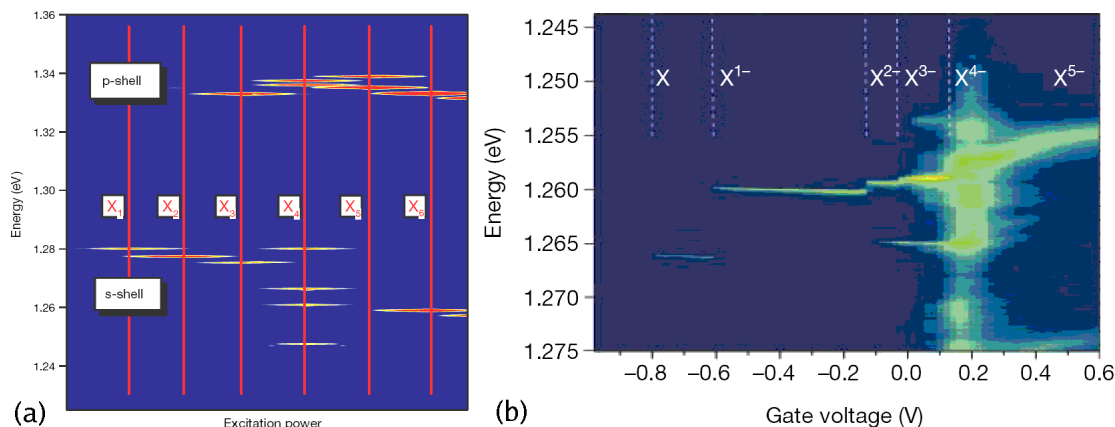


Figura 4.1: Espectros de fotoluminiscencia medidos para un único QD. La notación X_n representa que la emisión proviene de un QD que contiene en promedio n electrones y n huecos confinados en su interior. Análogamente X^{-n} hace referencia a un QD que contiene un hueco y n electrones. La potencia de excitación en el panel (a) fue variada entre 50 nW y 5 mW. Las Figuras han sido extraídas de (a) M. Bayer *et al.* [209] y (b) R. J. Warburton *et al.* [210]

En la Figura 4.1 hemos reproducido dos espectros de fotoluminiscencia que aparecieron en dos trabajos consecutivos dentro del mismo número de la revista *Nature* [209, 210]. Sin ánimo de pretender realizar una descripción en profundidad de estas gráficas, utilizaremos estos resultados experimentales como introducción a la problemática que plantea el estudio de varios cuerpos confinados en un QD. El panel (a) contiene una representación bidimensional de la energía de emisión en función de la potencia de excitación. Mediante el control de la potencia de la radiación incidente es posible modificar el número promedio de pares e-h confinados en el interior del QD. Aunque un número arbitrario de electrones y huecos estén presentes en la nanoestructura, la emisión sigue teniendo su origen en la recombinación de un único par e-h, pero la presencia de las otras cuasi-partículas modifica las energías de transición a través de la interacción de Coulomb entre ellos. Al contrastar la posición en energía de los picos con un modelo teórico, los autores han sido capaces de asignar a cada resonancia un número de pares $e-h$, de forma que el pico X_1 corresponde a un único par $e-h$ (excitón), X_2 a dos pares (biexcitón), y así sucesivamente. A las excitaciones electrónicas en que el número de electrones y huecos coinciden se denominan **complejos excitónicos neutros**. Supongamos que un QD ha sido excitado de forma que confina en su interior dos electrones y dos huecos. La emisión correspondiente a esa situación viene representada en la Figura 4.1(a) por la etiqueta X_2 . El espectro de PL muestra que la desexcitación radiativa se produce, en primer lugar, a través de la recombinación de un par $e-h$, que emite radiación a ~ 1.28 eV. Tras esta recombinación, en el QD queda un electrón y un hueco (X_1). Después de haber recombinado el estado

de excitación X_1 , el QD llega a su estado fundamental, en el que ya no hay ni electrones, ni huecos. La notación que han empleado los autores de [209] no es estándar. Más adelante definiremos la que vamos a emplear en este trabajo.

Por otro lado, los autores de [210], en lugar de variar la potencia de excitación, han modificado el voltaje al que está sometida la muestra. Al aumentar dicho voltaje, el QD se carga de electrones progresivamente. Debido al principio de exclusión de Pauli cada estado puede alojar un único electrón. Por consiguiente, la captura de un electrón por el QD se debe realizar a diferentes voltajes discretos. Además, para inyectar un electrón adicional en un QD que ya contiene otros electrones es necesario vencer la interacción electrón-electrón (efecto conocido como *Coulomb blockade*). Efectivamente, el espectro de la Figura 4.1(b) muestra que al variar el voltaje, la emisión se produce a diferentes energías que varían abruptamente. Estas diferencias de energía han sido atribuidas a la interacción entre los electrones y el hueco que se encuentran confinados en el QD, representando cada intervalo de voltajes delimitado por las líneas a trazos un estado de carga distinto del QD. A diferencia del caso discutido en el panel (a), en estos estados la carga neta del QD es no nula, y por ello hablamos de **complejos excitónicos cargados**. Estas dos Figuras muestran que las técnicas de espectroscopía de un único QD permiten acceder a una información que permanecía oculta en los espectros obtenidos por técnicas espectroscópicas convencionales (ver Fig. 1.3).

También es posible encontrar los dos tipos de complejos excitónicos en un mismo espectro dependiendo de las condiciones de excitación [211]. En la mayoría de los casos, en el estudio de la cinética de los portadores en sistemas de QDs se asume la captura de pares e-h desde una reserva externa (como puede ser la WL o la barrera). Sin embargo, electrones y huecos pueden presentar tiempos de captura diferentes y, por consiguiente, es factible encontrar la señal procedente de complejos excitónicos tanto neutros, como cargados en un espectro de emisión promediado en el tiempo.

Hemos dividido este Capítulo en tres Secciones. En la primera de ellas plantearemos el formalismo general que nos permitirá obtener la estructura electrónica de un complejo excitónico y describiremos el método empleado para su resolución. En las otras dos Secciones agruparemos los resultados numéricos en función del estado de carga de un QD en su estado fundamental: en primer lugar consideraremos que el QD se encuentra vacío, y después que está cargado. En cada una de estas dos Secciones trataremos independientemente los resultados para los sistemas InAs/GaAs y GaN/AlN.

Para etiquetar un complejo excitónico dado, y por extensión el pico de emisión

o absorción asociado, utilizaremos la siguiente notación:

$$N_{e-h}X^{n\pm}. \quad (4.1)$$

En esta expresión N_{e-h} indica el número de pares e-h del complejo excitónico y $n\pm$ es el estado de carga del estado fundamental del QD, siendo 0 para el caso de un QD vacío y, $n+$ y $n-$ para un QD que contiene n huecos o electrones, respectivamente. Si un QD confina en su interior N_e electrones y N_h huecos, entonces,

$$N_{e-h} = \min(N_e, N_h), \quad (4.2a)$$

$$n\pm = |N_h - N_e| \text{sign}(N_h - N_e), \quad (4.2b)$$

donde la función $\text{sign}(x)$ devuelve el signo del argumento. Cuando $N_{e-h} = 1$ será omitido de la etiqueta para aligerar la notación. Por ejemplo:

N_e	N_h	Nombre	Etiqueta
1	1	Excitón	X^0
2	1	Excitón cargado negativamente	X^{1-}
1	2	Excitón cargado positivamente	X^{1+}
2	2	Biexcitón	$2X^0$
3	2	Biexcitón cargado negativamente	$2X^{1-}$
2	3	Biexcitón cargado positivamente	$2X^{1+}$

4.1. Formulación y resolución del problema

4.1.1. Representación de electrones y huecos

A lo largo de todo el trabajo hemos utilizado el concepto de hueco para hacer referencia a los estados de la banda de valencia. Sin embargo, como advertimos en el Capítulo 3, en realidad en todo momento hemos utilizado una representación de electrones para describir la estructura electrónica y las propiedades ópticas de los sistemas estudiados. Para tratar el problema del excitón y de los complejos excitónicos es conveniente introducir rigurosamente el concepto de hueco para describir una nueva cuasi-partícula, diferente del electrón, con su propia carga, y estructura de niveles electrónicos. En esta nueva representación que adoptaremos en adelante, la palabra “electrón” será empleada para describir un electrón ocupando un estado en la banda de conducción y la palabra “hueco” para describir la ausencia de un electrón en un estado de la banda de valencia.

Como es bien sabido, la manera formal de transformar una representación de electrones en otra de electrones y huecos, es haciendo uso del operador de Kramers o de inversión temporal \hat{K} ¹ [172]. Al hacer actuar el operador de Kramers sobre los estados de electrón de la banda de valencia se obtienen los estados de hueco. Sea \mathcal{H} el espacio de Hilbert generado por el conjunto de autovectores del Hamiltoniano multibanda H definido en el Capítulo 3, y sean \mathcal{H}^{BC} y \mathcal{H}^{BV} los subespacios de \mathcal{H} generados por los estados de las bandas de conducción y de valencia respectivamente. Los subespacios de los estados de electrón y de hueco están entonces definidos según:

$$\mathcal{H}^e \longleftrightarrow \{|\psi_i\rangle = |\Psi_i\rangle \mid |\Psi_i\rangle \in \mathcal{H}^{\text{BC}}\} \longleftrightarrow E_i^e = (E_i - \epsilon_0), \quad (4.3a)$$

$$\mathcal{H}^h \longleftrightarrow \{|\psi_j\rangle = \hat{K} |\Psi_j\rangle \mid |\Psi_j\rangle \in \mathcal{H}^{\text{BV}}\} \longleftrightarrow E_j^h = -(E_j - \epsilon_0), \quad (4.3b)$$

donde ϵ_0 es una energía de referencia elegida de forma que E_i^e y E_j^h sean positivas.

4.1.2. Descripción del formalismo de segunda cuantización

En este trabajo hemos optado por formular el problema de la estructura electrónica de los complejos excitónicos combinando la representación de electrones y huecos con el formalismo de segunda cuantización. En este formalismo las funciones de onda quedan relegadas a un segundo plano y tanto los operadores como los autovectores se representan haciendo uso de operadores de creación y destrucción. La estadística fermiónica es contemplada automáticamente por las relaciones de anticonmutación entre los nuevos operadores. Con ello se consigue una notación más compacta, intuitiva y elegante. En la actualidad es el formalismo más extendido en la bibliografía especializada.

Partiendo de la definición de los subespacios \mathcal{H}^e y \mathcal{H}^h de la Ec. (4.3), los estados de una única partícula estudiados en el Capítulo 3 se representan de la siguiente manera:

$$|\psi_i\rangle = |i\rangle = c_i^\dagger |0\rangle, \quad |\psi_j\rangle = |j\rangle = d_j^\dagger |0\rangle, \quad (4.4a)$$

$$|0\rangle = c_i |i\rangle, \quad |0\rangle = d_j |j\rangle, \quad (4.4b)$$

donde $|0\rangle$ representa el estado fundamental del QD, c_i (c_i^\dagger) representa el operador de destrucción (creación) de un electrón en el estado (ψ_i, E_i^e) , y d_j (d_j^\dagger) representa el operador de destrucción (creación) de un hueco en el estado (ψ_j, E_j^h) . Los estados

¹El operador de Kramers está definido como $\hat{K} = -i\sigma_y \hat{K}_0$, donde σ_y es una matriz de Pauli y \hat{K}_0 es el operador de conjugación compleja.

de una única partícula vienen definidos por un único índice, que a lo largo de todo el trabajo será i para electrones y j para huecos. Por otra parte, en virtud del principio de exclusión de Pauli, tendremos que

$$c_i^\dagger |i\rangle = 0, \quad d_j^\dagger |j\rangle = 0, \quad (4.5a)$$

$$c_i |0\rangle = 0, \quad d_j |0\rangle = 0. \quad (4.5b)$$

Es posible reescribir las relaciones (4.4) y (4.5) de forma más compacta a través de las siguientes reglas de anticonmutación:

$$\{c_i^\dagger, c_{i'}^\dagger\} = \{d_j^\dagger, d_{j'}^\dagger\} = 0, \quad \{c_i, c_{i'}^\dagger\} = \delta_{i,i'}, \quad (4.6a)$$

$$\{c_i, c_{i'}\} = \{d_j, d_{j'}\} = 0, \quad \{d_j, d_{j'}^\dagger\} = \delta_{j,j'}, \quad (4.6b)$$

$$\{c_i^\dagger, d_j^\dagger\} = \{c_i, d_j\} = 0, \quad \{c_i, d_j^\dagger\} = \{d_j, c_i^\dagger\} = 0, \quad (4.6c)$$

donde $\{A, B\} = AB + BA$.

En términos de estos operadores la estructura de niveles obtenida en el Capítulo 3 en la aproximación de una única partícula queda representada mediante el siguiente Hamiltoniano:

$$H^c = H^e + H^h, \quad (4.7a)$$

$$H^e = \sum_i E_i c_i^\dagger c_i, \quad (4.7b)$$

$$H^h = \sum_j E_j d_j^\dagger d_j, \quad (4.7c)$$

Como ya hemos dicho anteriormente, la interacción entre los electrones viene gobernada por la interacción de Coulomb, cuyo operador está definido como:

$$V_{1,2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4.8)$$

Al escribir esta interacción en términos de los operadores de creación y destrucción encontramos el Hamiltoniano:

$$H^{cc} = H^{ee} + H^{hh} + H^{eh}, \quad (4.9a)$$

$$H^{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} V_{i_1, i_2, i_3, i_4} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger c_{i_3} c_{i_4}, \quad (4.9b)$$

$$H^{hh} = \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} V_{j_1, j_2, j_3, j_4} d_{j_1}^\dagger d_{j_2}^\dagger d_{j_3} d_{j_4}, \quad (4.9c)$$

$$H^{\text{eh}} = - \sum_{i_1, i_2, j_1, j_2} V_{i_1, j_1, j_2, i_2} c_{i_1}^\dagger d_{j_1}^\dagger d_{j_2} c_{i_2}, \quad (4.9d)$$

siendo

$$V_{l_1, l_2, l_3, l_4} = \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \psi_{l_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2}^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{l_3}(\mathbf{r}_2) \psi_{l_4}(\mathbf{r}_1). \quad (4.10)$$

La ecuación de Schrödinger que nos proponemos resolver se puede escribir como:

$$H |\Phi\rangle = (H^c + H^{\text{cc}}) |\Phi\rangle = \mathcal{E} |\Phi\rangle, \quad (4.11)$$

donde $|\Phi\rangle$ es el estado de un complejo excitónico y \mathcal{E} su energía. Con los operadores de creación y destrucción, definidos en las Ecs. (4.4) y (4.5), es posible introducir los operadores *número* que al actuar sobre $|\Phi\rangle$ devuelven el número de electrones y de huecos contenidos en el complejo excitónico:

$$\hat{N}_e = \sum_i c_i^\dagger c_i, \quad \hat{N}_h = \sum_j d_j^\dagger d_j. \quad (4.12)$$

Resulta inmediato comprobar que $[H, \hat{N}_e] = [H, \hat{N}_h] = 0$, por lo que resulta factible incorporar (N_e, N_h) como un buen número cuántico en la resolución de (4.11). En adelante denotaremos el estado de varios cuerpos como $|\Phi\rangle \equiv |\lambda, N_e, N_h\rangle$, donde λ representa los números cuánticos internos del estado.

4.1.3. Resolución del problema

Tras haber completado el planteamiento del problema de la estructura electrónica de un complejo excitónico, ver Ec. (4.11) procederemos a su resolución. La estrategia que describiremos a continuación consiste en expresar el estado del complejo excitónico $|\lambda, N_e, N_h\rangle$ como una combinación lineal de los elementos propios de H^c . Dichos estados vienen definidos por:

$$H^c |l_{(N_e, N_h)}\rangle = E_{l_{(N_e, N_h)}} |l_{(N_e, N_h)}\rangle, \quad (4.13)$$

donde hemos introducido el número cuántico $l_{(N_e, N_h)} \equiv i_1 i_2 \dots i_{N_e}; j_1 j_2 \dots j_{N_h}$ para presentar la formulación en forma más compacta. En adelante, y puesto que, como hemos dicho, podemos considerar N_e y N_h fijos, donde no haya ambigüedad haremos $|l_{(N_e, N_h)}\rangle \equiv |l\rangle$ para aligerar la notación. Cada elemento de esta base recibe el

nombre de *configuración* y está definido como:

$$|l\rangle \equiv |i_1 i_2 \dots i_{N_e}; j_1 j_2 \dots j_{N_h}\rangle = \prod_{n_e=1}^{N_e} c_{i_{n_e}}^\dagger \prod_{n_h=1}^{N_h} d_{j_{n_h}}^\dagger |0\rangle, \quad (4.14)$$

y la energía asociada es:

$$E_l = \sum_{n_e=1}^{N_e} E_{i_{n_e}} + \sum_{n_h=1}^{N_h} E_{j_{n_h}}. \quad (4.15)$$

La función de onda correspondiente a cada configuración es:

$$\begin{aligned} \Psi_{i_1, \dots, i_{N_e}; j_1, \dots, j_{N_h}}(\mathbf{r}_1^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e, \mathbf{r}_1^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h) &= \langle \mathbf{r}_1^e, \dots, \mathbf{r}_{N_e}^e | i_1, \dots, i_{N_e} \rangle \\ &\times \langle \mathbf{r}_1^h, \dots, \mathbf{r}_{N_h}^h | j_1, \dots, j_{N_h} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \text{Det} [\Psi_i(\mathbf{r}_k^e)] \times \frac{1}{\sqrt{N_h!}} \text{Det} [\Psi_j(\mathbf{r}_k^h)], \end{aligned} \quad (4.16)$$

i.e. el producto de dos determinantes de Slater asociados a e y h. Por ejemplo, la función de onda de una configuración donde los electrones ocupan los estados i_1 e i_2 , y los huecos los estados j_1 y j_2 empleada en la descripción de un estado de biexcitón, será:

$$\begin{aligned} \Psi_{i_1, i_2; j_1, j_2}(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \mathbf{r}_1^h, \mathbf{r}_2^h) &= \frac{1}{2} (\Psi_{i_1}(\mathbf{r}_1^e) \Psi_{i_2}(\mathbf{r}_2^e) - \Psi_{i_2}(\mathbf{r}_1^e) \Psi_{i_1}(\mathbf{r}_2^e)) \\ &\times (\Psi_{j_1}(\mathbf{r}_1^h) \Psi_{j_2}(\mathbf{r}_2^h) - \Psi_{j_2}(\mathbf{r}_1^h) \Psi_{j_1}(\mathbf{r}_2^h)). \end{aligned} \quad (4.17)$$

El conjunto de funciones definido en (4.14) constituye el punto de inicio para la resolución de la ecuación de Schrödinger (4.11). Los estados del sistema solución de (4.14) se pueden expresar como una combinación lineal de configuraciones:

$$|\lambda, N_e, N_h\rangle = \sum_l U_l^\lambda |l\rangle. \quad (4.18)$$

Tras sustituir (4.18) en (4.11), es posible encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger a través de la diagonalización de la matriz definida por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\sum_{l'} (H_{l,l'} - \mathcal{E}_\lambda \delta_{l,l'}) U_{l'}^\lambda = 0, \quad (4.19)$$

siendo la matriz

$$H_{l,l'} = \langle l | H | l' \rangle, \quad (4.20)$$

la representación del Hamiltoniano H expresado en la base $|l\rangle$. Hemos trasladado el cálculo de estos elementos de matriz al Apéndice E. Este método recibe el nombre de interacción de configuraciones (CI) [212, 213, 214, 215], y a la técnica de resolución diagonalización exacta (ED).

La estrategia adoptada en este trabajo es la más extendida en la bibliografía de QDs en lo referente al estudio de la estructura electrónica de complejos excitónicos. Por una lado, la calidad de los resultados obtenidos por este método depende, en gran medida, de la precisión con la que los estados de un única partícula han sido calculados. Por otra parte, al igual que sucedía en el modelo desarrollado en el Capítulo 3, la dimensión del conjunto de funciones base condicionará la fiabilidad de los resultados obtenidos. Aumentar el número de funciones del desarrollo requiere de un considerable aumento del tiempo de cálculo. La principal razón radica en la evaluación del elemento de matriz $H_{l,\nu}$. Éste se compone de $N_e!N_e(N_e - 1) + N_h!N_h(N_h - 1) + N_e!N_eN_h!N_h$ términos para un complejo excitónico compuesto por N_e electrones y N_h huecos. En cada término se calcula una integral del tipo V_{i_1, i_2, i_3, i_4} , la cual se realiza, en gran parte, de forma numérica (ver Apéndice E).

Es posible reducir el número de elementos de matriz que han de ser evaluados con ayuda de las propiedades de simetría que presenta el problema. Por un lado, se deben tener en cuenta las propiedades de simetría de la integral del potencial de Coulomb con el fin de no realizar cálculos redundantes:

- $V_{i_1, i_2, i_3, i_4} = V_{i_2, i_1, i_4, i_3}$,
- $V_{j_1, j_2, j_3, j_4} = V_{j_2, j_1, j_4, j_3}$,
- $V_{k_1, k_2, k_3, k_4} = V_{k_4, k_3, k_2, k_1}$.

En la última relación hemos empleado el índice k por ser ésta válida en todos los términos de H^{cc} . Por otro lado, es preciso implementar la simetría de rotación del sistema, extensamente discutida en el Capítulo 3. En el siguiente apartado discutiremos la existencia del momento angular total de un complejo excitónico.

4.1.4. Momento angular total del complejo excitónico

En sistemas en los que el spin es un buen número cuántico, es posible transformar la base de estados $|l\rangle$ en una base con spin total bien definido, de forma que, en virtud del teorema de Wigner-Eckart [216] se puede reducir la dimensión del espacio de estados que interactúan a través de H^{cc} . Vimos en el Capítulo 3 que, en general, el spin no era un buen número cuántico como consecuencia de

acoplamiento entre las bandas del semiconductor masivo. Por esta razón, no hemos implementado esta simetría en el programa de cálculo. Una descripción más detallada se puede encontrar en los trabajos de A. Wensauer *et al.* [214] y M. Rontani *et al.* [217].

Por otra parte, sabemos que los estados confinados en un punto cuántico descritos con el modelo desarrollado en el Capítulo 3 tienen la componente z del momento angular total $M = m + j_z$ bien definida. Se puede demostrar que el Hamiltoniano (4.11) conserva la componente z del momento angular total:

$$\hat{J}_z^{(N_e, N_h)} = \sum_i M_i^e c_i^\dagger c_i + \sum_j M_j^h d_j^\dagger d_j, \quad (4.21)$$

donde M_i^e y M_j^h es el número cuántico M del estado de electrón i y del estado de hueco j , respectivamente. En adelante, siempre que no haya riesgo de ambigüedad suprimiremos el número de partículas del superíndice de $M^{(N_e, N_h)}$ para aligerar la notación. Al ser j un estado de la banda de valencia se verifica que $M_j^h = -M_j^e$. El complejo excitónico tiene entonces una proyección z del momento angular total bien definido:

$$\hat{J}_z |\Phi\rangle = M |\Phi\rangle, \quad (4.22)$$

y por tanto será posible resolver la ecuación de Schrödinger (4.11) para cada $M^{(N_e, N_h)}$ de forma independiente. Cada configuración de la Ec. (4.18) también presenta una componente z del momento angular total M bien definida:

$$\hat{J}_z |l\rangle = M |l\rangle, \text{ donde } M = \sum_{i=1}^{N_e} M_i^e + \sum_{j=1}^{N_h} M_j^h. \quad (4.23)$$

Nuevamente encontramos que la simetría de rotación del sistema resulta ser de gran ayuda en la resolución del problema.

La notación empleada para identificar los estados de los complejos excitónicos cuando $N_e + N_h$ es par, consiste en:

$$N (N_{e-h} X^{n\pm})_{|M|},$$

y cuando $N_e + N_h$ es impar, en:

$$N (N_{e-h} X^{n\pm})_{2|M|},$$

donde N es el número cuántico principal de los estados definidos por M . Todos los estados de los complejos excitónicos están degenerados en $\pm M$, por lo que

hemos optado por suprimir el signo de este número cuántico en la etiqueta de los estados. Por ejemplo, supongamos un complejo excitónico compuesto por tres electrones ($N_e = 3$) y dos huecos ($N_h = 2$), y con $M = 3/2$. El primer estado de este complejo será $1(2X^{1-})_3$ y el segundo excitado $2(2X^{1-})_3$.

4.1.5. Cálculo de las propiedades ópticas de complejos excitónicos

En el Capítulo 1 describimos la interacción radiación-materia en el marco de la aproximación de un único electrón y utilizamos la regla de oro de Fermi para calcular transiciones entre estados. En el Capítulo 3 hemos utilizado sistemáticamente dichos resultados para estudiar la absorción sin efectos de correlación. En este apartado recurriremos al formalismo de segunda cuantización para formular el tratamiento de las transiciones ópticas entre complejos excitónicos.

Para escribir el Hamiltoniano que describe la interacción radiación-materia en segunda cuantización, debemos dejar a un lado la imagen descrita en el Capítulo 1 en la que todo proceso de absorción (emisión) de radiación consiste en una excitación (desexcitación) de un electrón a través de una transición entre estados. Ahora un proceso de absorción (emisión) de radiación implica la creación (aniquilación) de un par electrón-hueco. En consecuencia el Hamiltoniano se puede escribir como:

$$H_{r-m} = \sum_{ij} \underbrace{\mu_{ij}^* c_i^\dagger d_j^\dagger}_{\text{absorción}} + \underbrace{\mu_{ij} c_i d_j}_{\text{emisión}}, \quad (4.24)$$

donde

$$\mu_{ij} = \frac{e}{m_0} A_0 \langle \Psi_i | \hat{e} \mathbf{p} | \Psi_j \rangle \quad (4.25)$$

es el elemento de matriz óptico que fue introducido en la Sección 1.7. El Hamiltoniano (4.24) ya no conmuta con los operadores número \hat{N}_e y \hat{N}_h , por lo que el número de partículas presentes en el sistema ya no se conservará.

Recurriendo a las técnicas estándar de teoría de perturbaciones para estudiar la respuesta del sistema integrada en el tiempo, encontramos nuevamente que la regla de oro de Fermi nos permitirá evaluar de forma sencilla la probabilidad de la transición entre dos estados de varios cuerpos:

$$R_{|\lambda', N'_e, N'_h\rangle \rightarrow |\lambda, N_e, N_h\rangle}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \lambda, N_e, N_h | H_{r-m} | \lambda', N'_e, N'_h \rangle|^2 \times \delta(\mathcal{E}_{|\lambda, N_e, N_h\rangle} - \mathcal{E}_{|\lambda', N'_e, N'_h\rangle} \pm \hbar\omega), \quad (4.26)$$

Para contemplar el ensanchamiento homogéneo basta con sustituir la distribución tipo delta de Dirac por una distribución Lorentziana como se muestra en la Ec. (1.74). En los espectros mostrados a lo largo del Capítulo hemos introducido un ensanchamiento homogéneo igual a 5 meV. Obviamente, los elementos de matriz que aparecen en la Ec. (4.26) son distintos de cero sólo si se cumple que $N_e = N'_e \pm 1$ y $N_h = N'_h \pm 1$, esto es, si el estado inicial y el final se diferencia en un par e-h. Este resultado fue adelantado en la introducción del Capítulo al discutir la Figura 4.1. Una regla de selección adicional viene impuesta por la proyección z del momento angular total del complejo excitónico, que como sabemos, es un buen número cuántico. De forma análoga a como sucedía para el problema de estados de una única partícula, se debe cumplir que:

$$M^{(N_e, N_h)} = M^{(N'_e, N'_h)} \pm 1 \quad \text{si } \hat{e} = \hat{e}_\pm, \quad (4.27)$$

$$M^{(N_e, N_h)} = M^{(N'_e, N'_h)} \quad \text{si } \hat{e} = \hat{e}_z. \quad (4.28)$$

Esta última relación permite conocer qué estados de excitón van ser ópticamente activos y cuáles no. Dado que al estado fundamental $|0\rangle$ se le puede asignar $M^{(0,0)} = 0$, aquellos estados con $M^{(1,1)} = \pm 1$ serán activos en presencia de radiación polarizada circularmente. Por otra parte, los estados con $M^{(1,1)} = 0$ lo serán para polarización \hat{e}_z . Estos estados reciben el nombre de brillantes (*bright*). Al resto de estados se les denomina oscuros (*dark*), pues son ópticamente inactivos. Para complejos excitónicos compuestos por más de un electrón, o un hueco, esta nomenclatura carece de sentido, pues el estado inicial (o final) ya no es único.

Una vez es conocida la probabilidad de transición (4.26), es posible calcular la absorción óptica:

$$\alpha_{|\lambda', N'_e, N'_h\rangle}(\omega) = \sum_{|\lambda, N_e, N_h\rangle} R_{|\lambda, N_e, N_h\rangle \rightarrow |\lambda', N'_e, N'_h\rangle}(\omega). \quad (4.29)$$

4.2. Estructura electrónica de los complejos excitónicos neutros

En esta Sección estudiaremos complejos excitónicos en los que $N = N_e = N_h$. Esto significa que el estado fundamental corresponde a un QD vacío y está descrito por el estado $|0\rangle$. En la nomenclatura más extendida en la bibliografía para hacer referencia a los diferentes complejos excitónicos neutros se denomina excitón (X^0) al complejo excitónico caracterizado por $N = 1$, biexcitón ($2X^0$) a aquel con $N = 2$, triexcitón ($3X^0$) para $N = 3$, y así sucesivamente. Actualmente es posible

encontrar multitud de trabajos en los que se ha observado la emisión característica de biexcitones, sobre todo en QDs de InGaAs/GaAs y QDs basados en semiconductores II-VI. Sin embargo, todavía no se puede considerar su detección como un hecho rutinario al alcance de cualquier laboratorio óptico. Además, no en todos los sistemas es igualmente fácil la observación de la emisión del complejo $2X^0$. Por ejemplo, para el caso de puntos cuánticos basados en [0001] GaN/AlN, sólo tenemos constancia de un trabajo, realizado por S. Kako *et al.* [57]. Complejos excitónicos con $N > 2$ no se encuentran tan frecuentemente en la bibliografía. En los resultados que mostraremos a continuación estudiaremos la estructura electrónica de los complejos X^0 , $2X^0$ y $3X^0$ para los sistemas que venimos estudiando, i.e., puntos cuánticos de InAs/GaAs y GaN/AlN.

4.2.1. Estructura electrónica del complejo X^0

En este apartado presentaremos las energías del complejo X^0 para QDs con la misma geometría que fue considerada en el Capítulo 3. Asimismo mostraremos y discutiremos la energía de enlace definida como la diferencia entre la energía de la configuración dominante $|l\rangle$ ($E_{|l\rangle}$), i.e. aquella para la cual $|U_l^\lambda|^2$ es mayor, y la energía del estado excitónico (E_{X^0}) en cuestión:

$$\Delta X^0 = E_{|l\rangle} - E_{X^0}. \quad (4.30)$$

Finalmente, presentaremos el aspecto del espectro de absorción excitónica y discutiremos los cambios introducidos por la interacción entre el electrón y el hueco.

Resultados del sistema InAs/GaAs

En la Figura 4.2 hemos representado un esquema de niveles de energía en la aproximación de una única partícula (ver Fig. 3.34), i.e. sin interacción de Coulomb, y los niveles de energía de los estados de menor energía del complejo X^0 , para un QD de InAs de $h_{\text{QD}} = 4$ nm y resto de parámetros geométricos idénticos a los de los QDs analizados en el Capítulo 3. Las configuraciones dominantes de los estados de excitón en el rango de energías estudiado están compuestas por un único estado de electrón y seis estados de hueco. Es por ello que nos ha sido posible asociar a cada nivel de energía excitónico un estado de hueco de la configuración dominante, que ha sido indicado en el margen derecho de la figura. Finalmente, cada nivel de energía está acompañado de la energía de enlace ΔX^0 . La primera conclusión importante que se desprende de esta Figura es que se preserva, en gran medida, el orden de las transiciones sin interacción cuando

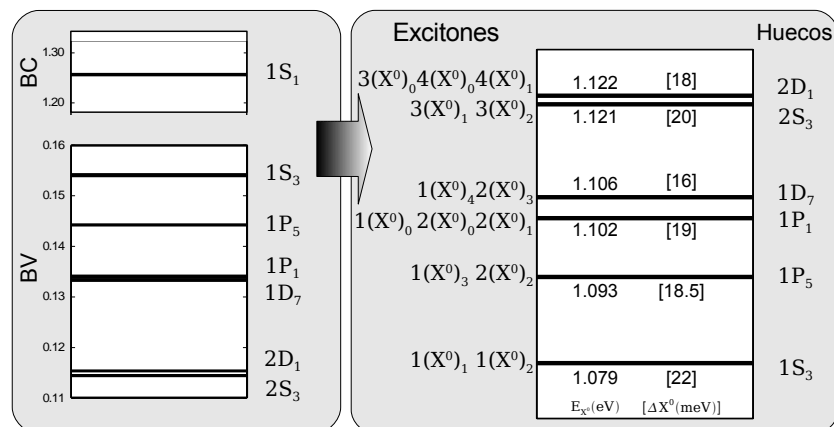


Figura 4.2: (Izquierda) Esquema de niveles de energía de un QD de InAs/GaAs de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm sin interacción de Coulomb (ver Fig. 3.34). (Derecha) Esquema de niveles de energía de estados de X^0 para el mismo QD. En los estados de excitón se ha indicado además el estado de hueco de la configuración dominante y la energía de enlace.

se introduce la interacción de Coulomb, como se puede comprobar comparando el orden de los estados de huecos en los paneles de la izquierda y la derecha. Únicamente se han intercambiado los estados de hueco $2D_1$ y $2S_3$. Todos los estados de excitón presentan una multiplicidad igual a dos, $\pm M$. Sin embargo, en la Figura 4.2 aparecen cuasi-degenerados con una multiplicidad igual a cuatro. Ello es debido a que los estados de electrón y de hueco presentan una multiplicidad igual a dos, tal y como se discutió en la Sección 3.3. Así, por ejemplo, el nivel fundamental está compuesto por cuatro estados $1(X^0)_{\pm 1}$ y $1(X^0)_{\pm 2}$, dos de los cuales son ópticamente activos o brillantes ($|M| = 1$) y otros dos son ópticamente inactivos u oscuros ($|M| = 2$). En el caso de que el acoplamiento entre las configuraciones fuese más importantes, el desdoblamiento de los niveles asociados a los estados $1(X^0)_{\pm 1}$ y $1(X^0)_{\pm 2}$ aumentaría.

En la Figura 4.3 hemos representado la dependencia en función de h_{QD} de la energía y de la energía de enlace de los estados de excitón considerados en la Figura 4.2. La energía de los estados excitados se reduce ~ 200 meV al cubrir el rango de alturas del QD estudiado, que resulta ser aproximadamente la suma de la variación de la energía de los estados de electrón y de hueco mostrada en la Figura 3.34, ya que la reducción de energía de enlace es ~ 10 meV. La energía de enlace es, en general, mayor para el estado fundamental y se reduce para los estados excitados. Sin embargo, vemos que la dependencia de ΔX^0 con h_{QD} no es igual para todos los estados. En el complejo X^0 , la mayor contribución a la energía de enlace proviene de la integral de Coulomb entre los estados de electrón y de hueco de la configuración dominante. El valor de dicha integral aumenta con la localización de

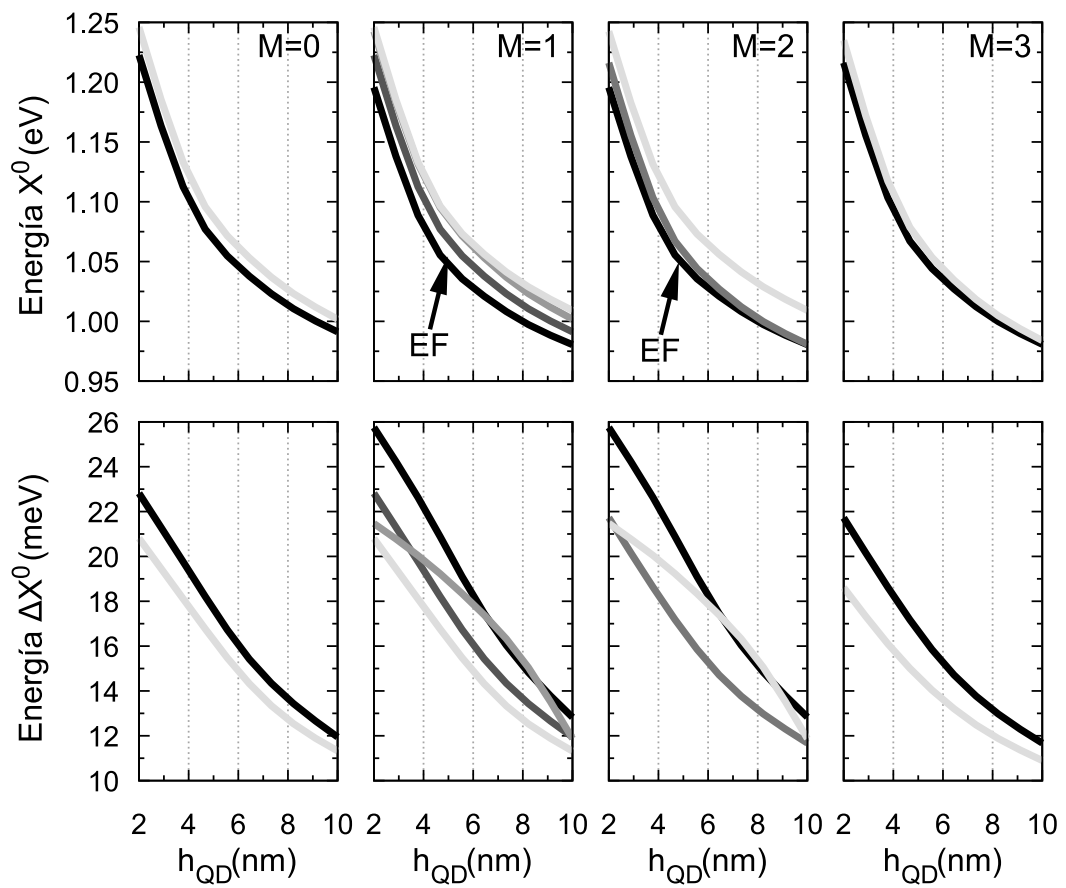


Figura 4.3: Energía (fila superior) y energía de enlace (fila inferior) de un conjunto seleccionado de estados excitónicos (ver texto) en función de h_{QD} . La etiqueta EF indica el estado fundamental.

las funciones de onda, y se reduce al crecer la separación entre los centros de carga de los estados que interaccionan. Estas propiedades de la integral de Coulomb nos van a permitir interpretar de manera sencilla los resultados descritos más arriba. En primer lugar, la localización de la función de onda se reduce, en general, con la energía del estado y por consiguiente también lo hará el valor de la integral de Coulomb. Ello permite explicar que ΔX^0 experimente una reducción en los estados de excitón compuestos de estados excitados de hueco. En segundo lugar, vimos en la Sección 3.3 que al aumentar h_{QD} se reducía la localización de la función de onda. Además, en la Figura 3.43 representamos z_{eh} , que coincide con la separación de los centros de carga, para el estado fundamental en la aproximación de un único electrón. Allí comprobamos cómo esa separación aumentaba monótonamente con h_{QD} , resultado que puede correlacionarse con la disminución de ΔX^0 mostrada en la Figura 4.3.

En la Figura 4.4 hemos representado el espectro de absorción de luz polarizada en el plano correspondiente al QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm. También ha sido incluido en la gráfica el espectro obtenido en la Sección 3.3 utilizando el modelo allí desarrollado para facilitar la comparación con los resultados de la aproximación de una partícula. Ahora en el espectro también se manifiestan estados de excitón cuya componente dominante contiene estados de electrón diferentes del $1S_1$. Por claridad hemos representado únicamente las resonancias correspondientes a las capas s y p discutidas en la Figura 3.38. Como ya comentamos los estados de excitón ópticamente activos son aquellos con $|M| = \pm 1$, razón por la cual, en el espectro únicamente participan estados tipo $N(X^0)_1$. Las diferentes resonancias han sido etiquetadas empleando la siguiente notación:

$$X_N[N_{M^e}\tilde{m}_{2M^e}, N_{M^h}\tilde{m}_{2M^h}].$$

La letra X indica que se trata de una resonancia excitónica y el subíndice es el número cuántico principal para el subespacio $|M| = 1$. Los estados de electrón y de hueco correspondientes a la configuración dominante incluida entre corchetes han sido etiquetados recurriendo a la misma notación empleada en el Capítulo 3 para identificar las transiciones ópticas. De la comparación de los dos espectros se pueden extraer los principales efectos del potencial de Coulomb sobre las propiedades ópticas de un QD. En primer lugar se aprecia el corrimiento hacia el rojo del espectro correspondiente a la absorción excitónica. Este efecto era previsible a la vista de los resultados mostrados más arriba relativos a la energía de enlace del excitón. Es posible relacionar las resonancias que exhiben ambos espectros sabiendo que, en general, los estados excitónicos pueden ser asociados a una configuración de par electrón-hueco dominante. Sin embargo, es necesario que

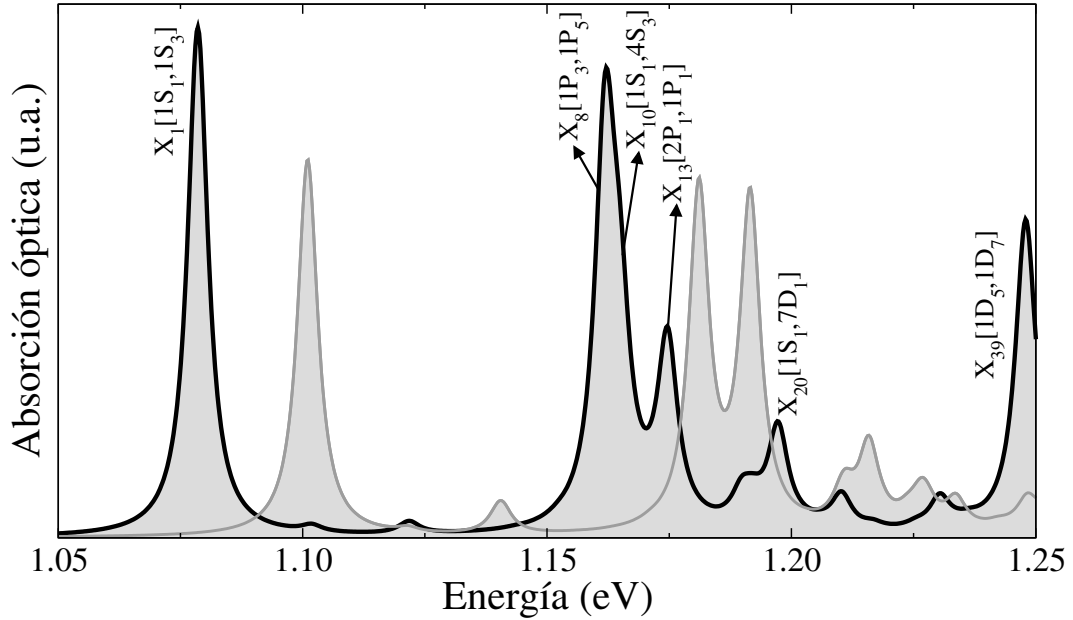


Figura 4.4: Espectros de absorción óptica correspondiente al QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm asumiendo que la radiación incidente está polarizada en el plano. En el espectro mostrado en línea negra se ha contemplado la interacción de Coulomb. El espectro mostrado con línea gris se ha calculado en la aproximación de una única partícula (ver Fig. 3.38).

exista un acoplamiento entre las configuraciones para poder explicar la diferencia de intensidad que se aprecia en ambos espectros. Por una parte, vemos que la transición fundamental presenta un incremento significativo de la fuerza de oscilador. Este resultado viene a confirmar la imagen extendida de que la probabilidad de transición aumenta al considerar la atracción Coulombiana en el par e-h. Sin embargo, en las transiciones correspondientes a la capa p la situación no es tan sencilla. Obsérvese que el estado excitónico X_8 presenta una intensidad mayor que el X_{13} , mientras que en el espectro de una única partícula los dos picos exhibían una intensidad aproximadamente igual. Además, la transición X_{10} no tiene un equivalente en espectro de una única partícula. Como se puede ver, el análisis de este problema es muy complicado pues requiere un estudio del acoplamiento entre las diferentes configuraciones y para cada configuración entre las diferentes componentes de Bloch que fueron empleadas en el Capítulo 3 para construir los estados de electrón y de hueco.

Para concluir este apartado, vamos a revisar la comparación con el espectro de absorción medido experimentalmente que fue realizada en el Capítulo 3. En las Figuras 4.5(a) y 4.5(b) hemos reproducido la curva experimental junto con las correspondientes al modelo sin y con interacción de Coulomb. Hemos considerado

un ensanchamiento Gaussiano igual a 30 meV, tal y como hicimos en la Figura 3.40. En los dos casos hemos desplazado los espectros de absorción teóricos de forma que coincida el centro del pico asociado a la transición fundamental con el correspondiente al espectro experimental. Por otra parte, la intensidad ha sido ajustada aplicando un factor global, de forma que coincida el máximo del pico de la transición fundamental de las curvas teórica y experimental. Obsérvese que la

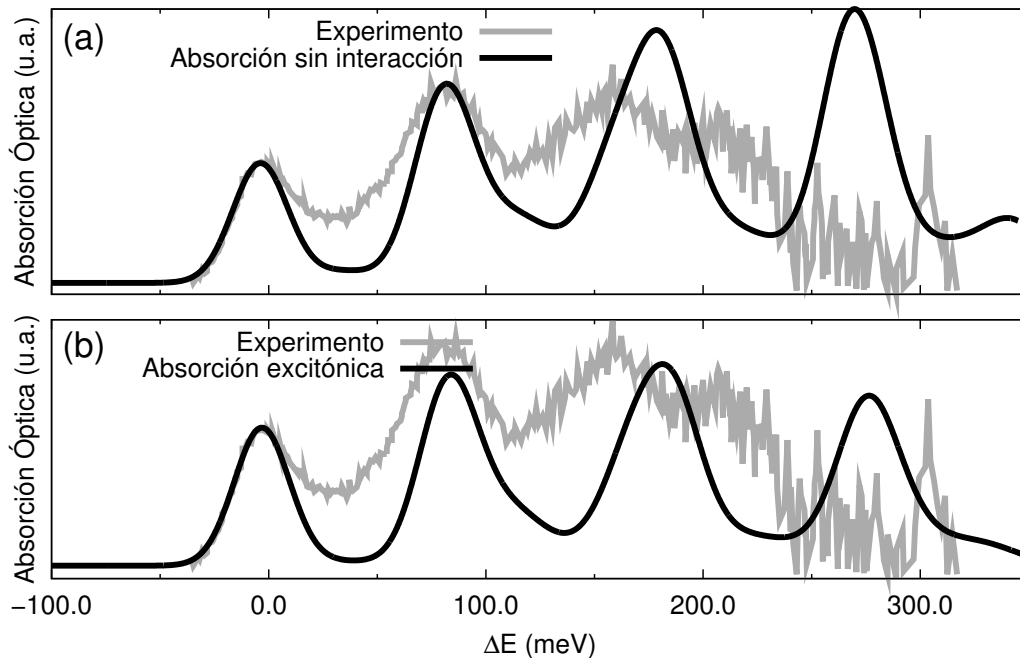


Figura 4.5: Curva de absorción experimental junto con la curva de absorción teórica para el QD con $h_{\text{QD}} = 4$ nm obtenida sin (a) y con (b) la interacción de Coulomb. En cada caso, los espectros teóricos han sido desplazados en el eje de abscisas y se ha aplicado un factor global a la intensidad de forma que se ajuste el pico asociado a la transición fundamental con el correspondiente al espectro experimental.

separación en energía entre los picos asociados a las capas s , p y d es aproximadamente igual para las dos curvas teóricas. Sin embargo, no sucede lo mismo con la intensidad relativa entre los picos. Mientras que en el espectro de absorción en la aproximación de una única partícula la intensidad de los picos asociados a las capas excitadas aumenta monótonamente, cuando se incluye el efecto de la interacción de Coulomb la intensidad es máxima para las capas p y d y se reduce para la capa f .

Al comparar con el espectro experimental, observamos que el hecho de haber introducido la interacción de Coulomb no ofrece ningún elemento nuevo a la dis-

cusión realizada en la Sección 3.3 relativa a la separación entre la posición de los picos. En cuanto a las intensidades de los picos, hemos visto que aunque no reproduce exactamente los resultados experimentales, sí que permite explicar que la intensidad no aumenta monótonamente para las transiciones asociadas a las capas excitadas, a diferencia de lo que sucede en el modelo sin interacción de Coulomb (ver Sección 3.3).

Resultados del sistema GaN/AlN

En este apartado mostraremos los resultados obtenidos para el sistema GaN/AlN siguiendo un esquema similar al empleado en el apartado anterior. En la Figura 4.6 hemos ilustrado la estructura interna de los estados excitónicos de menor energía correspondientes a un QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Al igual que sucedía en los QDs de InAs/GaAs, la interacción de Coulomb no modifica el orden de los estados excitónicos respecto al orden exhibido por los estados de hueco, como se puede observar de la comparación de los dos paneles mostrados en la Figura.

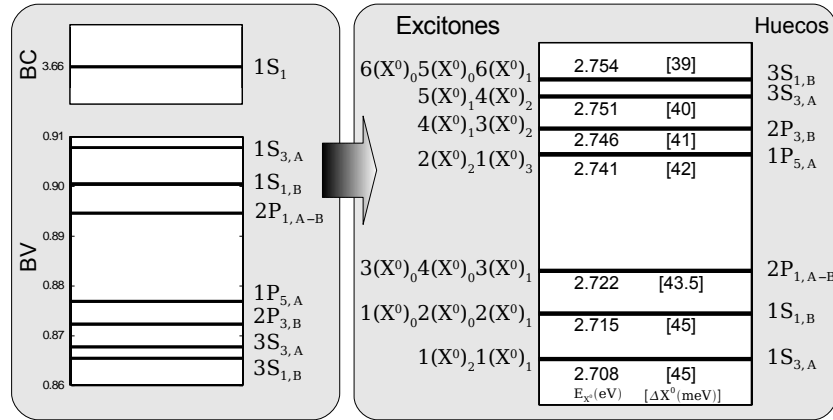


Figura 4.6: (Izquierda) Esquema de niveles de energía de un QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm sin interacción de Coulomb (ver Fig. 3.51). (Derecha) Esquema de niveles de energía de estados de X^0 para el mismo QD. En los estados de excitón se ha indicado además el estado de hueco de la configuración dominante y la energía de enlace.

En la Figura 4.7 presentamos la dependencia de la energía de confinamiento y la energía de enlace del complejo X^0 con h_{QD} de aquellos estados asociados a los tres primeros niveles de energía, i.e. en los que participan los estados de hueco $1S_{3,A}$, $1S_{1,B}$ y $2P_{1,A-B}$. Ahora la energía de confinamiento será:

$$E_{\text{Conf}}^{X^0} = E_{X^0} - E_g, \quad (4.31)$$

donde E_g es la diferencia de energía entre el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia bajo la influencia del potencial interno (ver Ec. (3.57)). En el eje de abscisas superior hemos indicado el valor de E_g , de forma que sea posible determinar el valor absoluto de la energía del X^0 a partir de los valores mostrados en la gráfica. En el panel (a) se observa que la energía de confinamiento experimenta una variación de ~ 150 meV dentro del rango de tamaños estudiado. Recordemos que en ausencia de interacción Coulombiana esta variación resulta ser ~ 200 meV. La diferencia se debe a que la energía de enlace ΔX_0 del excitón tiene una variación de ~ 50 meV, como se puede comprobar en el panel (b) de la Figura.

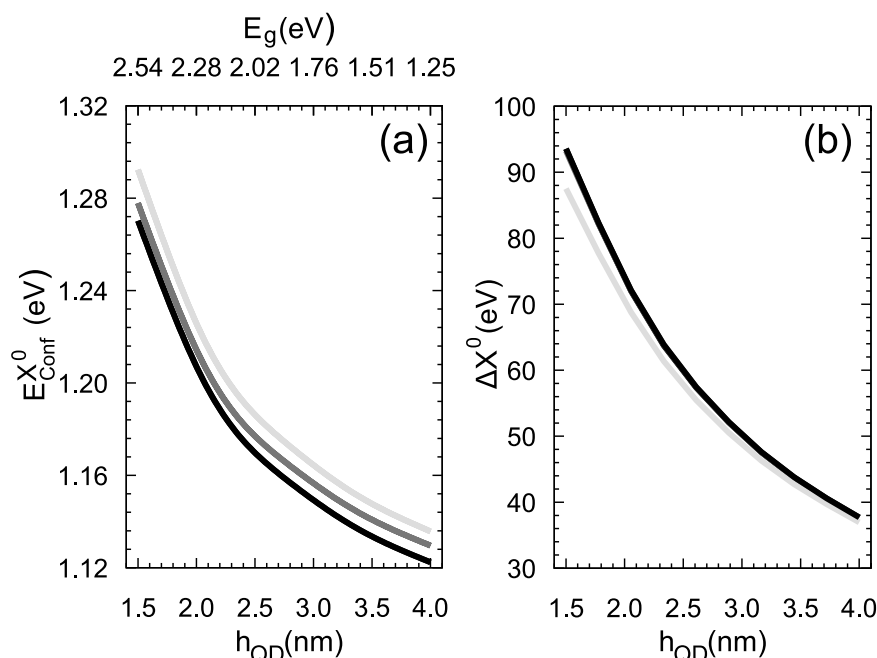


Figura 4.7: Energía (a) y energía de enlace (b) de los estados del complejo X^0 correspondientes a los tres primeros niveles de energía mostrados en la Figura 4.6.

La energía de enlace de los dos primeros estados excitónicos es aproximadamente igual (está superpuesta en la Fig. 4.7(b)). Este resultado es esperable pues, como vimos en la Figura 3.53, la distribución espacial de la densidad de probabilidad de los estados de hueco $1S_{3,A}$ y $1S_{1,B}$ era también aproximadamente igual. Esto hace que la interacción de Coulomb de estos dos estados de hueco con el estado de electrón $1S_1$ no presente diferencias apreciables. No ocurre lo mismo con la energía de enlace del tercer estado excitónico, que es menor a la de los otros estados debido a que la función de onda del estado de hueco $2P_{1,A-B}$ está menos localizada que las correspondientes a $1S_{3,A}$ y $1S_{1,B}$. En general, los estados de X^0 con energía de confinamiento mayor, exhiben una ΔX^0 menor.

El valor obtenido para ΔX^0 en el sistema GaN/AlN contrasta con los valores obtenidos en el sistema InAs/GaAs, que son significativamente menores a pesar de la presencia del potencial interno. El origen de este resultado radica en la localización de las funciones de onda, que es muy diferente en los dos sistemas. En la Figura 4.8 hemos representado la proyección en el eje Z de la densidad de probabilidad del electrón y el hueco correspondientes al QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm, panel (a), y al QD de InAs/GaAs de altura $h_{\text{QD}} = 2.0$ nm. La Figura revela la apreciable diferencia entre los regímenes de localización de los dos sistemas. Este resultado puede ser justificado por los siguientes argumentos:

- Las masas efectivas en el GaN son un orden de magnitud mayores que en el InAs.
- Los desalineamientos de las bandas en el GaN/AlN son mucho mayores que en el InAs/GaAs (ver Figuras 3.8 y 3.13).
- El potencial interno guarda una dependencia con ρ de tipo superlineal (ver Figura 2.44), que se traduce en una mayor localización de la función de onda en la región próxima al eje del QD.

Al igual que sucedía en el sistema InAs/GaAs, la energía de enlace del excitón disminuye monótonamente al aumentar el tamaño del QD. Esta reducción de ΔX^0 en función del tamaño podía ser atribuida a una menor localización de la función de onda de los estados o a la separación entre los centros de carga como en el sistema InAs/GaAs. Sin embargo, en la Figura 3.53 se puede comprobar que la distribución de la densidad de probabilidad de los estados de electrón y de hueco varía muy poco entre el QD con $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm y el QD con $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Por el contrario, la separación de los centros de carga sí que experimenta un apreciable incremento (véase también la Figura 3.56). De estos resultados se puede concluir que la reducción de ΔX^0 en función del tamaño del QD es atribuible fundamentalmente a la separación entre las cargas inducida por el potencial interno.

En la Figura 4.9 mostramos el efecto de la interacción de Coulomb en el espectro de absorción del mismo QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm que fue analizado en la Figura 3.54. Por completitud, hemos incluido en segundo plano y rellenado con un color más claro los espectros correspondientes al problema de una única partícula. Junto a cada resonancia hemos indicado el estado de excitón asociado y los estados de la configuración dominante. En el panel superior hemos representado la absorción debida a radiación polarizada en el plano de crecimiento (P_{\perp}) y en el panel inferior debida a radiación polarizada a lo largo de la dirección de crecimiento (P_{\parallel}). De la comparación de los espectros de absorción obtenidos por

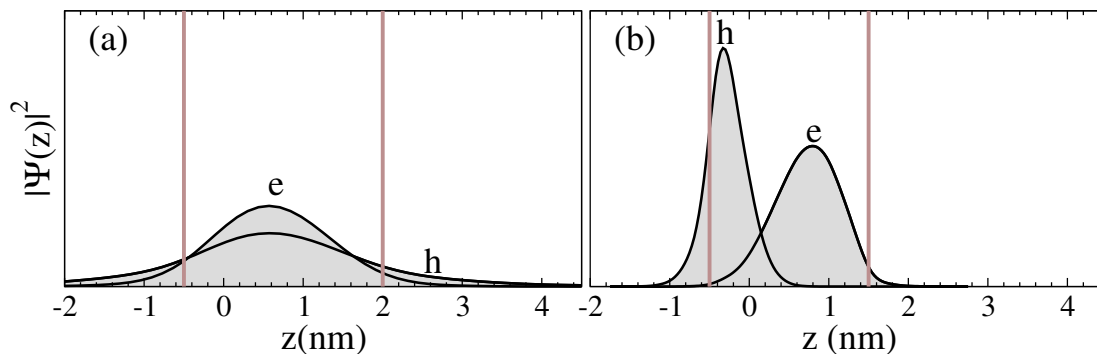


Figura 4.8: Proyección en el eje Z de la densidad de probabilidad del electrón y el hueco en su estado fundamental para un QD de GaN/AlN de $h_{\text{QD}} = 1.5$ nm (a) y para un QD de InAs/GaAs de $h_{\text{QD}} = 2.0$ nm (b). En las dos Figuras se ha empleado la misma escala en el eje de ordenadas.

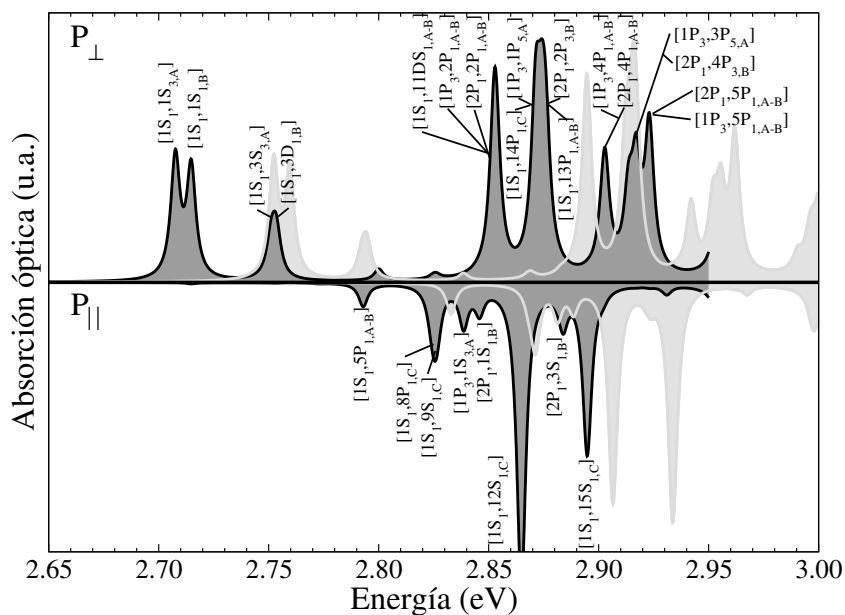


Figura 4.9: Espectro de absorción óptica correspondiente al QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.374$ nm. En el espectro mostrado en primer plano (color más oscuro) se ha contemplado la interacción de Coulomb. El espectro mostrado en segundo plano (color más claro) es el correspondiente a la aproximación de un única partícula (ver Fig. 3.54).

los dos modelos se desprende que la energía de enlace de los estados excitados del complejo X^0 es comparable a la estudiada para el estado fundamental ~ 40 meV. También resulta apreciable un incremento de la intensidad de las transiciones ópticas dentro del rango de energías estudiado. En general, la estructura de los espectros con y sin interacción de Coulomb guarda una mayor semejanza que en el sistema InAs/GaAs. Por consiguiente, salvo un error en la posición y en la intensidad de los picos, los resultados obtenidos en el Capítulo 3 resultan ser representativos de este tipo de nanoestructuras.

4.2.2. Estructura electrónica de los complejos $2X^0$ y $3X^0$

Ahora vamos a proceder al estudio de complejos excitónicos en los que interviene un número mayor de pares e-h. Sólo vamos a considerar aquellos con $N = 2$ (biexcitón) y $N = 3$ (triexcitón). Con el fin de representar de forma gráfica las diferentes etapas de la recombinación radiativa de un triexcitón, hemos realizado el esquema mostrado en la Figura 4.10. En el panel (a) hemos representado un esquema de niveles que representa de forma compacta la desintegración del complejo $3X^0$ a través de la generación de tres fotones. Una interpretación más detallada de este proceso ha sido representada en el panel (b). En primer lugar un estado de triexcitón $3X^0$ recombina a un estado biexcitónico liberando energía en forma de radiación (γ_1). En general, el estado final de este proceso no es el estado fundamental del biexcitón, por lo que existirá un proceso de termalización representado a través de una transición intrabanda. A continuación, el estado fundamental de biexcitón $2X^0$ recombina en un estado de excitón emitiendo radiación nuevamente (γ_2). Finalmente, la desintegración del estado fundamental de excitón X^0 emite un último fotón (γ_3) y el QD queda vacío. Con ello el sistema alcanza su estado fundamental $|0\rangle$. Esta descripción contiene algunas imprecisiones que iremos corrigiendo a lo largo de la Sección, pero estimamos que proporciona una idea intuitiva inicial para entender los resultados que mostraremos a continuación.

Resultados del sistema InAs/GaAs

En este apartado hemos realizado los cálculos numéricos considerando un QD de igual tamaño que el estudiado en apartados anteriores. En la Figura 4.11 mostramos los 13 estados del complejo $2X^0$ de menor energía. Todos los estados excepto el fundamental presentan una multiplicidad igual a dos. Los estados de la zona de baja energía del espectro del $2X^0$ presentan como configuraciones dominantes las combinaciones de estados de una única partícula indicadas en el

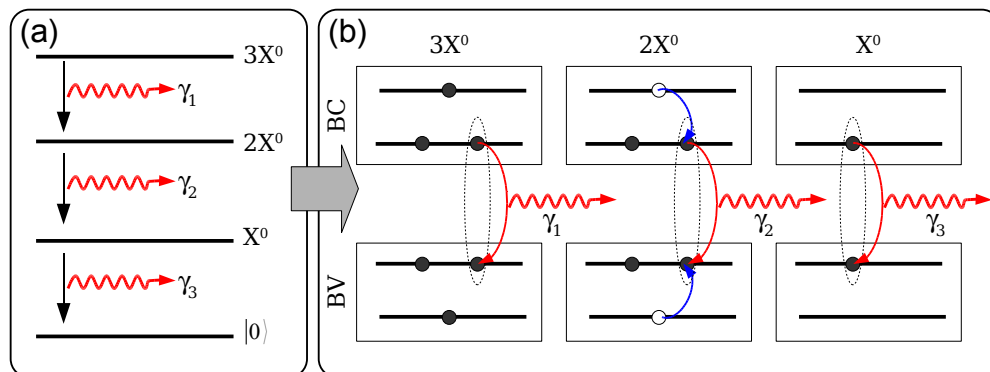


Figura 4.10: Proceso de desintegración radiativa de un triexcitón en el panel de la derecha. Las líneas discontinuas indican el par electrón hueco que se recombina dando lugar a un fotón. La flecha entre estados de una misma banda representa un proceso de termalización del complejo $2X^0$. El panel de la izquierda representa el mismo proceso mediante un diagrama de cuatro niveles.

panel izquierdo de la Figura. Los puntos sólidos indican qué estados están ocupados en todas las configuraciones, mientras que el punto blanco indica el estado cuya ocupación difiere. Por tanto, los dos electrones ocuparán los estados, $1S_{\pm 1}$ de la banda de conducción (BC), un hueco ocupará uno de los dos estados $1S_{\pm 3}$ de la banda de valencia (BV) y el segundo hueco podrá ocupar cualquiera de los otros estados indicados por puntos blancos en la Figura. Para identificar de forma compacta la configuración dominante de cada estado de biexcitón hemos indicado en el panel derecho el estado que ocupa este segundo hueco (columna derecha). La flecha situada sobre cada nivel de energía indica la orientación relativa de M^h de los estados de hueco, bien sea paralela o antiparalela.

En los estados estudiados hemos comprobado que la energía del complejo biexcitónico es menor cuando los estados de hueco ocupados se presentan en una configuración de M^h paralela. El análisis de los estados de una única partícula de huecos, revela que la orientación de j_z de la componente de Bloch de mayor peso coincide con la de M^h . El origen de este comportamiento está en la interacción de intercambio entre los estados de hueco, que resulta ser aproximadamente cero cuando la orientación relativa de M^h es antiparalela². Para ilustrar este punto analizaremos el término de repulsión hueco-hueco del Hamiltoniano (4.11) para dos configuraciones diferentes, una en la que la orientación de M^h es paralela,

²Sería exactamente cero en el caso de haber descrito los estados de una única partícula a través del modelo de una única banda desarrollado en la Sección 3.1

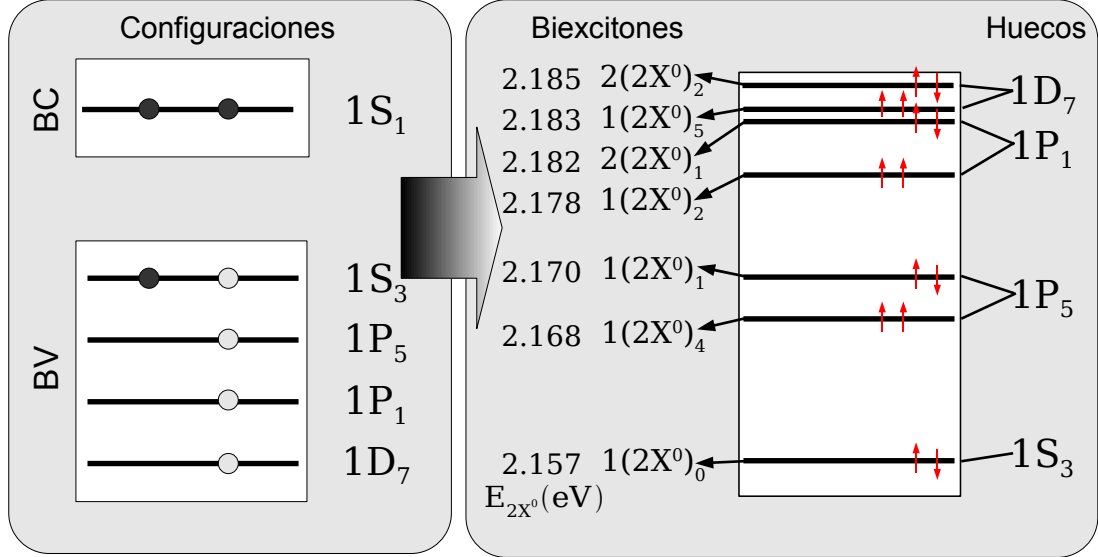


Figura 4.11: Esquema de las configuraciones dominantes de electrones y huecos (izquierda), que forman el conjunto de estados biexcitónicos de menor energía (derecha) para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm.

$|j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}\rangle$, y otra en la que es antiparalela, $|j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}\rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow} | H^{\text{hh}} | j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow} \rangle &= V_{j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}, j_{2\uparrow}, j_{1\uparrow}} - V_{j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}} \\
 &\quad + V_{j_{2\uparrow}, j_{1\uparrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}} - V_{j_{2\uparrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\uparrow}, j_{1\uparrow}}, \\
 \langle j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow} | H^{\text{hh}} | j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow} \rangle &= V_{j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}, j_{2\downarrow}, j_{1\uparrow}} - V_{j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}} \\
 &\quad + V_{j_{2\downarrow}, j_{1\uparrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}} - V_{j_{2\downarrow}, j_{1\uparrow}, j_{2\downarrow}, j_{1\uparrow}},
 \end{aligned}$$

donde hemos introducido \uparrow y \downarrow en el índice compuesto de los estados de una única partícula para indicar la orientación relativa de j_z correspondiente a la función de Bloch de la componente dominante. De la definición de la integral del potencial de Coulomb (ver Ec. (4.10)), de la ortogonalidad de las funciones de Bloch, y sabiendo que para este tamaño del QD de InAs/GaAs los estados de hueco tienen un carácter hh se puede inferir que los términos correspondientes a la interacción de intercambio (aquellos precedidos del signo menos) para el elemento de matriz de la configuración antiparalela serán muy pequeños.

El análisis de los resultados de la estructura electrónica del triexcitón $3X^0$ presenta una complejidad mayor, ya que ahora los efectos de correlación son más importantes. Por esta razón recurriremos a una descripción de carácter cualitativo. En la Figura 4.12 hemos realizado un esquema similar al presentado en la Figura

4.11. En el panel izquierdo hemos indicado las configuraciones de los electrones y los huecos que contribuyen a la estructura de niveles del triexcitón representada en el panel derecho. Dos electrones ocuparán el estado fundamental de la banda de conducción y el tercer electrón podrá ocupar cualquiera de los estados correspondientes a los dos primeros niveles de energía excitados $2P_1$ y $1P_3$, que están cuasi-degenerados, aunque en la representación no se aprecia el desdoblamiento³. Esta combinación de estados genera cuatro posibles configuraciones de electrones. Las configuraciones de huecos relevantes en la descripción de los estados de triexcitón de menor energía son más numerosas, pues la energía de cuantización es menor en la banda de valencia. Hemos seleccionado seis tipos diferentes de configuraciones. Las configuraciones están ordenadas según su energía en ausencia de interacción (ver Ec. (4.15)).

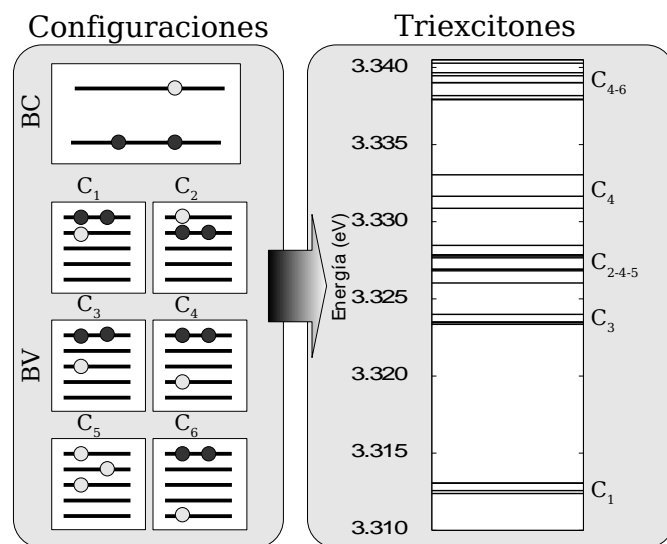


Figura 4.12: Esquema de las configuraciones dominantes de electrones y huecos (izquierda), que forman el conjunto de estados triexcitónicos de menor energía (derecha) para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm.

El estado fundamental del complejo $3X^0$ está compuesto principalmente por la configuración C_1 . Más arriba en energía encontramos los estados compuestos por configuraciones tipo C_3 . Por encima de este conjunto de estados aparece otro grupo que resultan del acoplamiento entre configuraciones C_2 con C_4 y C_5 . Aunque las configuraciones C_2 tienen menos energía que las C_3 en ausencia de interacción (menor de un meV), los estados del complejo $3X^0$ con componentes tipo C_2 aparecen a mayor energía debido a los efectos de correlación. Por último, encontramos

³En el QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm que estamos analizando el desdoblamiento entre los niveles de energía de los estados $2P_1$ y $1P_3$ es ~ 0.02 meV.

los estados $3X^0$ con configuraciones dominantes C_4 y C_4 con contribución de C_6 ($\sim 10 - 20\%$).

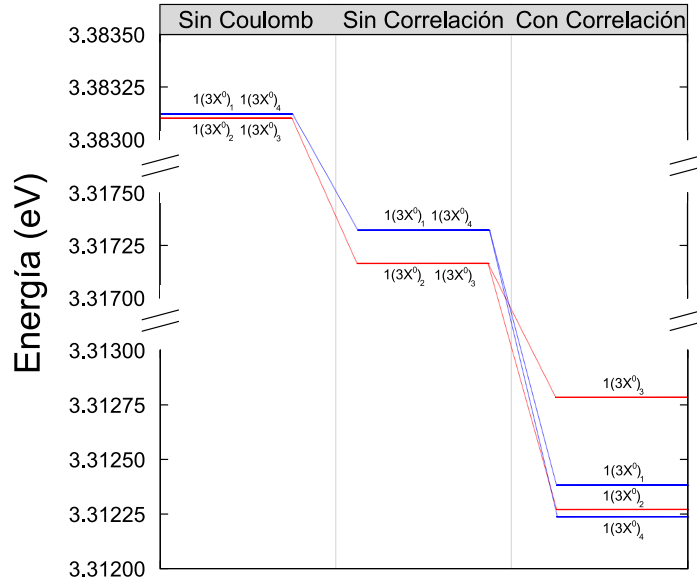


Figura 4.13: Estructura interna del nivel de energía fundamental del complejo $3X^0$ calculado sin incluir la interacción de Coulomb, con la interacción de Coulomb pero sin efectos de correlación (sin acoplamiento entre las configuraciones) y con efectos de correlación.

Como en los estados de más baja energía del complejo $3X^0$ la configuración dominante de los estados de valencia es C_1 (i.e. $1S_3, 1S_{-3}, 1P_{\pm 5}$), este conjunto de estados estará compuesto por ocho elementos:

$$\begin{aligned}
 1(3X^0)_{\pm 1} &\rightarrow [1S_1 1S_{-1} 1P_{\mp 3}, 1S_3 1S_{-3} 1P_{\pm 5}], \\
 1(3X^0)_{\pm 2} &\rightarrow [1S_1 1S_{-1} 2P_{\mp 1}, 1S_3 1S_{-3} 1P_{\pm 5}], \\
 1(3X^0)_{\pm 3} &\rightarrow [1S_1 1S_{-1} 2P_{\pm 1}, 1S_3 1S_{-3} 1P_{\pm 5}], \\
 1(3X^0)_{\pm 4} &\rightarrow [1S_1 1S_{-1} 1P_{\pm 3}, 1S_3 1S_{-3} 1P_{\pm 5}],
 \end{aligned}$$

donde la configuración dominante ha sido representada entre corchetes separando con una coma los tres estados de un única partícula de electrón de los de hueco. En la Figura 4.13 hemos representado el esquema de niveles correspondiente a este conjunto de estados considerando diferentes grados de aproximación. En primer lugar si no consideramos la interacción de Coulomb, se puede apreciar el doblete que resulta de la suma de las energías de los diferentes estados de electrón y de hueco de las configuraciones dominantes. La separación en energía del doblete tiene su origen en el desdoblamiento de los estados de electrón $1P_3$ y $2P_1$, que como ya hemos indicado, es 0.02 meV. Al introducir la interacción de Coulomb

sin considerar los efectos de correlación, i.e. despreciando el acoplamiento entre las configuraciones, la separación del doblete incrementa su valor llegando a ser igual a 0.159 meV. Finalmente, al contemplar el acoplamiento con el resto de configuraciones encontramos que cada uno de los niveles de energía antes descritos se desdobra, dando lugar a cuatro niveles de energía no degenerados. Los estados se reorganizan pasando a ser $1(3X^0)_4$ el estado fundamental y $1(3X^0)_2$ el de mayor energía. La separación entre estos dos estados es igual a 0.5 meV. Vemos entonces que, en el caso más general, únicamente prevalece la degeneración de inversión temporal, teniendo como único número cuántico la componente z del momento angular total M .

La diferencia energética entre las resonancias medidas en experimentos como el mostrado en la Figura 4.1(a) de los complejos $2X^0$ y X^0 se denomina energía de enlace del biexcitón. Establecer el análogo en nuestra formulación teórica no está exento de dificultades, pues la emisión de un complejo excitónico NX^0 (con $N > 1$) difiere cualitativamente respecto de la emisión excitónica. El estado final de la emisión del estado fundamental del complejo X^0 es el estado vacío $|0\rangle$, y éste es único. Por lo que el espectro de emisión mostrará un único pico. Por otra parte un complejo excitónico NX^0 en su estado fundamental se desintegra radiativamente en otro complejo $(N-1)X^0$, que tiene una estructura electrónica propia, de manera que el estado final no es único. Ello significa que en el espectro de emisión del estado de un complejo NX^0 se podrán, en principio, distinguir diferentes picos, con lo que la definición de energía de enlace presenta ambigüedad. En la práctica la emisión fundamental del complejo $2X^0$ presenta un pico dominante, por lo que es posible identificar su energía de enlace.

Con el fin de clarificar esta discusión hemos representado la emisión del estado fundamental del complejo $2X^0$, $1(2X^0)_0$, en la Figura 4.14. Como hemos considerado que la radiación emitida presenta polarización circular, los estados finales del complejo $2X^0$ serán estados del complejo X^0 con $|M| = 1$. Por otro lado, como ya mencionamos el espectro correspondiente al excitón en su estado fundamental presenta un único pico y ha sido representado también en la Figura indicado por X_0 . En la zona de baja energía hemos ampliado la intensidad de las resonancias debidas a diferentes estados finales de la emisión $2X^0 \rightarrow X^0$. Junto a cada resonancia hemos indicado el estado final excitónico. Si ahora nos preguntamos cuál es la energía de enlace del biexcitón, comprobamos que tal cuestión no está definida en sentido estricto. Sin embargo, debido a que la intensidad para la transición $1(2X^0)_0 \rightarrow 1(X^0)_1$ es varios órdenes de magnitud mayor que para el resto de transiciones, podemos redefinir la energía de enlace como la diferencia entre las

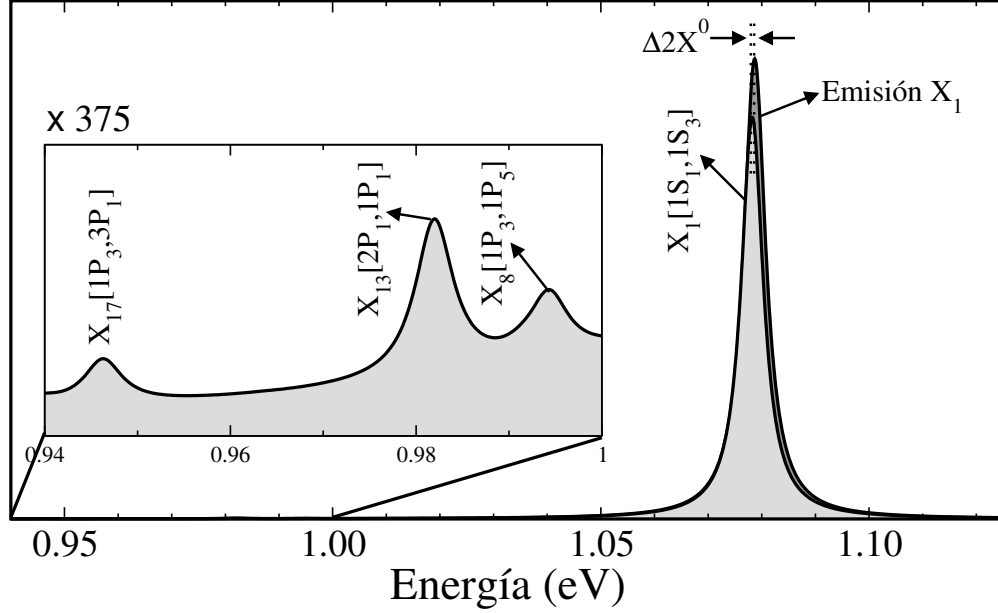


Figura 4.14: Emisión del estado fundamental de biexcitón y excitón. En la Figura insertada hemos ampliado la cola de baja energía de la emisión biexcitónica. En el espectro de biexcitón las etiquetas indican los estados finales del excitón remanente.

energías de las transiciones $1(2X^0)_0 \rightarrow 1(X^0)_1$ y $1(X^0)_1 \rightarrow |0\rangle$:

$$\Delta 2X^0 \equiv E_{1(X^0)_1 \rightarrow |0\rangle} - E_{1(2X^0)_0 \rightarrow 1(X^0)_1} \quad (4.32)$$

Si $\Delta 2X^0 > 0$ se dice que el biexcitón está ligado y si $\Delta 2X^0 < 0$ que no lo está. Esta denominación ha sido heredada de la física de sistemas 2D, i.e. pozos cuánticos, pues si la energía de estado fundamental de biexcitón es mayor que dos veces la del estado fundamental del excitón, entonces el complejo excitónico no es estable, i.e. resulta energéticamente favorable que los dos excitones que forman el biexcitón no estén ligados. En cambio, en la física de sistemas 0D el biexcitón “no ligado” es estable como consecuencia del confinamiento tridimensional.

La energía de enlace del biexcitón es una energía medible experimentalmente, al igual que la energía de transición excitónica. Ambas dependen de las propiedades de la nanoestructura, como puede ser el tamaño, la composición, etc Por consiguiente, una correcta comprensión de esas dependencias puede resultar de gran ayuda para obtener información adicional de las particularidades estructurales de los QD a partir de los espectros de luminiscencia. En la Tabla 4.1 hemos recopilado diferentes valores de $\Delta 2X^0$ publicadas en la bibliografía. Obsérvese que en la mayoría de los casos $\Delta 2X^0 > 0$.

Sistema	E_{X^0} (eV)	$\Delta 2X^0$ (meV)	T (K)	Referencia
InAs/GaAs	1.375	1.1	He líquido	[218]
U y A InAs/GaAs ^a	[1.360 : 1.400]	[-5.0:2.0]	~ 5	[219]
InAs/GaAs	[1.2 : 1.35]	[-6:1]	7	[220, 221]
In _{0.4} Ga _{0.6} As/GaAs	1.320	2.6	0.7	[222]
InGaAs/GaAs	1.345	2.0	10	[211]
InAs/GaAs	[1.297:1.336]	[1.41:3.24]	4	[223]
InAs/GaAs	1.375	3	-	[224]
InGaAs/GaAs	[1.05:1.4]	[2.5:3.7]	10	[225]
InAs/GaAs	1.342	-0.4	10	[226]
InAs/GaAs	1.232	4	70	[227]

^a U indica que la muestra no ha sido recocida (*unannealed*) y A que ha sido recocida (*annealed*).
 Tabla 4.1: Diferentes valores de la energía de enlace del biexcitón en sistemas tipo InAs/GaAs. $[E_1:E_2]$ representa un intervalo de energía entre E_1 y E_2 .

En la Figura 4.15 hemos representado la energía de enlace del complejo biexcitónico (Ec. (4.32)) para diferentes valores de h_{QD} . Vemos que cuando $h_{\text{QD}} \lesssim 6$ nm el estado $1(2X^0)_0$ se puede considerar ligado y para valores mayores aparece como no ligado. Esto significa que en los QDs de menor altura la atracción electrón-hueco es mayor que la suma de las repulsiones electrón-electrón y hueco-hueco. Este comportamiento puede ser entendido a partir del análisis de las funciones de onda de los estados de una única partícula realizado en la Figura 3.35. Allí vimos que la separación entre los centros de carga de los estados de electrón y de hueco aumentaba con la altura de la nanoestructura. También vimos en el estudio de los estados de excitón que dicha separación era responsable de la reducción de la energía de enlace de los estados excitónicos (veáse la Fig. 4.3). En el caso del biexcitón sucede algo parecido, pues al separarse los centros de carga de los estados que ocupan los electrones y los huecos se reduce la atracción electrón-hueco. Todo ello conduce a que la energía de enlace pase de ser positiva a negativa.

Vemos entonces que la dependencia del signo de $\Delta 2X^0$ con las propiedades geométricas de la nanoestructura puede servir para entender la dispersión de valores positivos y negativos hallada experimentalmente.

Resultados del sistema GaN/AlN

Empezaremos por estudiar la estructura electrónica de los estados de biexcitón de menor energía para un QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. En la Figura 4.16 hemos realizado un esquema similar al mostrado en la Figura 4.11 para el sistema InAs/GaAs. Hemos reducido el análisis a aquellos estados cuyas

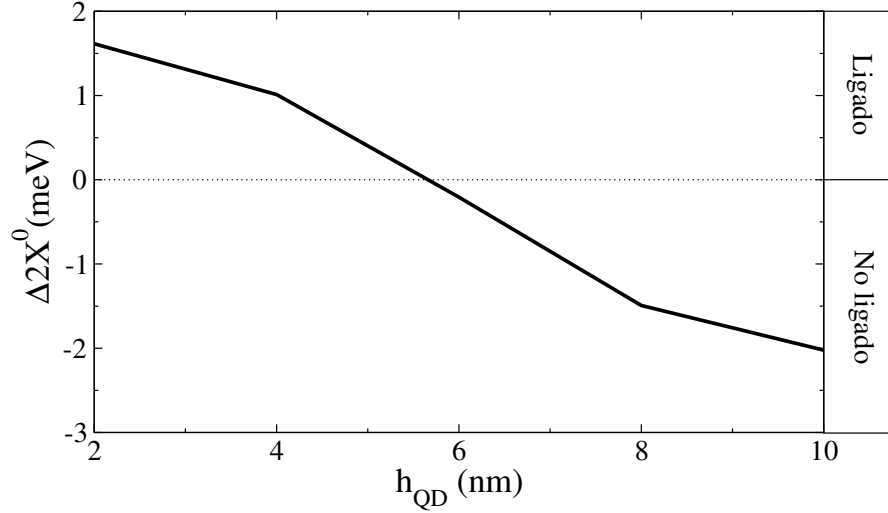


Figura 4.15: Energía de enlace del estado fundamental biexcitónico y triexcitónico en función de la altura del QD.

configuraciones dominantes están constituidas por los dos estados de electrón del nivel fundamental y por dos de los estados de hueco $1S_3$, $1S_1$ y $2P_1$. En el panel izquierdo de la Figura hemos representado gráficamente dichas configuraciones. En el panel derecho hemos indicado los estados biexcitónicos obtenidos del cálculo. A diferencia de lo que sucedía en el sistema InAs/GaAs, el acoplamiento entre las configuraciones es muy importante incluso en la construcción del estado fundamental. Muestra de ello es el hecho de que ningún estado presenta una configuración con un peso superior a un 80 %. La suma de los porcentajes no llega al 100 %, porque no hemos incluido en el análisis, aunque sí en el cálculo, configuraciones en las que participen estados de hueco diferentes a los antes mencionados.

La razón por la cual el acoplamiento entre las configuraciones es tan grande en este sistema radica en la importante mezcla entre las funciones de Bloch de los estados de hueco de una única partícula (véase la Figura 3.31). En el sistema InAs/GaAs también se observa esta mezcla de configuraciones (no mostrado) cuando el acoplamiento entre las bandas hh y lh es importante, como es el caso del QD con $h_{\text{QD}} = 10$ nm (ver Figura 3.36).

La estructura electrónica del complejo $3X^0$ resulta complicada de estudiar, como sucedía en el sistema InAs/GaAs. En la Figura 4.17 hemos realizado una representación de los niveles de energía de este complejo excitónico. El rango de energías cubierto se reduce a unos 12 meV, porque para energías más altas el número de estados crece muy rápidamente. En el panel izquierdo hemos representado las configuraciones que son relevantes para la descripción de los estados

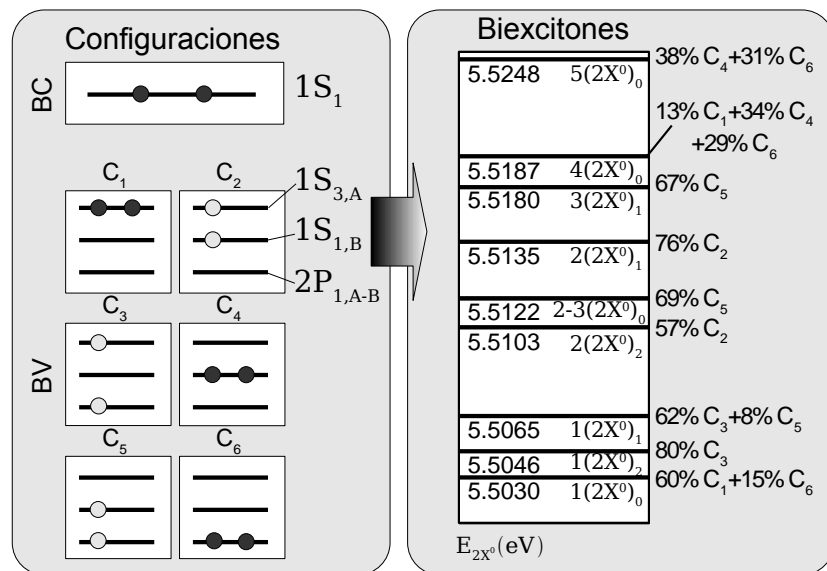


Figura 4.16: Esquema de las configuraciones dominantes de electrones y huecos (izquierda), que forman el conjunto de estados biexcitónicos de menor energía (derecha) para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm.

mostrados en la Figura. Las configuraciones mostradas junto a cada estado en el panel derecho son las dominantes y tienen un peso comprendido entre un 50 % y un 60 %. El resto de configuraciones que participan en la construcción de los estados tienen una energía mayor y no han sido consideradas en el análisis. Vemos entonces que el peso de las configuraciones de mayor energía aumenta a medida que el número de partículas que constituyen el complejo excitónico se incrementa. Es curioso observar que las configuraciones C₁ y C₃ no participan en la construcción de los estados analizados, aunque sí que lo hacen en estados más excitados con un peso de ~ 40 %. Aunque este comportamiento resulte aparentemente anómalo, su explicación es fácil de entender. Como es bien sabido, la energía de un estado excitónico se puede describir, en primera aproximación, como el balance entre tres contribuciones: la atracción electrón-hueco, la repulsión electrón-electrón y la repulsión hueco-hueco. En las configuraciones consideradas en la Figura 4.17 tenemos que la repulsión electrón-electrón es aproximadamente igual en todos los casos, únicamente existe una pequeña diferencia dependiendo de qué estado de electrón, $1P_3$ ó $2P_1$, participe en su construcción. Falta entonces por determinar si la repulsión hueco-hueco o la atracción electrón-hueco es responsable de que la energía de los estados triexcitónicos con la configuración dominante C₂, C₄, y C₅ sea menor que la correspondiente a aquellos dominados por las configuraciones C₁ y C₃. Para dirimir esta cuestión hemos reproducido en la Tabla 4.2.2 el valor espera-

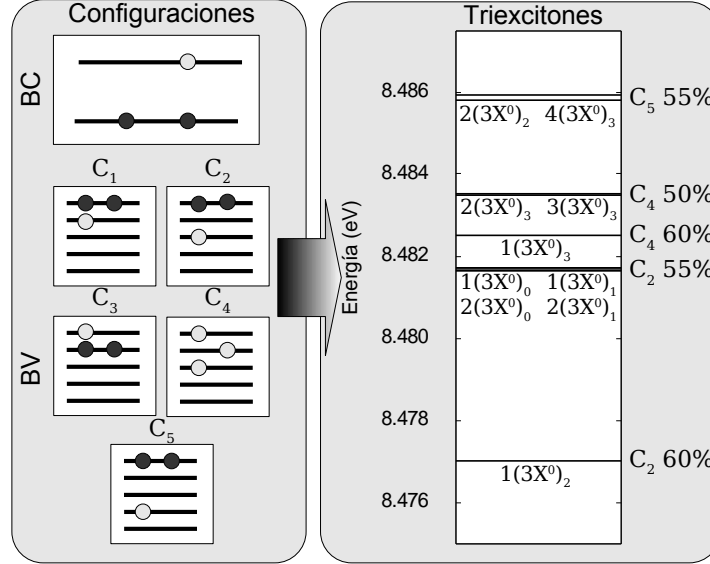


Figura 4.17: Esquema de las configuraciones dominantes de electrones y huecos (izquierda), que forman el conjunto de estados triexcitónicos de menor energía (derecha) para un QD de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm.

do de los Hamiltonianos H^{hh} y H^{eh} para las cinco configuraciones ya mencionadas. Como se puede deducir por inspección de la Tabla, la atracción electrón-hueco es aproximadamente constante en todas las configuraciones aquí contempladas. En cambio, la repulsión hueco-hueco es máxima para C_1 y C_3 . Las configuraciones C_1 y C_3 están compuestas únicamente por los estados de hueco $1S_{3,A}$ y $1S_{1,B}$, mientras que en el resto participan los estados $2P_{1,A-B}$ y $1P_{5,A}$. Resulta entonces razonable que la repulsión sea más intensa en configuraciones en las que únicamente participan estados de tipo S , que en aquellas en las que participan estados S y P . En el sistema InAs/GaAs esto no sucede, pues la estructura electrónica de la banda de valencia del QD no presenta estados tipo S tan próximos en energía.

Configuración $ l\rangle$	$\langle l H^{\text{hh}} l\rangle$ (eV)	$\langle l H^{\text{eh}} l\rangle$ (eV)
C_1	38.9	24.4
C_2	34.9	24.2
C_3	38.9	24.4
C_4	35.6	24.2
C_5	31.0	23.9

Tabla 4.2: Energía de repulsión hueco-hueco y de atracción electrón-electrón para las diferentes configuraciones descritas en la Figura 4.17.

A continuación vamos a estudiar la emisión de los complejos excitónicos neutros

$2X^0$ y $3X^0$. El estudio de la energía de emisión de estos complejos es particularmente interesante en los QDs basados en nitruros del grupo III pues en un complejo excitónico NX^0 , con $N > 1$, estaremos contemplando una situación en la cual N electrones y N huecos se hayan confinados en el interior de la nanoestructura. Debido al campo creado por estas partículas, el campo interno se verá apantallado y, por consiguiente, la emisión se desplazará hacia el azul. En la Figura 4.18 hemos representado los espectros de emisión de $1(X^0)_1$, $1(2X^0)_0$ y $1(3X^0)_2$. Los estados finales también han sido etiquetados y más adelante discutiremos su estructura interna.

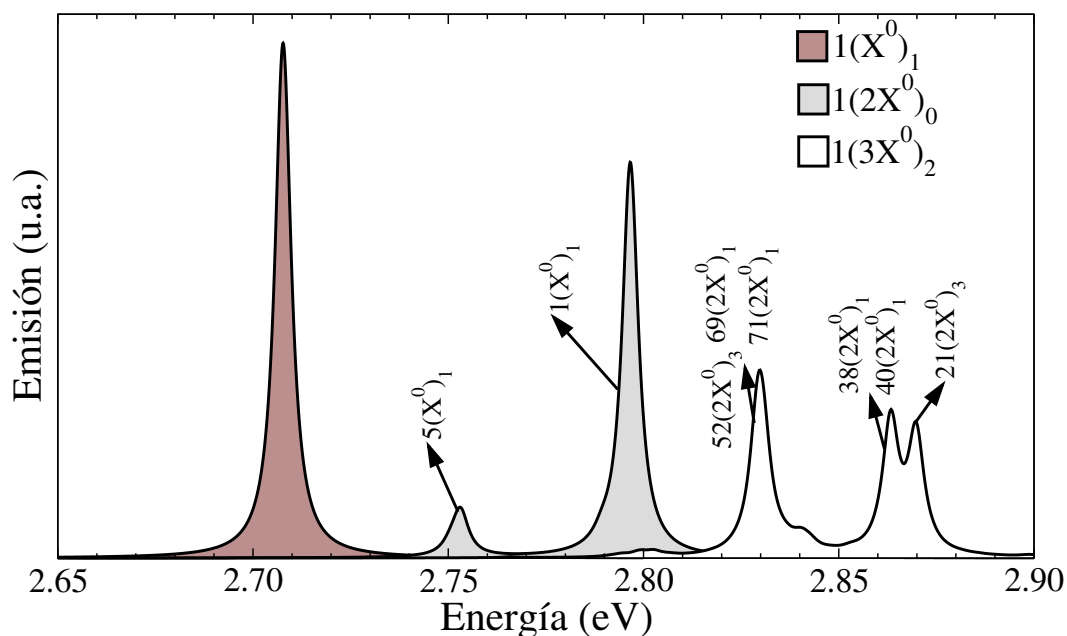


Figura 4.18: Emisión de los estados fundamentales de los complejos excitónicos en un QD de GaN/AlN.

A medida que el número de pares electrón-hueco aumenta, también lo hace la energía de emisión. También es importante destacar que la emisión del estado $1(2X^0)_0$ presenta dos resonancias apreciables. En el sistema InAs/GaAs vimos que la recombinación a estados excitados del complejo X^0 era despreciable (ver Fig. 4.14). La configuración dominante del estado $1(2X^0)_0$ es $[1S_1 1S_{-1}, 1S_{3,A} 1S_{-3,A}]$, y la correspondiente a los estados finales $1(X^0)_1$ y $5(X^0)_1$ son $[1S_1, 1S_{3,A}]$ y $[1S_1, 3S_{3,A}]$, respectivamente. Mientras que la transición $1(2X^0)_0 \rightarrow 1(X^0)_1$ se puede entender en términos de la recombinación de un excitón $[1S_1, 1S_{3,A}]$, para la transición $1(2X^0)_0 \rightarrow 5(X^0)_1$ es preciso tener en cuenta que el estado $1(2X^0)_0$ presenta una contribución de un 6% de la configuración $[1S_1 1S_{-1}, 1S_{3,A} 3S_{-3,A}]$. Por consigu-

iente, también se puede decir que el pico está asociado a la recombinación del estado excitónico $[1S_1, 1S_{3,A}]$.

En la emisión del estado $1(3X^0)_2$ los efectos de correlación son más importantes. La configuración dominante de baja energía de este estado es $[1S_1 1S_{-1} 1P_3, 1S_{3,A} 1S_{-3,A} 2P_{1,A-B}]$. Todos los estados finales de biexcitón indicados en la gráfica, presentan la configuración $[1S_1 1P_3, 1S_{3,A} 2P_{1,A-B}]$ dentro de su estructura interna. Al comparar con el estado inicial, comprobamos que aquí también se puede considerar que los picos proceden de la recombinación de un par $[1S_1, 1S_{3,A}]$.

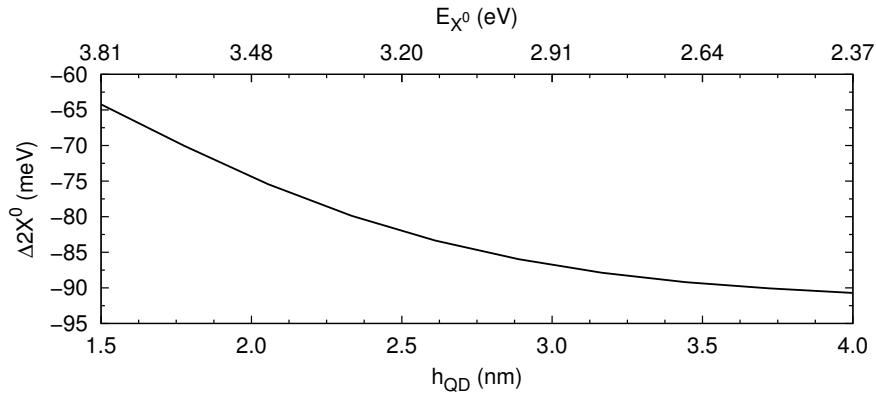


Figura 4.19: Energía de enlace del estado fundamental del complejo $2X^0$.

En la Figura 4.19 hemos representado la energía de enlace del estado fundamental del complejo $2X^0$ en función de la altura del QD. Comparando los resultados de este sistema con los del InAs/GaAs, vemos que esta energía resulta ser siempre negativa y hasta dos ordenes de magnitud mayor. Únicamente tenemos constancia de un trabajo en el que se ha medido la emisión de un biexcitón en un experimento de fotoluminiscencia de un único QD de GaN/AlN crecido en la dirección $[0001]$, S. Kako *et al.* [57]. El valor publicado de la energía de enlace es igual a -30 meV. Cualitativamente hemos encontrado un claro acuerdo entre la teoría y el experimento: al aumentar la potencia de excitación, aumenta el número de pares confinados en el QD, estos apantallan el campo interno y la emisión se desplaza hacia el azul. Sin embargo, el valor medido por S. Kako *et al.* es menor (en valor absoluto) que los mostrados en la Figura 4.19. No debe extrañar este desacuerdo, pues ya vimos en la Figura 3.57 que tampoco se encontraba un buen acuerdo con la energía de transición.

Por otro lado, es posible encontrar en la bibliografía estudios de fotoluminiscencia en configuración macroscópica en función de la potencia de excitación. En todos los casos se observa efectivamente un corrimiento hacia el azul del espectro

de emisión y el origen de tal desplazamiento se asocia al apantallamiento de los portadores fotogenerados. A modo de ejemplo, recogemos los resultados obtenidos en tres trabajos diferentes:

- F. Widmann *et al.* [53] midieron un desplazamiento de ~ 70 meV al pasar de 60 W/cm^2 a 450 W/cm^2 . La energía de emisión a baja potencia estaba localizada en ~ 2.9 eV.
- S. Kalliakos *et al.* [61] midieron en tres muestras diferentes con energía de emisión 2.35 eV, 2.57 eV y 2.76 eV unos desplazamientos de 370 meV, 200 meV y 200 meV respectivamente. En este experimento se cubrió un rango de potencias comprendido entre 1 y 10^3 W/cm^2 .
- N. Garro *et al.* [63] encontraron un desplazamiento igual a ~ 150 meV al aumentar la potencia de 1 W/cm^2 a 100 W/cm^2 . En este experimento la emisión a baja potencia estaba centrada en 2.5 eV.

De la comparación de los diferentes resultados experimentales se puede establecer que el corrimiento es mayor cuanto menor es la energía de emisión a baja potencia. Aunque no hemos hecho una modelización específica de este tipo de experimentos, esta conclusión concuerda cualitativamente con el comportamiento mostrado en la Figura 4.19. Además, los desplazamientos reportados en [53] y [63] son comparables a los valores que hemos encontrado para las energías de enlace. Esta explicación del desplazamiento de la emisión con la potencia ha sido invocada en la práctica totalidad de los artículos experimentales que han tratado este problema. Sin embargo, en este trabajo hemos presentado la primera discusión teórica basada en un modelo realista tanto del QD como de las correlaciones entre electrones y huecos.

4.3. Estructura electrónica de los complejos excitónicos cargados

Cuando el estado fundamental de un QD ya no se corresponde con el estado vacío $|0\rangle$, sino que representa el estado fundamental de N_e electrones, o N_h huecos, se dice que tal QD se encuentra cargado. La estructura electrónica de los complejos excitónicos confinados en su interior se verá perturbada por la presencia de estas cargas *residuales*. En la literatura especializada se denomina a estas excitaciones como *complejos excitónicos cargados*. En este apartado únicamente estudiaremos la estructura electrónica de los complejos X^{1-} y X^{2-} , dejando para un trabajo

futuro aquellos complejos con carga positiva. En la Figura 4.1(b), que fue descrita en la introducción de este Capítulo, es posible apreciar cómo la energía de emisión de un único QD puede ser controlada a través de un voltaje que permite fijar el estado de carga de la nanoestructura. Allí se puede apreciar cómo la energía de emisión se desplaza hacia el rojo al aumentar el voltaje al que está sometida la muestra, o lo que es igual, al incrementar el número de electrones confinados en el QD.

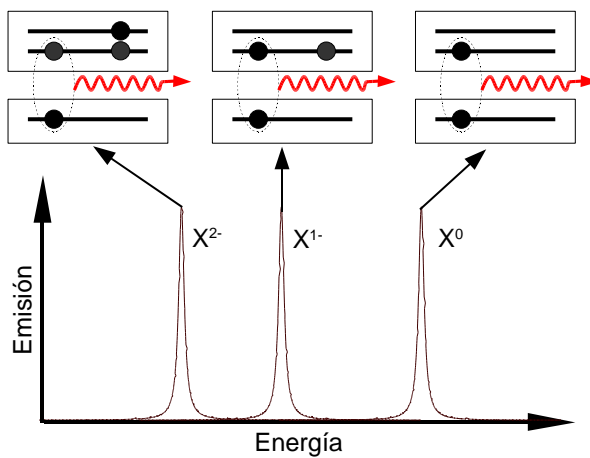


Figura 4.20: Esquema de la emisión de un QD descargado (X^0) y de un QD cargado con un electrón (X^{1-}) y con dos electrones (X^{2-}).

En la Figura 4.20 hemos representado esquemáticamente una descripción de los diferentes procesos de emisión que se dan cuando el QD no alberga ningún electrón residual en su interior (X^0) y cuando está cargado con uno (X^{1-}) y dos electrones (X^{2-}). En la representación hemos considerado que la emisión del complejo X^{1-} se produce a una energía menor que la emisión del complejo X^0 , tal y como sucedía en la Figura 4.1(b). Ello significa que la interacción entre el hueco y los electrones es más fuerte que la repulsión entre los electrones. El desplazamiento hacia el rojo de los picos asociados a los complejos X^{1-} y X^{2-} respecto del pico asociado al complejo X^0 es característico de los QDs tipo InAs/GaAs, aunque no tiene un carácter universal. Más adelante veremos que dicho desplazamiento depende del tamaño de la nanoestructura.

Experimentalmente existen diferentes métodos para poder observar este tipo de complejos excitónicos, que se pueden agrupar en tres grupos:

1. Fotoexcitación en resonancia con la WL o con la barrera. Debido a los diferentes tiempos de captura en el QD de los dos tipos de portadores es posible

- observar excitones cargados junto con otro tipo de complejos excitónicos [211].
2. Experimentos ópticos en dispositivo de ajuste de carga. La muestra de QDs se sitúa en el seno de un dispositivo que permite ajustar el número de portadores confinados en el interior del QD mediante un voltaje [29, 210].
 3. Experimentos ópticos en sistemas dopados. En este tipo de técnicas se emplean semiconductores extrínsecos que proveen de portadores a la nanoestructura [228].

A continuación estudiaremos la estructura electrónica de los complejos excitónicos con uno y dos electrones en exceso, i.e. X^{1-} y X^{2-} en QDs de InAs/GaAs y GaN/AlN.

4.3.1. Estructura electrónica de los complejos X^{1-} y X^{2-}

En la descripción de este tipo de complejos excitónicos resulta útil repasar previamente el problema de un sistema con dos electrones confinados. Por una parte, la estructura electrónica del complejo X^{1-} puede ser descrita como la de un sistema de dos electrones junto con la corrección introducida por la interacción de un hueco que ocupa un estado de la banda de valencia. Por otra parte, en el estudio del espectro de emisión del complejo X^{2-} es preciso conocer el estado final tras el proceso de recombinación que vendrá descrito por un estado del sistema compuesto por dos electrones.

Aunque el problema de dos electrones confinados ha sido estudiado extensivamente en los libros de texto de mecánica cuántica para el estudio de la estructura electrónica del átomo de helio [92], a continuación reproduciremos los principales resultados empleando el formalismo descrito en la Sección 4.1. A diferencia de los estados de hueco, los estados de electrón presentan, en general, una contribución mayor de un 90 % de una componente de Bloch determinada, $|S \uparrow\rangle$ ó $|S \downarrow\rangle$. Por consiguiente, podemos considerar que los electrones tienen, en primera aproximación, una componente z de spin, s_z , bien definida. Únicamente vamos a considerar los estados de menor energía, que pueden ser descritos a través de configuraciones en las que un primer electrón ocupa un estado de la capa s y el segundo puede ocupar uno de la capa s o de la capa p . Para simplificar el análisis consideraremos que el índice compuesto i empleado hasta ahora para etiquetar los estados de electrón puede descomponerse en dos índices auxiliares: uno para identificar la parte espacial de la función de onda, (s ó p), y otro para indicar la parte dependiente del

spin (\uparrow ó \downarrow). Según lo expuesto, únicamente cinco configuraciones son necesarias para describir los estados de dos electrones de menor energía y pueden escribirse como:

$$|1\rangle = |s \uparrow s \downarrow\rangle, |2\rangle = |s \uparrow p \uparrow\rangle, |3\rangle = |s \uparrow p \downarrow\rangle, |4\rangle = |s \downarrow p \uparrow\rangle, |5\rangle = |s \downarrow p \downarrow\rangle.$$

El Hamiltoniano $H = H^c + H^{cc}$ queda expresado matricialmente en el conjunto de configuraciones $\{|l\rangle, l = 1, \dots, 5\}$ según:

$$H \equiv \begin{pmatrix} 2E_s + E_{ss}^C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{sp} + E_{sp}^C & -E_{sp}^X & 0 \\ 0 & 0 & -E_{sp}^X & E_{sp} + E_{sp}^C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

donde $E_{sp} = E_s + E_p$, siendo E_s y E_p las energías correspondientes a los estado de una única partícula. Las energías E^C y E^X representan el término de Coulomb directo y de intercambio definido para una configuración general $|i_1 i_2\rangle$ como:

$$E^C = V_{i_1, i_2, i_2, i_1},$$

$$E^X = V_{i_1, i_2, i_1, i_2}.$$

Dependiendo de la parte espacial de los estados que constituyen las configuraciones hemos distinguido entre los términos E_{ss}^C , E_{sp}^C y E_{sp}^X . La diagonalización del Hamiltoniano (4.33) se realiza trivialmente, obteniendo los siguientes autovalores y autovectores:

$$E_1 = 2E_s + E_{ss}^C, \quad \longleftrightarrow \quad |\Phi_1\rangle = |1\rangle, \quad (4.34a)$$

$$E_2 = E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X, \quad \longleftrightarrow \quad |\Phi_2\rangle = |2\rangle, \quad (4.34b)$$

$$E_3 = E_{sp} + E_{sp}^C + E_{sp}^X, \quad \longleftrightarrow \quad |\Phi_3\rangle = \frac{1}{2}(|3\rangle - |4\rangle), \quad (4.34c)$$

$$E_4 = E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X, \quad \longleftrightarrow \quad |\Phi_4\rangle = \frac{1}{2}(|3\rangle + |4\rangle), \quad (4.34d)$$

$$E_5 = E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X, \quad \longleftrightarrow \quad |\Phi_5\rangle = |5\rangle. \quad (4.34e)$$

Las funciones de onda se obtienen a partir de la Ec. (4.16). Como se puede apreciar a partir de los autovalores, las soluciones de este sistema para los estados excitados se presentan en forma de un *triplete* ($|\Phi_2\rangle, |\Phi_4\rangle$, y $|\Phi_5\rangle$) con energía $E_{sp} + E_{sp}^C - E_{sp}^X$, y un *singlete* ($|\Phi_3\rangle$) con energía $E_{sp} + E_{sp}^C + E_{sp}^X$, separados en energía $2E_X$. Este conjunto de soluciones podría haber sido obtenido de forma directa transformando

la base de configuraciones $|l\rangle$ en una de spin total bien definido [92].

Para simplificar la resolución y análisis del problema hemos considerado que los estados de la capa p estaban doblemente degenerados. Sabemos que en un QD real la capa p esta compuesta por cuatro estados cuasi-degenerados. Por consiguiente, en tanto en cuanto el spin pueda ser considerado un buen número cuántico, el esquema general de las soluciones obtenidas en las Ecs. (4.34) seguirá siendo válido, aunque la multiplicidad de cada estado será doble. Para validar estas afirmaciones, hemos representado en la Figura 4.21 la solución exacta que se obtiene utilizando el formalismo de la Sección 4.1 para los estados de menor energía del sistema constituido por dos electrones confinados en un QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. En esta Figura las configuraciones han sido identificadas mediante la notación completa de los estados de una única partícula, donde además hemos escrito explícitamente su orientación de spin. Como se puede apreciar en la Figura, el esquema sencillo de las Ecs. (4.34) reproduce con excelente aproximación la estructura electrónica real de dos electrones confinados en el interior del QD. La separación entre los estados triplete y single es ~ 35 meV, lo que significa que la interacción de intercambio entre las configuraciones implicadas para este QD es $E_X \approx 17.5$ meV. La separación entre el estado de triplete y el estado fundamental es ~ 100 meV. Dado que las energías de cuantización de los estados de hueco en este QD son ~ 10 meV, podemos adelantar que en los estados de menor energía del complejo X^{1-} participará la configuración dominante de dos electrones $[1S_1 1S_{-1}]$. En el InAs/GaAs hemos obtenido unos resultados cualitativamente iguales aunque en un rango de energías diferentes, razón por la cual hemos optado por no mostrarlos.

Resultados del sistema InAs/GaAs

En la Figura 4.22 mostramos el esquema de niveles correspondiente a la estructura electrónica del complejo X^{1-} en el QD de altura $h_{\text{QD}} = 4.0$ nm. Las configuraciones dominantes de los estados del complejo X^{1-} pueden ser deducidas a partir de la estructura electrónica del excitón mostrada en la Figura 4.2: Los dos electrones ocupan el estado fundamental y el hueco ocupa uno de los estados de valencia. De la comparación de las Figuras 4.22 y 4.2 se puede inferir que el electrón en exceso no modifica sustancialmente el esquema de niveles excitónico. Cuantitativamente hemos comprobado que la separación entre niveles experimentales incrementos y reducciones. Por ejemplo, entre los estados $1(X^{1-})_3$ y $1(X^{1-})_5$ el incremento es de ~ 4 meV, y entre los estados $1(X^{1-})_7$ y $2(X^{1-})_3$ la reducción es de ~ 2 meV.

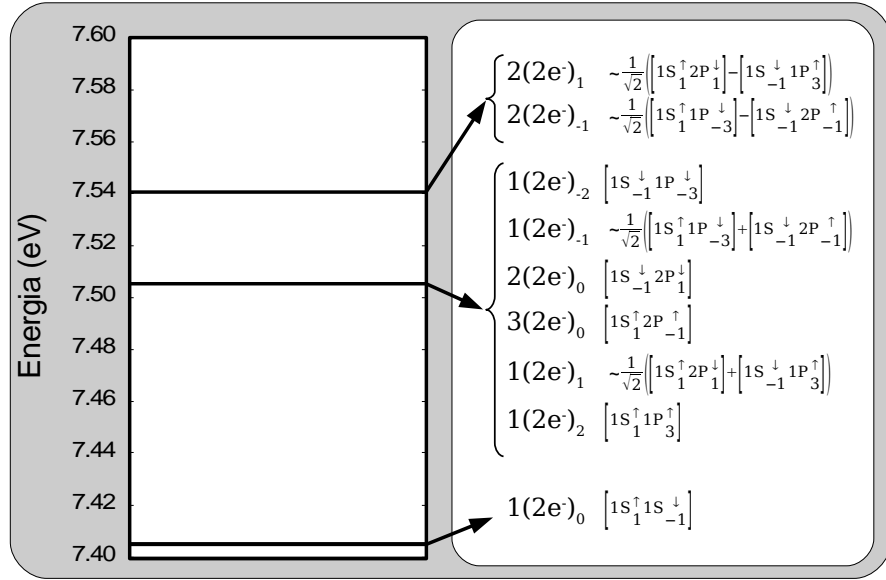


Figura 4.21: Estados de menor energía correspondientes a dos electrones confinados en el QD de GaN/AlN de altura $h_{\text{QD}} = 3.375$ nm. Hemos extendido la notación de los estados de una única partícula para contemplar la orientación del spin. Los estados de dos electrones han sido etiquetados empleando la misma notación introducida para los complejos excitónicos.

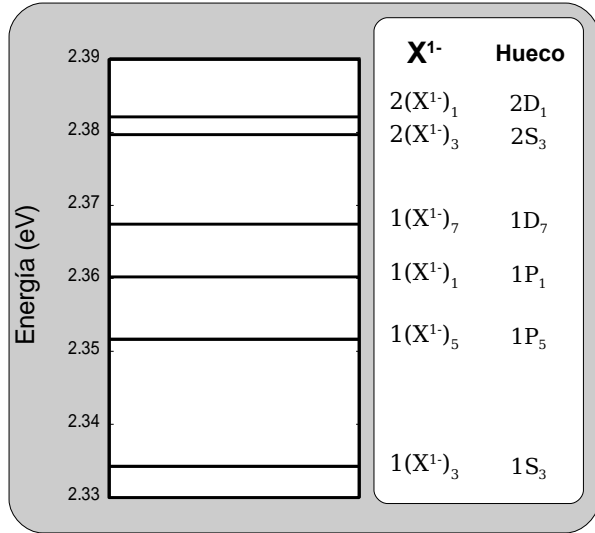


Figura 4.22: Esquema de niveles de los estados de menor energía del complejo excitónico X^{1-} confinado en un QD de InAs/GaAs de altura $h_{\text{QD}} = 4.0$ nm.

Para realizar el estudio de las propiedades ópticas del X^{1-} nos hemos fijado en el espectro de absorción. La pregunta que queremos responder es cómo se modifican las propiedades ópticas al tener un electrón de exceso en el QD que ocupa el estado fundamental. Para responder a esta cuestión, debemos considerar el estado fundamental del electrón $1S_1$ ocupado como estado inicial, y los estados del complejo X^{1-} como estados finales del proceso de absorción. Sin embargo, debido a la degeneración de inversión temporal el electrón inicialmente podrá ocupar con la misma probabilidad el estado con $M^e = +1$ ó $M^e = -1$. En consecuencia, el espectro que se obtiene de promediar sobre los dos estados iniciales $1S_1$ y $1S_{-1}$, donde ahora hemos indicado el signo de M^e explícitamente:

$$\alpha^{X^{1-}}(E) = \frac{1}{2} \sum_{i_1=1}^2 \alpha_{i_1}^{X^{1-}}(E), \quad (4.35)$$

representando i_1 el estado de electrón inicial. En la Figura 4.23 hemos representado este espectro de absorción junto con el espectro de absorción del complejo X^0 . La primera diferencia destacable entre ambos espectros es la reducción de un $\sim 50\%$ de la intensidad del pico asociado a la transición fundamental, que tiene su origen en la ocupación del estado de electrón $1S_1$ ó $1S_{-1}$. Por otra parte, vemos que la intensidad asociada a estados excitados apenas se ve perturbada por la presencia de electrón residual. Este comportamiento ha sido observado experimentalmente en la Ref. [183], donde C. S. Dürre *et al.* midieron el espectro de transmisión en un QD inmerso en un dispositivo de acoplamiento de carga. En la Fig. 2 de la misma referencia se puede apreciar como la transmisión en el entorno de la energía de la transición fundamental se reduce aproximadamente a la mitad el voltaje aplicado, coincidiendo con la inyección de un electrón en el interior del QD.

En la Figura 4.1(b) también vimos que la emisión del complejo X^{1-} se observa desplazada hacia el rojo respecto a la emisión del complejo X^0 . Esta diferencia de energía también es conocida en la literatura como energía de enlace, de forma análoga al caso del complejo $2X^0$. Por consiguiente, puede ser definida como:

$$\Delta X^{1-} = E_{1(X^0)_1 \rightarrow |0\rangle} - E_{1(X^{1-})_3 \rightarrow 1S_1}. \quad (4.36)$$

En la bibliografía se pueden encontrar valores para este desplazamiento que oscilan entre 3.1 y 5.8 meV [229]. En el espectro mostrado en la Figura 4.23 se observa que $\Delta X^{1-} \sim 0$ meV. En la Figura insertada hemos representado el valor de ΔX^{1-} en función de la altura de la nanoestructura. Vemos que ΔX^{1-} pasa de ser positiva a negativa al aumentar la altura del QD por encima de 4 nm. Este comportamiento tiene su origen en la separación de los centros de carga de los estados de electrón

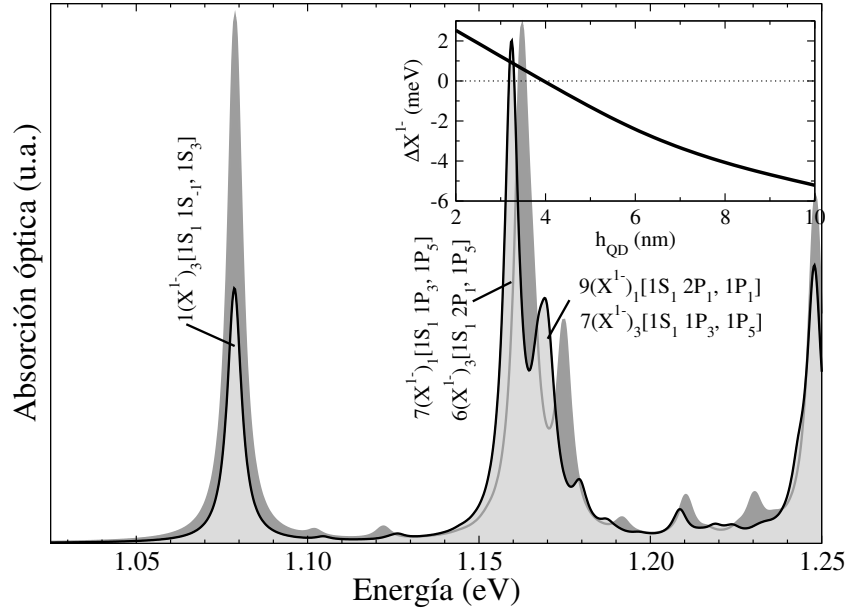


Figura 4.23: Espectro de absorción del complejo X^{1-} en un QD de InAs/GaAs de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm. La curva con un sombreado más intenso corresponde al espectro de absorción del complejo X^0 . En la Figura insertada se ha representado la energía de enlace ΔX^{1-} en función de la altura del QD.

y de hueco, y, por consiguiente, en la reducción de la atracción electrón-hueco al aumentar h_{QD} . Al comparar con los resultados experimentales encontramos que aún para el caso del QD de menor altura, el valor teórico está lejos de los hallados experimentalmente. Esta discrepancia se ha aducido como evidencia de la necesidad de considerar una cierta difusión de Ga en el interior del QD, pues ΔX^{1-} crece al aumentar la proporción de dicho elemento en el QD [229].

En la Figura 4.24 hemos representado el esquema de niveles correspondiente a los estados de menor energía del complejo X^{2-} . La configuración dominante asociada a los estados considerados en la Figura resulta fácil de describir. Por una parte, dos electrones ocupan el estado fundamental $1S_{\pm 1}$ y el tercer electrón ocupa uno de los cuatro estados excitados cuasi-degenerados: $2P_{\pm 1}$, $1P_{\pm 3}$. Al combinarse esta configuración de electrones con los estados de hueco forman el esquema de niveles mostrado en la Figura 4.24. Cada conjunto de niveles está constituido por ocho estados, ya que el estado fundamental del sistema compuesto por tres electrones está compuesto por cuatro estados, y cada estado de hueco presenta una multiplicidad igual a dos.

El estudio de las propiedades ópticas del complejo X^{2-} será abordado a partir del espectro de emisión. Al estar el nivel de energía fundamental compuesto

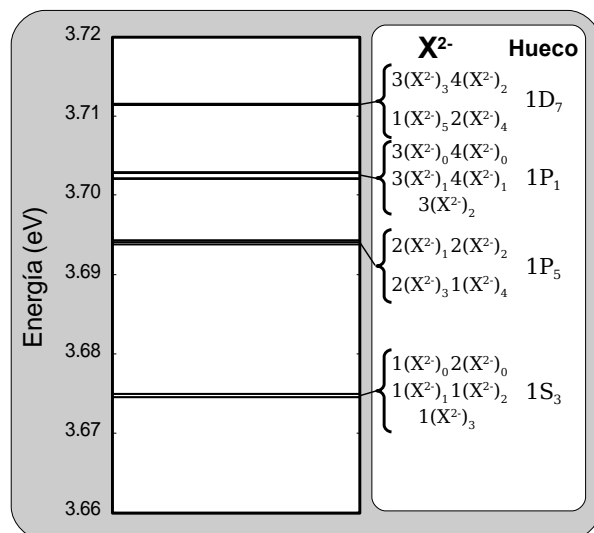


Figura 4.24: Estados de menor energía del complejo excitónico X^{2-} para el QD de altura $h_{\text{QD}} = 4$ nm.

por ocho estados muy próximos en energía (ver Fig. 4.24), todos ellos tienen, en primera aproximación, la misma probabilidad de estar ocupados. En consecuencia, describiremos la emisión del complejo X^{2-} a través del promedio de los espectros de emisión individuales de estos estados:

$$I^{X^{2-}}(E) = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 I_i^{X^{2-}}(E). \quad (4.37)$$

donde $I_i^{X^{2-}}(E)$ representa el espectro de emisión de cada estado i del complejo X^{2-} perteneciente al conjunto $\{1(X^{2-})_0, 2(X^{2-})_0, 1(X^{2-})_1, 1(X^{2-})_2, 1(X^{2-})_3\}$. En la Figura 4.25 hemos representado el espectro obtenido finalmente. La curva con un sombreado más intenso representa la emisión del estado excitónico $1(X^0)_1$. La emisión del complejo X^{2-} exhibe dos picos bien diferenciados de diferente intensidad. El origen de estas dos resonancias se encuentra en la estructura electrónica del sistema formado por dos electrones, representada en la Figura 4.21. Aunque dichos resultados corresponden a un QD de GaN/AlN, la estructura de niveles es igualmente válida para describir un QD de InAs/GaAs.

Por una parte, tenemos un tipo de recombinación en la cual los estados del complejo X^{2-} conectan con dos estados diferentes de dos electrones, un estado singlete y otro triplete, con una probabilidad de transición aproximadamente igual. Por ejemplo, considérese el estado inicial $1(X^{2-})_2$ cuya configuración dominante está formada por los estados de electrón $1S_1$, $1S_{-1}$ y $2P_1$, y el estado

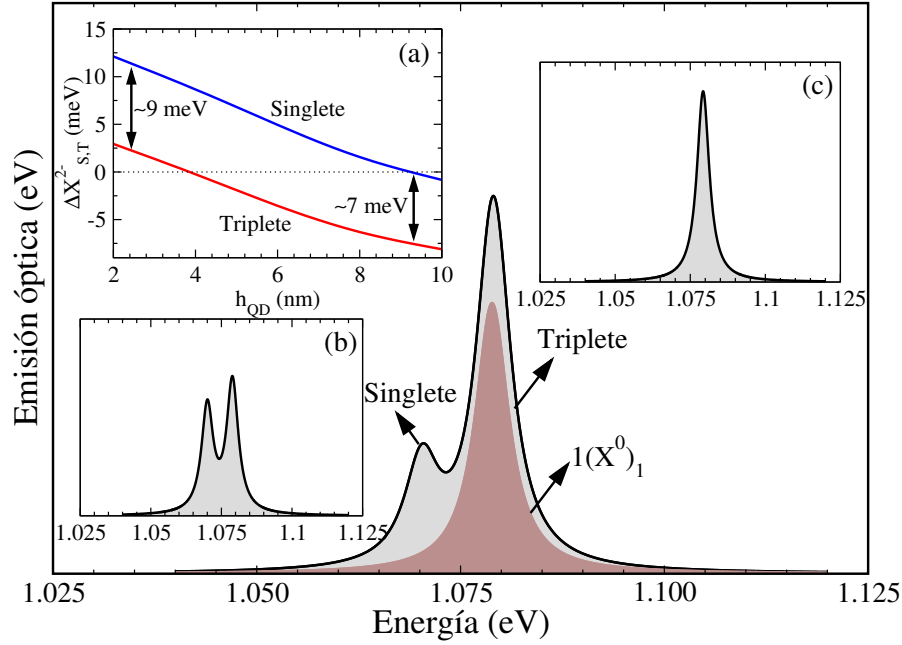


Figura 4.25: Emisión de los estados del complejo X^{2-} de menor energía al recombinar en los estados del complejo formado por dos electrones. El cálculo ha sido realizado para el QD de InAs/GaAs con $h_{QD} = 4$ nm.

de hueco $1S_3$. Este estado recombinar a los estados de dos electrones $1(2e^-)_1$ y $2(2e^-)_1$, cuyas configuraciones dominantes son $\sim 1/\sqrt{2}([1S_1 2P_1] + [1S_{-1} 1P_3])$ y $\sim 1/\sqrt{2}([1S_1 2P_1] - [1S_{-1} 1P_3])$, respectivamente, tal y como se mostró en la Figura 4.21. Estos dos estados no están degenerados. Uno de ellos es de tipo *triplete* y el otro es de tipo *singlete*. Como se puede comprobar tal recombinación es posible, pues tanto el estado inicial como los estados finales contienen los estados de electrón $1S_1$ y $2P_1$ en su configuración dominante. El espectro de emisión característico de este tipo de transiciones ha sido ilustrado en una Figura 4.25(b).

Por otra parte, existe otro tipo de recombinación en la que el complejo X^{2-} únicamente conecta con un estado triplete, exhibiendo entonces un único pico. Considérese ahora el estado inicial $1(X^{2-})_3$ cuya configuración dominante está compuesta por los estados de electrón $1S_1$, $1S_{-1}$ y $1P_3$, y el estado de hueco $1S_3$. El estados final de dos electrones es ahora $2(2e^-)_1$, definido por la configuración dominante $[1S_1 1P_3]$. Aquí también tienen en común las configuraciones dominantes de los estados inicial y final a los estados de electrón $1S_1$ y $1P_3$. Al pertenecer el estado $2(2e^-)_1$ al conjunto triplete únicamente exhibe un pico el espectro de emisión. Este tipo de transición ha sido representado en la Figura insertada (c).

Como resultado del promedio se obtiene que la resonancia triplete es aproxi-

madamente tres veces más intensa que la singlete. Al comparar con la intensidad de la recombinación excitónica, vemos que ésta es más débil, con una relación 3:4 frente a la intensidad de la emisión etiquetada como triplete. Experimentalmente se observa que, efectivamente, la emisión del X^{2-} es más intensa que la del excitón. Sin embargo, las relaciones halladas experimentalmente son $\sim 1:2$ [210] y $\sim 1:3$ [230]. Esto es, se observa que la emisión del complejo X^{2-} es más intensa que la obtenida con nuestro modelo. En cualquier caso, en un experimento de emisión es muy complicado determinar este tipo de relaciones tal y como se discutió en el Capítulo 1.

Retomando la discusión que hicimos en el estudio del complejo $2X^0$ sobre la energía de enlace, vemos que ahora se evidencia la ambigüedad del término. Ciñéndonos a la definición que allí dimos, la energía de enlace del complejo X^{2-} se correspondería con la diferencia entre la posición del pico asociado al estado de excitón $1(X^0)_1$ y la correspondiente al pico etiquetado como triplete, que es el más intenso. Sin embargo, dada la estructura del espectro de emisión de este complejo, consideraremos separadamente las energías de enlace correspondiente a las transiciones singlete y triplete. En la Figura insertada (a) hemos representado dichas magnitudes en función de la altura del QD. El complejo X^{2-} aparece ligado en nuestro modelo para $h_{\text{QD}} < 4$ nm, siendo la energía de enlace del mismo orden que la encontrada para el complejo X^{1-} . En la misma gráfica hemos indicado la diferencia entre las energías de las transiciones singlete y triplete para los QDs de mayor y menor altura. Comprobamos que dicha diferencia varía aproximadamente 2 meV al variar la altura del QD en 8 nm. Este resultado revela la débil dependencia de la energía de intercambio electrón-electrón con la altura del QD.

Experimentalmente, la transición tipo triplete se observa desplazada una energía menor a 1 meV respecto de la emisión del complejo X^{1-} [210, 231, 232]. Al igual que sucedía en el estudio del complejo X^{1-} , nuestro modelo subestima la energía de enlace del complejo X^{2-} . Otro aspecto que merece ser estudiado es la separación entre las transiciones triplete y singlete. De la gráfica 4.25 se infiere que nuestro modelo estima dicha separación en $\sim 7 - 9$ meV, valores significativamente mayores a los hallados experimentalmente: 3.6 meV [210], 4.2 meV [232] y 4.6 meV [231]. Esta discrepancia requiere un estudio detallado dada su relevancia, puesto que esta diferencia de energía está íntimamente relacionada con la interacción de intercambio electrón-electrón (ver Fig. 4.21). En un cálculo similar, aunque utilizando como estados de una única partícula las soluciones de un modelo atómico, G. Bester y A. Zunger han obtenido una diferencia de 8 meV entre las dos resonancias del complejo X^{2-} [229]. Este valor es más próximo al obtenido en nuestro trabajo que al reportado experimentalmente. La razón esgrimida por los

autores para explicar este desencuentro se fundamenta en una posible desviación respecto de la simetría axial en la forma de los QDs medidos. Otro aspecto a tener en cuenta en el análisis es la intensidad relativa de los dos picos. De nuestro modelo se desprende que la relación de intensidades debe ser aproximadamente 3:1. Experimentalmente se ha observado una relación significativamente diferente: 6:1 [232] y 7:1 [210]. También llama la atención la total supresión de dicha resonancia observada por B. Alén *et al.* [29]. En el estudio teórico de G. Bester y A. Zunger [229] obtienen una relación $\sim 5:1$, pues encuentran que el estado singlete presenta un desdoblamiento. Éste no ha sido observado experimentalmente, por lo que la hipótesis de una reducción de la eficiencia de la recombinación por efecto de una reducción de la simetría del problema no ha podido ser confirmada. De esta discusión se desprende que es preciso profundizar en el estudio de la estructura electrónica y en las propiedades ópticas del complejo X^{2-} .

Resultados del sistema GaN/AlN

En este apartado estudiaremos el problema de un QD de GaN/AlN cargado. El estudio del efecto de los portadores en exceso confinados en estas nanoestructuras es de crucial importancia, pues su presencia produce un apantallamiento parcial de los campos internos estudiados en el Capítulo 2. Esto significa que el impacto sobre las energías de transición va a ser mucho mayor que el encontrado en el sistema InAs/GaAs.

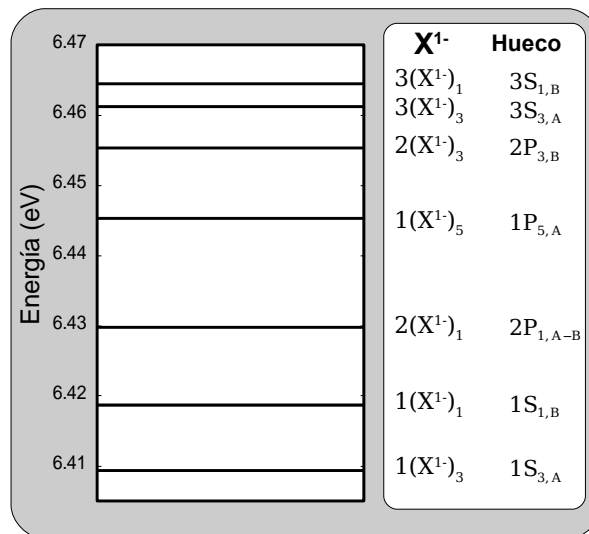


Figura 4.26: Esquema de niveles del complejo excitónico X^{1-} confinado en el QD de altura $h_{QD} = 3.375$ nm.

En la Figura 4.26 hemos representado el esquema de niveles del complejo X^{1-} . Al igual que sucedía en el caso de InAs/GaAs, las configuraciones dominantes de los estados representados consisten en dos electrones ocupando el estado fundamental de la banda de conducción y un hueco que ocupa uno de los estados de la banda de valencia. Vemos que el orden de los estados de menor energía del complejo X^{1-} es igual al de los estados de la banda de valencia en la aproximación de una única partícula (ver Fig. 3.51(d)). Al igual que sucedía en el QD de InAs/GaAs comparando el esquema de niveles con el correspondiente al complejo X^0 (ver Fig. 4.2) se observa que el electrón en exceso no perturba de forma significativa la separación entre niveles. En general, hemos observado que los niveles de energía experimentan un aumento en su separación de $\sim 2 - 5$ meV.

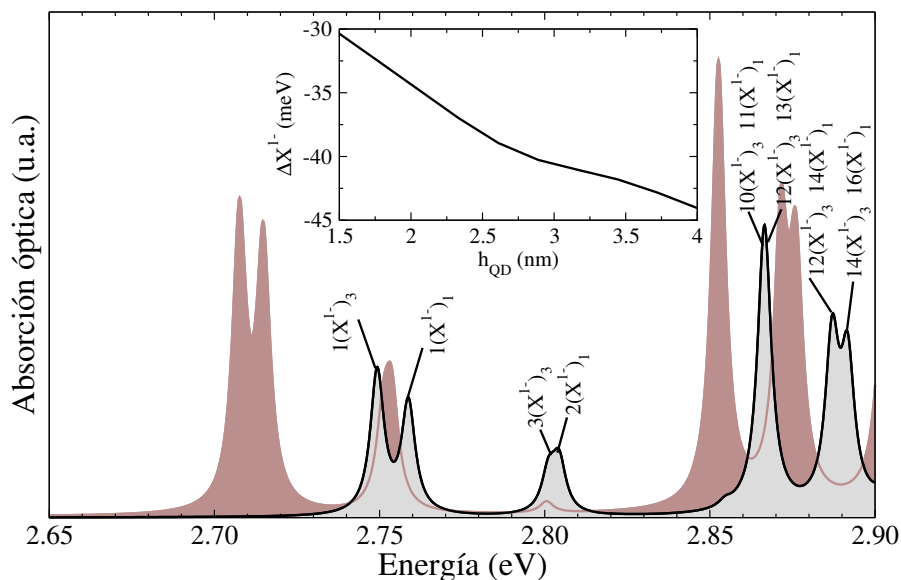


Figura 4.27: Espectro de absorción óptica del complejo X^{1-} . En la Figura insertada hemos representado la energía de enlace. Las configuraciones dominantes de los estados finales no han sido incluidas explícitamente. Éstas coinciden con las correspondientes al complejo X^0 (ver Fig. 4.9) añadiendo el estado que ocupa el electrón en exceso $1S_{\pm 1}$.

En la Figura 4.27 mostramos los resultados obtenidos para el espectro de absorción. Hemos representado el espectro de absorción que resulta de promediar sobre los estados iniciales de un único electrón $1S_1$ y $1S_{-1}$ (ver Ec. (4.35)). Observamos que la ocupación de un estado de la banda de conducción desplaza el espectro ~ 50 meV hacia el azul. La intensidad de las transiciones en las que interviene el estado fundamental de electrón (estado ocupado por el electrón en exceso) se ha reducido a la mitad: $1(X^{1-})_3$, $1(X^{1-})_1$, $3(X^{1-})_3$, y $2(X^{1-})_1$. Este efecto ya fue discutido para el sistema InAs/GaAs. Sin embargo, aquí es posible observar que la intensidad de las transiciones entre estados excitados también se ha reducido,

en contraste con el sistema InAs/GaAs, donde estas transiciones eran insensibles a la presencia del electrón en exceso.

En la Figura insertada hemos representado la energía de enlace ΔX^{1-} , que fue definida en la Ec. (4.36). Tal y como anticipamos en la introducción del apartado, la repulsión electrón-electrón es significativamente mayor en este sistema que la atracción electrón-hueco y en consecuencia la absorción fundamental del complejo X^{1-} experimenta un desplazamiento superior a 30 meV hacia altas energías. De este resultado se puede extraer que una eventual contaminación de la muestra, o un dopaje tipo n , va a tener importantes consecuencias en las propiedades ópticas del QD.

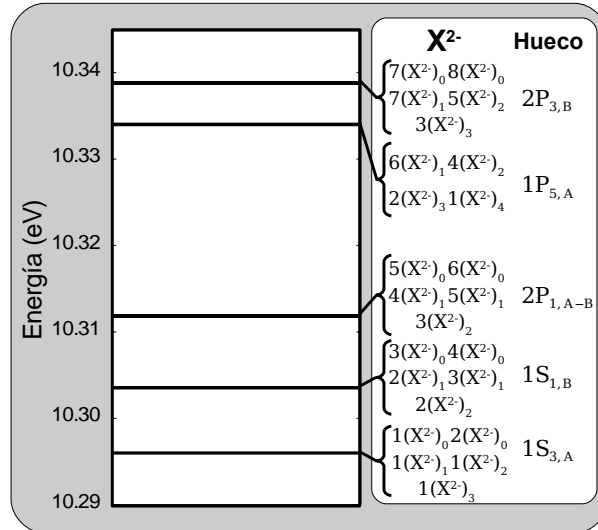


Figura 4.28: Estados de menor energía del complejo X^{2-} para el QD de GaN/AlN de altura $h_{QD} = 3.375$ nm.

Pasemos ahora a estudiar el espectro de energías del complejo X^{2-} . El esquema de niveles se muestra en la Figura 4.28. La multiplicidad de los diferentes estados discutida en el caso del QD de InAs/GaAs es válida aquí también. La separación entre los estados mostrados es aproximadamente igual que la encontrada para el complejo X^{1-} en la Figura 4.26.

Para poder apreciar de forma gráfica el impacto de los electrones en exceso sobre la energía de recombinación, hemos representado en la Figura 4.29 la emisión de los complejos X^{2-} , X^{1-} y X^0 . El espectro correspondiente a los complejos X^{2-} ha sido calculado recurriendo a la Ec. (4.37). El espectro del complejo X^{2-} muestra claramente las resonancias triplete y singlete. La relación entre las intensidades de las diferentes resonancias es la misma que la hallada en el sistema InAs/GaAs.

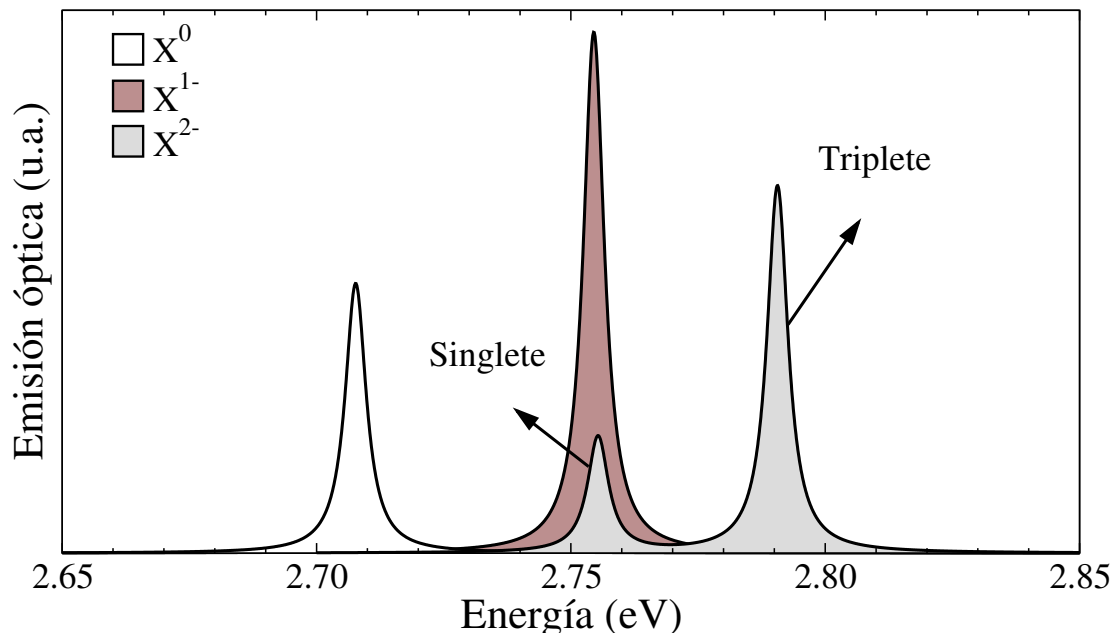


Figura 4.29: Espectros de emisión correspondientes a los complejos X^0 , X^{1-} y X^{2-} . Para el complejo X^{2-} se han indicado los estados finales singlete y triplete de dos electrones.

Por consiguiente, a la vista de los resultados mostrados, sería posible realizar un análisis experimental de este sistema con alguna de las técnicas de espectroscopía de un único QD empleadas en QDs de InAs/GaAs. Sin embargo, la caracterización óptica de estos QDs está lejos del estado de madurez alcanzado en el InAs/GaAs. En la Figura 4.30 mostramos las energías de enlace para los complejos excitónicos mencionados anteriormente. En esta Figura se observa nuevamente que la diferencia entre las transiciones triplete y singlete es poco sensible al tamaño del QD. Al comparar con los resultados obtenidos para el InAs/GaAs encontramos que la energía de intercambio es aproximadamente un orden de magnitud mayor.

Como comentamos en el apartado dedicado al estudio del complejo X^0 , revisaremos ahora la comparación entre los resultados del modelo teórico y las energías de emisión medidas en diferentes muestras de QDs. En el Capítulo 3 propusimos diferentes hipótesis encaminadas a determinar el posible origen de la discrepancia encontrada. Allí mencionamos que los efectos de la potencia de excitación y de la presencia de portadores en exceso también debían ser considerados, pues inducían un apantallamiento parcial del campo interno. Ahora se puede evaluar la importancia de estos efectos al comparar las curvas de los complejos X^{1-} y $2X^0$ con la correspondiente al excitón. Dado que al incrementar la potencia de excitación se puede considerar que se están fotogenerando un número mayor de pares e-h, es razonable asociar la energía del complejo $2X^0$ a los efectos derivados de dicha

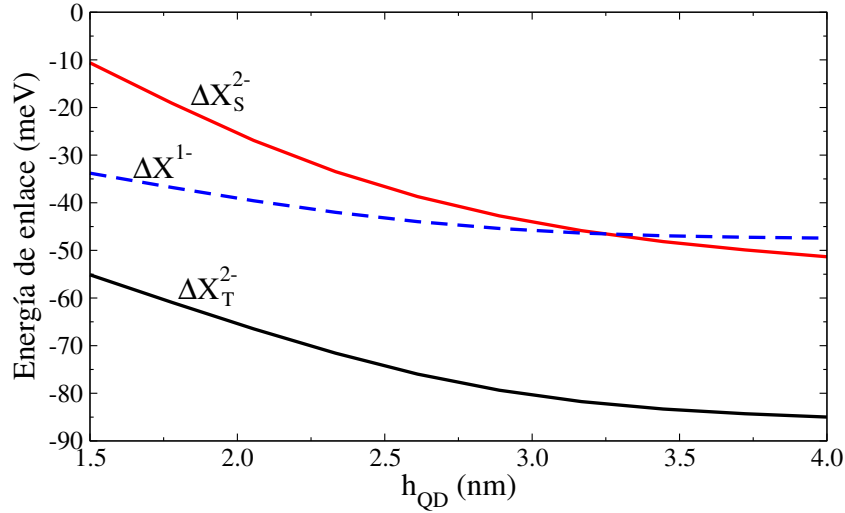


Figura 4.30: Energía de enlace de los complejos X^{1-} y X^{2-} en función del tamaño del QD.

potencia de excitación. En la Figura 4.31(a) hemos reproducido parte de los datos y valores de la Figura 3.57, junto con la energía de la transición fundamental de los complejos X^0 , $2X^0$ y X^{1-} . En la Figura 4.31(b) han sido representadas las mismas energías de transición tras sustraer E_g (ver Ec. (3.57)). En esta representación se puede apreciar que la dispersión de la energía con el tamaño del QD es diferente para los diferentes complejos excitónicos.

Sin embargo, a la vista de la Figura 4.31 queda claro que tales correcciones tienen una importancia relativa al ser comparada con la energía de transición en el caso de QDs de GaN/AlN. En el panel (b) se hace más evidente que la potencia de excitación induce un apantallamiento mayor que el electrón en exceso. Como cabía esperar, dado que en el complejo $2X^0$ tanto los electrones como los huecos son partícipes de dicho apantallamiento. Sin embargo, aunque ambos efectos son importantes no resuelven la discrepancia encontrada entre el modelo y la teoría. Como conclusión podemos decir que conocer el estado de carga del QD o las condiciones de excitación no resulta ser tan crítico como algunas de las hipótesis planteadas en la Sección 3.3 para resolver la discrepancia entre las energías de emisión medidas por PL, sea por ejemplo el apilamiento de QDs o la distribución de tamaños.

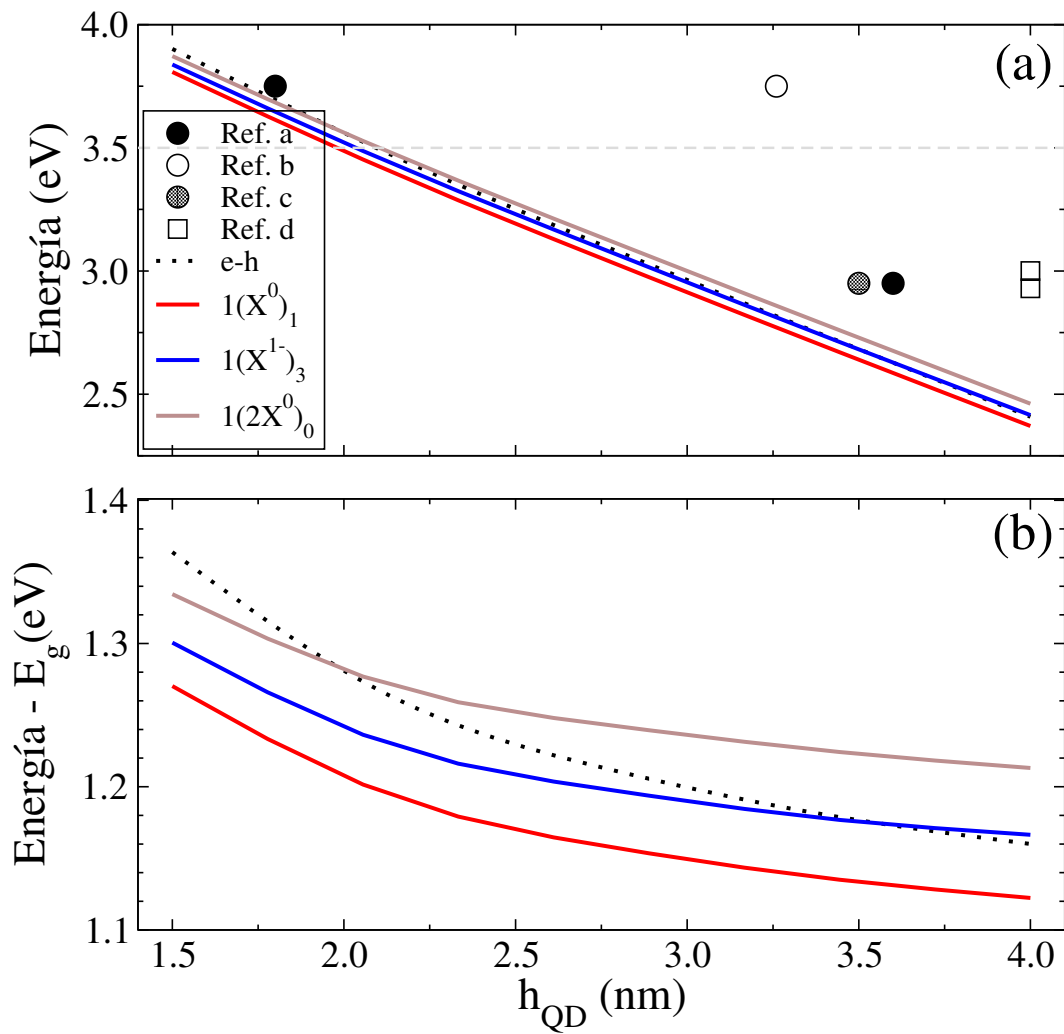


Figura 4.31: (a) Energía de la transición fundamental obtenida en el Capítulo 3 (línea de puntos) junto con la correspondiente a los estados $1(X^0)_1$, $1(2X^0)_0$, $1(X^{1-})_3$. (b) Idéntica representación tras sustraer E_g a las curvas teóricas.

Capítulo 5

Conclusiones

En el presente trabajo de Tesis hemos desarrollado un marco teórico que nos ha permitido estudiar diferentes propiedades de los puntos cuánticos auto-organizados. A continuación repasaremos las principales conclusiones que se pueden extraer de este trabajo.

- Partiendo del método de las inclusiones de Eshelby hemos conseguido desarrollar un modelo para el cálculo de la distribución de la deformación en puntos cuánticos con simetría de revolución compuestos por materiales elásticamente isótropos y transversalmente isótropos. Este modelo permite describir, con diferente grado de aproximación, el estado de deformación en QDs con estructura cristalina tipo zincblenda y wurtzita.
- Haciendo uso del principio de superposición hemos descrito las principales propiedades de superredes de QDs. Hemos analizado diferentes situaciones: una superred vertical (SR 1D), una superred en el plano (SR 2D) y una superred tridimensional (SR 3D). Paralelamente también hemos implementado un modelo para una superred tridimensional infinita (SR 3D libre).
- Con los modelos desarrollados para el cálculo de la deformación *hemos analizado diferentes resultados experimentales*. Lo que nos ha permitido validar la bondad del modelo y evidenciar su potencialidad como herramienta de análisis.
- Siguiendo una formulación similar a la empleada en el desarrollo del modelo para la deformación, hemos conseguido describir el potencial interno electrostático en QDs de GaN/AlN con simetría de revolución. Los resultados obtenidos en esta parte del trabajo tienen una gran relevancia para el estudio de las propiedades electrónicas de estos QDs.

- Para el estudio de la estructura electrónica de puntos cuánticos hemos desarrollado un modelo basado en la aproximación de la masa efectiva y el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Las características del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ nos han permitido abordar el estudio de los QDs utilizando diferentes grados de aproximación. Analizando los resultados obtenido por el modelo de una única banda y los modelos multibanda hemos podido establecer el impacto que tiene el acoplamiento entre las bandas del semiconductor masivo en la descripción de la estructura electrónica. Con los resultados obtenidos de la estructura electrónica nos ha sido posible estudiar los procesos de absorción en este tipo de estructuras.
- En esta parte del trabajo también hemos analizado diferentes resultados experimentales que nos han permitido profundizar en el estudio de estas estructuras, comprobar la bondad del modelo desarrollado e ilustrar su potencialidad como herramienta teórica.
- Para superar la limitación de la aproximación de un único electrón, hemos desarrollado un modelo capaz de describir la estructura electrónica de un QD cuando más de una partícula se haya confinada en su interior. Para esta tarea hemos empleado el formalismo de segunda cuantización, obteniendo con ello una formulación del problema elegante y compacta. Aquí hemos estudiado diferentes complejos excitónicos en QDs de InAs/GaAs y GaN/AlN, haciendo un especial énfasis en las particularidades que cada sistema exhibe.
- El estudio combinado de la estructura electrónica y las propiedades ópticas también nos ha permitido realizar la comparación con diferentes resultados experimentales, comprobando así la idoneidad del modelo para el análisis de la espectroscopía de un único punto cuántico.

Llegado este punto queremos aprovechar para mostrar un esquema general del código de programación desarrollado para implementar las diferente partes del modelo. El lenguaje de programación empleado en el desarrollo ha sido, fundamentalmente, Fortran 2000. Las diversiones versiones del código fuente ha sido gestionado por un único servidor CVS (en inglés “Concurrent Versions System”) de forma que desde cualquier máquina de cálculo sea accesible. En la Figura 5.1 hemos representado un esquema en el que se pueden identificar los principales programas. En primer lugar PTSLAT es el programa encargado del cálculo de la deformación, los potenciales internos y los potenciales de confinamiento. Como se puede apreciar en la Figura, este programa no guarda ninguna dependencia con el resto de programas desarrollados. En los programas ZBKANE y WZKANE se ha implementado el modelo para el cálculo de la estructura electrónica en QDs

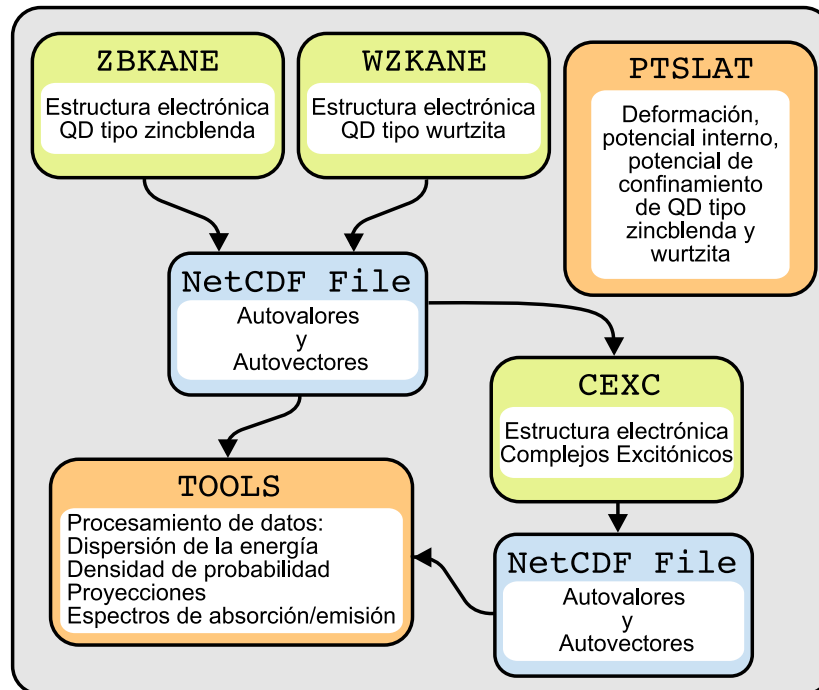


Figura 5.1: Diferentes programas informáticos que implementan los modelos teóricos desarrollados a lo largo del texto.

tipo zincblenda y wurtzita, respectivamente. De estos programas se obtienen las energías y las funciones de onda de los estos confinados, que se almacenan en un archivo `NetCDF`. Este tipo de archivo permite almacenar múltiples conjuntos de datos en un formato binario independiente de la plataforma, consiguiendo así encapsular en un mismo archivo tanto los detalles de los parámetros empleados en el cálculo como los resultados. Con este archivo se pueden emplear diferentes herramientas englobadas dentro del módulo `TOOLS`, o bien proceder al cálculo de la estructura electrónica de complejos excitónicos empleando el programa `CEXC`. Los resultados de este programa también son almacenados en un fichero `NetCDF` diferente, para poder proceder a un post-postprocesado con las herramientas de `TOOLS`.

Apéndice A

Valores de los parámetros de los materiales

En esta Sección hemos recogido los parámetros que han sido empleados a lo largo del trabajo para estudiar las propiedades de los puntos cuánticos de InAs/GaAs y GaN/AlN.

A.1. Parámetros del sistema InAs/GaAs

Para el sistema InAs/GaAs hemos empleado los parámetros recogidos por O. Stier *et al.* [203]. En la Tabla A.1 se muestran los valores de los parámetros introducidos a lo largo del texto. Obsérvese que han sido expresados de forma genérica para una aleación del tipo $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, de manera que es posible obtener valores para diferentes concentraciones de In y Ga.

Los valores de la constante elástica C_{11} no se corresponden con los experimentales. En su lugar se ha tomado el valor $C_{11} = C_{12} + 2C_{44}$ que satisface la relación de isotropía en materiales cúbicos, i.e. $C_{\text{an}} = 0$ (véase la Ec. (2.23)). A lo largo de todo el texto se ha mantenido este criterio.

En el Capítulo 1 realizamos un estudio del impacto de la deformación en la estructura de bandas del semiconductor masivo. Allí comprobamos que las masas efectivas en este material experimentaban un cambio significativo cuando éste experimenta una deformación. Para obtener los valores que las masas tomaban en el material deformado, hicimos un ajuste parabólico de la estructura de bandas calculada mediante el modelo 8×8 (ver Sección 1.5). Aunque las masas ya fueron mostradas en la Tabla 1.5 hemos estimado que también debía aparecer en este

Parámetro		Unidades	Valor para $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
Constante de red	a	Å	$5.6503+0.4050x$
Anchura banda prohibida	E_g	meV	$1518-1580x+475x^2$
Energía de Kane	E_p	meV	$(1.238 - 0.2095x) \frac{1-m_e}{m_e} \frac{3E_g(E_g+\Delta_{so})}{3E_g+\Delta_0}$
Desalineamiento BV	VBO	meV	$-6920+231x-58x^2$
Interacción spin-órbita	Δ_{so}	meV	$340-93x+133x^2$
Masa efectiva BC	m_e	m_0	$0.0667-0.0419x-0.00254x^2$
Parámetro de Luttinger	γ_1		$1/[(1-x)/7.10+x/19.7]$
	γ_2		$1/[(1-x)/2.02+x/8.4]$
	γ_3		$1/[(1-x)/2.91+x/9.3]$
Pot. def. de BC	a_c	meV	$-8013+2933x$
Pot. def. de BV	a_v	meV	$220+780x$
Pot. def. de E_g	a_g	meV	$-8233+2153x$
Pot. def. cizalla [100] de BV	b	meV	$-1824+24x$
Pot. def. cizalla [111] de BV	d	meV	$-5062+1462x$
Constante elástica	C_{11}	GPa	$172.6-48.1x$
	C_{12}	GPa	$53.8-8.5x$
	C_{44}	GPa	$59.4-19.8x$
Constante piezoeléctrica	ϵ_{14}	(C/m ²)	$0.160 - 0.115x$
Constante dieléctrica estática	ϵ_r	ϵ_0	$13.18+1.4x$

Tabla A.1: Parámetros para una aleación $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Extraídos de O. Stier *et al.*[203]

Banda	m_z	m_{\perp}
e	0.0724	0.0464
hh	0.3450	0.0710
lh	0.2160	0.0872
so	0.0837	0.2880

Tabla A.2: Masas efectivas del InAs en presencia de una deformación de tipo biaxial (ver Sección 1.5).

Apéndice, por completitud. Este conjunto de masas efectivas es el utilizado en el Capítulo 3 para realizar el cálculo en la aproximación de una única banda.

En el cálculo de la estructura electrónica de heteroestructuras es importante saber cómo se alinean las bandas de los materiales. El parámetro que permite determinar dicho alineamiento es el VBO ¹, que cuantifica el desalineamiento de la banda de valencia para una aleación de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. La separación entre los bordes de la banda de valencia del InAs y GaAs se puede determinar fácilmente sustituyendo los valores apropiados en la expresión: $|VBO_{\text{InAs}} - VBO_{\text{GaAs}}|$.

A.2. Parámetros del sistema GaN/AlN

Es posible comprobar en la literatura que los valores publicados para los parámetros de los materiales GaN y AlN presentan una gran dispersión [118, 233, 234]. En la Tabla A.3 hemos agrupado dos conjuntos de parámetros empleados en este trabajo para describir el sistema GaN/AlN. Los valores escogidos por defecto a lo largo del texto se corresponden con los escogidos por A. D. Andreev y E. P. O'Reilly en la Ref. [118]. Como valor del desalineamiento de las bandas de valencia también hemos tomado el empleado en [118], $|VBO_{\text{GaN}} - VBO_{\text{AlN}}| = 0.5$ eV.

Finalmente, hemos agrupado en la Tabla A.4 los valores numéricos de las masas efectivas correspondientes a las diferentes bandas del GaN masivo. Ello facilita la comparación con las masas efectivas obtenidas para el InAs. En el cálculo hemos empleado las Ecs. (1.53).

¹Siglas de *Valence Band Offset*.

Parámetro	GaN	AlN	Parámetro	GaN	AlN
a (Å)	3.189	3.112	D_1 (eV)	0.7	0.7
c (Å)	5.185	4.982	D_2 (eV)	2.1	2.1
E_g (eV)	3.5	6.3	D_3 (eV)	1.4	1.4
Δ_1 (eV)	0.022	-0.104	D_4 (eV)	-0.7	-0.7
Δ_2 (eV)	0.005	0.004	D_5 (eV)	-0.7	-0.7
Δ_3 (eV)	0.005	0.004	D_6 (eV)	1.4	1.4
$m_{e,z}$ (m_0)	0.20	0.33	C_{11} (GPa)	367.0	396.0
$m_{e,\perp}$ (m_0)	0.18	0.25	C_{12} (GPa)	135.0	137.0
A_1	-7.24	-4.17	C_{13} (GPa)	103.0	108.0
A_2	-0.51	-0.58	C_{33} (GPa)	405.0	373.0
A_3	6.73	3.68	C_{44} (GPa)	95.0	116.0
A_4	-3.36	-2.17	ϵ_{15} (C/m ²)	-0.49	-0.6
A_5	-3.35	-2.27	ϵ_{31} (C/m ²)	-0.49	-0.6
A_6	-4.72	-2.21	ϵ_{33} (C/m ²)	0.73	1.46
a_z (eV)	-4.08	-4.08	P_{sp} (C/m ²)	-0.029	-0.081
a_{\perp} (eV)	-4.08	-4.08	ϵ_r ϵ_0	9.6	9.6

Tabla A.3: Parámetros correspondientes al sistema GaN/AlN. El conjunto de A. D. Andreev y E. P. O'Reilly ha sido extraído de [118] y el correspondiente a I. Vurgaftman y J. R. Meyer ha sido extraído de [233].

Banda	m_z	m_{\perp}
e	0.020	0.018
A	1.961	1.923
B	1.961	0.139
C	0.138	1.961

Tabla A.4: Masas efectivas correspondientes a las diferentes bandas del GaN.

Apéndice B

Hamiltoniano para la zincblenda y para la wurtzita

En este Apéndice presentamos la forma explícita de los diferentes Hamiltonianos discutidos en el Capítulo 1 y que han sido utilizados en el Capítulo 3 para el cálculo de la estructura electrónica. Para reducir la extensión de las expresiones que definen los elementos de matriz, hemos recurrido a las siguientes definiciones auxiliares:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad (\text{B.1a})$$

$$k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (\text{B.1b})$$

$$k_{\pm} = k_x \pm i k_y, \quad (\text{B.1c})$$

$$\text{tr}(e) = e_h = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}, \quad (\text{B.1d})$$

$$\tilde{e} \equiv e_{\text{biax}} = e_{xx} + e_{yy} - 2e_{zz}, \quad (\text{B.1e})$$

$$\hat{e} = e_{xx} - e_{yy}, \quad (\text{B.1f})$$

$$e_{\pm} \equiv e_{xz} \pm i e_{yz}, \quad (\text{B.1g})$$

$$e_{\pm\pm} = \hat{e} \pm 2i e_{xy}. \quad (\text{B.1h})$$

$$(\text{B.1i})$$

$ c, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ c, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ v, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_-$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_-$
0	$E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_-$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$
$-\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_-$	0	$E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + \gamma'_2)k_\perp^2$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - 2\gamma'_2)k_z^2$	$2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$	$\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_-^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_+^2\right]$	0	$-\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$	$\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_-^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_+^2\right]$
$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$	$2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$	$E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - \gamma'_2)k_\perp^2$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + 2\gamma'_2)k_z^2$	0	$\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_-^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_+^2\right]$	$-\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2$ $\times (k_\perp^2 - 2k_z^2)$	$3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$
$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_-$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_+^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_-^2\right]$	0	$E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - \gamma'_2)k_\perp^2$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + 2\gamma'_2)k_z^2$	$-2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$	$3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$	$\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2$ $\times (k_\perp^2 - 2k_z^2)$
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	0	$\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_+^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_-^2\right]$	$-2\sqrt{3}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$	$E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 + \gamma'_2)k_\perp^2$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma'_1 - 2\gamma'_2)k_z^2$	$\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_+^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_-^2\right]$	$-\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$
$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_-$	$-\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$	$-\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2$ $\times (k_\perp^2 - 2k_z^2)$	$3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$	$\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_-^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_+^2\right]$	$E_v - \Delta_0$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2$	0
$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{\gamma'_2 + \gamma'_3}{2}\right)k_+^2 + \left(\frac{\gamma'_2 - \gamma'_3}{2}\right)k_-^2\right]$	$3\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_+ k_z$	$\sqrt{2}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_2$ $\times (k_\perp^2 - 2k_z^2)$	$-\sqrt{6}\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_3 k_- k_z$	0	$E_v - \Delta_0$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma'_1 k^2$

(B.2)

$ c, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ c, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ v, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$C_1 \text{tr}(e)$	0	0	0	0	0	0	0
0	$C_1 \text{tr}(e)$	0	0	0	0	0	0
0	0	$D_d \text{tr}(e) - \frac{1}{3} D_u \tilde{e}$	$\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u e_-$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{--} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{++} \right]$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} D'_u e_-$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{--} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{++} \right]$
0	0	$\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u e_+$	$D_d \text{tr}(e) + \frac{1}{3} D_u \tilde{e}$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{--} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{++} \right]$	$-\frac{\sqrt{2}}{3} D_u \tilde{e}$	$\sqrt{2} D'_u e_-$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{++} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{--} \right]$	0	$D_d \text{tr}(e) + \frac{1}{3} D_u \tilde{e}$	$-\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u e_-$	$\sqrt{2} D'_u e_+$	$\frac{\sqrt{2}}{3} D_u \tilde{e}$
0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{++} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{--} \right]$	$-\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u e_+$	$D_d \text{tr}(e) - \frac{1}{3} D_u \tilde{e}$	$\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{++} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{--} \right]$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} D'_u e_+$
0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} D'_u e_+$	$-\frac{\sqrt{2}}{3} D_u \tilde{e}$	$-\sqrt{2} D'_u e_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{--} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{++} \right]$	$D_d \text{tr}(e)$	0
0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{D_u + D'_u}{2} \right) e_{++} + \left(\frac{D_u - D'_u}{2} \right) e_{--} \right]$	$\sqrt{2} D'_u e_+$	$-\frac{\sqrt{2}}{3} D_u \tilde{e}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} D'_u e_-$	0	$D_d \text{tr}(e)$

(B.3)

$ c, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ c, 0, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 1, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, -1, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, -1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 0, -\frac{1}{2}\rangle$
$E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_+$	$\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_-$	$P_z k_z$	0	0	0
0	$E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_+$	$\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_-$	$P_z k_z$
$-\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_-$	0	$E_v + \Delta_1 + \Delta_2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_2 + A'_4)k_{\perp}^2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_1 + A'_3)k_z^2$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_5 k_-^2$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_- k_z$	0	0	0
$\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_+$	0	$E_v + \Delta_1 - \Delta_2$ $-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_5 k_+^2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_2 + A'_4)k_{\perp}^2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_1 + A'_3)k_z^2$	$+\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$	$\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$	0	0	$\sqrt{2}\Delta_3$
$P_z k_z$	0	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$	$\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_- k_z$	$E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0}A'_2 k_{\perp}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0}A'_1 k_z^2$	0	$\sqrt{2}\Delta_3$	0
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_-$	0	0	0	$E_v + \Delta_1 + \Delta_2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_2 + A'_4)k_{\perp}^2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_1 + A'_3)k_z^2$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_5 k_+^2$	$\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}P_{\perp}k_+$	0	0	$\sqrt{2}\Delta_3$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_5 k_-^2$	$E_v + \Delta_1 - \Delta_2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_2 + A'_4)k_{\perp}^2$ $+\frac{\hbar^2}{2m_0}(A'_1 + A'_3)k_z^2$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_- k_z$
0	$P_z k_z$	0	$\sqrt{2}\Delta_3$	0	$\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$	$-\frac{\hbar^2}{2m_0}A'_6 k_+ k_z$	$E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0}A'_2 k_{\perp}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0}A'_1 k_z^2$ (B.4)

$ c, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ c, 0, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 1, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, -1, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 0, +\frac{1}{2}\rangle$	$ v, -1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, 0, -\frac{1}{2}\rangle$
$a_z(e_{xx} + e_{yy}) + a_{\perp}e_{zz}$	0	0	0	0	0	0	0
0	$a_z(e_{xx} + e_{yy}) + a_{\perp}e_{zz}$	0	0	0	0	0	0
0	0	$(D_2 + D_4)(e_{xx} + e_{yy}) + (D_1 + D_3)e_{zz}$	$-D_5 e_{--}$	$-D_6 e_{-}$	0	0	0
0	0	$-D_5 e_{++}$	$(D_2 + D_4)(e_{xx} + e_{yy}) + (D_1 + D_3)e_{zz}$	$D_6 e_{+}$	0	0	0
0	0	$-D_6 e_{+}$	$D_6 e_{-}$	$D_2(e_{xx} + e_{yy}) + D_1 e_{zz}$	0	0	0
0	0	0	0	0	$(D_2 + D_4)(e_{xx} + e_{yy}) + (D_1 + D_3)e_{zz}$	$-D_5 e_{++}$	$D_6 e_{+}$
0	0	0	0	0	$-D_5 e_{--}$	$(D_2 + D_4)(e_{xx} + e_{yy}) + (D_1 + D_3)e_{zz}$	$-D_6 e_{-}$
0	0	0	0	0	$D_6 e_{-}$	$-D_6 e_{+}$	$D_2(e_{xx} + e_{yy}) + D_1 e_{zz}$

(B.5)

Apéndice C

Funciones auxiliares para el cálculo de la deformación y del potencial interno

Las funciones auxiliares $\mathcal{I}_{n,m}^p$ que introducimos en la Sección 2.2 vienen dadas por:

$$\mathcal{I}_{n,m}^p(\rho, \rho'; \Delta) = \int_0^\infty q_\perp^p dq_\perp J_n(q_\perp \rho) J_m(q_\perp \rho') e^{-q_\perp |\Delta|}, \quad (\text{C.1})$$

donde las funciones $J_n(x)$ son las funciones de Bessel de orden entero n . De su definición se desprende que las propiedades de $\mathcal{I}_{n,m}^p$ estarán íntimamente relacionadas con las propiedades de las funciones de Bessel. En efecto, con ayuda de éstas, es posible deducir la siguiente relación de recurrencia:

$$\mathcal{I}_{n+1,m}^p = \frac{2n}{\rho} \mathcal{I}_{n,m}^{p-1} - \mathcal{I}_{n-1,m}^p, \quad (\text{C.2})$$

y las siguientes reglas de derivación:

$$\frac{\partial \mathcal{I}_{n,m}^p}{\partial \Delta} = -\text{sign}(\Delta) \mathcal{I}_{n,m}^{p+1}, \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{\partial \mathcal{I}_{n,m}^p}{\partial \rho} = \frac{1}{2} [\mathcal{I}_{n-1,m}^{p+1} - \mathcal{I}_{n+1,m}^{p+1}] = \mathcal{I}_{n-1,m}^{p+1} - \frac{n}{\rho} \mathcal{I}_{n,m}^p = \frac{n}{\rho} \mathcal{I}_{n,m}^p - \mathcal{I}_{n+1,m}^{p+1}. \quad (\text{C.4})$$

Estas últimas juegan un importante papel en la obtención de la deformación a partir del desplazamiento.

Las integrales del tipo (C.1) fueron estudiadas de forma sistemática por G. Eason *et al.* [235], donde se demostró que pueden expresarse en términos de las

funciones elípticas. Una recopilación de las soluciones de las integrales (C.1) para valores generales $(n, m; p)$ se encuentra en la obra de A. P. Prudnikov *et al.* [236]. En este Apéndice hemos reproducido aquellas expresiones necesarias para el cálculo del desplazamiento, la deformación y el potencial interno.

$$\mathcal{I}_{0,1}^0(\rho, \rho'; \Delta) = -\frac{1}{2\pi} k \frac{|\Delta|}{\sqrt{\rho\rho'}} \frac{1}{\rho'} \mathbb{K}(k) + \text{sign}(\rho - \rho') \frac{1}{2\rho'} \Lambda_0(\varphi, \psi) + \frac{1}{\rho'} \Theta(\rho' - \rho), \quad (\text{C.5})$$

$$\mathcal{I}_{1,1}^0(\rho, \rho'; \Delta) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{k} \frac{1}{\sqrt{\rho\rho'}} [2\mathbb{E}(k) - (2 - k^2)\mathbb{K}(k)], \quad (\text{C.6})$$

$$\mathcal{I}_{0,1}^1(\rho, \rho'; \Delta) = \frac{1}{8\pi} \frac{k}{1 - k^2} \frac{1}{(\rho\rho')^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\rho'} [k^2(\rho'^2 - \rho^2 - \Delta^2)\mathbb{E}(k) + 4\rho\rho'(1 - k^2)\mathbb{K}(k)], \quad (\text{C.7})$$

$$\mathcal{I}_{1,1}^1(\rho, \rho'; \Delta) = \frac{1}{4\pi} \frac{k}{1 - k^2} \frac{|\Delta|}{(\rho\rho')^{\frac{3}{2}}} [(2 - k^2)\mathbb{E}(k) - 2(1 - k^2)\mathbb{K}(k)], \quad (\text{C.8})$$

y con ayuda de la relación de recurrencia (C.2), se puede obtener:

$$\mathcal{I}_{2,1}^1(\rho, \rho'; \Delta) = \frac{2}{\rho} \mathcal{I}_{1,1}^0(\rho, \rho'; \Delta) - \mathcal{I}_{0,1}^1(\rho, \rho'; \Delta) \quad . \quad (\text{C.9})$$

En estas expresiones se ha empleado la siguiente notación:

$$k \equiv \sin\varphi = \frac{2\sqrt{\rho\rho'}}{\sqrt{(\rho + \rho')^2 + \Delta^2}},$$

$$\sin\psi = \frac{|\Delta|}{\sqrt{(\rho - \rho')^2 + \Delta^2}}.$$

Las funciones $\mathbb{E}(k)$, $\mathbb{K}(k)$ y $\Lambda_0(\varphi, \psi)$, son funciones elípticas definidas como [236]:

$$\mathbb{E}(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} dt \sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}, \quad (\text{C.10a})$$

$$\mathbb{K}(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} dt \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}}, \quad (\text{C.10b})$$

$$\Lambda_0(\varphi, \psi) = \frac{2}{\pi} \left\{ \mathbb{E}(\psi) \mathbb{F}(\varphi, \sqrt{1 - \psi^2}) + \mathbb{K}(\psi) \left[\mathbb{E}(\varphi, \sqrt{1 - \psi^2}) - \mathbb{F}(\varphi, \sqrt{1 - \psi^2}) \right] \right\}, \quad (\text{C.10c})$$

$$\mathbb{E}(\varphi, \psi) = \int_0^\varphi dt \frac{1}{\sqrt{1 - \psi^2 \sin^2 t}}, \quad (\text{C.10d})$$

$$\mathbb{F}(\varphi, \psi) = \int_0^\varphi dt \sqrt{1 - \psi^2 \sin^2 t}. \quad (\text{C.10e})$$

Apéndice D

Elementos de matriz del cálculo de la estructura electrónica

En este Apéndice hemos incluido las expresiones que nos permiten calcular los elementos de matriz de los diferentes Hamiltonianos introducidos en el Capítulo 3.

D.1. Elementos de matriz para el modelo de una única banda

En este apartado vamos a escribir de forma explícita los elementos de matriz de la Ec. (3.17). Para ello debemos sustituir la expresión de H de la Ec. (3.11) en (3.17) e integrar los tres términos que aparecen:

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | H | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | T_{\rho}^{(m)} + T_z + V_{\text{QD}}(\rho, z) | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle. \quad (\text{D.1})$$

Los tres elementos de matriz que aparecen en (D.1) vienen dados por:

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | T_{\rho} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | T_{\rho}^{(m)} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m_{xy}\mathcal{R}^2} \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\mu,\nu}. \quad (\text{D.2})$$

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | T_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | T_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m_z\mathcal{Z}^2} (\mu\pi)^2 \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\mu,\nu}. \quad (\text{D.3})$$

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | V_{\text{QD}}(\rho, z) | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | V_{\text{QD}}(\rho, z) | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = V_0 \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho R_{m,\alpha}^*(\rho) O_{\mu,\nu}(\rho) R_{m,\beta}(\rho) \quad (\text{D.4})$$

La función $O_{\mu,\nu}(\rho)$ está definida como:

$$O_{\mu,\nu}(\rho) = \frac{2}{\mathcal{Z}} \int_{-\frac{\mathcal{Z}}{2}}^{+\frac{\mathcal{Z}}{2}} dz \frac{V_{\text{QD}}(\rho, z)}{V_0} \sin \left[\mu\pi \left(\frac{z}{\mathcal{Z}} - \frac{1}{2} \right) \right] \sin \left[\nu\pi \left(\frac{z}{\mathcal{Z}} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (\text{D.5})$$

D.2. Elementos de matriz del Hamiltoniano multi-banda

El Hamiltoniano H^{MB} empleado para la descripción de la estructura electrónica en los modelos multibanda fue definido en la Ec. (3.39). En su forma más general adopta una representación matricial de rango ocho cuya forma explícita se puede encontrar en las Ecs. (B.2) y (B.4). Los elementos de matriz correspondientes a los elementos diagonales del Hamiltoniano se calculan con las expresiones derivadas en la Sección D.1. Para el cálculo del resto de elementos de matriz únicamente será necesario conocer las expresiones que presentamos a continuación.

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 1)} | k_{\pm} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 1)} | k_{\pm} | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = (-i) \frac{(\mp k_{\beta}^{(m)})}{\mathcal{R}} \Pi_{m\pm 1} \left(k_{\alpha}^{(m\pm 1)}, k_{\beta}^{(m)} \right) \quad (\text{D.6})$$

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | k_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m)} | k_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = (-i) \delta_{\alpha,\beta} \frac{\nu\pi}{\mathcal{Z}} H_{\mu,\nu} \quad (\text{D.7})$$

$$\square \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 1)} | k_{\pm} k_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 1)} | k_{\pm} k_z | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = - \frac{(\nu\pi)(\pm k_{\beta}^{(m)})}{\mathcal{Z}\mathcal{R}} H_{\mu,\nu} \Pi_{m\pm 1} \left(k_{\alpha}^{(m\pm 1)}, k_{\beta}^{(m)} \right) \quad (\text{D.8})$$

$$\blacksquare \quad \langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 2)} | k_{\pm}^2 | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle$$

$$\langle \xi_{\alpha,\mu}^{(m\pm 2)} | k_{\pm}^2 | \xi_{\beta,\nu}^{(m)} \rangle = -\delta_{\mu,\nu} \frac{(k_{\beta}^{(m)})^2}{\mathcal{R}^2} \Pi_{m\pm 2} \left(k_{\alpha}^{(m\pm 2)}, k_{\beta}^{(m)} \right) \quad (\text{D.9})$$

Para evaluar estos elementos de matriz hemos introducido dos funciones auxiliares:

$$H_{\mu,\nu} = \frac{2}{\mathcal{Z}} \int_{-\frac{\mathcal{Z}}{2}}^{+\frac{\mathcal{Z}}{2}} dz \sin \left[\mu\pi \left(\frac{z}{\mathcal{Z}} - \frac{1}{2} \right) \right] \cos \left[\nu\pi \left(\frac{z}{\mathcal{Z}} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (\text{D.10})$$

$$\begin{aligned} \Pi_{m'}(k_{\alpha'}^{(m')}, k_{\alpha}^{(m)}) &= \mathcal{N}_{\alpha'}^{(m')} \mathcal{N}_{\alpha}^{(m)} \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho J_{m'}(k_{\alpha'}^{(m')} \rho) J_{m'}(k_{\alpha}^{(m)} \rho) \\ &= \begin{cases} \frac{2k_{\alpha'}^{(m')}}{k_{\alpha'}^{(m')^2} - k_{\alpha}^{(m)^2} \left| \frac{J_{m'}(k_{\alpha}^{(m)})}{J_{m+1}(k_{\alpha}^{(m)})} \right|} (-1)^{\frac{m'+1-|m'+1|}{2}} (-1)^{\alpha'} & \text{si } k_{\alpha'}^{(m')} \neq k_{\alpha}^{(m)} \\ 1 & \text{si } k_{\alpha'}^{(m')} = k_{\alpha}^{(m)} \end{cases}. \quad (\text{D.11}) \end{aligned}$$

La expresión (D.11) es únicamente válida cuando a es un cero de la función de Bessel $J_m(\rho)$.

Apéndice E

Cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano de varios cuerpos

En el Capítulo 4 hemos descrito la estrategia elegida para la resolución del problema de varios cuerpos. En este Apéndice daremos expresiones explícitas que permitirán evaluar los elementos de matriz que aparecen en la formulación del Capítulo 4. Empezaremos desarrollando los elementos de matriz correspondientes a cada término de la Ec. (4.11). Con ello obtendremos expresiones en las que únicamente aparecen las energías correspondientes al problema de un único electrón, las integrales correspondientes a la interacción de Coulomb entre dos cuerpos y deltas de Kronecker. Las energías del problema de un único cuerpo no son más que las obtenidas por cualquiera de los modelos desarrollados en el Capítulo 3. Finalmente hemos tratado el cálculo de las integrales del potencial de Coulomb en la última Sección.

E.1. Elementos del matriz de H

El Hamiltoniano para muchos cuerpos puede ser escrito en forma compacta como:

$$H = H^c + H^{cc} = H^e + H^h + H^{ee} + H^{hh} + H^{eh} \quad (\text{E.1})$$

Para obtener las funciones de onda y las energías de los complejos excitónicos debemos resolver el sistema de ecuaciones (4.19), lo que nos lleva a tener que evaluar los elementos de matriz $\langle l|H|l' \rangle$. Pasaremos a desarrollar únicamente H^{ee} y H^{eh} . El término H^{hh} se puede obtener fácilmente a partir de H^{ee} .

- $\langle l|H^e|l'\rangle$

Este elemento de matriz se evalúa trivialmente y resulta ser:

$$\langle l|H^e|l'\rangle = \left[\sum_{k=1}^{N_e} E_{i_k} \right] \delta_{l_{(N_e, N_h)}, l'_{(N_e, N_h)}}. \quad (\text{E.2})$$

Para su derivación, basta con tener en cuenta las propiedades de ortogonalidad de las funciones de onda de los estados de una única partícula.

- $\langle l|H^{ee}|l'\rangle$

La evaluación de este elemento de matriz es más complicada, pues conforme el número de N_e y N_h aumenta, el número de términos también lo hace. Para $N_{e,h} \leq 2$ es factible proceder al cálculo contando únicamente con las reglas de anticonmutación. Se deben intercambiar los operadores de creación y destrucción de forma que estos últimos se desplacen hacia la derecha. Al actuar estos sobre el estado fundamental $|0\rangle$, el término se anula exactamente, ver Ec. (4.5). Véase por ejemplo la forma de H^{ee} y H^{eh} para $N_e = N_h = 2$.

$$\begin{aligned} H^{ee} &= (\delta_{j_1, j'_1} \delta_{j_2, j'_2} - \delta_{j_1, j'_2} \delta_{j_2, j'_1}) \times (V_{i_1, i_2, i'_2, i'_1} - V_{i_1, i_2, i'_1, i'_2} - V_{i_2, i_1, i'_2, i'_1} + V_{i_2, i_1, i'_1, i'_2}) \\ H^{eh} &= \delta_{i_2, i'_2} \delta_{j_2, j'_2} V_{i_1, j_1, j'_1, i'_1} - \delta_{i_2, i'_2} \delta_{j_2, j'_1} V_{i_1, j_1, j'_2, i'_1} - \delta_{i_2, i'_2} \delta_{j_1, j'_2} V_{i_1, j_2, j'_1, i'_1} \\ &\quad + \delta_{i_2, i'_2} \delta_{j_1, j'_1} V_{i_1, j_2, j'_2, i'_1} - \delta_{i_2, i'_1} \delta_{j_2, j'_2} V_{i_1, j_1, j'_1, i'_2} + \delta_{i_2, i'_1} \delta_{j_2, j'_1} V_{i_1, j_1, j'_2, i'_2} \\ &\quad + \delta_{i_2, i'_1} \delta_{j_1, j'_2} V_{i_1, j_2, j'_1, i'_2} - \delta_{i_2, i'_1} \delta_{j_1, j'_1} V_{i_1, j_2, j'_2, i'_2} - \delta_{i_1, i'_2} \delta_{j_2, j'_2} V_{i_2, j_1, j'_1, i'_1} \\ &\quad + \delta_{i_1, i'_2} \delta_{j_2, j'_1} V_{i_2, j_1, j'_2, i'_1} + \delta_{i_1, i'_2} \delta_{j_1, j'_2} V_{i_2, j_2, j'_1, i'_1} - \delta_{i_1, i'_2} \delta_{j_1, j'_1} V_{i_2, j_2, j'_2, i'_1} \\ &\quad + \delta_{i_1, i'_1} \delta_{j_2, j'_2} V_{i_2, j_1, j'_1, i'_2} - \delta_{i_1, i'_1} \delta_{j_2, j'_1} V_{i_2, j_1, j'_2, i'_2} - \delta_{i_1, i'_1} \delta_{j_1, j'_2} V_{i_2, j_2, j'_1, i'_2} \\ &\quad + \delta_{i_1, i'_1} \delta_{j_1, j'_1} V_{i_2, j_2, j'_2, i'_2} \end{aligned}$$

En este trabajo hemos desarrollado un código que permite evaluar este elemento de matriz para un número arbitrario de electrones y huecos. Para ello hemos contado con la inestimable ayuda de Joaquín Cuenca, quien, desinteresadamente, se ofreció a escribir esta parte del programa. La expresión explícita resulta:

$$\langle l_{(N_e, N_h)}|H^{ee}|l'_{(N_e, N_h)}\rangle = \frac{1}{2} \langle l_{(N_e, N_h)}| \sum_{m, n, o, p} V_{m, n, o, p} c_m^\dagger c_n^\dagger c_o c_p |l'_{(N_e, N_h)}\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left(\sum_{m=1}^{N_e} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^{N_e} \sum_{k=1}^{N_e!} V_{i_m, i_n, i'_{\text{ve}[k,2]}, i'_{\text{ve}[k,1]}} \prod_{r=3}^{N_e} \delta_{i_{\text{we}(m,n,r)}, i'_{\text{ve}[k,r]}} \right. \\
&\quad \times \left[(-1)^{m-1} \begin{cases} (-1)^{n-1} & n < m \\ (-1)^n & n > m \end{cases} \text{se}[k] \right] \\
&\quad \times \left. \left(\sum_{k=1}^{N_h!} \prod_{r=1}^{N_h} \delta_{j_m, j_{\text{vh}[k,r]}} \text{sh}[k] \right) \right). \quad (\text{E.3})
\end{aligned}$$

El miembro de la derecha de esta ecuación encontramos dos factores agrupados los cuales han sido agrupados utilizando los paréntesis grandes. El primero de ellos contiene la solución para los operadores de electrón y el segundo para los operadores de hueco. Al no contener H^{ee} ningún operador de hueco, este último factor es el resultado de evaluar $\langle 0 | d_{j'_{N_h}} \cdots d_{j'_1} d_{j_1}^\dagger \cdots d_{j_{N_h}}^\dagger | 0 \rangle$. Vemos que contiene $N_h!$ términos, los cuales son un producto de N_h deltas. El factor correspondiente al cálculo con los operadores de electrón contiene $N_e! N_e(N_e - 1)$ términos. Finalmente el factor entre corchetes contiene el signo correspondiente a cada término de la suma.

Para poder escribir de forma compacta la solución, hemos recurrido a una serie de elementos auxiliares. Por un lado la función $\text{wc}(m, n, r)$ y por otro las matrices $\text{vc}[k, l]$ y $\text{sc}[k]$ ¹. Donde la c representa a cualquiera de los dos tipos de portadores. A continuación procedemos a dar la definición de cada una de estas matrices.

- $\text{wc}(m, n, r)$: Esta función fija el subíndice de las deltas de Kronecker previniendo repeticiones con los subíndices de la integral del potencial de Coulomb. Esto es, $\text{wc}(m, n, 1) = m$, $\text{wc}(m, n, 2) = n$ y $\text{wc}(m, n, r)$, con $r = 3, \dots, N_c$ toma los valores de 1 a N_c de forma creciente siempre y cuando sean diferentes de m y n . Por ejemplo, sean $m = 1$, $n = 3$ y $N_c = 4$, entonces $\text{wc}(1, 3, 3) = 2$ y $\text{wc}(1, 3, 4) = 4$.
- $\text{vc}[k, l]$: En esta matriz $k = 1, \dots, N_c!$ y $l = 1, \dots, N_c$. Aquí se almacenan las $N_c!$ permutaciones de los N_c subíndices. Esto es, k recorre los $N_c!$ términos del determinante $\text{Det}(k_1, k_2, \dots, k_{N_c})$ y l los N_c factores de

¹No hemos empleado subíndices para reducir, en la medida de lo posible, el número de estos. No se debe confundir con la notación empleada para representar funciones.

cada término. Por ejemplo, sea $N_c = 3$, entonces

$$\text{vc} \equiv \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ k_2 & k_3 & k_1 \\ k_3 & k_1 & k_2 \\ k_1 & k_3 & k_2 \\ k_2 & k_1 & k_3 \\ k_3 & k_2 & k_1 \end{bmatrix} \quad (\text{E.4})$$

- $\text{sc}[k]$: Esta matriz contiene el signo de las permutaciones almacenadas en $\text{vc}[k, l]$.

$$\blacksquare \langle l_{(N_e, N_h)} | H^{\text{eh}} | l'_{(N_e, N_h)} \rangle$$

Los comentarios que hemos realizado para el cálculo del elemento de matriz que contempla la interacción electrón-electrón son igualmente válidos aquí. Por consiguiente procederemos a escribir la expresión general:

$$\begin{aligned} \langle l_{(N_e, N_h)} | H^{\text{eh}} | l'_{(N_e, N_h)} \rangle &= - \langle l_{(N_e, N_h)} | \sum_{m, n, o, p} V_{m, n, o, p} c_m^\dagger d_n^\dagger d_o c_p | l'_{(N_e, N_h)} \rangle \\ &= - \sum_{m=1}^{N_e} \sum_{k=1}^{N_e!} \sum_{n=1}^{N_h} \sum_{o=1}^{N_h!} V_{i_m, j_n, j'_{\text{vh}[o,1]}, i'_{\text{ve}[k,1]}} \prod_{r=2}^{N_e} \delta_{i_{\text{we}(m,r)}, i'_{\text{ve}[k,r]}} \prod_{p=2}^{N_h} \delta_{j_{\text{wh}(n,p)}, j'_{\text{vh}(o,p)}} \\ &\quad \times [(-1)^{m-1} (-1)^{n-1} \text{se}[k] \text{sh}[o]]. \quad (\text{E.5}) \end{aligned}$$

En esta expresión hemos recurrido a los mismo elementos auxiliares introducidos al escribir el término H^{ee} . La única diferencia radica en la definición de función $\text{wc}(m, r)$, en la que ahora solo tiene dos argumentos, de forma que, $\text{wc}(m, 1) = m$.

E.2. Expresión para el cálculo de V_{k_1, k_2, k_3, k_4}

En esta apartado vamos a detallar los pasos que hemos seguido para resolver la integral:

$$V_{k_1, k_2, k_3, k_4} = \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \psi_{k_1}^{(M_1)*}(\mathbf{r}_1) \psi_{k_2}^{(M_2)*}(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{k_3}^{(M_3)}(\mathbf{r}_2) \psi_{k_4}^{(M_4)}(\mathbf{r}_1). \quad (\text{E.6})$$

Esta integral es de dimensión seis, por lo que su resolución no resulta sencilla. En el caso de que las funciones de onda fuesen soluciones de un problema con un potencial de confinamiento tipo oscilador armónico bidimensional, la Ec. (E.6) sí que admite soluciones analíticas [204, 230]. Lamentablemente, para las funciones de onda obtenidas mediante el modelo desarrollado en el Capítulo 3 no es posible reducir el problema a una simple fórmula algebraica.

En primer lugar vamos a realizar la integración de las funciones de Bloch. Para ello sustituimos las expresiones (3.41) y (3.46) en (E.6), de forma que:

$$V_{k_1, k_2, k_3, k_4} = \sum_{j_1} [A_{k_1, j_1}^{(M_1)}]_{\alpha_1, \mu_1} [A_{k_4, j_1}^{(M_4)}]_{\alpha_4, \mu_4} \sum_{j_2} [A_{k_2, j_2}^{(M_2)}]_{\alpha_2, \mu_2} [A_{k_3, j_2}^{(M_3)}]_{\alpha_3, \mu_3} \times \langle \xi_{\alpha_1, \mu_1}^{(m_1)} \xi_{\alpha_2, \mu_2}^{(m_2)} | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \xi_{\alpha_3, \mu_3}^{(m_3)} \xi_{\alpha_4, \mu_4}^{(m_4)} \rangle \quad (\text{E.7})$$

donde las funciones $\xi_{\alpha, \mu}^{(m)}(\mathbf{r})$ están definidas en la Ec. (3.12).

Para avanzar en el tratamiento analítico de la integral, hemos expresado el potencial de Coulomb como una serie de Fourier. Con ello se consigue una expresión más sencilla de manipular, pero, como contrapartida, se debe evaluar una integral adicional.

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{4\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (\text{E.8})$$

Calculando el paso al límite continuo de la suma en \mathbf{q} y tras realizar una serie de manipulaciones se obtiene:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int_0^\infty dq_\perp J_0(q_\perp |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|) e^{-q_\perp |z_1 - z_2|}. \quad (\text{E.9})$$

Por último, es posible factorizar la dependencia en ρ_1 y ρ_2 con ayuda de la expresión [237]:

$$J_0(\kappa |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|) = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n \cos[n(\theta_1 - \theta_2)] J_n(\kappa \rho_1) J_n(\kappa \rho_2), \quad (\text{E.10})$$

donde

$$\sigma_n = \begin{cases} 1 & \text{si } n = 0 \\ 2 & \text{si } n \neq 0 \end{cases}. \quad (\text{E.11})$$

Finalmente el potencial de Coulomb queda expresado como

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n \cos[n(\theta_1 - \theta_2)] \int_0^\infty dq_\perp J_n(q_\perp \rho_1) J_n(q_\perp \rho_2) e^{-q_\perp |z_1 - z_2|} \quad (\text{E.12})$$

Sustituyendo (E.12) en (E.7) reducimos el problema a una integral en q_{\perp} :

$$\langle \xi_{\alpha_1, \mu_1}^{(m_1)} \xi_{\alpha_2, \mu_2}^{(m_2)} | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \xi_{\alpha_3, \mu_3}^{(m_3)} \xi_{\alpha_4, \mu_4}^{(m_4)} \rangle = \delta_{m_1+m_2, m_3+m_4} \int_0^{\infty} dq_{\perp} G_{\alpha_1, \alpha_4}^{(m_1, m_4)}(q_{\perp}) G_{\alpha_2, \alpha_3}^{(m_2, m_3)}(q_{\perp}) \mathcal{Y}_{\mu_1, \mu_4; \mu_2, \mu_3}(q_{\perp}). \quad (\text{E.13})$$

donde hemos introducido las siguientes funciones auxiliares

$$G_{\alpha, \alpha'}^{(m, m')}(q_{\perp}) = \int_0^{\mathcal{R}} \rho d\rho \mathcal{R}^2 \mathcal{N}_{\alpha}^{(m)} J_m(k_{\alpha}^{(m)} \rho) J_{|m-m'|}(q_{\perp} \mathcal{R} \rho) \mathcal{N}_{\alpha'}^{(m')} J_{m'}(k_{\alpha'}^{(m')} \rho), \quad (\text{E.14})$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{\mu, \nu; \mu', \nu'}(q_{\perp}) &= 4 \int_{-1}^0 d\zeta \int_{-1}^0 d\zeta' \sin(\mu\pi\zeta) \sin(\mu'\pi\zeta') e^{-q_{\perp} \mathcal{Z} |\zeta - \zeta'|} \sin(\nu\pi\zeta) \sin(\nu'\pi\zeta') \\ &= (q_{\perp} \mathcal{Z}) \left\{ \frac{2}{\sigma_{|\mu-\nu|}} \frac{\delta_{|\mu-\nu|, |\mu'-\nu'|} - \delta_{|\mu-\nu|, |\mu'+\nu'|}}{(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu - \nu)^2} - \frac{2}{\sigma_{|\mu+\nu|}} \frac{\delta_{|\mu+\nu|, |\mu'-\nu'|} - \delta_{|\mu+\nu|, |\mu'+\nu'|}}{(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu + \nu)^2} \right\} \\ &\quad - \frac{[1 + (-1)^{\mu+\nu+\mu'+\nu'}] [1 - (-1)^{\mu+\nu} e^{-q_{\perp} \mathcal{Z}}] (q_{\perp} \mathcal{Z})^2 (2\pi)^4 \mu \nu \mu' \nu'}{[(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu - \nu)^2] [(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu + \nu)^2] [(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu' - \nu')^2] [(q_{\perp} \mathcal{Z})^2 + (\mu' + \nu')^2]}. \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

La delta de Kronecker que aparece en la Ec. (E.13) demuestra que la interacción Coulombiana conserva la proyección z del momento angular total. Aunque en la Ecuación aparece el momento angular orbital de la función envolvente, es fácil comprobar que $M_1 + M_2 = M_3 + M_4$ en virtud de la ortogonalidad de las amplitudes de Bloch.

Hemos conseguido reducir la integral de seis dimensiones definida en (E.6) a tres integrales. Dos de ellas nos vemos obligados a realizarlas numéricamente y es por ello que la evaluación de cada una de estas integrales puede llevar varios minutos en un procesador Itanium². El proceso se puede reducir a ~ 1 s, si las integrales en ρ y en z son almacenadas en un *array* y en la ejecución del programa únicamente se evalúa la integral en q_{\perp} .

Bibliografía

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, y N. N. Ledentsov. *Quantum Dot Heterostructures* (John Wiley & Sons, 1999)
- [2] J. Y. Marzin, J. M. Gerard, A. Izrael, D. Barrier, y G. Bastard. Photoluminescence of single InAs quantum dots obtained by self-organized growth on GaAs. *Phys. Rev. Lett.* **73**(5), 716–719 (1994)
- [3] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, y P. M. Petroff. Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of InGaAs on GaAs-surfaces. *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3203–3205 (1993)
- [4] M. Grundmann, J. Christen, N. N. Ledentsov, J. Bohrer, D. Bimberg, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, U. Gosele, J. Heydenreich, V. M. Ustinov, A. Y. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kopev, y Z. I. Alferov. Ultranarrow luminescence lines from single quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **74**(20), 4043–4046 (1995)
- [5] Quantum Information Science and Technology Roadmap, <http://qist.lanl.gov>.
- [6] L. Jacak, P. Hawrylak, y A. Wojs. *Quantum Dots* (Springer, 1998)
- [7] F. C. Frank y J. H. van der Merwe. One-dimensional dislocation. 1. Static theory. *Proceedings of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **198**, 205–216 (1949)
- [8] I. N. Stranski y L. Krastanow. Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften Wien, Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse, Abteilung IIb, Chemie* **146**, 797 (1938)
- [9] V. V. Mitin, V. I. Pipa, A. V. Sergeev, M. Dutta, y M. Strosio. High-gain quantum-dot infrared photodetector. *Infrared Physics and Technology* **42**(3-5), 467–472 (2001)

- [10] D. Granados y J. M. García. In(Ga)As self-assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401–2403 (2003)
- [11] Q. H. Xie, A. Madhukar, P. Chen, y N. P. Kobayashi. Vertically self-organized InAs quantum box islands on GaAs(100). *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2542–2545 (1995)
- [12] Q. H. Xie, P. Chen, y A. Madhukar. InAs island-induced-strain driven adatom migration during GaAs overlayer growth. *Appl. Phys. Lett.* **65**, 2051–2053 (1994)
- [13] S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Gosele, J. Heydenreich, U. Richter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, A. Y. Egorov, P. S. Kopev, y Z. I. Alferov. Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix. *Phys. Rev. B* **51**, 14766–14769 (1995)
- [14] D. Leonard, K. Pond, y P. M. Petroff. Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs. *Phys. Rev. B* **50**, 11687–11692 (1994)
- [15] D. M. Bruls, J. W. A. M. Vugs, P. M. Koenraad, H. W. M. Salemink, J. H. Wolter, M. Hopkinson, M. S. Skolnick, F. Long, y S. P. A. Gill. Determination of the shape and indium distribution of low-growth-rate InAs quantum dots by cross-sectional scanning tunneling microscopy. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1708–1710 (2002)
- [16] P. W. Fry, I. E. Itskevich, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, J. J. Finley, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, L. R. Wilson, I. A. Larkin, P. A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J. P. R. David, A. G. Cullis, G. Hill, y J. C. Clark. Inverted electron-hole alignment in InAs-GaAs self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 733–736 (2000)
- [17] T. Yang, J. Tatebayashi, S. Tsukamoto, M. Nishioka, y Y. Arakawa. Narrow photoluminescence linewidth (< 17 meV) from highly uniform self-assembled InAs/GaAs quantum dots grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2817–2819 (2004)
- [18] D. Granados, J. M. García, T. Ben, y S. I. Molina. Vertical order in stacked layers of self-assembled In(Ga)As quantum rings on GaAs (001). *Appl. Phys. Lett.* **86**, 071918 (2005)
- [19] I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke, J. Peisl, J. Stangl, G. Bauer, J. M. García, y P. M. Petroff. Nanometer-scale resolution of strain and interdiffusion in

- self-assembled InAs/GaAs quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1694–1697 (2000)
- [20] M. Cardona y P. Y. Yu. *Fundamentals of Semiconductors* (Springer-Verlag, 1996)
- [21] K. Karrai y R. J. Warburton. Optical transmission and reflection spectroscopy of single quantum dots. *Superlattices Microstruct.* **33**, 311–337 (2003)
- [22] J. B. Alén Millán. *Espectroscopía óptica confocal aplicada al estudio de cajas cuánticas aisladas de Arseniuro de Indio (InAs)*. Tesis Doctoral, Institut de Ciència dels Materials, Universitat de València (2004)
- [23] S. Fafard, R. Leon, D. Leonard, J. L. Merz, y P. M. Petroff. Visible photoluminescence from n-dot ensembles and the linewidth of ultrasmall $\text{Al}_y\text{In}_{(1-y)}\text{As}$ $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ quantum dots. *Phys. Rev. B* **50**, 8086–8089 (1994)
- [24] M. S. Skolnick y D. J. Mowbray. Self-assembled semiconductor quantum dots: Fundamental physics and device applications. *Annu. Rev. Mater. Res.* **34**, 181–218 (2004)
- [25] P. Michler (Ed.). *Single Quantum Dots*, tomo 90 de *Fundamentals, Applications and New Concepts Series: Topics in Applied Physics* (Springer, 2003)
- [26] J. Martínez-Pastor, B. Alen, C. Rudamas, P. Roussignol, J. M. García, y L. González. Vertical stacks of small InAs/GaAs self-assembled dots: resonant and non-resonant excitation. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **17**(1-4), 46–49 (2003)
- [27] Y. Toda, S. Shinomori, K. Suzuki, y Y. Arakawa. Polarized photoluminescence spectroscopy of single self-assembled InAs quantum dots. *Phys. Rev. B* **58**, R10147–R10150 (1998)
- [28] E. Dekel, D. Gershoni, E. Ehrenfreund, D. Spektor, J. M. García, y P. M. Petroff. Multiexciton spectroscopy of a single self-assembled quantum dot. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4991–4994 (1998)
- [29] B. Alen, J. Martínez-Pastor, D. Granados, y J. M. García. Continuum and discrete excitation spectrum of single quantum rings. *Phys. Rev. B* **72**, 155331 (2005)

- [30] D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook, D. S. Katzer, y D. Park. Homogeneous linewidths in the optical spectrum of a single gallium arsenide quantum dot. *Science* **273**, 87–90 (1996)
- [31] A. Kuther, M. Bayer, A. Forchel, A. Gorbunov, V. B. Timofeev, F. Schafer, y J. P. Reithmaier. Zeeman splitting of excitons and biexcitons in single $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}/\text{GaAs}$ self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B* **58**, R7508–R7511 (1998)
- [32] S. Nakamura, G. Fasol, y S. J. Pearton. *The Blue Laser Diode : The Complete Story* (Springer, 2000)
- [33] B. Daudin, G. Feuillet, J. Hubner, Y. Samson, F. Widmann, A. Philippe, C. Bru-Chevallier, G. Guillot, E. Bustarret, G. Bentoumi, y A. Deneuve. How to grow cubic GaN with low hexagonal phase content on (001) SiC by molecular beam epitaxy. *J. Appl. Phys.* **84**, 2295–2300 (1998)
- [34] D. J. As, F. Schmilgus, C. Wang, B. Schottker, D. Schikora, y K. Lischka. The near band edge photoluminescence of cubic GaN epilayers. *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1311–1313 (1997)
- [35] X. L. Sun, H. Yang, L. X. Zheng, D. P. Xu, J. B. Li, Y. T. Wang, G. H. Li, y Z. G. Wang. Stability investigation of cubic GaN films grown by metalorganic chemical vapor deposition on GaAs (001). *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2827–2829 (1999)
- [36] C. Y. Yeh, Z. W. Lu, S. Froyen, y A. Zunger. Zinc-blende-wurtzite polytypism in semiconductors. *Phys. Rev. B* **46**, 10086–10097 (1992)
- [37] F. Jona y G. Shirane. *Ferroelectric Crystals* (Dover, 1993)
- [38] F. C. Frank. On Miller–Bravais indices and four-dimensional vectors. *Acta Crystallographica* **18**(5), 862–866 (1965)
- [39] C. Skierbiszewski, Z. Wasilewski, M. Siekacz, A. Feduniewicz, B. Pastuszka, I. Grzegory, M. Leszczynski, y S. Porowski. Growth optimisation of the GaN layers and GaN/AlGaN heterojunctions on bulk GaN substrates using plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Physica Status Solidi A-Applied Research* **201**, 320–323 (2004)
- [40] O. Ambacher. Growth and applications of group III nitrides. *Journal of Physics D-Applied Physics* **31**, 2653–2710 (1998)

- [41] S. Strife y H. Morkoc. GaN, AlN, and InN - a review. *Journal of Vacuum Science & Technology B* **10**, 1237–1266 (1992)
- [42] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, y J. L. Rouviere. Stranski-Krastanov growth mode during the molecular beam epitaxy of highly strained GaN. *Phys. Rev. B* **56**, R7069–R7072 (1997)
- [43] J. Brown, C. Elsass, C. Poblenz, P. M. Petroff, y I. S. Speck. Temperature dependent photoluminescence of MBE grown gallium nitride quantum dots. *Physica Status Solidi B-Basic Research* **228**, 199–202 (2001)
- [44] H. Morko, A. Neogi, y M. Kuball. Growth Structure, and Optical Properties of III-Nitride Quantum Dots. *Material Research Society Symposium Proceedings* **799**, Z6.5.1/N8.5.1/T6.5.1 (2004)
- [45] B. Damilano, N. Grandjean, J. Massies, y F. Semond. GaN and GaInN quantum dots: an efficient way to get luminescence in the visible spectrum range. *Appl. Surf. Sci.* **164**, 241–245 (2000)
- [46] M. Miyamura, K. Tachibana, T. Someya, y Y. Arakawa. Stranski-Krastanow growth of GaN quantum dots by metalorganic chemical vapor deposition. *J. Cryst. Growth* **237**, 1316–1319 (2002)
- [47] S. Tanaka, S. Iwai, y Y. Aoyagi. Self-assembling GaN quantum dots on $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$ surfaces using a surfactant. *Appl. Phys. Lett.* **69**, 4096–4098 (1996)
- [48] T. J. Goodwin, V. J. Leppert, S. H. Risbud, I. M. Kennedy, y H. W. H. Lee. Synthesis of gallium nitride quantum dots through reactive laser ablation. *Appl. Phys. Lett.* **70**, 3122–3124 (1997)
- [49] K. Kawasaki, D. Yamazaki, A. Kinoshita, H. Hirayama, K. Tsutsui, y Y. Aoyagi. GaN quantum-dot formation by self-assembling droplet epitaxy and application to single-electron transistors. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 2243–2245 (2001)
- [50] C. Adelman, B. Daudin, R. A. Oliver, G. A. D. Briggs, y R. E. Rudd. Nucleation and growth of GaN/AlN quantum dots. *Phys. Rev. B* **70**, 125427 (2004)
- [51] N. Gogneau, D. Jalabert, E. Monroy, T. Shibata, M. Tanaka, y B. Daudin. Structure of GaN quantum dots grown under “modified Stranski-Krastanow” conditions on AlN. *J. Appl. Phys.* **94**, 2254–2261 (2003)

- [52] M. Miyamura, K. Tachibana, y Y. Arakawa. High-density and size-controlled GaN self-assembled quantum dots grown by metalorganic chemical vapor deposition. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3937–3939 (2002)
- [53] F. Widmann, J. Simon, B. Daudin, G. Feuillet, J. L. Rouviere, N. T. Pelekanos, y G. Fishman. Blue-light emission from GaN self-assembled quantum dots due to giant piezoelectric effect. *Phys. Rev. B* **58**, R15989–R15992 (1998)
- [54] F. Widmann, B. Daudin, G. Feuillet, Y. Samson, J. L. Rouviere, y N. Pelekanos. Growth kinetics and optical properties of self-organized GaN quantum dots. *J. Appl. Phys.* **83**, 7618–7624 (1998)
- [55] J. L. Rouviere, J. Simon, N. Pelekanos, B. Daudin, y G. Feuillet. Preferential nucleation of GaN quantum dots at the edge of AlN threading dislocations. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2632–2634 (1999)
- [56] S. Kako, M. Miyamura, K. Tachibana, K. Hoshino, y Y. Arakawa. Size-dependent radiative decay time of excitons in GaN/AlN self-assembled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 984–986 (2003)
- [57] S. Kako, K. Hoshino, S. Iwamoto, S. Ishida, y Y. Arakawa. Exciton and biexciton luminescence from single hexagonal GaN/AlN self-assembled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 64–66 (2004)
- [58] B. Damilano, N. Grandjean, F. Semond, J. Massies, y M. Leroux. From visible to white light emission by GaN quantum dots on Si(111) substrate. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 962–964 (1999)
- [59] J. Kudrna, P. G. Gucciardi, A. Vinattieri, M. Colocci, B. Damilano, F. Semond, N. Grandjean, y J. Massies. Steady-state and time-resolved near-field optical spectroscopy of GaN/AlN quantum dots and InGaN/GaN quantum wells. *Physica Status Solidi A-Applied Research* **190**, 155–160 (2002)
- [60] K. Moumanis, A. Helman, F. Fossard, M. Tchernycheva, A. Lusson, F. H. Julien, B. Damilano, N. Grandjean, y J. Massies. Intraband absorptions in GaN/AlN quantum dots in the wavelength range of 1.27–2.4 μm . *Appl. Phys. Lett.* **82**, 868–870 (2003)
- [61] S. Kalliakos, T. Bretagnon, P. Lefebvre, T. Taliencio, B. Gil, N. Grandjean, B. Damilano, A. Dussaigne, y J. Massies. Photoluminescence energy and linewidth in GaN/AlN stackings of quantum dot planes. *J. Appl. Phys.* **96**, 180–185 (2004)

- [62] G. Salviati, O. Martinez, M. Mazzoni, F. Rossi, N. Armani, P. Gucciar-di, A. Vinattieri, D. Alderighi, M. Colocci, M. A. González, L. F. Sanz-Santacruz, y J. Massies. Optical and structural characterization of GaN/AlN quantum dots grown on Si(111). *Journal of Physics-Condensed Matter* **14**, 13329–13336 (2002)
- [63] N. Garro, A. Cros, J. A. Budagosky, A. Cantarero, A. Vinattieri, M. Gurioli, S. Founta, H. Mariette, y B. Daudin. Reduction of the internal electric field in wurtzite a-plane GaN self-assembled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 011101 (2005)
- [64] Varios. *Nanoscience and nanotechnologies: opportunities and uncertainties* (London: The Royal Society & The Royal Academy of Engineering, 2004)
- [65] J. Stangl, V. Holy, y G. Bauer. Structural properties of self-organized semi-conductor nanostructures. *Reviews of Modern Physics* **76**, 725–783 (2004)
- [66] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, y A. Zunger. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. *J. Appl. Phys.* **83**, 2548–2554 (1998)
- [67] M. J. Musgrave y J. A. Pople. General valence force field for diamond. *Proceedings of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **268**, 474–& (1962)
- [68] P. N. Keating. Effect of invariance requirements on elastic strain energy of crystals with application to diamond structure. *Physical Review* **145**, 637 (1966)
- [69] S. Erkoç. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters* **278**, 80–105 (1997)
- [70] J. F. Nye. *Physical Properties of Crystals* (Oxford University Press, 1985)
- [71] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **241**, 376–396 (1957)
- [72] J. D. Eshelby. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. *Proceedings of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **252**, 561–569 (1959)

- [73] R. M. Martin. *Electronic Structure, Basic Theory and Practical Methods*. 1 ed^{ón}. (Cambridge University Press, 2004)
- [74] J. C. Slater y G. F. Koster. Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Physical Review* **94**, 1498–1524 (1954)
- [75] Y. C. Chang. Bond-orbital models for superlattices. *Phys. Rev. B* **37**, 8215–8222 (1988)
- [76] G. T. Einevoll y Y. C. Chang. Effective bond-orbital model for acceptor states in semiconductors and quantum dots. *Phys. Rev. B* **40**, 9683–9697 (1989)
- [77] V. Heine. *Solid State Physics*, cap. 1, pág. 1 (Academic, New York, 1970)
- [78] M. V. R. Krishna y R. A. Friesner. Exciton spectra of semiconductor clusters. *Physical Review Letters* **67**, 629–632 (1991)
- [79] L. W. Wang, J. N. Kim, y A. Zunger. Electronic structures of [110]-faceted self-assembled pyramidal InAs/GaAs quantum dots. *Phys. Rev. B* **59**, 5678–5687 (1999)
- [80] N. Baer, S. Schulz, S. Schumacher, P. Gartner, G. Czycholl, y F. Jahnke. Optical properties of self-organized wurtzite InN/GaN quantum dots: A combined atomistic tight-binding and full configuration interaction calculation. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 231114 (2005)
- [81] W. D. Sheng, S. J. Cheng, y P. Hawrylak. Multiband theory of multi-exciton complexes in self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B* **71**, 035316 (2005)
- [82] V. Ranjan, G. Allan, C. Priester, y C. Delerue. Self-consistent calculations of the optical properties of GaN quantum dots. *Phys. Rev. B* **68**, 115305 (2003)
- [83] J. G. Diaz, J. Planelles, W. Jaskolski, J. Aizpurua, y G. W. Bryant. Nanocrystal molecules and chains. *J. Chem. Phys.* **119**, 7484–7490 (2003)
- [84] T. Saito y Y. Arakawa. Electronic structure of piezoelectric In_{0.2}Ga_{0.8}N quantum dots in GaN calculated using a tight-binding method. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **15**, 169–181 (2002)
- [85] G. Klimeck, F. Oyafuso, T. B. Boykin, R. C. Bowen, y P. von Allmen. Development of a nanoelectronic 3-D (NEMO 3-D) simulator for multimillion atom

- simulations and its application to alloyed quantum dots. *CMES-Computer Modeling in Engineering & Sciences* **3**, 601–642 (2002)
- [86] T. Saito, J. N. Schulman, y Y. Arakawa. Strain-energy distribution and electronic structure of InAs pyramidal quantum dots with uncovered surfaces: Tight-binding analysis. *Phys. Rev. B* **57**, 13016–13019 (1998)
- [87] P. O. Lowdin. A note on the quantum-mechanical perturbation theory. *J. Chem. Phys.* **19**, 1396–1401 (1951)
- [88] G. L. Bir y G. E. Pikus. *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974)
- [89] S. L. Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices* (Wiley-Interscience, 1995)
- [90] Y. Zhang. Motion of electrons in semiconductors under inhomogeneous strain with application to laterally confined quantum wells. *Phys. Rev. B* **49**(20), 14352–14366 (1994)
- [91] J. R. Chelikowsky y M. L. Cohen. Nonlocal pseudopotential calculations for electronic-structure of 11 diamond and zincblende semiconductors. *Phys. Rev. B* **14**, 556–582 (1976)
- [92] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, y F. Laloë. *Quantum Mechanics* (Hermann and John Wiley & Sons, 1977)
- [93] H. R. Trebin, U. Rossler, y R. Ranvaud. Quantum resonances in the valence bands of zincblende semiconductors. 1. Theoretical aspects. *Phys. Rev. B* **20**, 686–700 (1979)
- [94] E. O. Kane. Band structure of indium antimonide. *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249–261 (1957)
- [95] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, y L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *J. Appl. Phys.* **89**(11), 5815–5875 (2001)
- [96] R. Beresford. Full-zone $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method of band structure calculation for wurtzite semiconductors. *J. Appl. Phys.* **95**, 6216–6224 (2004)
- [97] Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, y M. A. Stroscio. Envelope-function formalism for valence bands in wurtzite quantum wells. *Phys. Rev. B* **53**, 1997–2009 (1996)

- [98] S. L. Chuang y C. Chang. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method for strained wurtzite semiconductors. *Phys. Rev. B* **54**, 2491–2504 (1996)
- [99] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, y M. van Schilfgaarde. Effective masses and valence-band splittings in GaN and AlN. *Phys. Rev. B* **56**, 7363–7375 (1997)
- [100] G. Bastard. Super-lattice band-structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B* **24**, 5693–5697 (1981)
- [101] J. M. Luttinger y W. Kohn. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review* **97**, 869–883 (1955)
- [102] D. J. Bendaniel y C. B. Duke. Space-charge effects on electron tunneling. *Physical Review* **152**, 683–& (1966)
- [103] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Halstead Press, New York, 1988)
- [104] D. L. Smith y C. Mailhot. Theory of semiconductor superlattice electronic structure. *Reviews of Modern Physics* **62**, 173–234 (1990)
- [105] M. G. Burt. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics-Condensed Matter* **4**, 6651–6690 (1992)
- [106] R. van Dalen y P. N. Stavrinou. General rules for constructing valence bands effective mass hamiltonians with correct operator order for heterostructures with arbitrary orientations. *Semiconductor Science and Thechnology* **13**, 11–17 (1998)
- [107] F. Mireles y S. E. Ulloa. Strain and crystallographic orientation effects on the valence subbands of wurtzite quantum wells. *Phys. Rev. B* **62**, 2562–2572 (2000)
- [108] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics* (Wiley; 3 edition, 1998)
- [109] V. A. Shchukin y D. Bimberg. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces. *Reviews of Modern Physics* **71**, 1125–1171 (1999)
- [110] R. M. Martin. Eleastic properties of ZnS structure semiconductors. *Phys. Rev. B* **1**, 4005–& (1970)

- [111] M. Grundmann, O. Stier, y D. Bimberg. Electronic states in strained cleaved-edge-overgrowth quantum wires and quantum dots. *Phys. Rev. B* **58**, 10557–10561 (1998)
- [112] A. J. Williamson, L. W. Wang, y A. Zunger. Theoretical interpretation of the experimental electronic structure of lens-shaped self-assembled InAs/GaAs quantum dots. *Phys. Rev. B* **62**, 12963–12977 (2000)
- [113] F. H. Stillinger y T. A. Weber. Computer-simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B* **31**, 5262–5271 (1985)
- [114] J. Tersoff. Modeling solid-state chemistry - interatomic potentials for multi-component systems. *Phys. Rev. B* **39**, 5566–5568 (1989)
- [115] C. Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. 3 ed^{ón}. (Reverté, 1997)
- [116] J. D. Eshelby. The continuum theory of lattice defects. *Solid State Physics-Advances in Research and Applications* **3**, 79–144 (1956)
- [117] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids* (Martinus Nijhoff, 1982)
- [118] A. D. Andreev y E. P. O'Reilly. Theory of the electronic structure of GaN/AlN hexagonal quantum dots. *Phys. Rev. B* **62**, 15851–15870 (2000)
- [119] T. C. T. Ting. *Anisotropic Elasticity* (Oxford University Press, Oxford, UK, 1996)
- [120] M. Sadd. *Elasticity* (Academic Press Inc., London, UK, 2005)
- [121] A. D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux, y E. P. O'Reilly. Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape. *J. Appl. Phys.* **86**, 297–305 (1999)
- [122] V. Holy, A. A. Darhuber, J. Stangl, S. Zerlauth, F. Schaffler, G. Bauer, N. Darowski, D. Lubbert, U. Pietsch, y I. Vavra. Coplanar and grazing incidence X-Ray-diffraction investigation of self-organized Si/Ge quantum dot multilayers. *Phys. Rev. B* **58**, 7934–7943 (1998)
- [123] E. Anastasakis y M. Cardona. *High Pressure Semiconductor Physics II*, tomo 55 de *Semiconductors and Semimetals*, cap. Phonons, Strains, and Pressure in Semiconductors, pág. 117 (Academic, New York, 1998)
- [124] M. Grundmann, O. Stier, y D. Bimberg. InAs/GaAs pyramidal quantum dots - strain distribution, optical phonons, and electronic-structure. *Phys. Rev. B* **52**, 11969–11981 (1995)

- [125] D. P. Williams, A. D. Andreev, D. A. Faux, y E. P. O'Reilly. Surface integral determination of built-in electric fields and analysis of exciton binding energies in nitride-based quantum dots. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **21**, 358–362 (2004)
- [126] D. P. Williams, A. D. Andreev, y E. P. O'Reilly. Self-consistent calculations of exciton, biexciton and charged exciton energies in inGaN/GaN quantum dots. *Superlattices Microstruct.* **36**, 791–798 (2004)
- [127] O. L. Lazarenkova y A. A. Balandin. Electron and phonon energy spectra in a three-dimensional regimented quantum dot superlattice. *Phys. Rev. B* **66**(24), 245319 (2002)
- [128] W. Dorsch, H. P. Strunk, H. Wawra, G. Wagner, J. Groenen, y R. Carles. Strain-induced island scaling during $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ heteroepitaxy. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 179–181 (1998)
- [129] J. A. Floro, M. B. Sinclair, E. Chason, L. B. Freund, R. D. Twisten, R. Q. Hwang, y G. A. Lucadamo. Novel SiGe island coarsening kinetics: Ostwald ripening and elastic interactions. *Phys. Rev. Lett.* **84**(4), 701–704 (2000)
- [130] F. Liu, A. H. Li, y M. G. Lagally. Self-assembly of two-dimensional islands via strain-mediated coarsening. *Phys. Rev. Lett.* **87**12(12), 126103 (2001)
- [131] J. Y. Liang, H. Chik, A. J. Yin, y J. Xu. Two-dimensional lateral superlattices of nanostructures: Nonlithographic formation by anodic membrane template. *J. Appl. Phys.* **91**, 2544–2546 (2002)
- [132] J. Tersoff, C. Teichert, y M. G. Lagally. Self-organization in growth of quantum dot superlattices. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1675–1678 (1996)
- [133] N. Gogneau, F. Fossard, E. Monroy, S. Monnoye, H. Mank, y B. Daudin. Effects of stacking on the structural and optical properties of self-organized GaN/AlN quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4224–4226 (2004)
- [134] V. Chamard, T. H. Metzger, E. Bellet-Amalric, B. Daudin, C. Adelmann, H. Mariette, y G. Mula. Structure and ordering of GaN quantum dot multilayers. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1971–1973 (2001)
- [135] V. Chamard, T. H. Metzger, M. Sztucki, V. Holy, M. Tolan, E. Bellet-Amalric, C. Adelmann, B. Daudin, y H. Mariette. On the driving forces for the vertical alignment in nitride quantum dot multilayers. *Europhys. Lett.* **63**, 268–274 (2003)

- [136] H. Shin, W. Lee, y Y. H. Yoo. Comparison of strain fields in truncated and un-truncated quantum dots in stacked InAs/GaAs nanostructures with varying stacking periods. *Journal of Physics-Condensed Matter* **15**, 3689–3699 (2003)
- [137] H. Shin, W. Lee, y Y. H. Yoo. Effect of the stacking period on the strain field in InAs/GaAs quantum dots. *Nanotechnology* **14**, 742–747 (2003)
- [138] H. Shin, Y. H. Yoo, y W. Lee. Analysis of strain-modified confinement potentials in vertically stacked InAs/GaAs quantum dot nanostructures with varying stacking period. *Journal of Physics D-Applied Physics* **36**, 2612–2618 (2003)
- [139] G. S. Pearson y D. A. Faux. Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots. *J. Appl. Phys.* **88**, 730–736 (2000)
- [140] K. Hoshino y Y. Arakawa. Formation of high-density GaN self-assembled quantum dots by MOCVD. *J. Cryst. Growth* **272**, 161–166 (2004)
- [141] D. Gottlieb y C. W. Shu. On the Gibbs phenomenon and its resolution. *SIAM Review* **39**, 644–668 (1997)
- [142] S. Tandon, M. Beleggia, Y. Zhu, y M. De Graef. On the computation of the demagnetization tensor for uniformly magnetized particles of arbitrary shape. part II: numerical approach. *J. Magn. Magn. Mater.* **271**, 27–38 (2004)
- [143] I. Kegel, T. H. Metzger, J. Peisl, J. Stangl, G. Bauer, y D. Smilgies. Vertical alignment of multilayered quantum dots studied by X-Ray grazing-incidence diffraction. *Phys. Rev. B* **60**, 2516–2521 (1999)
- [144] M. Arlery, J. L. Rouviere, F. Widmann, B. Daudin, G. Feuillet, y H. Mariette. Quantitative characterization of GaN quantum-dot structures in AlN by high-resolution transmission electron microscopy. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3287–3289 (1999)
- [145] V. Chamard, T. Schulli, M. Sztucki, T. H. Metzger, E. Sarigiannidou, J. L. Rouviere, M. Tolan, C. Adelman, y B. Daudin. Strain distribution in nitride quantum dot multilayers. *Phys. Rev. B* **69**, 125327 (2004)
- [146] V. Holy, G. Springholz, M. Pinczolit, y G. Bauer. Strain induced vertical and lateral correlations in quantum dot superlattices. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 356–359 (1999)

- [147] D. W. Moon, H. I. Lee, B. Cho, Y. L. Foo, T. Spila, S. Hong, y J. E. Greene. Direct measurements of strain depth profiles in Ge/Si(001) nanostructures. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 5298–5300 (2003)
- [148] K. Sumitomo, H. Omi, Z. H. Zhang, y T. Ogino. Anisotropic strain relaxation of Ge nanowires on Si(113) studied by medium-energy ion scattering. *Phys. Rev. B* **67**, 035319 (2003)
- [149] D. Jalabert, J. Coraux, H. Renevier, B. Daudin, M. H. Cho, K. B. Chung, D. W. Moon, J. M. Llorens, N. Garro, A. Cros, y A. García-Cristóbal. Deformation profile in GaN quantum dots: Medium-energy ion scattering experiments and theoretical calculations. *Phys. Rev. B* **72**, 115301 (2005)
- [150] B. Daudin, J.-L. Rouvière, D. Jalabert, J. Coraux, V. Favre-Nicolin, H. Renevier, C. Mann-Ho, C. Kwun-Bum, D. W. Moon, M. G. Proietti, J. M. Llorens, N. Garro, A. Cros, y A. García-Cristóbal. Structural properties of GaN quantum dots. En *Proceedings of the Microscopy of Semiconducting Materials XIV Conference held at University of Oxford, Oxford, UK, during April 11-14, 2005* (En imprenta, 2005)
- [151] J. Gleize, F. Demangeot, J. Frandon, M. A. Renucci, M. Kuball, B. Damilano, N. Grandjean, y J. Massies. Direct signature of strained GaN quantum dots by Raman scattering. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 686–688 (2001)
- [152] J. Gleize, J. Frandon, F. Demangeot, M. A. Renucci, C. Adelmann, B. Daudin, G. Feuillet, B. Damilano, N. Grandjean, y J. Massies. Signature of GaN-AlN quantum dots by nonresonant Raman scattering. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2174–2176 (2000)
- [153] A. Cros, N. Garro, J. M. Llorens, A. García-Cristóbal, A. Cantarero, N. Gogneau, E. Monroy, y B. Daudin. Raman study and theoretical calculations of strain in gan quantum dot multilayers. *Phys. Rev. B* **73**(11), 115313 (2006)
- [154] N. Garro, A. Cros, J. M. Llorens, A. García-Cristóbal, A. Cantarero, N. Gogneau, E. Sarigiannidou, E. Monroy, y B. Daudin. Resonant Raman scattering in self-assembled GaN/AlN quantum dots. *Phys. Rev. B* **74**(7), 075305 (2006)
- [155] D. B. Williams y C. B. Carter. *Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Material Science* (Plenum Press, 1996)

- [156] P. Werner, K. Scheerschmidt, N. D. Zakharov, R. Hillebrand, M. Grundmann, y R. Schneider. Quantum dot structures in the InGaAs system investigated by TEM techniques. *Cryst. Res. Technol.* **35**, 759–768 (2000)
- [157] K. Tillmann y W. Jäger. Quantitative HRTEM analysis of semiconductor quantum dots. *Journal of Electron Microscopy* **49**, 245–257 (2000)
- [158] M. Schmidbauer, M. Hanke, y R. Kohler. X-Ray diffuse scattering on self-organized mesoscopic structures. *Cryst. Res. Technol.* **37**, 3–34 (2002)
- [159] A. Krost, F. Heinrichsdorff, D. Bimberg, J. Blasing, A. Darhuber, y G. Bauer. X-Ray analysis of self-organized InAs/InGaAs quantum dot structure. *Cryst. Res. Technol.* **34**, 89–102 (1999)
- [160] M. Copel. Medium-energy ion scattering for analysis of microelectronic materials. *IBM Journal of Research and Development* **44**(4), 571–582 (2000)
- [161] J. F. van der Veen. Ion beam crystallography of surfaces and interfaces. *Surf. Sci. Rep.* **5**, 199–287 (1985)
- [162] N. Gogneau, D. Jalabert, E. Monroy, E. Sarigiannidou, J. L. Rouviere, T. Shibata, M. Tanaka, J. M. Gerard, y B. Daudin. Influence of AlN overgrowth on structural properties of GaN quantum wells and quantum dots grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *J. Appl. Phys.* **96**, 1104–1110 (2004)
- [163] J. M. García, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, y P. M. Petroff. Intermixing and shape changes during the formation of InAs self-assembled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014–2016 (1997)
- [164] R. Resta. Theory of the electric polarization in crystals. *Ferroelectrics* **136**(1-4), 51–55 (1992)
- [165] R. D. King-Smith y D. Vanderbilt. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B* **47**(3), 1651–1654 (1993)
- [166] R. Resta. Macroscopic polarization in crystalline dielectrics - the geometric phase approach. *Reviews of Modern Physics* **66**(3), 899–915 (1994)
- [167] E. Pan. Elastic and piezoelectric fields around a quantum dot: Fully coupled or semicoupled model? *J. Appl. Phys.* **91**, 3785–3796 (2002)

- [168] G. Bester y A. Zunger. Cylindrically shaped zinc-blende semiconductor quantum dots do not have cylindrical symmetry: Atomistic symmetry, atomic relaxation, and piezoelectric effects. *Phys. Rev. B* **71**, 045318 (2005)
- [169] F. Bernardini y V. Fiorentini. First-principles calculation of the piezoelectric tensor \overleftrightarrow{d} of III-V nitrides. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4145–4147 (2002)
- [170] V. A. Fonoberov y A. A. Balandin. Excitonic properties of strained wurtzite and zinc-blende GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum dots. *J. Appl. Phys.* **94**, 7178–7186 (2003)
- [171] V. A. Fonoberov y A. A. Balandin. Optical properties of wurtzite and zinc-blende GaN/AlN quantum dots. *Journal of Vacuum Science & Technology B* **22**, 2190–2194 (2004)
- [172] C. Kittel. *Quantum Theory of Solids* (John Wiley & Sons, Inc., 1963)
- [173] J. Y. Marzin y G. Bastard. Calculation of the energy-levels in InAs/GaAs quantum dots. *Solid State Commun.* **92**, 437–442 (1994)
- [174] G. A. Baraff y D. Gershoni. Eigenfunction-expansion method for solving the quantum-wire problem - formulation. *Phys. Rev. B* **43**, 4011–4022 (1991)
- [175] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, y L. Jacak. Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B* **54**, 5604–5608 (1996)
- [176] P. Matagne, J. P. Leburton, J. Destine, y G. Cantraine. Modeling of the electronic properties of vertical quantum dots by the finite element method. *Cmes-Computer Modeling in Engineering & Sciences* **1**, 1–10 (2000)
- [177] F. Gelbard y K. J. Malloy. Modeling quantum structures with the boundary element method. *Journal of Computational Physics* **172**, 19–39 (2001)
- [178] J. A. Barker y E. P. O'Reilly. Theoretical analysis of electron-hole alignment in InAs-GaAs quantum dots. *Phys. Rev. B* **61**, 13840–13851 (2000)
- [179] Linear algebra package. acceso via <http://www.netlib.org/lapack>.
- [180] J. M. Llorens, C. Trallero-Giner, A. García-Cristóbal, y A. Cantarero. Energy levels of a quantum ring in a lateral electric field. *Phys. Rev. B* **64**, 035309 (2001)

- [181] J. M. Llorens, C. Trallero-Giner, A. García-Cristóbal, y A. Cantarero. Electronic structure of a quantum ring in a lateral electric field. *Microelectronics Journal* **33**, 355–359 (2001)
- [182] J. M. Llorens. *Estructura Electrónica de un anillo cuántico en un campo eléctrico lateral*. Proyecto Fin de Carrera, Universitat de València (2002)
- [183] C. S. Durr, R. J. Warburton, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, y P. M. Petroff. Interband absorption on self-assembled InAs quantum dots. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **2**, 23–27 (1998)
- [184] H. Pettersson, R. J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. García, y P. M. Petroff. Excitons in self-assembled quantum ring-like structures. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **6**, 510–513 (2000)
- [185] A. Vasanelli, R. Ferreira, y G. Bastard. Continuous absorption background and decoherence in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 216804 (2002)
- [186] E. E. Vdovin, Y. N. Khanin, A. V. Veretennikov, A. Levin, A. Patane, Y. V. Dubrovskii, L. Eaves, P. C. Main, M. Henini, y G. Hill. Spatial mapping of the electron eigenfunctions in InAs self-assembled quantum dots by magnetotunnelling. *Nanotechnology* **14**, 16–19 (2003)
- [187] E. E. Vdovin, A. Levin, A. Patane, L. Eaves, P. C. Main, Y. N. Khanin, Y. V. Dubrovskii, M. Henini, y G. Hill. Imaging the electron wave function in self-assembled quantum dots. *Science* **290**, 122–124 (2000)
- [188] R. J. Warburton, C. S. Durr, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, y P. M. Petroff. Charged excitons in self-assembled semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5282–5285 (1997)
- [189] F. Findeis, M. Baier, E. Beham, A. Zrenner, y G. Abstreiter. Photocurrent and photoluminescence of a single self-assembled quantum dot in electric fields. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2958–2960 (2001)
- [190] T. M. Hsu, W. H. Chang, C. C. Huang, N. T. Yeh, y J. I. Chyi. Quantum-confined stark shift in electroreflectance of InAs/in_xGa_(1-x)As self-assembled quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1760–1762 (2001)
- [191] W. D. Sheng y J. P. Leburton. Electron-hole alignment in InAs/GaAs self-assembled quantum dots: Effects of chemical composition and dot shape. *Phys. Rev. B* **63**, 161301 (2001)

- [192] W. D. Sheng y J. P. Leburton. Absence of correlation between built-in electric dipole moment and quantum stark effect in single InAs/GaAs self-assembled quantum dots. *Phys. Rev. B* **67**, 125308 (2003)
- [193] R. J. Warburton, C. Schulhauser, D. Haft, C. Schafflein, K. Karrai, J. M. García, W. Schoenfeld, y P. M. Petroff. Giant permanent dipole moments of excitons in semiconductor nanostructures. *Phys. Rev. B* **65**, 113303 (2002)
- [194] Y. M. Park, Y. J. Park, J. D. Song, y J. I. Lee. Estimation of built-in dipole moment in InAs quantum dots. *Solid State Commun.* **134**, 391–395 (2005)
- [195] P. Jin, C. M. Li, Z. Y. Zhang, F. Q. Liu, Y. H. Chen, X. L. Ye, B. Xu, y Z. G. Wang. Quantum-confined stark effect and built-in dipole moment in self-assembled InAs/GaAs quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2791–2793 (2004)
- [196] C. Adelmann, E. Sarigiannidou, D. Jalabert, Y. Hori, J. L. Rouviere, B. Daudin, S. Fanget, C. Bru-Chevallier, T. Shibata, y M. Tanaka. Growth and optical properties of GaN/AlN quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4154–4156 (2003)
- [197] F. Yang, M. Wilkinson, E. J. Austin, y K. P. Odonnell. Origin of the stokes shift - a geometrical model of exciton spectra in 2d semiconductors. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 323–326 (1993)
- [198] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, y S. Schmittrink. Electroabsorption of highly confined systems - theory of the quantum-confined franz-keldysh effect in semiconductor quantum wires and dots. *Appl. Phys. Lett.* **52**, 2154–2156 (1988)
- [199] C. G. Smith. Low-dimensional quantum devices. *Reports on Progress in Physics* **59**, 235–282 (1996)
- [200] K. J. Vahala y P. C. Sercel. Application of a total-angular-momentum basis to quantum-dot band-structure. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 239–242 (1990)
- [201] P. C. Sercel y K. J. Vahala. Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band-structure in the multiband envelope-function approximation. *Phys. Rev. B* **42**, 3690–3710 (1990)
- [202] M. Altarelli, U. Ekenberg, y A. Fasolino. Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices. *Phys. Rev. B* **32**, 5138–5143 (1985)

- [203] O. Stier, M. Grundmann, y D. Bimberg. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory. *Phys. Rev. B* **59**, 5688–5701 (1999)
- [204] R. J. Warburton, B. T. Miller, C. S. Durr, C. Bodefeld, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, P. M. Petroff, y S. Huant. Coulomb interactions in small charge-tunable quantum dots: A simple model. *Phys. Rev. B* **58**, 16221–16231 (1998)
- [205] L. X. He, G. Bester, y A. Zunger. Strain-induced interfacial hole localization in self-assembled quantum dots: Compressive InAs/GaAs versus tensile InAs/InSb. *Phys. Rev. B* **70**, 235316 (2004)
- [206] G. A. Narvaez, G. Bester, y A. Zunger. Dependence of the electronic structure of self-assembled (In,Ga)As/GaAs quantum dots on height and composition. *J. Appl. Phys.* **98**, 043708 (2005)
- [207] K. L. Janssens, B. Partoens, y F. M. Peeters. Magnetoexcitons in planar type-II quantum dots in a perpendicular magnetic field. *Phys. Rev. B* **6415**, 155324 (2001)
- [208] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, y P. M. Petroff. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223–2226 (2000)
- [209] M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, y A. Forchel. Hidden symmetries in the energy levels of excitonic 'artificial atoms'. *Nature* **405**, 923–926 (2000)
- [210] R. J. Warburton, C. Schaflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J. M. García, W. Schoenfeld, y P. M. Petroff. Optical emission from a charge-tunable quantum ring. *Nature* **405**, 926–929 (2000)
- [211] J. J. Finley, A. D. Ashmore, A. Lemaitre, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, I. E. Itskevich, P. A. Maksym, M. Hopkinson, y T. F. Krauss. Charged and neutral exciton complexes in individual self-assembled In(Ga)As quantum dots. *Phys. Rev. B* **6307**, 073307 (2001)
- [212] J. Shumway, A. Franceschetti, y A. Zunger. Correlation versus mean-field contributions to excitons, multiexcitons, and charging energies in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B* **6315**, 155316 (2001)
- [213] F. Jensen. *Introduction to Computational Chemistry* (John Wiley and Sons, 1999)

- [214] A. Wensauer, M. Korkusinski, y P. Hawrylak. Configuration interaction method for Fock-Darwin states. *Solid State Commun.* **130**, 115–120 (2004)
- [215] N. Baer, P. Gartner, y F. Jahnke. Coulomb effects in semiconductor quantum dots. *European Physical Journal B* **42**, 231–237 (2004)
- [216] L. Ludwig y C. Falter. *Symmetries in Physics*. 2 ed^{ón}. (Springer, 1995)
- [217] M. Rontani, C. Cavazzoni, D. Bellucci, y G. Goldoni. Full configuration interaction approach to the few-electron problem in artificial atoms. *J. Chem. Phys.* **124**(12), 124102 (2006)
- [218] R. M. Thompson, R. M. Stevenson, A. J. Shields, I. Farrer, C. J. Lobo, D. A. Ritchie, M. L. Leadbeater, y M. Pepper. Single-photon emission from exciton complexes in individual quantum dots. *Phys. Rev. B* **6420**, 201302 (2001)
- [219] A. J. Shields, R. M. Stevenson, R. M. Thompson, M. B. Ward, Z. Yuan, B. E. Kardynal, P. See, I. Farrer, C. Lobo, K. Cooper, y D. A. Ritchie. Self-assembled quantum dots as a source of single photons and photon pairs. *Physica Status Solidi B-Basic Research* **238**, 353–359 (2003)
- [220] S. Rodt, R. Heitz, A. Schliwa, R. L. Sellin, F. Guffarth, y D. Bimberg. Repulsive exciton-exciton interaction in quantum dots. *Phys. Rev. B* **68**, 035331 (2003)
- [221] S. Rodt, R. Heitz, R. L. Sellin, A. Schliwa, K. Potschke, y D. Bimberg. Biexcitons in self-organized InAs/GaAs quantum dots: an optical probe for structural properties. *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures* **21**, 1065–1069 (2004)
- [222] F. Findeis, A. Zrenner, G. Bohm, y G. Abstreiter. Phonon-assisted biexciton generation in a single quantum dot. *Phys. Rev. B* **61**, 10579–10582 (2000)
- [223] M. Ediger, P. A. Dalgarno, J. M. Smith, B. D. Gerardot, R. J. Warburton, K. Karrai, y P. M. Petroff. Controlled generation of neutral, negatively-charged and positively-charged excitons in the same single quantum dot. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 2119209 (2005)
- [224] E. Moreau, I. Robert, L. Manin, V. Thierry-Mieg, J. M. Gerard, y I. Abram. Quantum cascade of photons in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **8718**, 183601 (2001)

- [225] W. Langbein, P. Borri, U. Woggon, V. Stavarache, D. Reuter, y A. D. Wieck. Control of fine-structure splitting and biexciton binding in $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ quantum dots by annealing. *Phys. Rev. B* **69**, 161301 (2004)
- [226] L. Landin, M. E. Pistol, C. Pryor, M. Persson, L. Samuelson, y M. Miller. Optical investigations of individual InAs quantum dots: Level splittings of exciton complexes. *Phys. Rev. B* **60**, 16640–16646 (1999)
- [227] Y. J. Yu, W. Jhe, y Y. Arakawa. High-resolution near-field spectroscopy of InAs single quantum dots at 70 k. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3024–3026 (2003)
- [228] A. Hartmann, Y. Ducommun, E. Kapon, U. Hohenester, y E. Molinari. Few-particle effects in semiconductor quantum dots: Observation of multicharged excitons. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5648–5651 (2000)
- [229] G. Bester y A. Zunger. Compositional and size-dependent spectroscopic shifts in charged self-assembled $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots. *Phys. Rev. B* **68**, 073309 (2003)
- [230] C. Schulhauser. *Elektronische Quantenzustände induziert durch Photonemission*. Tesis Doctoral, Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilians-Universität München (2004)
- [231] M. Baier, F. Findeis, A. Zrenner, M. Bichler, y G. Abstreiter. Optical spectroscopy of charged excitons in single quantum dot photodiodes. *Phys. Rev. B* **64**, 195326 (2001)
- [232] J. J. Finley, P. W. Fry, A. D. Ashmore, A. Lemaitre, A. I. Tartakovskii, R. Oulton, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, M. Hopkinson, P. D. Buckle, y P. A. Maksym. Observation of multicharged excitons and biexcitons in a single InGaAs quantum dot. *Phys. Rev. B* **63**, 161305 (2001)
- [233] I. Vurgaftman y J. R. Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *J. Appl. Phys.* **94**(6), 3675–3696 (2003)
- [234] D. Fritsch, H. Schmidt, y M. Grundmann. Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blende and wurtzite AlN , GaN , and InN . *Phys. Rev. B* **67**(23), 235205 (2003)
- [235] G. Eason, B. Noble, y I. N. Sneddon. On certain integrals of Lipschitz-Hankel type involving products of Bessel functions. *Philosophical Transactions of The Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences* **247**, 529–551 (1955)

- [236] A. P. Prudnikov, Y. A. Brychkov, y O. I. Marichev. *Integrals and Series. Volume 2: Special Functions* (Gordon and Breach, New York, 1992)
- [237] P. M. Morse y H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, pág. 1371 (McGraw Hill, New York, 1953)