

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA
Departament de Física Aplicada i Electromagnetisme



UNIVERSITAT DE VALÈNCIA

DEA Fotónica: Fundamentos y Dipositivos

**Efectos de los campos eléctrico y magnético sobre
los estados electrónicos excitados en
nanoestructuras cuánticas semiconductoras**

por

José Bosch Bailach

para optar al grado de Doctor en Física

Directores: Juan Martínez-Pastor,

El Mustapha Feddi

A mis padres

« Si buscas la verdad, prepárate para lo inesperado, pues es difícil de encontrar y sorprendente cuando la encuentras »

Heráclito

« All those moments will be lost in time, like tears...in rain. Time to die. »

de la película **Blade Runner (Ridley Scott)**

« Vánitas vanitatum, et ómnia vánitas »

Qohéleth

Índice general

1. Introducción general	11
Bibliografía	19
2. La física de los excitones	21
2.1. Excitones	21
2.1.1. Características físicas del excitón de Wannier-Mott	24
2.2. Análisis del confinamiento cuántico	26
2.3. Estado del arte y bibliografía de referencia	28
Bibliografía	33
3. Teoría básica	35
3.1. Estado electrónico de un semiconductor	36
3.1.1. Aproximación de Born-Oppenheimer	36
3.1.2. Aproximación de Hartree-Fock	36
3.2. La aproximación de la masa efectiva	40
3.3. Estados excitónicos	42
3.3.1. Ecuación efectiva para la función envolvente excitónica	43
3.3.2. Resolución de la ecuación efectiva	44
3.4. Funciones de onda excitónicas	46
3.4.1. Excitón en un espacio tridimensional	47
3.4.2. Excitón en un espacio bidimensional	48
3.4.3. El modelo de dimensión fraccionaria	49

3.5. Efecto Stark cuántico confinado (QCSE)	51
3.5.1. QCSE sobre electrones	51
3.5.2. QCSE sobre excitones	54
3.6. Peculiaridades del Efecto Stark cuántico confinado	55
3.6.1. Campo vertical	55
3.6.2. Campo lateral	57
3.7. Efecto de un campo magnético	59
3.7.1. Caso electrónico	59
3.7.2. Caso excitónico	62
3.8. Aplicabilidad de la aproximación de la masa efectiva	65
Bibliografía	69
4. Efecto Stark anómalo en un disco cuántico	71
4.1. Introducción	71
4.2. Formalismo teórico de partícula única	74
4.3. Modelo excitónico	76
4.4. Resultados y discusión	80
4.5. Densidades de probabilidad	92
4.6. Conclusión	93
Bibliografía	95
5. Competición entre recombinación radiativa y efecto túnel	99
5.1. Introducción	99
5.2. Resultados experimentales	100
5.3. Descripción del modelo	101
5.4. Recombinación radiativa <i>versus</i> efecto túnel	106
5.5. Recombinación de excitones en puntos cuánticos	109
5.5.1. Muestras y experimento	110
5.5.2. Láseres empleados en la caracterización óptica	111
5.5.3. Resultados y discusión	113

5.6. Conclusión	119
Bibliografía	121
6. Efecto del campo eléctrico sobre un dopante en un disco cuántico	123
6.1. Introducción	123
6.2. Formalismo teórico	126
6.3. Resultados y discusión	129
6.4. Conclusión	138
Bibliografía	141
7. Efecto del campo magnético sobre el complejo excitónico (D^+,X)	145
7.1. Introducción	145
7.2. Formalismo teórico	153
7.3. Resultados y discusión	158
7.4. Conclusión	172
Bibliografía	173
8. Conclusiones	177
Apéndices	179
A. Campo eléctrico en un pozo cuántico	181
A.1. Pozo infinito con campo	181
A.2. Pozo de potencial finito con campo eléctrico	182
A.3. Método del corrimiento de fase	185
A.4. Cálculo de la energía mínima en un pozo	186
B. Fórmulas para el cambio de unidades	189
C. Oscilador armónico bidimensional	193

D. Coordenadas de Hylleraas	195
D.1. Hamiltoniano en coordenadas de Hylleraas	197
D.2. Elemento de volumen	200
D.3. Límites de integración	202
E. Cálculo de la energía mínima en un disco	207
F. Constantes fundamentales	211
G. Integración numérica con <i>Mathematica</i>	213
Lista de publicaciones	221
Agradecimientos	223

Capítulo 1

Introducción general

Los sistemas semiconductores de dimensión reducida, como los puntos, hilos y pozos cuánticos, ocupan un lugar destacado en la investigación actual. Muchos dispositivos optoelectrónicos basan su funcionamiento en propiedades nuevas descubiertas a raíz del confinamiento electrónico. Cuando a la materia se la obliga a ocupar un espacio más reducido del que ocuparía normalmente, exhibe unas propiedades nuevas que a día de hoy aún se están descubriendo. Un buen ejemplo sería el del grafeno. La estructura de bandas del grafeno ya había sido calculada por primera vez por Wallace en 1949. El premio nobel de Física del año 2010 se concedió a Andre Geim y Konstantin Novoselov por el estudio y análisis que han permitido la comprensión de las propiedades de este nuevo material bidimensional.

Las técnicas experimentales de crecimiento en el laboratorio permiten la creación de islas de tamaño nanométrico que a su vez son capaces de sumergirse en otro material semiconductor con diferente banda prohibida cada uno. Esto tiene la ventaja de que podemos producir excitaciones ópticas del semiconductor más interno cuando las iluminamos. La excitación elemental así creada o *excitón*¹ se puede considerar como un pseudoátomo que queda confinado dentro del semiconductor con banda prohibida más alta.

¹El término excitón no existe en lengua castellana. Proviene del inglés *exciton*. Su uso ya está ampliamente generalizado y se permite su empleo en textos científicos.

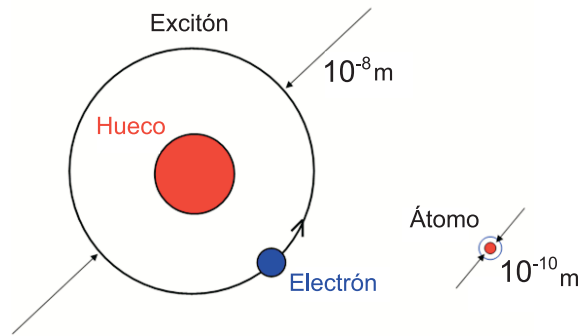


Figura 1.1: Ilustración del tamaño ocupado por un átomo y un excitón típicos. El excitón corresponde al semiconductor masivo.

En la figura 1.1 presentamos un esbozo del tamaño relativo entre un átomo y un excitón. En nanoestructuras esta excitación ocupa menos sitio del que ocuparía naturalmente. Dependiendo de la forma en la que los electrones y huecos producidos en la excitación *ven* la red cristalina, podemos hablar de excitones de Wannier-Mott o de Frenkel. En el primer caso, y en un semiconductor masivo, la red hace que el electrón sienta una constante dieléctrica que no tiene en cuenta las posiciones de los átomos en la red. En el caso del excitón de Frenkel, cuyo estudio es más complejo y no vamos a tratar en esta tesis, los electrones y huecos experimentan las peculiaridades del potencial de confinamiento cercano que producen los átomos de la red cristalina.

La dinámica de los excitones Wannier-Mott permite estudiar tanto la energía del sistema como su tiempo de recombinación radiativo, efecto túnel de portadores, etc. Variando a su vez la dimensionalidad del sistema se pueden obtener resultados teóricos que corroboran bastante bien los experimentos.

Los semiconductores son muy sensibles a la adición de impurezas en su estructura. Estas últimas pueden dar lugar a la aparición de niveles intermedios dentro de la banda prohibida que alteran de manera dramática las propiedades ópticas. Las propiedades electrónicas de un semiconductor vienen determinadas por las denominadas transiciones intrabanda que nos permiten describir, entre otras, las propiedades de transporte. Por otra parte las propiedades ópticas tienen que ver con

las transiciones interbanda, es decir entre las bandas de valencia y conducción. Ambos tipos de transiciones están muy ligadas entre sí y no puede comprenderse bien la física de muchos dispositivos si no se toman en consideración ambas transiciones.

Muchos estudios dan cuenta de como las propiedades excitónicas muestran un comportamiento anómalo cuando añadimos una sola impureza en un punto cuántico. Un par de capítulos de esta tesis están consagrados a los efectos que estas impurezas tienen en las propiedades ópticas de nanoestructuras cuando se aplican campos eléctricos y magnéticos. Lampert, en 1958, fue el primero en intuir la existencia de complejos excitónicos, en particular (D^0, X) , (A^0, X) y (D^+, X) , como resultado de la ligadura del excitón con una impureza neutra dadora, una impureza neutra aceptora y una impureza dadora ionizada.

Al analizar el efecto de un campo eléctrico sobre los excitones en una nanoestructura la primera imagen que nos viene es la de su homóloga en física atómica, el efecto Stark. En el átomo de hidrógeno la aplicación de un campo eléctrico externo da lugar a un desdoblamiento de los niveles energéticos cuya polarizabilidad es proporcional al cuadrado del campo eléctrico aplicado. En puntos cuánticos encontramos un comportamiento similar pero con una fenomenología más compleja si cabe. La presencia de confinamiento fuerte y de impurezas da lugar a una competición entre ambos efectos haciendo que el efecto Stark efectivo presente un comportamiento anómalo. Un conocimiento explícito y empírico de estos efectos puede tener interesantes aplicaciones optoelectrónicas.

De igual manera la aplicación de un campo magnético añade nuevas propiedades. Si el campo es débil puede tratarse perturbativamente dando lugar a un efecto similar al Zeeman atómico. Cuando es intenso su efecto es similar al de un confinamiento tipo oscilador armónico cuya frecuencia es la frecuencia ciclotrón. Los niveles de Landau serían las cuantizaciones de las órbitas ciclotrón, de manera análoga a las órbitas electrónicas del modelo de Bohr. De nuevo la presencia de impurezas aporta nuevas peculiaridades a las propiedades ópticas de los puntos cuánticos.

Al estar confinados los portadores de carga en estructuras pequeñas se acentúa la superposición de las funciones de onda del electrón y el hueco. Ello daría lugar a

un aumento de la energía de enlace de los excitones y de los complejos excitónicos. Los resultados de los modelos teóricos corroboran muy bien esto último. Los efectos excitónicos son muy pronunciados en el caso de las nanoestructuras. Esto se debe a la baja dimensionalidad del sistema. En particular, y como se demuestra más adelante, la energía de ligadura de los excitones Wannier bidimensionales es cuatro veces superior a la de sus homólogos en el semiconductor masivo. Esta estabilidad es la que origina que las propiedades ópticas no sean lineales, sobre todo en el caso de puntos cuánticos.

Los excitones ligados a impurezas tienen un tiempo de recombinación del orden del nanosegundo y son interesantes en investigaciones espectroscópicas pues dan lugar a la aparición de líneas estrechas muy bien definidas en el espectro.

Motivados por estos resultados muchos investigadores han intensificado su estudio de los sistemas semiconductores de baja dimensionalidad. En muchos de ellos es posible controlar su forma, dimensiones, estructura de niveles e incluso el número de electrones. Las diferentes técnicas de realización permiten obtener diferentes formas de puntos cuánticos: paralelepípedos, esferas, conos, cilindros, pirámides, etc [1][2]. Las técnicas de fabricación, ya sea por epitaxia molecular o por ataque químico, entre otras, dan lugar a una considerable dispersión de tamaños y por consiguiente a una gran anchura espectral de banda. La interacción de los estados electrónicos con las vibraciones ópticas de la red pueden igualmente contribuir a un ensanchamiento de los espectros. En algunos casos los materiales utilizados son semiconductores del tipo II-VI y I-VII, que presentan un carácter polar o iónico bastante acusado y unas constantes de acoplamiento electrón-fonón importantes [3]. Así pues la creación o la recombinación de pares electrón-hueco puede venir acompañada de una fuerte probabilidad de emisión de fonones longitudinales ópticos (LO) que dan lugar a líneas espectrales separadas por cantidades que son múltiplos de $\hbar\omega_{LO}$ [4]

Esta tesis tiene varios objetivos generales. Por una parte se han realizado estudios experimentales sobre puntos cuánticos en los que se ha medido la fotoluminiscencia, el tiempo radiativo y los efectos del campo eléctrico. Los resultados experimentales

propios de nuestro grupo se acompañan siempre con modelos teóricos para explicar la fenomenología observada. Otro de los objetivos ha sido la implementación matemática de modelos basados en las coordenadas de Hylleraas² que permitan calcular la energía de nanoestructuras cuánticas cuando se encuentran sometidas a campos externos eléctrico y magnético. El sistema de coordenadas mencionado tiene la ventaja de poder calcular la energía total del excitón sin necesidad de descomponer el movimiento en una parte relativa y en otra del centro de masas. Esto último da lugar a una indefinición a la hora de tomar el cero de la energía de los excitones. Por contra las coordenadas de Hylleraas hace que el operador laplaciano tenga una expresión algebraica bastante más farragosa y complicada de manipular. Las funciones de onda que se emplean para describir los excitones poseen características muy bien definidas que dan cuenta de todos los elementos del problema y hasta qué punto unos tienen más importancia que otros.

El procedimiento general de cálculo es el que se describe a continuación. Partiendo de soluciones conocidas de la función de onda, planteada mediante la ecuación de Schrödinger, hemos usado el método variacional para determinar la función de onda que tiene en cuenta el confinamiento, la interacción coulombiana y las interacciones extras con campos externos. Este método posee la ventaja, a diferencia del perturbativo, de que los valores de los campos externos pueden ser todo lo elevados que se quieran. Una vez determinados los parámetros variacionales que minimizan la energía del sistema ya podemos escribir nuestra función de onda para el excitón en la nanoestructura. Con esta función y convencidos de la bondad de la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica, deberíamos ser capaces de calcular las propiedades del excitón. La libertad a la hora de elegir la función de onda y la forma de expresar e introducir los parámetros en las funciones de onda varía mucho entre los autores y no contribuye en nada a aclarar los aspectos del problema. En cualquier caso el autor de esta tesis siempre justifica mediante razonamientos físicos

²Estas coordenadas fueron introducidas por primera vez por el físico noruego Egil A. Hylleraas y la referencia básica de su trabajo puede consultarse en [5]. De igual manera en el apéndice D puede encontrarse ampliamente detallado todo el desarrollo matemático que permiten expresar los operadores vectoriales en estas coordenadas.

el por qué de la elección de la función de onda. Se han añadido también gráficas de la densidad de probabilidad que ayuden a visualizar la dinámica de los excitones cuando el modelo realizado nos da tal posibilidad.

Damos a continuación la estructura de este estudio:

- El capítulo 2 versa sobre las características generales de la física de los excitones.
- El capítulo 3 trata sobre las aproximaciones empleadas en los cálculos de las funciones de onda: Born-Oppenheimer, Hartree-Fock, la masa efectiva y otras. Introduciremos las funciones de onda de los estados excitónicos en diferentes dimensiones y hablaremos del efecto Stark cuántico confinado (QCSE). De igual manera se da la teoría relativa a los efectos del campo magnético sobre excitones y los límites de aplicabilidad de la aproximación de la masa efectiva.
- En el capítulo 4 nos centraremos en el estudio del efecto Stark en un disco cuántico y cuyo comportamiento en algunos casos es poco lineal.
- Resultados experimentales de fotoluminiscencia en función del campo eléctrico se presentan en el capítulo 5.
- Siguiendo con la línea marcada en anteriores capítulos, en este capítulo 6 vamos a analizar el comportamiento de un electrón cuando tenemos una impureza en el disco cuya posición iremos cambiando. El modelo da cuenta una vez más de un comportamiento no lineal de las propiedades ópticas en función del campo eléctrico, de su dirección y de la posición de la impureza.
- El capítulo 7 se dedica al estudio de la influencia del campo magnético externo sobre una nanoestructura esférica con impureza D^+ .

El autor reconoce que la formulación de la tesis es extensa y de hecho contiene una buena parte de apéndices en los que se dan los detalles de muchos de los cálculos. Esto se ha hecho con una finalidad deliberadamente pedagógica a fin de que se puedan reproducir los cálculos por otros investigadores interesados en el tema.

Una tesis doctoral no es el fin de un camino, debiera ser el comienzo de una nueva singladura científica. Por recomendación explícita no se dice cómo se ha hecho todo pero sí todo lo que se ha hecho. Todos los cálculos, los modelos y la implementación, tanto del trabajo algebraico como numérico, han sido desarrollados empleando en parte la aplicación *Mathematica*. La potencia de esta aplicación a la hora de calcular integrales numéricas con funciones especiales llega a resultar notable si se programa con habilidad. Los detalles de los algoritmos matemáticos pueden consultarse en el apéndice G. Cuando ha sido posible se han empleado resultados analíticos generados por el propio programa que han ayudado bastante en la simplificación algebraica de algunas fórmulas. Se podría argüir porqué no se han empleado métodos numéricos estándar, comunes dentro de los ámbitos de programación en C o en Fortran. En opinión del autor los modelos numéricos pueden aportar mayor precisión en el cálculo aunque en ocasiones puede ensombrecerse la física subyacente. Además, según comenta Jacques I. Pankove en su libro *Optical Processes in Semiconductors*, las sutilezas del cálculo numérico quedan oscurecidas por las imperfecciones de la Naturaleza.

Bibliografía

- [1] T. Fukui, S. Ando and Y. Tokura, Phys. Lett. B **58**, 2018 (1991).
- [2] J. Y. Marzin and G. Bastard, Solid State Commun. **92**, 437 (1994).
- [3] E. Kartheuser, *Polarons in ionic crystals and polar semiconductors* (J. T. Devreese, North Holland, 1972).
- [4] K. Huang and A. Rhys, Pro. R. Soc. A **204**, 406 (1950).
- [5] Egil A. Hylleraas "Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium ", Zeitschrift fur Physik A (Eingegangen: 22. Februar 1929).

Capítulo 2

La física de los excitones

En este capítulo vamos a dar las ideas directrices en las que se va a basar esta tesis. Introduciremos el concepto de excitón explicando sus características principales y los diferentes tipos que hay. Comentaremos a su vez los efectos que la dimensionalidad o el confinamiento tiene sobre sus propiedades ópticas.

2.1. Excitones

El concepto de *excitón* fue introducido en 1931 por Frenkel en uno de sus trabajos pioneros y durante la década de 1950 tuvo un importante auge tanto en el desarrollo teórico como en el experimental. También podemos citar entre otros los trabajos de Peierls y Wannier. Formalmente el excitón se puede interpretar como el estado excitado de un sólido. Al absorber radiación un sólido, los electrones que están en la banda de valencia adquieren energía para saltar a la banda de conducción, produciendo un "hueco" de carga positiva en la banda de valencia. Este par electrón-hueco está sujeto a la interacción de Coulomb, con lo que podemos tener estados ligados. Esta imagen es completamente análoga a un átomo de hidrógeno y es lo que se entiende por excitón. Un ejemplo claro de esta naturaleza "hidrogenoide" lo tenemos en el espectro del óxido cuproso (Cu_2O). Todos los excitones están confinados espacialmente, como si se tratara de partículas compactas. La intensa atracción

de Coulomb que experimentan los electrones y huecos los mantiene juntos espacialmente, a diferencia de los pares de Cooper, que pueden hallarse muy separados debido al débil acoplamiento entre fonones. El tamaño de los excitones varía, desde un tamaño atómico, del orden de un angstrom, hasta centenares de angstrom, esto es, extendiéndose a lo largo de varios miles de celdillas unidad del sólido.

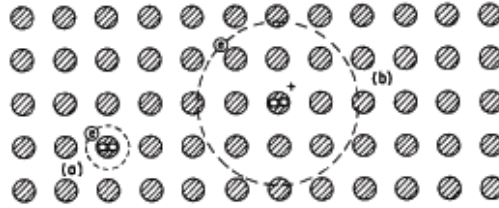


Figura 2.1: Ilustración de los dos tipos de excitones y sus radios. En cada caso existe un movimiento interno del electrón alrededor del hueco y el par se mueve como una unidad a través de la celdilla. Aunque son equivalentes en principio, los dos excitones requieren técnicas diferentes para su estudio. En el excitón de Frenkel, esbozado en (a), el electrón "ve" el hueco y los detalles del potencial de la celdilla, mientras que en el excitón de Wannier (b), el electrón ve sólo el hueco y un potencial promedio de toda la celdilla. Los dos casos los encontramos en KBr y en Cu_2O respectivamente.

Se pueden distinguir dos clases de excitones: excitones Wannier-Mott, con una extensión efectiva (radio de Bohr) mucho mayor que el tamaño de la celdilla unidad, y los excitones Frenkel, en los que el par electrón-hueco está confinado dentro de la celdilla unidad. Un ejemplo gráfico lo podemos ver en la Figura 2.1.

En general se puede decir que los excitones pueden moverse a través del sólido. En el caso del excitón de Frenkel este movimiento podemos interpretarlo como el "salto" de electrones y huecos de un átomo a otro. Si excitamos un electrón desde la capa de valencia de un átomo, a un estado excitado, puede moverse entonces a un estado excitado desocupado de un átomo vecino. La repulsión coulombiana del electrón sobre los electrones de valencia del nuevo átomo tenderá a empujar a uno de ellos al hueco dejado en la capa de valencia del átomo original cuando el electrón fue excitado. Esto da lugar entonces a que el hueco en la banda de valencia siga al electrón excitado. De la misma manera se podría decir que el átomo excitado y cargado negativamente atrae al hueco positivo cargado en la banda de valencia. Los

excitones Frenkel son pues muy sensibles al potencial atómico individual.

En el caso de los excitones Wannier, la imagen que nos hemos de hacer es diferente. Los átomos que forman la red cristalina del sólido hay que tratarlos como un *campo de fondo* en el que los electrones y huecos se mueven como partículas libres, y al excitón podemos imaginarlo como un átomo hidrogenoide sumergido en un medio. Así pues los excitones Wannier son sensibles a las propiedades globales del sólido. El potencial creado por toda la red cristalina se tiene en cuenta por medio de: (1) las masas reducidas del excitón, (2) la constante dieléctrica del medio, y (3) la dispersión por fonones e impurezas.

Los excitones han sido estudiados en trabajos pioneros por Hilsch y Pohl [1] en espectros de cristales iónicos, en particular haluros alcalinos. Los espectros de estas sustancias pueden interpretarse en términos de excitones cuyos radios tienen un tamaño intermedio entre los de Frenkel y Wannier. En la década de los 50 se estudiaron los espectros de sólidos covalentes (tales como Ge, Si, y CdS) y cristales iónicos (como CuO₂) con constante dieléctrica alta. Estos espectros se pueden entender en detalle gracias al modelo de Wannier, que recibió una formulación más completa por Dresselhaus y Elliot.

En 1957, en un trabajo pionero, Elliot [11] encontró una relación entre el coeficiente de absorción y los estados propios de los pares electrón-hueco. La fórmula de Elliot explica muy bien los resultados experimentales. Años más tarde estos resultados fueron generalizados por Shinada y Sugano [3] para el caso de semiconductores bidimensionales. Sus trabajos explican cualitativamente la absorción en pozos cuánticos.

La teoría de los excitones ha seguido desde entonces dos líneas de investigación, que podríamos denominar como estructura excitónica y dinámica excitónica. La primera de ellas versa sobre el análisis de los estados excitados de un cristal perfecto, siendo su finalidad determinar la naturaleza detallada de la función de onda electrón-hueco y la energía de su estado fundamental y excitados.

La dinámica excitónica, por otro lado, se encarga del estudio de las interacciones entre los excitones y otras partículas y también con campos externos, objetivo

fundamental de esta tesis. Entre ellas cabe considerar la interacción excitón-fotón, la interacción con fonones, dislocaciones y defectos puntuales. Los fonones pueden contribuir a la dispersión de excitones y es una interacción que no se puede ignorar. De hecho cuando el electrón y el hueco están muy separados pueden dar lugar a una polarización de la celdilla, conocida como *polarón*.

2.1.1. Características físicas del excitón de Wannier-Mott

Ya que nuestro estudio va a tratar fundamentalmente con excitones Wannier vamos a dedicar esta sección al estudio de sus propiedades más representativas. Por lo que se ha comentado antes, el excitón Wannier es en esencia un átomo hidrogenoide similar al positronio. Para este tipo de átomo, la función de onda consiste de una parte atómica orbital multiplicada por un factor de onda plana, $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$, donde $\mathbf{k} = (m_0 + m_P)\mathbf{v}/\hbar$ es el momento del centro de masas del positronio, con m_0 y m_P las masas del electrón y positrón, respectivamente. El espectro de energía del par ligado es igual a la energía de Rydberg más la energía cinética del centro de masas,

$$E_H = -\frac{Ry}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_0 + m_P)}, \quad (2.1)$$

donde $n = 1, 2, \dots$ es el número cuántico principal,

$$Ry = \frac{m_r e^4}{2\varepsilon_0^2 \hbar^2} \quad (2.2)$$

es la energía de Rydberg, y

$$a_B = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{m_r e^2} \quad (2.3)$$

es el radio de Bohr del átomo hidrogenoide con masa reducida $1/m_r = 1/m_0 + 1/m_P$ y ε_0 la constante dieléctrica del vacío.

La situación en un semiconductor es análoga, el electrón y el hueco se mueven en un medio de constante dieléctrica ε y sus masas son ahora las masas efectivas del electrón (m_e^*) y el hueco (m_h^*). En el capítulo 3 se hará un estudio detallado de esta aproximación. Podemos comparar pues los valores de estas constantes para un semiconductor y para el átomo de hidrógeno y tener una idea del orden de magnitud.

	ZnSe	CdTe	GaAs	InAs	InSb
μ/m_0	0.103	0.0683	0.0453	0.0156	0.0092
ε	8.66	10.23	12.87	14.6	17.9
Ry^* (meV)	18.68	8.876	3.722	0.996	0.389
a_B^* (nm)	4.45	7.93	15.03	49.5	103.3

Tabla 2.1: Parámetros del excitón para varios materiales [4]

Para el semiconductor tenemos entonces

$$Ry^* = \frac{\mu e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} = 13,6 \text{ eV} \times \frac{\mu}{m_0} \frac{1}{\varepsilon^2} \quad (2.4)$$

$$a_B^* = \frac{\varepsilon \hbar^2}{\mu e^2} = 0,05992 \text{ nm} \times \frac{m_0}{\mu} \varepsilon \quad (2.5)$$

Ahora μ es la masa reducida del par electrón-hueco $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$. Vemos así que la constante dieléctrica del medio, por una parte, tiende a aumentar el radio de Bohr y por otra a disminuir la energía de ligadura en varios órdenes de magnitud, en comparación a los valores para el átomo de hidrógeno. A partir de ahora se tomará como unidad para la energía la constante de Rydberg excitónica, es decir, Ry^* , que la escribiremos simplemente como R_X . Para la distancia tomaremos el radio de Bohr excitónico a_B^* que será a_X . En la tabla podemos ver los valores de estos parámetros calculados para varios materiales.

Pese al cambio de escala el excitón Wannier sigue siendo el caso de un electrón moviéndose alrededor de un hueco, sumergidos en un medio sólido, exactamente igual que el átomo de hidrógeno. El excitón puede moverse como un todo en línea recta y con momento constante hasta que es dispersado por un fonón, una impureza, otro excitón, un electrón libre o un hueco.

Al ser un par partícula-antipartícula, los excitones son en general metaestables. Tanto en el de Frenkel como el de Wannier, existe una probabilidad finita de que el electrón se recombine con el hueco, dando lugar a la emisión de un fotón. Un ciclo de "vida" para un excitón sería el siguiente: (1) El excitón se crea por la absorción de un fotón, (2) el excitón se mueve a través del sólido, sufriendo procesos de dispersión,

y (3), finalmente, el excitón se recombina y emite un fotón, posiblemente en un lugar del sólido bastante alejado de su punto de creación. Dependiendo de las simetrías de los procesos de recombinación y de las condiciones experimentales, el tiempo de vida de los excitones va desde unos pocos picosegundos hasta milisegundos e incluso tiempos mayores. Por regla general la tasa de desintegración es proporcional al cuadrado de la función de onda cuando las posiciones del electrón y el hueco coinciden (integral de superposición). Para el excitón Wannier será $\varphi^2(0) = 1/(\pi a_B^3)$, lo cual significa que los excitones de menor extensión (menor a_B) que incluyen a los de Frenkel, se desintegran más rápidamente.

2.2. Análisis del confinamiento cuántico de excitones en nanoestructuras

Hasta ahora hemos supuesto que los excitones no tienen una barrera de potencial que los confine espacialmente. En la realidad el confinamiento viene dado porque uno de los materiales semiconductores está embebido en otro de banda prohibida mayor, de tal forma que cuando el excitón se crea en el de banda prohibida menor, su energía es menor que la de la banda prohibida del semiconductor externo, dando lugar al confinamiento cuántico. El potencial de confinamiento suele ser bastante mayor que el de interacción coulombiana.

Se pueden distinguir tres regímenes al comparar la importancia de la interacción coulombiana con los efectos debidos a la cuantización de la energía cinética [5].

1. En el régimen de confinamiento fuerte los efectos coulombianos son una pequeña corrección a la cuantización de la energía cinética, es decir, $\Delta E_e \gg E_C$ y $\Delta E_h \gg E_C$, donde ΔE_e y ΔE_h son la separación de subniveles de electrones y huecos y E_C es la energía de la interacción coulombiana. Las funciones de onda del electrón y del hueco no están correlacionadas. Un ejemplo lo tenemos en una caja cuántica pequeña, donde el radio de la caja es menor que el radio del excitón en el material masivo.

2. El caso opuesto es el régimen de confinamiento débil, donde el radio excitónico es menor que el radio de la caja. En este caso los electrones y huecos forman pares cuyo movimiento del centro de masas está cuantizado por el potencial de confinamiento. Los valores de ΔE_e y ΔE_h son comparables o ligeramente mayores que E_C .
3. El caso de régimen de confinamiento intermedio se produce cuando $\Delta E_e \gg E_C$ y $\Delta E_h < E_C$. Esta situación puede producirse cuando las masas efectivas de los electrones y los huecos son muy diferentes, lo que sería cierto para el sistema InAs/GaAs, por ejemplo.

Puesto que la energía de Coulomb depende mucho del valor de la constante dieléctrica, cajas del mismo tamaño pueden pertenecer a regímenes diferentes en diferentes materiales. Para los compuestos formados con elementos del grupo III-V, debido al bajo valor de las masas efectivas, el radio del excitón en el material masivo es mayor de 10 nm, lo que causa que se pueda alcanzar el régimen de confinamiento fuerte para tamaños de cajas de 10-20 nm de base. Por el contrario, en muchos compuestos del grupo II-VI (para los que las masas efectivas son mayores), el radio del excitón es pequeño, de unos pocos nanómetros, lo que hace más difícil estar en el régimen de confinamiento fuerte para tamaños de caja típicos de 10-30 nm. Vamos a comentar algunos de los aspectos más relevantes del régimen de confinamiento fuerte.

Para cajas cuánticas pequeñas, $R_0 \ll a_B$, (siendo R_0 el radio del excitón y a_B el radio de Bohr en el material masivo), la cuantización de la energía cinética es la contribución más importante. Para electrones y huecos la energía de la interacción de Coulomb es pequeña comparada con la separación entre el estado fundamental y los excitados. La energía de enlace del excitón E_b puede calcularse usando teoría de perturbaciones. A primer orden viene dado por el elemento de matriz

$$E_b = \langle 00 | W_{eh} | 00 \rangle = \int \int_V \Psi_0(\mathbf{r}_e) \Psi_0(\mathbf{r}_h) \mathbf{W}_{ij}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \Psi_0(\mathbf{r}_e) \Psi_0(\mathbf{r}_h) d^3\mathbf{r}_e d^3\mathbf{r}_h \quad (2.6)$$

\mathbf{W}_{ij} representa a la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco. Cuando $R_0 \rightarrow 0$ y tenemos barreras infinitas, la energía de enlace del excitón diverge como $1/R_0$. Las funciones de onda a primer orden de aproximación no deben modificarse por la inclusión de la interacción coulombiana. La transición dipolar entre un electrón en el estado m y un hueco en el estado n viene dado, independientemente de R_0 , por

$$\langle \Psi_{mn} | p | \Psi_g \rangle = p_{cv} \delta_{mn} \quad (2.7)$$

donde p_{cv} es el elemento de matriz interbanda para las funciones de Bloch. La función δ describe las reglas de selección de las transiciones ópticas impuestas por la función de ondas envolvente. Si las masas del electrón y el hueco son diferentes y el potencial de confinamiento es finito, la superposición de las funciones de onda es cercano a la unidad para las transiciones permitidas. La fuerza de oscilador de la transición electrón-hueco en el estado n por caja cuántica en el régimen de confinamiento fuerte f_n^{SC} es

$$f_n^{SC} = \frac{2m_0\omega_n}{\hbar} p_{cv}^2 \quad (2.8)$$

donde m_0 es la masa del electrón en el vacío y $\hbar\omega_n$ la energía de la transición. Si este valor lo comparamos con el de un pozo cuántico

$$f_n^{QW} = \frac{2m_0\omega_n}{\hbar} p_{cv}^2 \frac{8}{\pi a_B^2} \quad (2.9)$$

observamos que sólo una familia de cajas cuánticas con una distancia promedio entre centros de $d_{av} = a_B\sqrt{\pi}/8 \approx 2a_B/3$, posee la misma fuerza de oscilador por unidad de área. Así pues basta que el área cubierta con cajas cuánticas sea mayor que la establecida por esa distribución promedio para superar la fuerza de oscilador de un pozo cuántico.

2.3. Estado del arte y bibliografía de referencia

Vamos a comentar algunas de las referencias básicas en lo que al desarrollo teórico del concepto de excitón se refiere, alguno de los otros campos de aplicabilidad y reseñar el estado actual de las investigaciones. La bibliografía puede llegar a resultar

extensa por lo que el autor se ha centrado en aquellas obras que estima son más relevantes y ofrecen un enfoque lo más general del tema.

Como ya se ha comentado el concepto de *excitón* fue introducido por Frenkel y Peierls en 1931-32. Frenkel consideró N moléculas (o átomos) idénticos en un cristal, que absorbían energía y pasaban a un estado excitado. En ausencia de acoplamiento interatómico la función de onda del cristal es un producto directo del estado de esta molécula y los estados fundamentales de las restantes. Esta función de onda posee una N -degeneración ya que la excitación puede producirse en cualquier átomo. La introducción del acoplamiento intermolecular tiene como consecuencia una deslocalización de esta excitación en el interior del cristal. Esta era la idea inicial que tenía Frenkel sobre los excitones.

Un primer estudio teórico en profundidad sobre la naturaleza y los tipos de excitones se debe a Knox [13]. En esta obra encontramos un extenso capítulo dedicado a la estructura electrónica en el que se discute detalladamente la naturaleza y propiedades físicas de los excitones y su clasificación en los tipos Frenkel y Wannier. Es una obra de lectura nada fácil debido en parte a una nomenclatura algo farragosa para los cánones de hoy en día, además de pasar muy de puntillas al tratar la aproximación de la masa efectiva. No obstante el análisis que desarrolla de los excitones de Wannier es magnífico y difícil de encontrar en los libros de hoy. Muchos artículos se refieren a este libro por una fórmula del tiempo radiativo, fórmula cuya demostración tampoco aparece.

Otra de las obras de referencia dignas de mención es el libro de Hartmut Haug y Stephan W. Koch [7]. El capítulo 10 está íntegramente dedicado a las propiedades físicas de los excitones en nanoestructuras. Advierte del uso de algunas funciones especiales diciendo que su nomenclatura es muy diferente a lo que el lector encontrará en la bibliografía habitual. Otra de las características de esta obra es la facilidad con la que cambia de notación de un capítulo a otro, alternando con el formalismo de primera y segunda cuantización. De este libro conviene destacar las secciones donde obtiene la fórmula de Elliot para el coeficiente de absorción en función de la dimensionalidad del sistema.

Stephan W. Koch posee otro libro en colaboración con L. Bányai sobre puntos cuánticos semiconductores [8]. En la obra encontramos un interesante capítulo dedicado a los estados de electrón-hueco, donde se explican procedimientos de cálculo, como el variacional, la técnica de diagonalización de matrices y otras más. El modelo se centra en puntos cuánticos esféricos.

Otra obra clásica dentro del ámbito de los semiconductores es la G. Bastard [9], sobre mecánica ondulatoria aplicada a las heteroestructuras semiconductoras. Es un libro ambicioso y sobre todo coherente en su notación, mucho más que las obras de Koch. El capítulo 8 está dedicado a la influencia de los campos externos sobre los niveles de energía de los gases electrónicos cuasi-bidimensionales.

De entre las obras modernas es muy notable el libro de John H. Davies [10]. Usando simples explicaciones físicas, este libro presenta los principios generales de los sistemas de baja dimensionalidad. En concreto el autor describe las propiedades del gas de electrones en dos dimensiones y las propiedades de confinamiento de los pozos cuánticos.

Cualquier reseña bibliográfica relativa a los semiconductores no puede finalizar sin hacer una referencia obligada a la obra de Cardona [11]. En este libro, *Fundamental of semiconductors*, se nos da una panorámica general, empezando con los capítulos dedicados a los grupos cristalográficos y siguiendo con un desarrollo muy claro de la aproximación de la masa efectiva y del método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.

Para concluir diremos que el concepto de excitón abarca campos más allá de la propia Física. En Química se aplica para explicar fenómenos de fluorescencia y en Biología está muy relacionado con estudios de la fotosíntesis.

A lo largo del siglo XX y parte del XXI se han desarrollado una gran cantidad de congresos y simposios relativos a la Física de los Semiconductores, sus propiedades ópticas, física de nanoestructuras, efecto del confinamiento sobre las propiedades ópticas de los semiconductores y un largo etcétera. El confinamiento ha permitido por ejemplo dar cuenta del denominado Efecto Stark Cuántico Confinado (QCSE), el Efecto Franz-Keldysh Confinado (FKCE), las escaleras de Wannier-Stark, las resonancias de Fano, el efecto Zener y diodos de efecto túnel.

A mediados de los años ochenta se estudiaron de forma teórica muchas de las propiedades ópticas de las nanoestructuras, pozos cuánticos, superredes, hilos cuánticos, cajas cuánticas, con y sin la aplicación de campos externos. Otro de los métodos usados entonces fue el de elementos finitos y posteriormente las diferencias finitas. La absorción óptica se calculaba con álgebra matricial estándar, métodos iterativos o por métodos aproximados de teoría de dispersión. Por último otro de los métodos a considerar es el desarrollo en ondas planas. Cada uno de ellos tiene sus ventajas y sus límites de aplicabilidad y se opta por uno u otro según lo que se desee modelizar teóricamente. En esta tesis se opta principalmente por el método variacional. Una de sus ventajas es su amplio rango de aplicabilidad cuando estamos en presencia de campos externos, tal como ha sido demostrado por afamados científicos como Gerald Bastard en pozos cuánticos [9].

Bibliografía

- [1] R. Hilsch R. W. Pohl "Optical Absorption by Silver Halides", Z. Physik **48**, 384 (1928).
- [2] R. J. Elliot "Intensity of Optical Absorption by Excitons", Phys. Rev **108**, 1384 (1957).
- [3] M. Shinada,S. Sugano "Interband Optical Transitions in Extremely Anisotropic Semiconductors. I. Bound and Unbound Exciton Absorption", J. Phys. Soc. Jpn. **21**, 1936 (1966).
- [4] S. A. Noskalkenko D. W. Snoke, *Bose-Einstein Condensation of Excitons and Biexcitons* (Cambridge University Press, 2000).

Este libro ha pasado a ser un clásico en lo que a condensados de excitones se refiere y es una de las referencias fundamentales en el campo. El análisis de las características físicas de los excitones que hace en el primer capítulo son muy ilustrativas.

- [5] N. L. D. Bimberg, M. Grundmann, *Quantum Dot Heterostructures* (John Wiley & Sons, 1998).

La obra, escrita por dos de las eminencias en lo que propiedades del confinamiento cuántico se refiere, consta fundamentalmente de una colección de artículos publicados en revistas científicas de importante factor de impacto. Trata muchos temas. El inconveniente principal es que al ser una reunión de contribuciones cada una tiene a veces su propia terminología con lo que es un libro que solo puede usarse para consultarlas por separado. Muchas de las fórmulas que aparecen están mal.

- [6] Robert S. Knox, *Theory of Excitons* (Academic Press, 1963).
- [7] H. Haug and S. Koch, *Quantum Theory of the optical and electronic properties of semiconductors* (World Scientific, 1998), 4th ed.
- [8] L. Bányai and S. Koch, *Semiconductor quantum dots* (World Scientific, 1993).
- [9] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, 1990).
- Estamos frente a un libro clásico y de referencia. Muy completo, coherente y de muy buena lectura. Profundiza mucho en la fenomenología física.
- [10] John H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction* (Cambridge University Press, 1997).
- [11] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamental of semiconductors* (Springer-Verlag, 1996).

Capítulo 3

Teoría básica

En este capítulo vamos a dar una rápida revisión a la teoría de los excitones en semiconductores. Primero se estudiará el caso del semiconductor masivo, para luego ir viendo como al reducir la dimensionalidad de nuestro sistema, cambian de forma dramática las propiedades físicas. A este respecto conviene mencionar algunos matices que a veces suelen pasar desapercibidos. Cuando se analiza el comportamiento de los excitones en el semiconductor masivo se toma la coordenada relativa, es decir la distancia entre el electrón y el hueco. De esa manera lo que se obtiene es la energía del excitón relativa a la del centro de masas. Esto se hace así porque la ecuación de Schrödinger es soluble y es similar a la del átomo hidrogenoide. Cuando tenemos confinamiento, la energía cinética de los electrones y huecos suele ser bastante mayor que la energía de interacción coulombiana con lo que esta última se puede tratar perturbativamente y el excitón se trata como dos partículas únicas e independientes. Por regla general la ecuación de Schrödinger no tiene solución analítica cuando consideramos el confinamiento y la interacción coulombiana. Esto nos lleva a lo que se denomina aproximación adiabática, es decir, desacoplamos las contribuciones debidas al confinamiento, a la interacción coulombiana y a la dimensionalidad del sistema. La aplicación de campos externos hace que la ecuación de Schrödinger tenga de nuevo soluciones parciales en algunos casos y en otros no. En resumen podemos considerar la función de onda excitónica como un producto de

contribuciones dadas por las soluciones parciales que en cada caso se conocen.

3.1. Estado electrónico fundamental de un cristal semiconductor

En esta sección vamos a recordar las aproximaciones fundamentales que permiten pasar de las leyes generales de la Mecánica Cuántica a las ecuaciones para un electrón o un hueco.

3.1.1. Aproximación de Born-Oppenheimer

En un cristal semiconductor podemos distinguir, por una parte, los iones de la red cristalina, con sus núcleos y los electrones de las capas profundas fuertemente localizados en el interior del cristal y, por otra, los electrones de las capas superficiales, que son las responsables de las propiedades conductoras del cristal.

La aproximación adiabática, también conocida como de Born-Oppenheimer (1927), consiste en despreciar el acoplamiento entre el movimiento de los electrones superficiales y el movimiento de los iones de la red. Ambos movimientos pueden estudiarse por separado. Si sólo nos interesa el movimiento de los electrones podemos considerar que los iones están fijos. Estos últimos ejercen entonces sobre cada electrón acciones mecánicas que pueden describirse por un potencial periódico $V_{iones}(\mathbf{r})$ cuya periodicidad es igual a la de la red cristalina.

3.1.2. Aproximación de Hartree-Fock

Dentro del marco de la aproximación de Born-Oppenheimer y trabajando con el formalismo de segunda cuantización, el Hamiltoniano electrónico del cristal puede escribirse como

$$\begin{aligned}
H_{cris}^{el} = & \int \Psi^\dagger(\xi) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ions}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\xi) d\xi \\
& + \frac{1}{2} \int \int \Psi^\dagger(\xi) \Psi^\dagger(\xi') V_{ee}(\xi, \xi') \Psi(\xi') \Psi(\xi) d\xi d\xi'
\end{aligned} \tag{3.1}$$

donde $\Psi^\dagger(\xi)$ es el operador creación de fermiones que crea un electrón en el punto $\xi \equiv (\mathbf{r}, \zeta)$, \mathbf{r} y $\zeta = \pm \frac{1}{2}$ designan las coordenadas espaciales y las de espín respectivamente. La integración sobre ξ representa la integración sobre las tres coordenadas espaciales y la suma sobre los dos estados de espín. V_{ions} es el potencial periódico creado por los iones del cristal y $V_{ee}(\xi, \xi')$ es el potencial de interacción electrón-electrón que se reduce al potencial coulombiano $V_{ee}(\xi, \xi') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ en la aproximación no relativista.

Los operadores de creación pueden desarrollarse usando una base ortonormal de funciones de un solo electrón $\{\phi_\lambda\}$:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \phi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \tag{3.2}$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \phi_{\lambda}(\mathbf{r})$$

a_{λ}^{\dagger} y a_{λ} son respectivamente los operadores de creación y destrucción de un electrón en el estado λ . Los estados electrónicos del cristal se construyen por aplicación sucesiva de N operadores de creación a_{λ}^{\dagger} sobre el estado vacío $|0\rangle$.

$$|\Phi_{cris}\rangle = \prod_{i=1}^N a_{\lambda_i}^{\dagger} |0\rangle \tag{3.3}$$

donde N es el número de electrones en el cristal. No hemos tenido en cuenta las interacciones electrón-electrón. Las funciones de onda del cristal poseen propiedades de simetría si los operadores a_{λ}^{\dagger} y a_{λ} obedecen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad \{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij} \quad \{a_i, a_j\} = 0 \quad (3.4)$$

donde $\{ \}$ y δ son el anticonmutador y la delta de Kronecker respectivamente. $\{A, B\} = AB + BA$.

Definido así, $|\Phi_{cris}\rangle$ es el determinante de Slater construido a partir de las funciones monoeléctricas $\phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}$. Ahora queda elegir qué tipo de función elegimos para la base. La aproximación de Hartree-Fock consiste en hallar estas funciones usando el método variacional, es decir, elegir las de tal forma que minimicen la energía electrónica del cristal y con la condición de normalización,

$$\frac{\delta \langle \Phi_{cris} | H | \Phi_{cris} \rangle}{\delta \phi_{\lambda_i}} = 0, \quad \int \phi_{\lambda_i}^*(\xi) \phi_{\lambda_i}(\xi) d\xi = 1 \quad (3.5)$$

La primera de las ecuaciones 3.5 nos lleva a un sistema de ecuaciones denominadas de Hartree-Fock,

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ions}(\mathbf{r}) \right) \phi_{\lambda_i}(\xi) + \left(\sum_j \int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda_j}(\xi') d\xi' \right) \phi_{\lambda_i}(\xi) \\ & - \sum_j \left(\int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda_i}(\xi') d\xi' \right) \phi_{\lambda_j}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_i}(\xi) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Examinemos el primer miembro de las ecuaciones 3.6. La interpretación del primer término es inmediata, es el Hamiltoniano de un electrón ligado al potencial periódico de la red cristalina. El segundo término es el de repulsión coulombiana electrón-electrón, pues el producto $-e|\phi_{\lambda_j}|^2$ representa la densidad de carga en volumen correspondiente al electrón en el estado λ_i tras hacer la suma en j para todos los electrones del cristal. El tercer término tiene origen puramente cuántico. Se denomina término de intercambio pues aparece al utilizar la función de onda antisimétrica de la fórmula 3.3. Este término de intercambio da cuenta del hecho de que dos electrones con el mismo espín no pueden acercarse indefinidamente, lo que se traduce en efectos repulsivos a corta distancia.

De igual manera los niveles de energía ϵ_i así determinados tienen un significado físico dado por el teorema de Koopmans (Kittel 1963, p 90): la energía $-\epsilon_i$ es la

energía que hay que dar a un electrón en el estado λ_i para extraerlo del sólido.

Técnicamente, la resolución de estas ecuaciones, que constituyen un sistema de ecuaciones integro-diferenciales acopladas, es un problema bastante complicado. La técnica estándar es una resolución autocoherente que permita calcular las ϕ_{λ_i} por aproximaciones sucesivas.

Si definimos

$$\begin{aligned} V_{coul}(\mathbf{r}) &= \sum_j \int |\phi_{\lambda_j}(\xi')|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\xi' \\ A_{\lambda_j, \lambda}(\mathbf{r}) &= \int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda}(\xi') d\xi' \end{aligned} \quad (3.7)$$

la ecuación 3.6 se escribe de la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ions}(\mathbf{r}) + V_{coul}(\mathbf{r}) \right) \phi_{\lambda_i}(\xi) - \sum_j A_{\lambda_j, \lambda}(\mathbf{r}) \phi_{\lambda_j}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_i}(\xi) \quad (3.8)$$

Podemos introducir un potencial efectivo V_{eff} que contemple la interacción coulombiana iones-electrón, la repulsión coulombiana electrón-electrón y la interacción de intercambio electrón-electrón, con lo que la ecuación 3.8 queda

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{eff}(\mathbf{r}) \right) \phi_{\lambda_i}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_i}(\xi) \quad (3.9)$$

donde el potencial efectivo V_{eff} posee la periodicidad de la red, de suerte que las funciones $\phi_{\lambda_i}(\xi)$ satisfacen el teorema de Bloch, y son de la forma

$$\begin{aligned} \phi_{n, \mathbf{k}}(\xi) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, \zeta) \\ \text{con} & \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_L, \zeta) = u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, \zeta)$$

donde \mathbf{R}_L es un vector de la red cristalina.

Las ecuaciones 3.9 son la base de los cálculos en teoría de bandas y no tienen en cuenta la interacción espín-órbita. Si ésta hubiera de incluirse habría que añadir el término $\frac{1}{4m^2c^2} \sigma \wedge \nabla V_{eff}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}$

3.2. La aproximación de la masa efectiva

El punto de arranque de esta aproximación ampliamente usada y que nos va a ser muy útil en el desarrollo de todos los cálculos expuestos en esta tesis, es la ecuación de Schrödinger para un electrón en un cristal masivo,

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} + H_r \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.11)$$

$V(\mathbf{r})$ es el potencial cristalino que incluye un promedio de las interacciones electrón-electrón y es periódico, con la periodicidad de la red de Bravais. El tercer término es el acoplamiento espín-órbita y el cuarto es la corrección relativista (término de Darwin debido a la corrección de la masa por la velocidad). La solución de la ecuación 3.11 puede escribirse, de acuerdo con el teorema de Bloch como

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3.12)$$

donde N es la constante de normalización y $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función periódica de \mathbf{r} con el periodo de la red. Las partes periódicas de las funciones de Bloch $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ son soluciones del siguiente Hamiltoniano (si despreciamos las correcciones relativistas)

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \right) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.13)$$

Los términos independientes de \mathbf{k} en 3.13 desaparecen en $\mathbf{k} = 0$ y conmutan con el operador de traslación. Las funciones $u_{m0}(\mathbf{r})$ forman una base completa que puede usarse para analizar la relación de dispersión $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ y las propiedades de las funciones de onda para valores de \mathbf{k} pequeños permiten escribir

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_m c_m(\mathbf{k}) u_{m0}(\mathbf{r}). \quad (3.14)$$

Sustituyendo 3.14 en 3.13, multiplicando por $u_{n0}^*(\mathbf{r})$ e integrando sobre la celdilla unidad obtenemos

$$\sum_m \left[\left(\varepsilon_{n\mathbf{0}} - \varepsilon_{n\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_0} \cdot \langle n\mathbf{0} | \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) | m\mathbf{0} \rangle \right] c_m(\mathbf{k}) = 0 \quad (3.15)$$

donde

$$\langle n\mathbf{0} | A | m\mathbf{0} \rangle = \int_{\text{celda unidad}} u_{n\mathbf{0}}^*(\mathbf{r}) A u_{m\mathbf{0}}(\mathbf{r}) d^3r \quad (3.16)$$

La ecuación 3.15 se puede resolver por métodos perturbativos. Suponiendo que la n -ésima banda es no-degenerada, para pequeños valores de \mathbf{k} podemos asumir que

$$c_{n\mathbf{k}} \sim 1; \quad c_{m\mathbf{k}} = \alpha \mathbf{k} \quad (3.17)$$

y si lo insertamos en la ecuación 3.15 se reduce a

$$c_{m\mathbf{k}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_0} \cdot \Pi_{nm} \frac{1}{\varepsilon_{n\mathbf{0}} - \varepsilon_{m\mathbf{0}}} \quad (3.18)$$

lo cual nos da la corrección a segundo orden de $\varepsilon_{n\mathbf{0}}$

$$\varepsilon_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_{n\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{|\Pi_{nm} \cdot \mathbf{k}|^2}{\varepsilon_{n\mathbf{0}} - \varepsilon_{m\mathbf{0}}} \quad (3.19)$$

El vector Π se define como

$$\Pi = \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \quad (3.20)$$

A medida que \mathbf{k} es más pequeño ($\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{n\mathbf{0}}$ permanece mucho más pequeño que las diferencias de energía entre las bandas $\varepsilon_{n\mathbf{0}} - \varepsilon_{m\mathbf{0}}$) la relación de dispersión de las bandas no degeneradas es parabólica en \mathbf{k} en la vecindad del punto Γ .

$$\varepsilon_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_{n\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha \frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} k_\beta \quad (3.21)$$

donde

$$\frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} = \frac{1}{m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{\Pi_{mn}^\alpha \Pi_{mn}^\beta}{\varepsilon_{n\mathbf{0}} - \varepsilon_{m\mathbf{0}}} \quad (3.22)$$

y $\mu_n^{\alpha\beta}$ es el tensor de la masa efectiva que describe la cinemática de los portadores en la vecindad del centro de la primera zona de Brillouin (punto Γ), y para una energía próxima a la banda n -ésima. Suponiendo la validez de 3.22, el efecto global de la estructura de la banda se puede asimilar mediante el uso de una masa efectiva que sustituye a la masa de los electrones libres. O sea, toda la mecánica cuántica subyacente a la banda podemos interpretarla diciendo que los electrones poseen una masa diferente de m_0 . Esta aproximación es válida para la banda de conducción de menor energía.

Podemos hacer una estimación de la expresión 3.22 teniendo en cuenta que el operador Π es del orden de \hbar/d donde d es el tamaño de la celdilla unidad. No hemos considerado en esta cruda aproximación el acoplamiento espín-órbita. La diferencia de energías del denominador $\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}$ podemos aproximarla como la energía de la banda prohibida, E_g con lo que una idea del orden de magnitud del valor de las masas efectivas lo podemos obtener sustituyendo todas estas aproximaciones en 3.22, resultando

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \left(\frac{\hbar}{d} \right)^2 \frac{1}{E_g} \quad (3.23)$$

Para un semiconductor típico podemos tomar $E_g \sim 1$ eV y para la celdilla unidad, $d \sim 2 \times 10^{-10}$ m, por tanto $\frac{m_0}{m^*} \sim 5$ y $m^* \sim 0.2 m_0$. Las masas efectivas suelen ser en la mayoría de los casos inferiores a la masa de los electrones en el vacío.

3.3. Estados excitónicos

Una excitación electrónica de un cristal semiconductor que contiene N electrones corresponde a la transferencia de un electrón de un nivel ocupado de la banda de valencia a un nivel desocupado de la banda de conducción. Dado el orden de magnitud de la banda prohibida, este proceso está generalmente provocado por la absorción de un fotón en el espectro óptico.

La función de onda excitónica la podemos escribir de la forma

$$F_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\lambda_1, \lambda_2} C_{\lambda_1, \lambda_2} \phi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{e\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \quad (3.24)$$

Para una transición óptica en un semiconductor de banda prohibida directa, los vectores \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 no serán muy diferentes uno de otro y sus valores serán próximos a 0. Las funciones de onda $\phi_{e\lambda}$ y $\phi_{h\lambda}$ se pueden aproximar en la vecindad de $\mathbf{k} = 0$ como

$$\phi_{e\lambda}(\mathbf{r}) \simeq c(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.25)$$

$$\phi_{h\lambda}(\mathbf{r}) \simeq (\nu(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})^* = \nu^*(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

La función 3.24 se escribe como

$$\begin{aligned} F_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} c(\mathbf{r}_1) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} \nu^*(\mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \\ &= \psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) c(\mathbf{r}_1) \nu^*(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (3.26)$$

La función de onda excitónica se descompone pues en un producto de una función envolvente ψ_X y una función cristalina f_{cris} :

$$\begin{aligned} \psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \\ f_{cris}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= c(\mathbf{r}_1) \nu^*(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.3.1. Ecuación efectiva para la función envolvente excitónica

Para bandas isotropas y no degeneradas y con banda prohibida directa en $\mathbf{k} = 0$, las relaciones de dispersión de las bandas de conducción y valencia pueden escribirse en la vecindad de $\mathbf{k} = 0$ como

$$\begin{aligned} \epsilon_v(\mathbf{k}) &= \epsilon_{v0} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_h^*} \\ \epsilon_c(\mathbf{k}) &= \epsilon_{c0} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e^*} \end{aligned} \quad (3.28)$$

El coeficiente m_h^* caracteriza la curvatura de la banda de valencia y representa la masa efectiva del hueco. La anchura de la banda prohibida es entonces

$$\epsilon_g = \epsilon_{c0} - \epsilon_{v0} \quad (3.29)$$

Con todo lo dicho podemos hacer un modelo a dos bandas, uno para el electrón y otro para el hueco y considerar la energía del par como la energía excitónica. La función envolvente representaría en este caso la función de onda excitónica. Así pues,

$$\left[\epsilon_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] \psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \epsilon_X \psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.30)$$

Si se tienen en cuenta los fenómenos de polarización inducidos por las transiciones virtuales entre las bandas, el término de interacción coulombiana se modifica. Esta polarización macroscópica del medio puede tenerse en cuenta mediante la introducción de una constante dieléctrica ϵ . Con esta modificación y haciendo el cambio $\mathbf{r}_1 \equiv \mathbf{r}_e$ y $\mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{r}_h$, la ecuación 3.30 pasa a ser

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_X \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (3.31)$$

donde E_X es la energía de enlace del excitón¹ y viene definida por

$$E_X = \epsilon_X - \epsilon_g \quad (3.32)$$

3.3.2. Resolución de la ecuación efectiva

En un cristal infinito existe invariancia traslacional. La cantidad de movimiento \mathbf{P} del sistema electrón-hueco conmuta con el Hamiltoniano. Se puede separar el movimiento del centro de masas mediante la variable

¹La energía de enlace o de ligadura de los excitones suele definirse en realidad de otra manera. Se define como la diferencia entre las energías que tienen el electrón y el hueco como partículas independientes y la energía que tiene todo el sistema, es decir $E_X^b = E_e + E_h - E_X$

$$\mathbf{R} = \frac{m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h}{m_e^* + m_h^*} \quad (3.33)$$

del movimiento relativo descrito por la variable

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h \quad (3.34)$$

La función de onda $\psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ podemos expresarla como producto de una función que describe el centro de masas y otra el movimiento relativo

$$\psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r}) \quad (3.35)$$

Introduciendo la masa reducida $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ y la masa total $M = m_e^* + m_h^*$, la ecuación 3.31 se puede reescribir como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right] \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r}) = E_X \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r}) \quad (3.36)$$

En la ecuación anterior podemos separar el movimiento del centro de masas

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \Phi(\mathbf{R}) = E_X^0 \Phi(\mathbf{R}) \quad (3.37)$$

cuya solución viene dada por ondas planas

$$\Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \quad (3.38)$$

y cuya energía es

$$E_X^0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \quad (3.39)$$

De igual manera la ecuación de Schrödinger de la parte relativa es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right] \phi(\mathbf{r}) = E_X^{rel} \phi(\mathbf{r}) \quad (3.40)$$

La ecuación 3.40 es formalmente idéntica a la del problema del átomo de hidrógeno y la energía del estado fundamental es

$$E_X^{rel} = -\frac{\mu e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} = E_X^{3D} \quad (3.41)$$

fórmula que es esencialmente igual a 2.4.

La función de onda correspondiente al estado fundamental será $\psi_X^{3D} = e^{-\alpha r}$, donde r es la distancia electrón-hueco y α es tal que

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\varepsilon \hbar^2}{\mu e^2} = a_X^{3D} \quad (3.42)$$

Así pues α^{-1} es idéntico al radio de Bohr del excitón introducido en 2.5.

En resumen podemos decir que la energía total del excitón es la suma de la energía cinética de traslación del centro de masas más la energía debida al movimiento relativo del par electrón-hueco. Esta aproximación es buena y podemos hacerla siempre y cuando trabajemos en cristales de tamaño ilimitado. Además tenemos el inconveniente de que no tenemos una manera clara de calcular el valor de la energía cinética del centro de masas.² Si nuestro estudio se centra en heteroestructuras, tal es el caso de pozos, hilos y puntos cuánticos, la separación del movimiento relativo de la del centro de masas tiene una validez muy limitada. En tal caso es más cómodo usar, por ejemplo, coordenadas de Hylleraas y ya tiene sentido hablar de la energía total del excitón.

3.4. Funciones de onda excitónicas

El excitón de Wannier, por todo lo visto hasta ahora, es asimilable a un átomo hidrogenoide sumergido en un medio de constante dieléctrica $\varepsilon \neq \varepsilon_0$. Ello significa que en ausencia de un confinamiento fuerte las funciones de onda excitónicas serán las mismas que las ya conocidas para el átomo de hidrógeno. Los excitones, y dada la naturaleza y las diferentes geometrías que pueden tener las nanoestructuras,

²En aquellas situaciones en las que es posible separar el movimiento del centro de masas se suele tomar como origen de energías la propia energía del centro de masas. No podemos hablar en este caso de la energía total del excitón, sino de su energía relativa al centro de masas.

pueden estar en un espacio de 3 dimensiones (semiconductor masivo), en 2 dimensiones (pozos cuánticos) o en una dimensión (hilos cuánticos). Esta clasificación hay que tomarla también en un sentido aproximado. Todos los modelos se hacen considerando un espacio tridimensional, lo que ocurre es que en cada uno de los casos antes mencionados, alguna de las dimensiones es mucho mayor o menor que las restantes. Esto permite de alguna manera desacoplar las características geométricas de la función de onda según el número de dimensiones que estamos tratando.

3.4.1. Excitón en un espacio tridimensional

Se trata pues de resolver la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno. La ecuación de Wannier es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi) \quad (3.43)$$

∇_r^2 es el operador laplaciano en coordenadas esféricas

$$\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (3.44)$$

La descripción que vamos a hacer es con la coordenada relativa r , que se refiere a la distancia entre el electrón y hueco, $r \equiv |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$, μ es la masa reducida y ε es la constante dieléctrica del medio en el que se halla sumergido el excitón. Para la energía total del excitón faltaría tener en cuenta la energía cinética del centro de masas dada en 3.39. En la ecuación 3.43 hemos supuesto que no existe ningún confinamiento tridimensional, la interacción entre el electrón y el hueco es sólo coulombiana. La función de onda es separable en las tres variables y dependerá de tres números cuánticos, n , l y m . Tras hacer unos cambios de variable adecuados, la solución general de la ecuación diferencial 3.43 convenientemente normalizada es la siguiente, e idéntica a la de física atómica

$$\Psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = -\sqrt{\left(\frac{2}{na_B^*}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (3.45)$$

con

$$\rho = \frac{2r}{na_B^*} \quad (3.46)$$

a_B^* es el radio de Bohr excitónico definido en 2.5. $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ son los polinomios de Laguerre y $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ los armónicos esféricos. Al igual que en el átomo de hidrógeno $n = 1, 2, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ y $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$. Para el estado fundamental, $n = 1$, $l = m = 0$, la función de onda 3.45 es simplemente

$$\Psi_{100}(\mathbf{r}) = 2(a_B^*)^{-3/2} e^{-r/a_B^*} \quad (3.47)$$

y la energía del estado fundamental es igual a la energía de Rydberg (Ry) definida en 2.4. Hasta aquí toda la descripción es análoga al átomo de hidrógeno.

3.4.2. Excitón en un espacio bidimensional

Si tenemos un espacio de dos dimensiones, con coordenadas r y ϕ , en la ecuación de Wannier 3.43 el operador laplaciano es ahora

$$\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (3.48)$$

La solución a la ecuación diferencial nos da ahora una función de onda que depende de dos números cuánticos, n y m

$$\Psi_{n,m}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi(a_B^*)^2(n+1/2)^3} \frac{(n-|m|)!}{[(n+|m|)!]^3}} \rho^{|m|} e^{-\rho/2} L_{n+|m|}^{2|m|}(\rho) e^{im\phi} \quad (3.49)$$

con

$$\rho = \frac{2r}{(n+1/2)a_B^*}$$

Los números cuánticos son ahora $n = 0, 1, 2, \dots$ y $m = -n, \dots, 0, \dots, +n$. La energía de los estados en función del número cuántico principal n es ahora

$$E_n = -Ry \frac{1}{(n + \frac{1}{2})^2} \quad (3.50)$$

Para el estado fundamental con $n = 0$, tenemos $E_0 = -4Ry$. Vemos ahora que en el caso bidimensional el excitón posee cuatro veces la energía correspondiente al caso

tridimensional. Para la función de onda del estado fundamental basta con hacer $n = m = 0$ en 3.49,

$$\Psi_{00}(\mathbf{r}) = \frac{4}{a_B^*} e^{-2r/a_B^*} \quad (3.51)$$

3.4.3. El modelo de dimensión fraccionaria

Resulta evidente que la geometría de las nanoestructuras afecta de manera esencial a la dinámica de los excitones y en particular a su energía de ligadura. En la mayoría de los modelos la anisotropía de las nanoestructuras se puede estudiar cambiando sus dimensiones y formas, ya sea el tamaño del pozo, el radio del hilo o del anillo, etc. El estudiar modelos en 3, 2 o 1 dimensión se hace por facilidad en el tratamiento matemático. Teniendo en cuenta que todos los sólidos son más o menos tridimensionales, haría falta un modelo más razonable para dar cuenta del grado de anisotropía que presentan. Uno de esos modelos consiste en tener un espacio de dimensión no entera. En esta sección vamos a comentar los resultados obtenidos por Xing-Fei He [1], pues, aparte de ser muy ilustrativos, contemplan no sólo los resultados obtenidos sino que sirven para hacer predicciones a espacios de otras dimensiones. A este respecto, entre la bibliografía existente cabe citar un artículo sobre mecánica cuántica en espacios curvados y en particular aplicada a una geometría en forma de cinta de Möbius y con aplicación de campo magnético [2].

Se empieza por plantear la ecuación de Schrödinger para el excitón de Wannier-Mott en un espacio de dimensión fraccionaria,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{\alpha-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right] \Psi(r, \theta) = E_n \Psi(r, \theta) \quad (3.52)$$

donde α es la dimensión del sólido ($1 < \alpha < 3$) y L^2 es el operador momento angular, dado por

$$L^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^{\alpha-2} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin^{\alpha-2} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \quad (3.53)$$

α es la dimensión del espacio de Hausdorff y $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$. La integración sobre un espacio de medida αD se halla con la fórmula

$$\int_{\alpha D} d\mathbf{r} = \frac{2\pi^{(\alpha-1)/2}}{\Gamma\left[\frac{\alpha-1}{2}\right]} \int_0^\infty dr r^{\alpha-1} \int_0^\pi d\theta \sin^{\alpha-2} \theta \quad (3.54)$$

$d\mathbf{r}$ representa el volumen en el αD espacio. La ecuación 3.52 admite separación de variables, $\Psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$, con lo que obtenemos dos ecuaciones diferenciales, una para $R(r)$ y otra para $\Theta(\theta)$. La ecuación radial es

$$R''(r) + \frac{\alpha-1}{r}R'(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+\alpha-2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.55)$$

En esta ecuación se pueden hacer los cambios de variable adecuados para que resulte una ecuación diferencial hipergeométrica confluyente. La parte angular, que no vamos a escribir, se convierte en la ecuación de Gegenbauer. La primera función de onda radial, $R_{n1}(r)$, para $n = 1$ y $l = 0$ es

$$R_{10}(r) = \left[\frac{2^{2\alpha}}{(\alpha-1)^\alpha \Gamma(\alpha) a_B^\alpha} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{2}{\alpha-1} \left(\frac{r}{a_B} \right) \right] \quad (3.56)$$

a_B es el radio de Bohr definido en 2.5. Con estas funciones radiales podemos calcular las energías de los estados y los radios de Bohr, siendo ahora

$$E_n = -\frac{Ry}{\left[n + \frac{\alpha-3}{2} \right]^2} \quad (3.57)$$

$$(a_B)_n = \left[n + \frac{\alpha-3}{2} \right]^2 a_B \quad (3.58)$$

Haciendo $\alpha = 2, 3$ las ecuaciones 3.56 a 3.58 reproducen los resultados expuestos anteriormente para el excitón en dos y en tres dimensiones.

Para $n = 1$ la energía de ligadura del excitón en el caso unidimensional, $\alpha = 1$, se hace infinita como ya sabemos. Todo ello da pie a que el caso unidimensional tenga que tratarse aparte y con unos procedimientos distintos. Los modelos que vamos a desarrollar a lo largo de la tesis no contemplan los sistemas unidimensionales.

3.5. Efecto Stark cuántico confinado (QCSE)

El efecto Stark cuántico confinado, QCSE (quantum confined Stark effect), describe el efecto de un campo eléctrico externo en los espectros de absorción o emisión sobre pozos cuánticos. En un principio se estudió pues sobre sistemas bidimensionales junto con el efecto Franz-Keldysh, que explica el cambio de la absorción óptica en un semiconductor cuando se aplica un campo eléctrico. Su nombre proviene de su homólogo en física atómica. El QCSE permite desarrollar moduladores ópticos.

Una vez conocida la teoría básica en lo relativo a estados excitónicos y funciones de onda ya estamos en condiciones de pasar a estudiar los efectos que un campo eléctrico externo produce sobre los excitones. En el apéndice A tenemos el desarrollo de la teoría básica para pozo finito e infinito que usaremos en el futuro a la hora de estudiar el efecto del campo sobre puntos cuánticos de forma cilíndrica. No obstante hay una serie de trabajos clásicos que ilustran de manera muy clara los resultados usando el método perturbativo y variacional y que pasamos a comentar brevemente con una finalidad puramente pedagógica.

3.5.1. QCSE sobre electrones

Bastard *et al* [3] analizan el problema sin tener en cuenta la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco, ya que la energía debida al confinamiento es más importante. Estos autores emplean una función variacional que da cuenta del hecho de que cuando el campo es intenso la distribución de carga se concentra en las barreras del pozo. El efecto de la aplicación de un campo eléctrico sobre un pozo cuántico lo podemos ver representado en la Figura 3.1.

El resultado al que llegan Bastard *et al*, tras hacer alguna manipulación algebraica es el que mostramos a continuación. Es interesante ver la demostración en el apéndice A.4. Tomando aproximaciones a campo débil de forma tal que podamos encontrar una solución analítica al problema, la energía que se obtiene es

$$E(F) = E_1^{(0)} - \frac{1}{8} \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right]^2 \frac{m^* |q|^2 F^2 L^4}{\hbar^2} \quad (3.59)$$

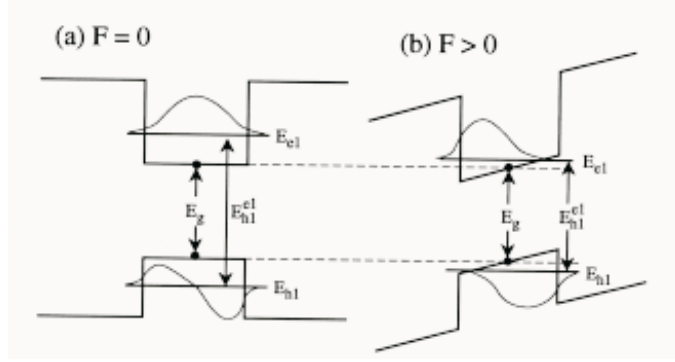


Figura 3.1: Estructura de niveles y gráfica de la función de onda del electrón y el hueco en un pozo cuántico sin y con campo eléctrico.

en donde $|q|$ se refiere al valor absoluto de la carga electrónica. Así pues a campos débiles la variación de la energía con el campo es cuadrática, hecho que vamos a constatar a lo largo de diferentes modelos y en diferentes nanoestructuras. Además la variación con la anchura del pozo crece con la cuarta potencia.

De igual manera se puede hacer un desarrollo por teoría de perturbaciones llegando al conocido resultado

$$E(F) = E_1^{(0)} - \frac{1}{24\pi^2} \left[\frac{15}{\pi^2} - 1 \right] \frac{m^* |q|^2 F^2 L^4}{\hbar^2} \quad (3.60)$$

Si tomamos como potencial de confinamiento un oscilador armónico el problema tiene ahora solución analítica. En el trabajo de Sarkisyan [4] podemos ver que la energía en función del campo eléctrico es de la forma

$$E(F) = E_1^{(0)} - \frac{|q|^2 F^2}{2 m^* \omega^2} \quad (3.61)$$

y si tenemos en cuenta que la frecuencia del oscilador $\omega \sim \frac{\hbar}{m^* L^2}$, la expresión 3.61 se reduce a

$$E(F) = E_1^{(0)} - \frac{m^* |q|^2 F^2 L^4}{2 \hbar^2} \quad (3.62)$$

En un modelo variacional desarrollado por el autor de esta tesis y cuya formulación íntegra puede consultarse en el apéndice E se llega a que

$$E(F) = E_1^{(0)} - \left[\frac{(3e - 8)^2}{4(e - 2)^2} \right] \frac{m^* |q|^2 F^2 R^4}{\hbar^2} \quad (3.63)$$

En la expresión 3.63, e se refiere a la base de los logaritmos neperianos ($e = 2.718281$). El modelo consiste en un disco cuántico y con el campo eléctrico contenido en el plano.

Para concluir el análisis se ha modelizado también una esfera cuántica con potencial de confinamiento infinito y campo eléctrico sobre el eje z . La variación de la energía en función del campo es ahora

$$E(F) = E_1^{(0)} - \left[\frac{(2\pi^2 - 3)^2}{324\pi^4} \right] \frac{m^* |q|^2 F^2 R^4}{\hbar^2} \quad (3.64)$$

Así pues podemos concluir que el confinamiento da lugar a un efecto Stark electrónico que es puramente cuadrático con el campo ($\Delta E \sim F^2$) y posee a su vez una variación con la cuarta potencia del tamaño, ($\Delta E \sim L^4$). En cada caso la intensidad de esa variación depende del confinamiento y del método de aproximación empleado. En el método variacional el factor que multiplica a $\frac{m^* |q|^2 F^2 L^4}{\hbar^2}$ es

$$c_v = \frac{1}{8} \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right]^2 \simeq 0,00213502 \quad (3.65)$$

en el perturbativo

$$c_p = \frac{1}{24\pi^2} \left[\frac{15}{\pi^2} - 1 \right] \simeq 0,00219452 \quad (3.66)$$

en el oscilador armónico, el término correspondiente a la fórmula 3.63, es

$$c_h = \left[\frac{(3e - 8)^2}{4(e - 2)^2} \right] \simeq 0,01161842731 \quad (3.67)$$

y para la esfera cuántica

$$c_s = \left[\frac{(2\pi^2 - 3)^2}{324\pi^4} \right] \simeq 0,00887821 \quad (3.68)$$

A la vista de los resultados los métodos variacional y perturbativo dan resultados prácticamente coincidentes, $c_v/c_p = 0,972884$. No así en el caso del oscilador armónico $c_h/c_p = 5,3$ y la esfera $c_s/c_p = 4,2$. La diferencia es significativa y se debe

en parte a dos motivos. Por una parte, tanto el método variacional como el perturbativo son métodos aproximados que se aplican a campo débil. En ambos casos el confinamiento que se ha tomado es el de barreras de potencial infinito. No es el caso del oscilador armónico en el que el potencial solo tiene valores altos a grandes distancias.

3.5.2. QCSE sobre excitones

Al hablar del excitón hemos de tener en cuenta la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco. Esto da lugar a la aparición en el hamiltoniano de un término de la forma $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}$, lo cual hace irresoluble analíticamente el problema. En tal caso uno de los procedimientos que dan resultados satisfactorios es el variacional. La filosofía de este método consiste en buscar una función de onda que dependa de uno o varios parámetros. Luego todo estriba en determinar los valores de los parámetros de forma tal que la energía del excitón sea mínima. La dependencia funcional que se busca es similar a la del átomo de hidrógeno en la que la interacción coulombiana da lugar a una función de la forma $\exp(-r/a_0)$, donde a_0 es el radio de Bohr. En pozos cuánticos, que fueron, como ya se ha apuntado más arriba, las estructuras en las que primero se estudió el QCSE, se toma una función de onda de la forma

$$\phi(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\lambda} \exp(-r/\lambda) \quad (3.69)$$

donde $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$. La forma de la función 3.69 satisface el que sea normalizada, $\langle\phi|\phi\rangle = 1$. Si se expresa λ en unidades del radio de Bohr, su valor nos da un idea de la dimensionalidad del sistema. En el semiconductor masivo, $\lambda \rightarrow 1$ y para el caso bidimensional $\lambda \rightarrow 2$, con lo que se consigue reproducir las funciones de onda dadas en 3.49. En cada caso y según la geometría a estudiar las funciones variacionales serán diferentes. Una vista a la literatura de los cálculos variacionales nos da una idea de cuán diferentes pueden llegar a ser las funciones. Se trata también de buscar los menos parámetros posibles ya que así se simplifica el cálculo y el modelo es más realista.

El efecto del campo, ya sea mediante teoría de perturbaciones o por el método variacional, tiene como resultado una superposición y mezcla de todos los estados posibles del sistema cuántico. El procedimiento variacional permite interpretar esta superposición como una variación de la dimensionalidad del sistema.

En los capítulos sucesivos, cuando estudiemos el efecto del campo ya daremos la forma específica de cada función y presentaremos su análisis.

3.6. Peculiaridades del Efecto Stark cuántico confinado

El QCSE presenta características diferentes según la dirección en la que se aplique el campo y según la geometría de la nanoestructura. Vamos a analizar los resultados concernientes a experimentos realizados en campo vertical y en campo lateral respectivamente.

3.6.1. Campo vertical

El crecimiento de heteroestructuras mediante las técnicas habituales da como resultado que las muestras de cajas cuánticas no tengan una forma simétrica. Más bien poseen formas lenticulares, piramidales o tronco-cónicas [5], e incluso en algunos casos su concentración no es constante, sino que existe un gradiente de composición en la caja cuántica.

Los resultados experimentales de este tipo de cajas son compatibles con la existencia de un momento dipolar permanente o intrínseco [6], lo que implica una separación neta espacial entre el electrón y el hueco para campo $F = 0$. Fry *et al*, contrariamente a las predicciones habituales, demostraron que los huecos están localizados por *arriba* de los electrones en cajas cuánticas asimétricas con un gradiente de concentración en la dirección vertical. Las cajas cuánticas analizadas por estos autores tienen una base de unos 18 nm y una altura de 8,5 nm. Los resultados experimentales relativos al QCSE asimétrico se muestran en la Figura 3.2.

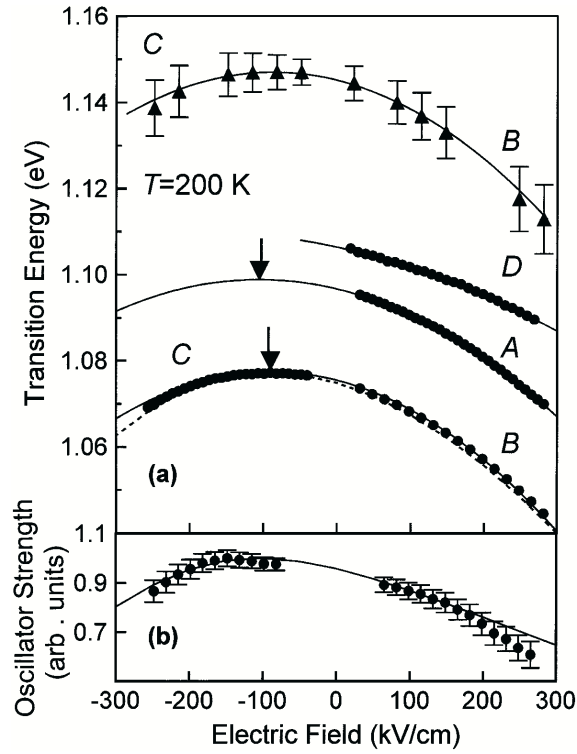


Figura 3.2: En (a) se muestran las energías de transición al estado fundamental (círculos negros) para dos muestras a una temperatura de $T=200$ k. Las curvas sólidas son ajustes a una expresión de la forma $E = E_0 + pF + \beta F^2$. Las flechas indican las energías máximas de emisión. Las curvas inferior en (a) representan las transiciones desde el primer estado excitado. La superior se ha desplazado 7 meV hacia arriba para obtener una variación continua de la posición de los picos entre campos eléctricos positivos y negativos. En (b) se representa la fuerza del oscilador y las líneas continuas son resultado de un cálculo de la superposición de las funciones de onda del electrón y el hueco.

La dependencia de la energía de transición para las muestras se ajusta muy bien a un polinomio de segundo grado, $E = E_0 + pF + \beta F^2$, (la línea continua en la Fig 3.2 (a)). E_0 es la energía para $F = 0$, el segundo término proviene del momento dipolar intrínseco p y el parámetro β se conoce como polarizabilidad y está relacionado con la separación espacial que el campo eléctrico induce sobre el electrón y el hueco como consecuencia del QCSE.

Los ajustes experimentales dan un valor de $p = (7 \pm 2) \times 10^{-29}$ Cm que corresponde a una separación electrón-hueco de $r = 4 \pm 1$ Å, si usamos $p = er$. Los modelos teóricos de Bimberg y Grundmann [7] predicen la existencia de un momento dipo-

lar intrínseco, pero los experimentos indican que sorprendentemente la dirección del dipolo está invertida. Las curvas de la Figura 3.2 presentan un máximo para campos eléctricos negativos lo que nos dice que la densidad de carga electrónica se mantiene por debajo de la densidad de carga de los huecos, o sea, el dipolo está invertido.

Los modelos teóricos precisos se hicieron suponiendo que las cajas cuánticas estaban constituidas exclusivamente por InAs y tenían forma piramidal. Todos los modelos así calculados dan una variación de la energía con el campo de la forma indicada, salvo por el signo del coeficiente p .

Este hecho se explica por la difusión de Ga dentro de la caja cuántica. Weidong y Leburton [8] han desarrollado un modelo en el que se tiene en cuenta un gradiente en la composición de Ga a lo largo de la geometría de la caja cuántica. Para determinados perfiles de Ga han encontrado un alineamiento invertido en lo que a la posición del electrón y el hueco cabría esperar, lo cual explica el signo anómalo que presenta el momento dipolar en el QCSE. Para cajas cuánticas piramidales han encontrado igualmente que los estados de los huecos son muy sensibles a la difusión de Ga a lo largo de la nanoestructura.

3.6.2. Campo lateral

Si el campo eléctrico se aplica en la dirección perpendicular a la de crecimiento, el QCSE tiene un carácter diferente hasta al ahora descrito. Seufert, Obert *et al* han realizado experimentos y modelizaciones teóricas con cajas cuánticas autoensambladas de CdSe/ZnSe con campo eléctrico lateral [34]. En la Figura 3.3 vemos sus resultados.

Los puntos indican los resultados experimentales, los cuales se ajustan bien a un polinomio puramente cuadrático, sin término lineal. Como podemos ver el ajuste es más sensible a una contribución lineal a campos más elevados. Si suponemos un momento dipolar permanente que dé lugar a una separación entre electrón y hueco de 5 Å encontramos una desviación muy importante entre teoría y experimento, ver figura 3.3. Así pues podemos concluir que en campo lateral las cajas cuánticas analizadas no presentan momento dipolar intrínseco, para este tipo de material. La

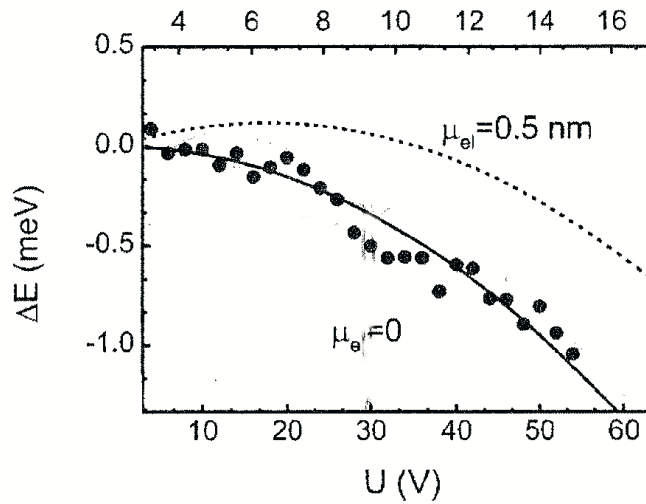


Figura 3.3: Desplazamiento Stark en cajas cuánticas con campo lateral y ajuste a un polinomio de segundo grado. La línea de puntos muestra el desplazamiento teórico de la energía para un momento dipolar permanente correspondiente a una separación electrón-hueco de 5\AA .

polarizabilidad obtenida del ajuste, el factor que multiplica a F^2 , es $\beta = 4,9 \times 10^{-3} \text{ meV}(\text{kV}/\text{cm})^2$, valor que está relacionado con el volumen de la caja, y que con el valor dado por β podemos estimar el tamaño lateral de la caja en torno a 5 nm. Los resultados también indican que debido al gran confinamiento el QCSE es del orden de 1 meV en el rango de voltajes aplicado.

D. Reuter, V. Stavarache *et al* llegan a conclusiones similares en puntos cuánticos de InAs embebidos en dispositivos p-i-n o n-i-n [10]. Sus resultados se muestran en la Figura 3.4.

El comportamiento del desplazamiento Stark es similar para todas las muestras y de una magnitud muy pequeña. Este efecto es tan pequeño porque el desplazamiento de los niveles de energía está ampliamente compensado por la disminución de la energía de ligadura excitónica debida a la débil superposición de las funciones de onda. A la vista de la Figura 3.4 podemos decir que la variación de la energía con el campo también se puede aproximar a un polinomio sólo con un término cuadrático.

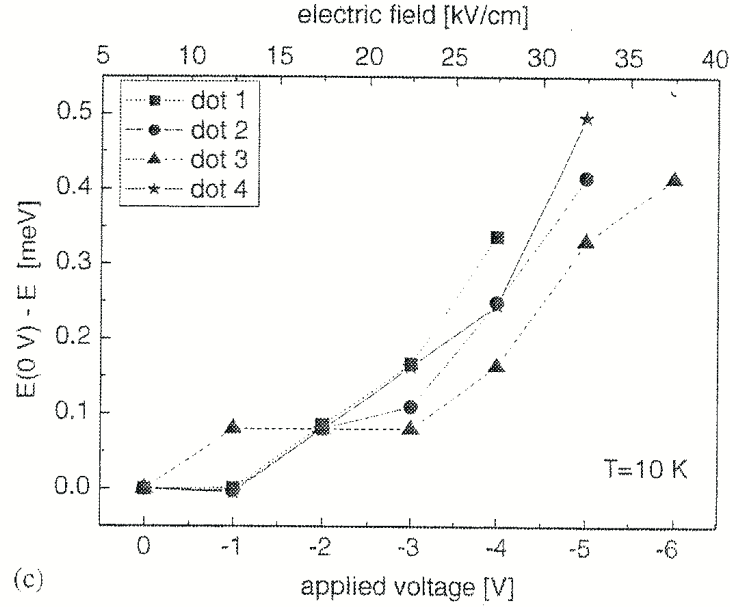


Figura 3.4: Desplazamiento Stark en cuatro muestras de cajas cuánticas [10].

3.7. Efecto de un campo magnético

La aplicación de un campo magnético sobre una nanoestructura puede tratarse de dos formas diferentes. Si el campo es intenso comparado con el confinamiento, tenemos una dependencia que es similar a la del oscilador armónico y se obtienen los denominados niveles de Landau, cuyo equivalente clásico sería la cuantización de las órbitas ciclotrónicas. Si el campo es débil puede tratarse perturbativamente y obtendríamos un resultado similar al efecto Zeeman atómico.

3.7.1. Caso electrónico

En presencia de un campo magnético intenso y con un potencial oscilador armónico de confinamiento en el plano (disco cuántico), la ecuación de Schrödinger de un electrón es

$$\frac{1}{m_e^*} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + \frac{1}{2} m_e^* \omega_\rho^2 \rho^2 = E \psi \quad (3.70)$$

donde ω_ρ es la frecuencia asociada al potencial de confinamiento, $\omega_\rho \propto \frac{\hbar}{m_e^* R^2}$, siendo R el radio del disco.

El potencial vector en coordenadas polares planas es de la forma $\vec{A} = (0, 0, B\rho/2)$, según el *gauge* de Lorentz, y desarrollando el hamiltoniano 3.70 se llega a que

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi - \frac{i\hbar\omega_c}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{m_e^* \Omega^2 \rho^2}{8} \psi = E \psi \quad (3.71)$$

donde $\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$ es la frecuencia ciclotrón y

$$\Omega^2 = \omega_c^2 + 4\omega_\rho^2 \quad (3.72)$$

Así pues el campo magnético da lugar a un confinamiento parabólico que se suma al confinamiento del oscilador, siendo Ω la frecuencia resultante. A su vez tenemos un término con una derivada primera que da cuenta de la dependencia de la función de onda con el ángulo φ . En el apéndice C tenemos la solución analítica de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico bidimensional. Por tanto la solución de 3.71 es

$$\psi(\rho, \varphi) = N e^{im\varphi} e^{-\frac{\rho^2}{4a^2}} \times \rho^{|m|} F_1^1 \left(-n_\rho, |m| + 1; \frac{\rho^2}{2a^2} \right) \quad (3.73)$$

con

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a^{1+|m|}} \sqrt{\frac{(|m| + n_\rho)!}{2^{|m|} n_\rho! |m|!}} \quad (3.74)$$

la constante de normalización, m el número cuántico magnético y n_ρ el número cuántico radial, correspondientes ambos al oscilador armónico bidimensional; F_1^1 es la función hipergeométrica confluyente. El parámetro a , denominado también longitud magnética, es

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \Omega}} \quad (3.75)$$

Las energías del electrón son entonces

$$E_{n_\rho m}^e = \hbar\Omega \left(n_\rho + \frac{|m| + 1}{2} \right) + \frac{\hbar\omega_c m}{2} \quad (3.76)$$

Recordemos que en el oscilador armónico bidimensional los valores que pueden tomar los números cuánticos son $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ y $m = n_\rho, n_\rho - 2, n_\rho - 4, \dots, -n_\rho + 2, -n_\rho$. Si representamos los estados por pares (n_ρ, m) , para $n_\rho = 0$ necesariamente $m = 0$, para $n_\rho = 1$, $m = 1$ y $m = -1$, etc. Es decir

$$n_\rho = 0, m = 0 \quad (3.77)$$

$$n_\rho = 1, m = 1, m = -1 \quad (3.78)$$

$$n_\rho = 2, m = 2, m = 0, m = -2 \quad (3.79)$$

$$n_\rho = 3, m = 3, m = 1, m = -1, m = -3 \quad (3.80)$$

entonces tomando hasta $n_\rho = 2$, según 3.76 tendremos

$$E_{00} = 1/2 \hbar\Omega \quad (3.81)$$

$$E_{11} = 2 \hbar\Omega + 1/2 \hbar\omega_c \quad (3.82)$$

$$E_{1-1} = 2 \hbar\Omega - 1/2 \hbar\omega_c \quad (3.83)$$

$$E_{22} = 7/2 \hbar\Omega + \hbar\omega_c \quad (3.84)$$

$$E_{20} = 5/2 \hbar\Omega \quad (3.85)$$

$$E_{2-2} = 7/2 \hbar\Omega - \hbar\omega_c \quad (3.86)$$

El espectro de energías para un oscilador armónico bidimensional se conoce también con el nombre de niveles de Fock-Darwin. Para visualizar mejor la dependencia de las energías en función del campo magnético vamos a suponer primero que la frecuencia ciclotrón es mucho mayor que la frecuencia debida al confinamiento, $\omega_c \gg \omega_\rho$ y entonces según 3.72, $\Omega \simeq \omega_c$. Las gráficas de las energías en función del campo magnético se muestran en la figura 3.5. Algunos niveles son degenerados y poseen la misma energía, aunque correspondan a combinaciones diferentes de números cuánticos. El abanico de niveles equiespaciados por una cantidad $\hbar\omega_c$ es lo que se conoce como niveles de Landau. Cabe destacar de la gráfica la dependencia lineal de la energía con el campo magnético. En puntos cuánticos pequeños ya no

podemos hacer la aproximación antes citada y el comportamiento de la energía ya no sería lineal con el campo.

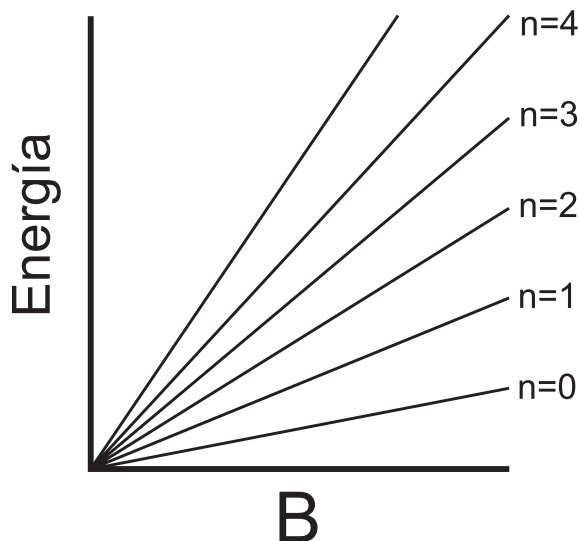


Figura 3.5: Abanico de niveles de Landau en función del campo magnético.

3.7.2. Caso excitónico

Todo lo esbozado anteriormente es aplicable a un electrón en presencia de un campo magnético. El problema del excitón, considerado como un par electrón hueco que interacciona electrostáticamente requiere otra formulación que, *mutatis mutandis*, es análoga. Siguiendo una línea de argumentación similar podemos escribir ahora

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{\epsilon r_{eh}} + \frac{ie\hbar}{m_e^* c} A(\vec{r}_e) \cdot \nabla_e - \frac{ie\hbar}{m_h^* c} A(\vec{r}_h) \cdot \nabla_h + \frac{e^2}{2m_e^* c^2} (A(\vec{r}_e))^2 + \frac{e^2}{2m_h^* c^2} (A(\vec{r}_h))^2 \right\} \Psi = E\Psi \quad (3.87)$$

De igual manera que anteriormente $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{H} \times \vec{r})$

Hacemos el cambio de coordenadas relativo al centro de masas

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= (m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h) / (m_e^* + m_h^*) \\ \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_h \end{aligned} \quad (3.88)$$

Con la transformación canónica

$$\Psi(\vec{\rho}, \vec{r}) = \exp\{i[\vec{K} - (e/\hbar c)A(\vec{r})] \cdot \vec{\rho}\} F(\vec{r}) \quad (3.89)$$

el Hamiltoniano 3.87 se transforma en

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} + \frac{ie\hbar}{c} \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right) A(r) \cdot \nabla \right. \\ \left. + \frac{e^2}{2\mu c^2} A(r)^2 - \frac{2e\hbar}{m_e^* + m_h^*} A(\vec{r}) \cdot \vec{K} \right\} F = \left\{ E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_e^* + m_h^*)} \right\} F \quad (3.90)$$

El Hamiltoniano 3.90 es análogo al excitónico sin interacciones externas, pero con la adición de tres términos perturbativos. El primero de ellos es el relacionado con el efecto Zeeman, siendo proporcional al campo magnético

$$\frac{ie\hbar}{c} \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right) A(r) \cdot \nabla = -\frac{e}{2c} \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right) \vec{H} \cdot \vec{L} \quad (3.91)$$

donde $\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$ es el operador momento angular relativo.

El segundo es el término diamagnético

$$\frac{e^2}{2\mu c^2} A(r)^2 = \frac{e^2 H^2 (x^2 + y^2)}{8\mu c^2} \quad (3.92)$$

en donde H tiene componente z

El tercer término proviene del campo eléctrico observado desde el centro de masas como consecuencia del campo magnético.

$$-\frac{2e\hbar}{m_e^* + m_h^*} A(\vec{r}) \cdot \vec{K} = - \left[-\frac{\hbar \vec{K}}{m_e^* + m_h^*} \times \vec{H} \right] \cdot \vec{r} = -\frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{H}) \cdot \vec{r} \quad (3.93)$$

donde $\vec{v} = \hbar \vec{K} / (m_e^* + m_h^*)$ es la velocidad del excitón. Este término suele ser pequeño y su contribución es despreciable.

El uso de estos tres términos como perturbaciones de estados hidrogenoides, cuya teoría es bien conocida de la espectroscopia atómica, exige que los términos magnéticos sean pequeños comparados con la energía de Coulomb $-e^2/\varepsilon r_{eh}$. Cuando esta

última es pequeña comparada con los términos magnéticos, este método perturbativo no es válido, y ha de tomarse más bien como término perturbativo la energía de Coulomb $-e^2/\epsilon r_{eh}$. Las soluciones no perturbadas son obviamente productos de los estados de Landau del electrón y el hueco respectivamente. Los trabajos de Elliot [11] y Loudon [12] fueron pioneros en su tiempo y permitieron determinar los coeficientes magnéticos de absorción interbanda.

Hay que destacar que la ecuación 3.91 da cuenta solamente del efecto Zeeman orbital. En todos los estados que son estados puros singlete, ha de considerarse la interacción de los espines del electrón y el hueco con el campo magnético. Esto da lugar a la adición del término

$$g_e \mu_e \cdot \mathbf{S}_e + g_h \mu_h \cdot \mathbf{S}_h \quad (3.94)$$

al Hamiltoniano 3.87. Ahora $\mu_B = e\mathbf{H}/mc$ y los espines del electrón y el hueco y los factores g son $\mathbf{S}_e, \mathbf{S}_h, g_e, g_h$. El factor giromagnético g_{eff} de un estado excitónico vendrá dado por las contribuciones

$$g_{eff} = a_\mu g_\mu + a_e g_e + a_h g_h \quad (3.95)$$

donde a son coeficientes numéricos que dependen de las simetrías de las funciones de onda del electrón, del hueco y de la función envolvente y

$$g_\mu = m \left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) [13] \quad (3.96)$$

En cualquier caso la contribución de los espines hay que considerarla dentro de la estructura fina, y si tratamos con puntos cuánticos con gran confinamiento éste acabará por enmascarar las posibles estructuras finas que puedan estar presentes.

3.8. Sobre la aplicabilidad de la aproximación de la masa efectiva

En la sección 3.2 hemos esbozado las ideas que conforman lo que se denomina aproximación de la masa efectiva. Al tratarse de una aproximación es obvio que tiene un rango de validez limitado, y que no siempre es justificable su uso. Vamos a analizar aquí bajo qué condiciones es factible y está permitido el uso de tal aproximación cuando se aplican campos externos. Solo se pretende justificar de manera somera el uso de la aproximación ya que un estudio riguroso casi podría ser objeto de una nueva tesis en la que tendrían cabida la teoría de bandas, teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, etc.

La aplicación de un campo eléctrico constante a electrones confinados en un potencial periódico da lugar a lo que se conoce como oscilaciones de Bloch. Esto es una consecuencia del modelo de enlace fuerte (*tight binding*) en el que la relación de dispersión en función de k puede tomarse de la forma $\varepsilon(k) = A \cos ak$, donde A es una constante y a es el tamaño de la celdilla unidad. Para un electrón sometido a un campo eléctrico externo \mathcal{F} la fuerza neta es

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e\mathcal{F} \quad (3.97)$$

ecuación diferencial cuya solución es

$$k(t) = k(0) - \frac{e\mathcal{F}}{\hbar} t \quad (3.98)$$

con lo que la relación de dispersión tendría ahora la forma

$$\varepsilon(k) = A \cos \left[ak(0) - \frac{ae\mathcal{F}}{\hbar} t \right] \quad (3.99)$$

en donde aparece la frecuencia de oscilación de Bloch, $\omega_B = ae|\mathcal{F}|/\hbar$

Cerca del mínimo de la banda y dentro del modelo de enlace fuerte, la masa efectiva puede determinarse por

$$m^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right]^{-1} \quad (3.100)$$

con lo que la masa efectiva será un parámetro que oscilará armónicamente con el tiempo. No obstante, si tenemos en cuenta la frecuencia de esta oscilación, que viene dada por la frecuencia de Bloch, ω_B , y para el GaAs con una celdilla unidad de $a = 5.65 \text{ \AA}$ y para un campo eléctrico externo de 1000 kV/cm obtenemos $\omega_B = 8.5 \times 10^{13} \text{ Hz}$. Esta frecuencia es muy alta con lo que en promedio las variaciones asociadas de la masa efectiva debidas al campo eléctrico externo no es necesario considerarlas dentro de los valores del campo eléctrico a los que se trabaja en el laboratorio. Una formulación más adecuada vendría de la mano de otros modelos.

Al centrarnos en el estudio de los excitones de Wannier sabemos que el radio de Bohr es bastante más grande que el tamaño de la celdilla unidad y que los electrones no son sensibles a las particularidades del potencial local creado por los átomos de la red cristalina. Peter, A. John Sugirtham y L. Caroline [16] analizan las energías de ionización y masas efectivas de pozos cuánticos de GaAs en presencia de campo eléctrico externo y con masas efectivas que dependen de la posición. Con su modelo justifican que tomar la masa efectiva constante es válido en nanoestructuras cuya dimensión sea mayor o igual que el radio de Bohr excitónico.

El caso del campo magnético es diferente. Al aumentar su intensidad el radio de las órbitas ciclotrónicas es menor con lo que es de esperar que a partir de determinado valor del campo magnético los electrones sean sensibles a los potenciales locales atómicos y la aproximación de la masa efectiva deje de ser válida. En la mayoría de los casos analizados experimentalmente la masa efectiva aumenta de manera lineal con el campo con una pendiente que depende del material estudiado. En un principio la medida de masas efectivas se hacía mediante el estudio de picos de absorción en la zona de microondas correspondientes a la frecuencia ciclotrón, $\omega_c = eB/m^*$. Hoy en día se usan técnicas basadas en el efecto Haas-van Alphen³ y en fotoemisión resuelta en ángulo, *angle-resolved photo emission* (ARPES) [17]. En un trabajo que casi podemos considerar seminal, E. D. Palik, S. Teitler y R. F. Wallis [18] hacen un

³El efecto Haas-van Alphen, abreviado efecto dHvA, es un efecto puramente cuántico en el que el momento magnético de un metal puro cristalino oscila a medida que la intensidad del campo magnético aplicado \mathbf{B} se incrementa. El efecto se debe a los niveles de Landau cuantizados de la energía electrónica. El efecto se presenta a campos magnéticos intensos y a baja temperatura.

estudio de la variación de la masa efectiva en función del campo magnético llegando a la siguiente expresión

$$m^* = m_0^*[1 + (\hbar\omega_c/E_G)(A - B)] \quad (3.101)$$

en la que m^* es la masa efectiva del electrón, m_0^* es la masa efectiva en el fondo de la banda y E_G es la energía de la banda prohibida. A y B vienen dadas por

$$\begin{aligned} A &= 2 \left[\frac{2 + x^2}{2 + x} \right] (1 - y^2) \\ B &= (1 - y)(1 - x) \left\{ \left[\frac{(4 + 3x + 2x^2)(1 - y)}{2(2 + x)^2} \right] - \frac{2}{3} y \right\} \\ x &= [1 + (\Delta/E_G)]^{-1} \\ y &= m_0^*/m \end{aligned} \quad (3.102)$$

donde Δ es la energía del desdoblamiento espín-órbita y m es la masa del electrón en el vacío. La variación de la masa efectiva en función del campo magnético es consecuencia de la naturaleza no parabólica de las bandas de conducción. La fórmula anterior es válida para el GaAs, InP e InAs y obtenida con un tratamiento a cuarto orden. A y B son pues constantes que introducidas en 3.101 nos dan una dependencia lineal de la masa efectiva con el campo magnético.

La figura 3.6 está obtenida de la referencia [18] y la mostramos porque es muy ilustrativa del comportamiento que predice el modelo para las masas efectivas en función del campo magnético. Las líneas son el ajuste del modelo, que podemos ver que es lineal y con diferentes pendientes según el material. Para el GaAs y el InAs la masa efectiva es prácticamente constante con el campo así que en estos materiales está justificado el usar la masa efectiva como un parámetro constante. Para el InSb y el InP hay una variación creciente y lineal de la masa efectiva con el campo magnético externo aplicado. Así pues podemos concluir que un modelo riguroso habría de contemplar este tipo de dependencia en la formulación del problema.

La siguiente tabla muestra algunos de los parámetros del excitón que usaremos en los cálculos y que tienen que ver con las unidades naturales para el campo eléctrico y magnético.

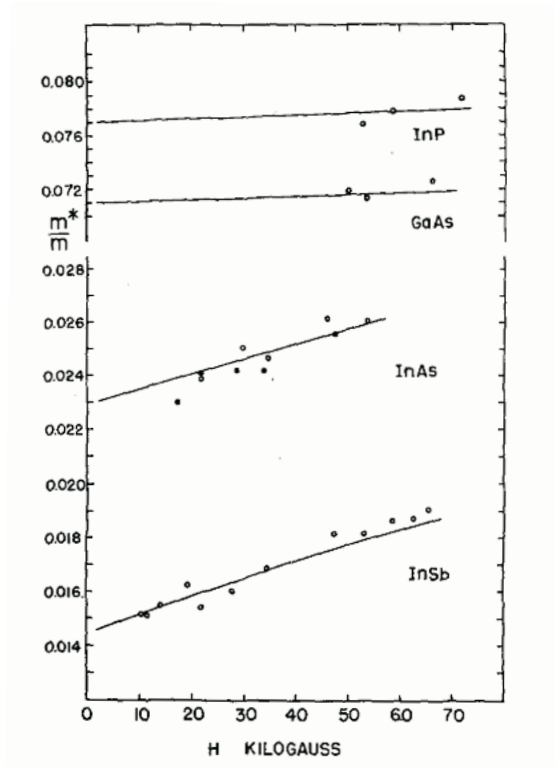


Figura 3.6: Variación a baja temperatura de la relación de masas m^*/m en función del campo magnético H obtenidos con valores resonantes de la frecuencia ciclotrón y para varios compuestos semiconductores del grupo III-V.

	ϵ	m_e^*	m_h^*	μ	σ	f_X (kV/cm)	γ_X (T)
GaAs	13.2	0.038	0.5	0.060	0.136	8.011	4.835
GaSb	15.7	0.05	0.23	0.041	0.217	2.241	1.609
InP	12.4	0.067	0.65	0.061	0.103	9.950	5.641
InAs	14.6	0.022	0.41	0.021	0.054	0.720	0.481
InSb	17.7	0.014	0.4	0.014	0.035	0.170	0.137

Tabla 3.1: Parámetros del excitón para varios materiales. Las fórmulas para el cambio de unidades pueden consultarse en el apéndice B

Bibliografía

- [1] Xing-Fei He "Excitons in anisotropic solids: The model of fractional-dimensional space", Phys. Rev. B **43**, 2063 (1990).
- [2] Zehao Li and L. R. Ram-Mohan "Quantum mechanics on a Möbius ring: Energy levels, symmetry, optical transitions, and level splitting in a magnetic field", Phys. Rev. B **85**, 195438 (2012).
- [3] G. Bastard E. E. Mendez, L. L. Chang, L. Esaki "Variational calculations on a quantum well in an electric field", Phys. Rev. B **28**, 3241 (1983).
- [4] H. A. Sarkisyan Modern Phys. Lett. B **16**, 835 (2002).
- [5] S. Rusimov *et al* "Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix", Phys. Rev. B **51**, 14766 (1995).
- [6] P. W. Fry *et al* "Inverted Electron-Hole Alignment in InAs-GaAs Self-Assembled Quantum Dots", Phys. Rev. Lett. **84**, 733 (2000).
- [7] N. L. D. Bimberg, M. Grundmann, *Quantum Dot Heterostructures* (John Wiley & Sons, 1998).
- [8] S. Weidong and 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(R) (2001).
- [9] J. Seufert, M. Obert, M. Rambach, G. Bacher, A. Forchel, T. Passow, K. Leonardi and D. Hommel, Physica E **13**, 147 (2002).

- [10] D. Reuter, V. Stavarache, A. D. Wieck, M. Shwab, R. Oulton and M. Bayer "Influence of lateral electric field on the optical properties of InAs quantum dots", *Physica E* **32**, 73 (2006).
- [11] R. J. Elliot and R. Loudon , *Phys. Chem. Solids* **8**, 382 (1959).
- [12] R. J. Elliot and R. Loudon , *Phys. Chem. Solids* **15**, 196 (1960).
- [13] Robert S. Knox, *Theory of Excitons* (Academic Press, 1963).
- [14] M. G. Burt "Effective-Mass Approximation for Electrons in Crossed Electric and Magnetic Fields", *Phys. Rev.* **145**, 536-542 (1965).
- [15] O. Madelung *Intrinsic Properties of group IV elements and III-V, II-VI, and I-VII compounds*" (Springer-Verlag, New York, 1987)
- [16] Peter, A. John; Sugirtham, L. Caroline "Spatial Dependent Effective Mass for Donor Binding Energies in a Quantum Well in the Influence of an Electric Field ", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **6**, 157-161 (2009).
- [17] N. Tang, B. Shen, M. J. Wang, Z. J. Yang, K. Xu, G. Y. Zhang, Y. S. Gui, B. Zhu, S. L. Guo, J. H. Chu, K. Hoshino, and Y. Arakawa "Influence of the magnetic field on the effective mass of two-dimensional electron gas in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures", *phys. stat. sol. (c)* **3**, 2246-2249 (2006).
- [18] E. D. Palik, S. Teitler y R. F. Wallis "Free Carrier Cyclotron Resonance, Faraday Rotation, and Voigt Double Refraction in Compound Semiconductors", *Journal of Applied Physics* **32**, 2132-2135 (1961).

Capítulo 4

Efecto Stark anómalo en un disco cuántico

4.1. Introducción

Debido al gran interés en la física y en la tecnología, las estructuras semiconductoras de dimensión cero ocupan un lugar importante en la investigación fundamental y aplicada [1][2]. De acuerdo a su proceso de fabricación, estas cajas cuánticas adquieren diferentes formas (esfera, lente, anillo, disco, etc.). Todas estas nanoestructuras muestran propiedades análogas a las de átomos, como por ejemplo niveles discretos de energía y desplazamiento Stark, tema que se va a estudiar en el presente capítulo.

Las estructuras de dimensión cero en presencia de un campo eléctrico externo ofrecen una gran variedad de aplicaciones tales como puertas lógicas controladas cuánticamente [3] y dispositivos usados en computación cuántica [4]. Recientemente el efecto Stark cuántico confinado (QCSE) se ha estudiado intensamente desde el punto de vista experimental, a fin de mejorar el rendimiento de dispositivos ópticos semiconductores [5][6][7][8]. En general podemos decir que los estudios teóricos y experimentales de los efectos del campo eléctrico en portadores confinados constatan dos hechos notables: un ensanchamiento del espectro de absorción y un desplaza-

miento hacia el rojo en la emisión de luz debida a la recombinación excitónica. Ambos efectos se atribuyen al campo eléctrico externo, lo que puede proporcionarnos información útil para futuras aplicaciones en puntos cuánticos. Así pues, la electroabsorción basada en el QCSE es uno de los procesos más eficientes para construir moduladores ópticos y dispositivos electro-ópticos. Además, en sistemas 0D, el desplazamiento Stark de los niveles de energía de los excitones confinados no viene acompañada por una disminución dramática de la fuerza del oscilador de la transición óptica [9], la cual es algo mayor que la fuerza de oscilador típica para transiciones ópticas en semiconductores homogéneos. De todo ello resulta que los estados excitónicos no colapsan para campos eléctricos superiores al campo de ionización de los semiconductores masivos y los desplazamientos de las energías exceden a la energía de ligadura excitónica.

Algunos estudios teóricos y experimentales se han dedicado a la influencia del campo eléctrico en dimensión cero y muchos de ellos ya los hemos citado anteriormente, como las referencias [10][11][12][13] entre otras. Desde un punto de vista teórico, el desplazamiento Stark de una única partícula en una caja cuántica en forma de disco fue estudiada por Ham y Spector [14] en 2006. Estos autores han estudiado el efecto de un campo eléctrico en la energía electrónica de un disco cuántico semiconductor. Han demostrado que el desplazamiento Stark de los niveles de energía electrónicos dependen sólo del radio o de la altura del disco cuando el campo se aplica en la dirección perpendicular o paralela al eje del disco, respectivamente. Cuando el campo eléctrico es paralelo o perpendicular al eje del disco, el desplazamiento Stark depende del radio y la altura del disco, al igual que del ángulo entre el campo y el eje del disco. El desplazamiento de los niveles de energía conduce a una disminución de la banda prohibida de los materiales semiconductores, entendiéndose como ésta la distancia energética mínima entre el estado de mayor energía de la banda de valencia y el de menor energía de la banda de conducción. En el caso del excitón, Gotoh et al [15] han estudiado el espectro de fotoluminiscencia excitónico en discos cuánticos aislados con campo eléctrico lateral. Han observado un desplazamiento hacia el rojo de las líneas de emisión y una disminución de la intensidad

al aumentar el campo eléctrico. Se ha encontrado además que la fotoluminiscencia de los excitones estaba fuertemente polarizada a lo largo de la dirección del campo en los discos más grandes. Estos efectos dependen principalmente del tamaño lateral del disco. Experimentos realizados por Kowalik et al [16] proporcionan un método para testar y medir propiedades fotónicas de puntos cuánticos individuales por emisión de pares de fotones entrelazados. Korkusinski et al [17] han demostrado teóricamente, usando la aproximación de la masa efectiva y tratamientos perturbativos, que aplicando un campo eléctrico en el plano es posible originar fotones en cascada a partir de recombinación multiexcitónica en puntos cuánticos.

Vogel et al [18] han estudiado el QCSE del excitón, biexcitón y excitón cargado en puntos cuánticos de InGaAs/GaAs mediante microfotoluminiscencia. Sus resultados muestran una ausencia de momento dipolar permanente en el plano lateral de los discos. Experimentalmente han encontrado también que la polarizabilidad varía entre 2.6 y $3.7 \mu eV cm^2 kV^{-2}$, que es comparable con los valores reportados por Gerardot et al [19]. Sus experimentos sobre puntos cuánticos autoensamblados y aislados de InGaAs llevan a las siguientes conclusiones: el campo eléctrico lateral afecta considerablemente a la estructura fina, el corrimiento Stark llega hasta 1.5 meV, la anchura de línea aumenta y la intensidad de la fotoluminiscencia disminuye. Algunos de estos resultados los volveremos a ver cuando estudiemos los anillos cuánticos.

Los estudios realizados por Ritter et al [20] constituyen una buena descripción cuantitativa de los efectos que compiten entre sí cuando se aplica un campo eléctrico lateral al estado fundamental del par electrón-hueco en nanoestructuras en forma de disco. Dentro de la aproximación de la masa efectiva y considerando un potencial de confinamiento parabólico los autores han elaborado dos métodos aproximados. El primero de ellos viene de considerar la interacción de Coulomb como perturbativa, lo que lleva a una reducción de la polarizabilidad e incluso, para un acoplamiento coulombiano fuerte, la aparición de una polarizabilidad negativa. Este resultado contradice el teorema de la concavidad, que establece que la energía del estado fundamental es una función cóncava de cualquier parámetro que sea lineal en el

hamiltoniano (ver por ejemplo Thirring [21]), lo cual viene a decir que el método perturbativo no es correcto en este caso. Sin embargo, el método variacional en el que la función de prueba se toma como producto de una función de onda para el electrón y otra para el hueco da una energía menor que en el método perturbativo. Reimer et al [22] han mejorado este último modelo. Han estudiado, tanto teórica como experimentalmente, el efecto del campo lateral. En su trabajo han llegado a que el potencial de interacción electrón-hueco se modifica por la aplicación del campo eléctrico. Este comportamiento tiende a compensar el desplazamiento Stark para la partícula única. La polarizabilidad excitónica calculada ($\alpha_{teo} = 30 \mu eV cm^2 kV^{-2}$) es 100 veces mayor que el valor experimental ($\alpha_{exp} = 0,31 \mu eV cm^2 kV^{-2}$) y es muy sensible a la energía de confinamiento. Todos los trabajos concluyen diciendo que todavía queda mucho por descubrir tanto teórica como experimentalmente en este problema.

Vamos a desarrollar en el siguiente capítulo un análisis variacional del problema que intente presentar una mejor descripción del confinamiento y una elección apropiada de la función de onda para discos cuánticos delgados. Vamos a tomar la dimensión radial del disco mucho mayor que la vertical e igualmente un potencial de confinamiento tipo oscilador armónico bidimensional y para la dirección vertical un pozo cuadrado de barreras infinitas, como la mayoría de autores suelen tomar [23][24][25]. En la siguiente sección vamos a desarrollar la base teórica de nuestra aproximación para luego dar los resultados del modelo, compararlos con valores experimentales de la literatura y sacar conclusiones. La referencia al modelo y los resultados de este capítulo se encuentran en el artículo del autor [26], *On the anomalous Stark effect in a thin disc-shaped quantum dot*, J. Phys.: Condens. Matter **22**, (2010) 375301.

4.2. Formalismo teórico de partícula única

Antes de atacar el problema del excitón de manera general hay que resolver el problema de una partícula confinada con un potencial de oscilador armónico y

sometida a la acción de un campo eléctrico. Consideremos por lo tanto una partícula (electrón o hueco) confinada en un disco cuántico plano de radio R . Dentro de la aproximación de la masa efectiva y sin considerar los efectos de la polarización superficial producida por el campo, el Hamiltoniano de una partícula es

$$H_i = H_0^i + W_i \quad (4.1)$$

H_0^i ($i = e, h$) es el Hamiltoniano del electrón sin perturbar

$$H_0^i = -\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \nabla^2 + V_i(\rho, \varphi) \quad (4.2)$$

(ρ, φ) son las coordenadas polares. En el plano xy el confinamiento viene dado por el potencial oscilador armónico bidimensional

$$V_i(\rho, \varphi) = \begin{cases} \frac{1}{2} m_i^* \omega_i^2 \rho^2, & \text{si } \rho < R \\ \infty, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (4.3)$$

m_i^* y ω_i son la masa efectiva isótropa y la frecuencia de oscilación, respectivamente.

La energía dipolar eléctrica es

$$W_i = q e \vec{F} \cdot \vec{r} \quad (4.4)$$

$q = +1$ o $q = -1$ para el electrón o hueco respectivamente. A fin de simplificar el problema vamos a suponer que las frecuencias de oscilación para el electrón y el hueco son iguales ($\omega_e = \omega_h = \omega$). Tomamos además como unidades de distancia $a_i^* = \varepsilon_0 \hbar^2 / e^2 m_i^*$ y como unidades de energía $R_i^* = \hbar^2 / 2m_i^* a_i^{*2}$. ε_0 es la constante dieléctrica efectiva del semiconductor, la cual contempla los posibles efectos de polarización. Introducimos además un campo adimensional de unidades $f_i = (e a_i^* / R_i^*)$. $f_i = 1$ corresponde al campo de ionización del electrón o el hueco, es decir, el valor en el que la energía electrostática del campo es igual a la energía de Rydberg. Si definimos la anisotropía en la masa efectiva como $\sigma = m_e^* / m_h^*$, los radios de Bohr para el electrón y el hueco se pueden expresar como $a_h^* = \sigma a_e^*$, $R_e^* = \sigma R_h^*$ y $f_h = \sigma^2 f_e$.

En estas condiciones el Hamiltoniano del electrón o hueco en coordenadas polares puede ponerse como

$$H_0^i = -\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + \gamma_i^2 \rho^2 + q f_i \rho \cos \varphi \quad (4.5)$$

siendo $\gamma_e = \frac{1}{R^2}$ y $\gamma_h = \frac{\sigma}{R^2}$. El subíndice i representa al electrón o hueco respectivamente. Los detalles algebraicos del cambio de unidades pueden consultarse en Apéndice B. Allí se muestran también para el caso más general del excitón.

En *ausencia* de campo eléctrico el problema del oscilador armónico bidimensional tiene solución analítica y viene dada por la solución general

$$\Phi(\rho, \varphi) = N \rho^{|m|} \exp\left(-\frac{\gamma_i \rho^2}{2}\right) F_1^1(-n_\rho, |m| + 1, \gamma_i \rho^2) \exp(im\varphi) \quad (4.6)$$

donde n_ρ^i es el cero no entero positivo de la función hipergeométrica confluyente $F_1^1(-n_\rho, |m| + 1, \gamma_i \rho^2)$.

En *presencia* de campo eléctrico externo el problema es irresoluble analíticamente, de modo que se opta por una función variacional de la forma

$$\Psi^i(\rho, \varphi) = \exp(-\gamma_i \rho^2 / 2) F_1^1(-n_\rho^i, 1, \gamma_i \rho^2) \exp(\beta f \rho \cos \varphi) \quad (4.7)$$

En 4.7 se ha tomado la función de onda para el estado fundamental ($m = 0$). La última exponencial contiene el parámetro variacional β , de manera similar a como hacen muchos autores al tratar el caso del pozo de potencial [27] y que ha dado tan buenos resultados como la solución analítica con las funciones de Airy. Modelos de elección de funciones variacionales pueden encontrarse en el libro de Galindo y Pascual [29].

4.3. Modelo excitónico

El Hamiltoniano de un excitón confinado en un disco cuántico plano con potencial oscilador armónico y en presencia de un campo eléctrico externo \vec{F} nos complica más el problema, pues contiene el término coulombiano

$$H_X = \frac{p_e^2}{2m_e^*} + \frac{p_h^2}{2m_h^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_e^2 (x_e^2 + y_e^2) + \frac{1}{2} m_h^* \omega_h^2 (x_h^2 + y_h^2) - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + e \vec{F} \cdot (\vec{r}_e - \vec{r}_h) \quad (4.8)$$

donde $\omega_{e(h)}$ es la frecuencia del oscilador para el electrón o el hueco respectivamente, valor que está relacionado directamente con el radio del disco,

$$\omega_{e(h)} \sim \frac{\hbar}{m_{e(h)}^* R^2} \quad (4.9)$$

[28], y $m_{e(h)}^*$ son las masas efectivas del electrón o hueco.

Las coordenadas de nuestro sistema junto con la dirección del campo eléctrico las podemos ver en la figura 4.1

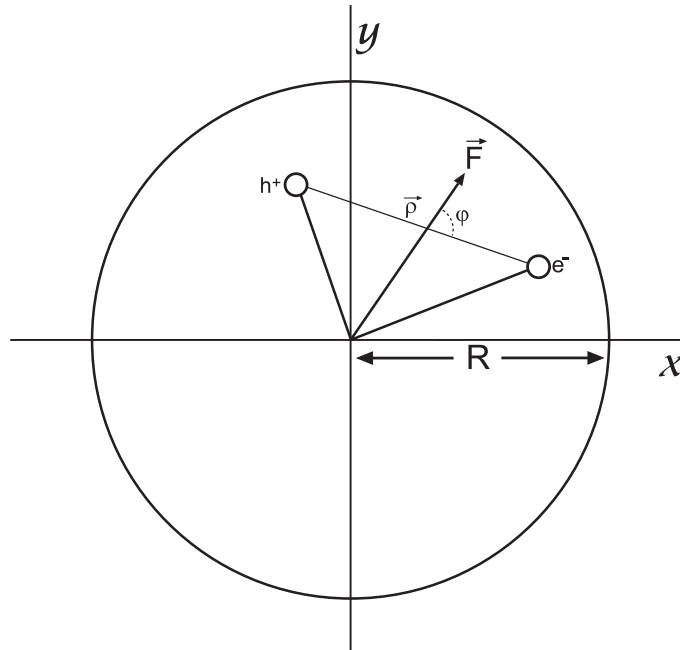


Figura 4.1: Coordenadas empleadas en el Hamiltoniano del modelo de un excitón en un disco cuántico; ρ representa la coordenada relativa o distancia electrón-hueco y φ el ángulo entre ρ y la dirección del campo eléctrico.

El Hamiltoniano 4.8 se puede separar, quedando una parte en función de las coordenadas del centro de masas y otra en función de la coordenada relativa del

electrón y el hueco, $\vec{R} = (m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h)/M$, $M = m_e^* + m_h^*$,

$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$, escribiéndose ahora

$$H_X = H_{CM} + H_{rel} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}M\omega^2 R^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + e\vec{F} \cdot \vec{r} \quad (4.10)$$

con $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ y $\omega \sim \frac{\hbar}{\mu R^2}$ siendo

$$H_{rel} = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + e\vec{F} \cdot \vec{r} \quad (4.11)$$

El Hamiltoniano relativo es el que contiene la mayor parte de la física que queremos estudiar. Al tener una geometría plana circular vamos a tomar coordenadas polares (ρ, φ) , por tanto 4.11 se escribe ahora

$$H_{rel} = -\frac{\hbar}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \rho^2 - \frac{e}{\epsilon \rho} + eF\rho \cos \varphi \quad (4.12)$$

Llegados a este punto es conveniente tomar como unidad de energía la correspondiente a la energía de Rydberg del excitón y como unidad de distancia la del radio de Bohr excitónico.

$$R_X = \frac{\mu e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2}, \quad a_X = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu e^2} \quad (4.13)$$

Con estas unidades el Hamiltoniano 4.12, se puede escribir de la forma

$$H_{rel} = -\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \gamma_X^2 \rho^2 - \frac{2}{\rho} + f_X \rho \cos \varphi \quad (4.14)$$

donde

$$\gamma_X = \frac{1}{R^2}, \quad f_X = \frac{ea_X}{R_X} F \quad (4.15)$$

Referimos de nuevo al lector al Apéndice B.

El Hamiltoniano 4.14 nos permite plantear la ecuación de Schrödinger y resolverla analíticamente si no consideramos el potencial de Coulomb ni tampoco el de interacción con el campo electrostático, es decir

$$\left[- \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \gamma_X^2 \rho^2 \right] |\Phi(\rho, \varphi)\rangle = E |\Phi(\rho, \varphi)\rangle \quad (4.16)$$

La función de onda solución de la ecuación diferencial 4.16 es similar a la que hemos obtenido para la partícula única, salvo parámetros dimensionales

$$\Phi(\rho, \varphi) = N \rho^{|m|} \exp \left(- \frac{\gamma_X \rho^2}{2} \right) F_1^1(-n_\rho, |m| + 1, \gamma_X \rho^2) \exp(im\varphi) \quad (4.17)$$

donde N es la constante de normalización, n_ρ es el número cuántico radial y m el número cuántico magnético, con $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$; F_1^1 es la función hipergeométrica confluyente. Al considerar paredes infinitas la función de onda 4.17 ha de anularse en $\rho = R$, lo que impone una restricción que nos permite hallar la energía del oscilador [28]

$$E = 4\gamma_X \left(n_\rho + \frac{|m| + 1}{2} \right) \quad (4.18)$$

Para el estado fundamental, como ya se apuntó anteriormente, $n_\rho = 0$ y $m = 0$. La manera en como se llega a la resolución de la ecuación diferencial puede consultarse en el Apéndice C.

Volvamos de nuevo al Hamiltoniano 4.14. En él aparecen los términos $-2/\rho$ y $f\rho \cos \varphi$. Por analogía con el átomo de hidrógeno sabemos que la interacción coulombiana da lugar a una dependencia en la función de onda de la forma $\exp(-r/a)$, así pues la manera de tener en cuenta esta interacción es añadiendo a 4.17 un término variacional de la forma $\exp(-\alpha\rho)$, siendo α el parámetro variacional.

A su vez el término $f\rho \cos \varphi$ podemos considerarlo en la solución con una función de la forma $\exp(\beta f\rho \cos \varphi)$, con β el parámetro variacional. Esto último es muy habitual a la hora de hacer cálculos en física atómica y fuerzas de Van der Waals [29].

Así pues, la función variacional de prueba que vamos a tomar para la resolución de nuestro problema será

$\frac{m_e^*}{m_0}$	$\frac{m_{hh}^*}{m_0}$	ϵ_r	a_X (nm)	R_X (meV)	F_I^X (kV/cm)
0.023	0.41	15.15	36.42	1.303	0.386

Tabla 4.1: Parámetros del InAs

$$\Psi_X(\rho, \varphi) = \exp(-\gamma_X \rho^2 / 2) F_1^1(-n_\rho, 1, \gamma_X \rho^2) \exp(-\alpha \rho) \exp(\beta f \rho \cos \varphi) \quad (4.19)$$

Esta función de onda es válida para el estado fundamental, ($m = 0$). La energía del excitón en su estado fundamental pasa por determinar los valores de α y β que hacen mínimo el funcional

$$E_X = \min \frac{\langle \Psi_X | H_{rel} | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} \quad (4.20)$$

En el apéndice E puede verse una formulación analítica completa para el caso de un excitón fuertemente confinado.

4.4. Resultados y discusión

Vamos a restringir nuestro estudio a un disco delgado de InAs con electrón y hueco pesado cuyos parámetros se dan en la tabla 4.1 [30].

Como podemos ver en la figura 4.2 la energía del excitón no solo es sensible al campo eléctrico, sino que depende también de la energía coulombiana y del confinamiento. En esta figura se presenta la variación de la energía del estado fundamental del excitón en función del radio para algunos valores significativos de la intensidad del campo, $F=0, 10$ y 20 kV cm⁻¹.

Vemos en la figura 4.2 que el campo eléctrico hace disminuir los valores de la energía del excitón. Existe por otra parte una competición, cuando aplicamos campo, entres tres factores. Por una parte el confinamiento que varía de la forma ($\sim 1/R^2$), el potencial de atracción coulombiano ($\sim -1/R$) y el efecto dipolar que depende de la intensidad del campo eléctrico y de la separación en el plano entre el electrón y el hueco ($W = eF\rho \cos \varphi$). El efecto del confinamiento y la atracción de Coulomb

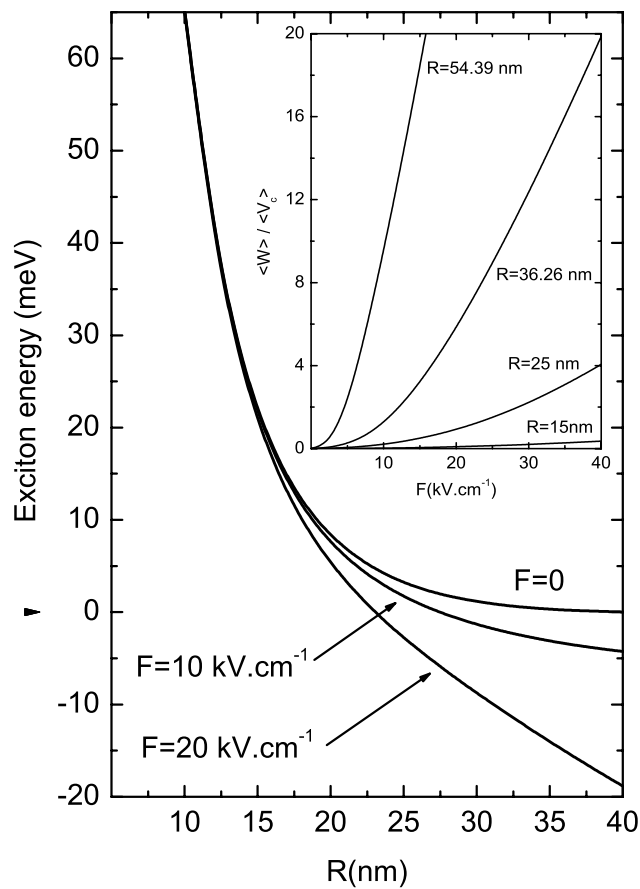


Figura 4.2: Energía del estado fundamental del excitón en función del radio para determinados valores del campo eléctrico ($F=0, 10$ y 20 kV cm^{-1}). El pequeño gráfico que se ve en el interior muestra la relación $\langle W \rangle / \langle V_c \rangle$ en función del campo eléctrico para diferentes regímenes de confinamiento $R= 15, 25, 36.26$ y 54.39 nm

tienden a reducir la extensión espacial de la función de onda excitónica, mientras que el campo eléctrico tiende a mover en direcciones opuestas las densidades del electrón y el hueco, lo que conlleva una disminución de la superposición entre sus respectivas funciones de onda. Así, para los valores de campo eléctrico usados aquí, el efecto de aquél solo se observa por debajo del límite de confinamiento fuerte ($R \sim 15 \text{ nm}$). Cuando R es menor que este valor el confinamiento fuerte y el potencial de Coulomb dominan, de modo que la distribución de carga es menos sensible al campo

eléctrico y la función de onda excitónica está más localizada. Por tanto las curvas correspondientes a diferentes valores de F coinciden y la energía de enlace disminuye al aumentar R .

En la región con $R > 15$ nm, la influencia del campo eléctrico es ya acusada, porque el orbital excitónico está más extendido. Además, aumentando el tamaño del disco los efectos de confinamiento cuántico disminuyen, y solo entonces la atracción coulombiana compite con la energía dipolar eléctrica, como se puede observar en la figura 4.2. En el recuadro dentro de la figura 4.2 se muestra la relación entre los valores esperados de $W = f_X \rho \cos \varphi$ y $V_c = \frac{2}{\rho}$ en función de F , observándose más claramente el efecto dominante del campo eléctrico para $R > 15$ nm.

Para comprender mejor esta descripción en la figura 4.3 hemos trazado la variación de la energía fundamental en función de la intensidad de campo para diferentes tamaños del disco cuántico.

La energía total del excitón apenas cambia con F para $R = 15$ nm, mientras que disminuye notablemente para tamaños de disco mayores.

La figura 4.4 muestra que el potencial coulombiano electrón-hueco disminuye al aumentar el campo eléctrico, porque las dos partículas son empujadas en direcciones opuestas.

Esta mayor separación al aumentar F introduce un desplazamiento hacia el azul en la energía del excitón, que compensa el corrimiento hacia el rojo del efecto Stark para la partícula independiente (electrón o hueco). Para puntos (discos) cuánticos grandes la atracción de Coulomb tiende a un valor constante lo que indica que el excitón no colapsa. De hecho para puntos muy grandes el radio excitónico tiende a a_X . Este efecto ya ha sido reportado por varios autores [17][18][19][20][21]. La figura 4.5 puede ayudarnos a comprender mejor este hecho en donde se muestra el valor esperado de la distancia entre el electrón y el hueco en el plano $\langle \rho_{eh} \rangle$, que es proporcional al momento dipolar inducido en el plano $\langle p \rangle = e \langle \rho_{eh} \rangle$, y que depende de la intensidad del campo eléctrico.

Los portadores llegan a encontrarse lo suficientemente separados y esta separación tiende a saturar como consecuencia del confinamiento, lo cual conduce a un

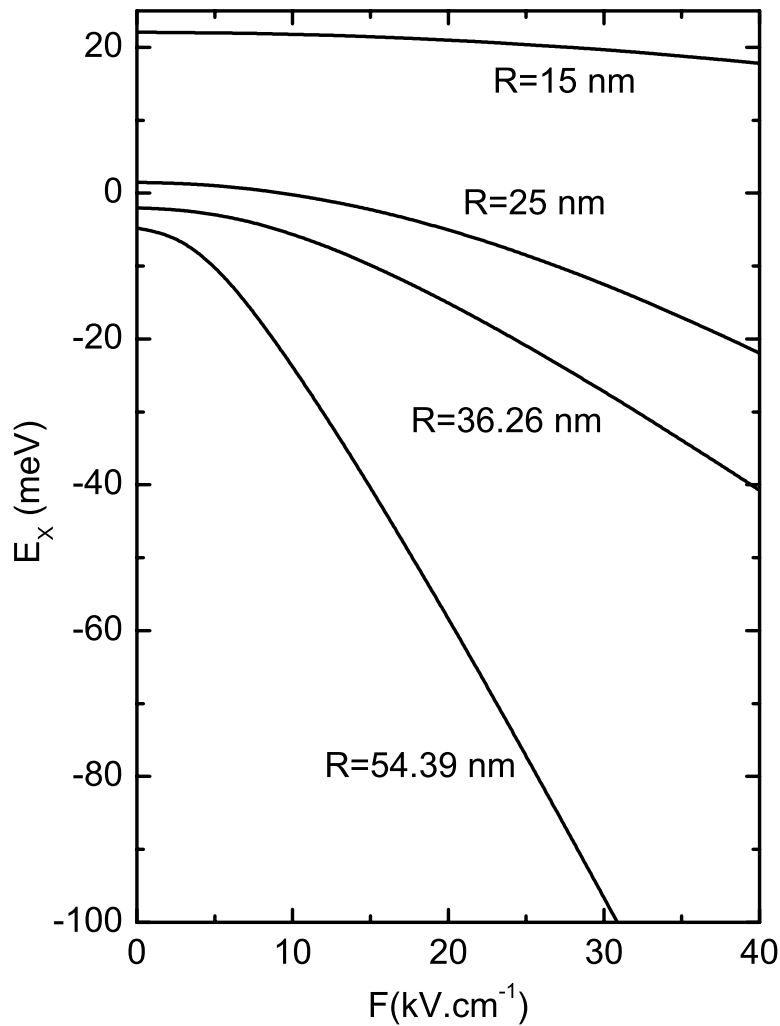


Figura 4.3: Energía del estado excitónico fundamental en función de la intensidad del campo eléctrico para diferentes regímenes de confinamiento ($R=15, 25, 36.26$ y 54.39 nm)

momento dipolar permanente no nulo.

En vistas a comprender el efecto del campo eléctrico en el desplazamiento del espectro de energías del excitón, vamos a analizar el corrimiento Stark en función del radio del disco y del campo eléctrico. Para campos débiles el desplazamiento en energías debido al efecto Stark, definido por $\Delta E = E(F) - E(0)$, donde $E(F)$ y $E(0)$ son las energías con y sin campo eléctrico aplicado, tiene la forma $\Delta E =$

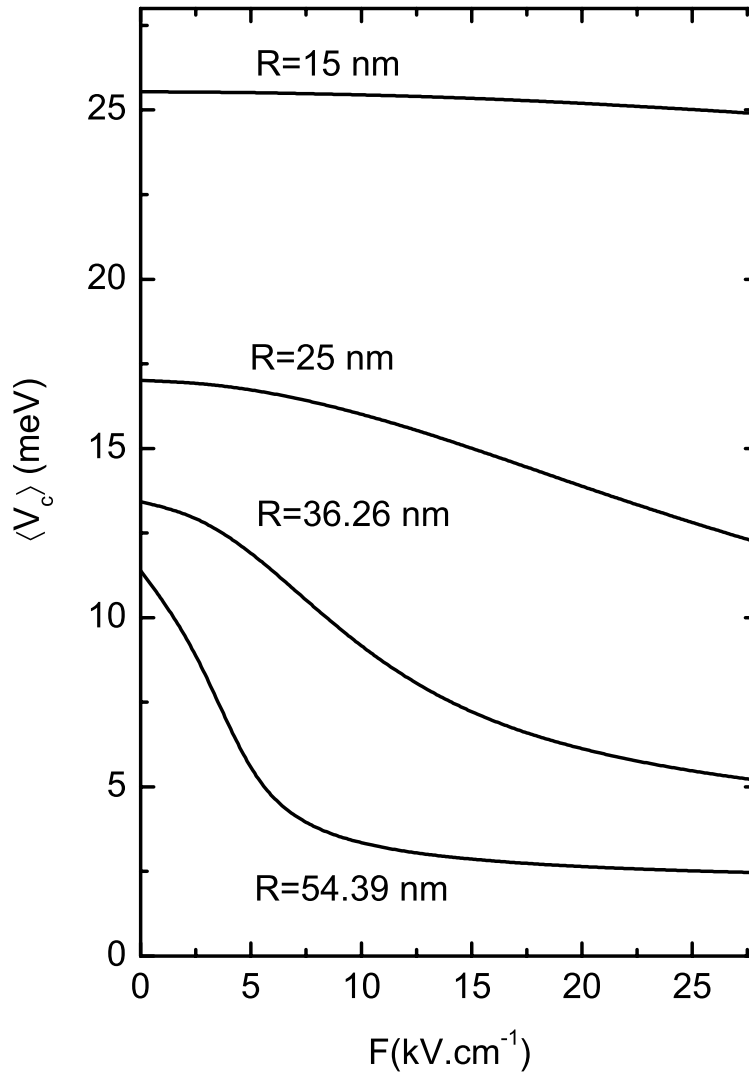


Figura 4.4: El valor medio del potencial de Coulomb $\langle V_c \rangle$ en función del campo eléctrico para discos cuánticos de radios $R=15$, 25, 36.26 y 54.39 nm. Comparando la curva correspondiente a $R=54.39$ nm con la de la figura 4.5, el electrón y el hueco están en los extremos del disco.

$\mu F + \alpha F^2$, donde μ y α son respectivamente la componente del momento dipolar permanente y la polarizabilidad en la dirección del campo eléctrico aplicado. El signo de estos términos ha sido tema de controversia en la literatura, véase por ejemplo [20]. Algunos autores han demostrado que la forma piramidal o cónica de un punto

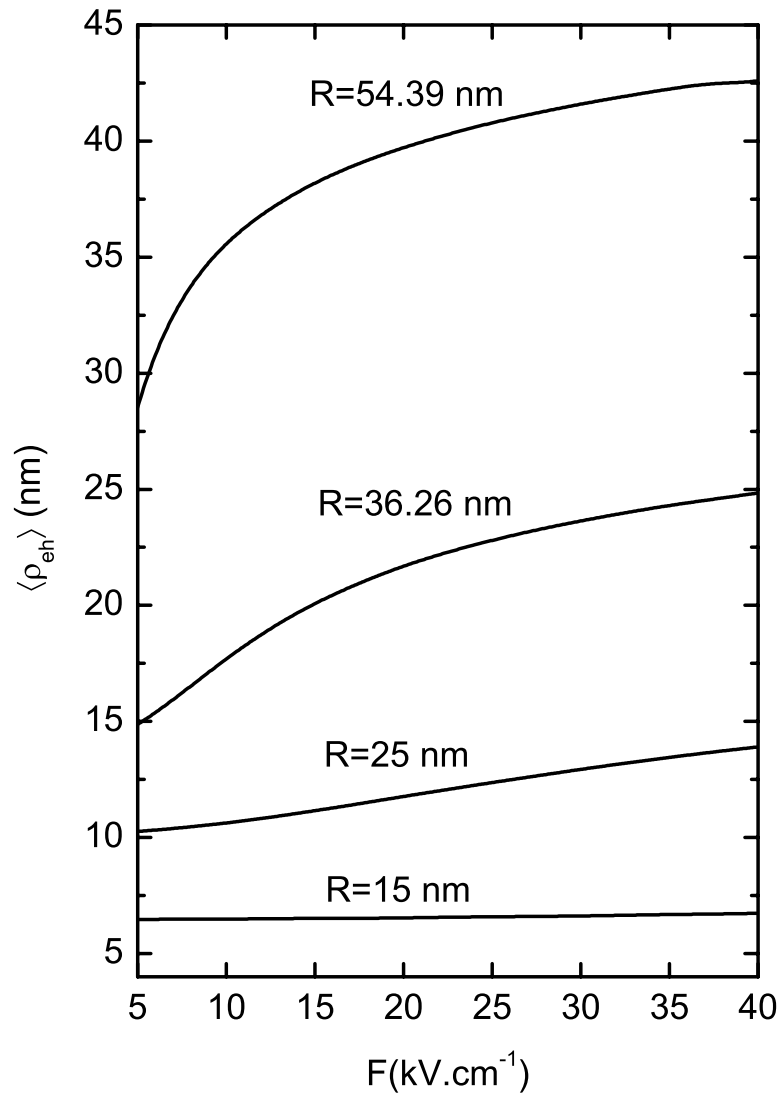


Figura 4.5: Variación de la distancia en el plano entre el electrón y el hueco en función de la intensidad del campo eléctrico para diferentes confinamientos. $R=15, 25, 36.26$ y 54.39 nm

cuántico junto con un gradiente de concentración de uno de los componentes a lo largo de la estructura puede dar lugar a la aparición de uno u otro signo en el valor de μ .

La figura 4.6 ilustra el corrimiento Stark de un excitón para diferentes regímenes de confinamiento en función de la intensidad del campo eléctrico aplicado.

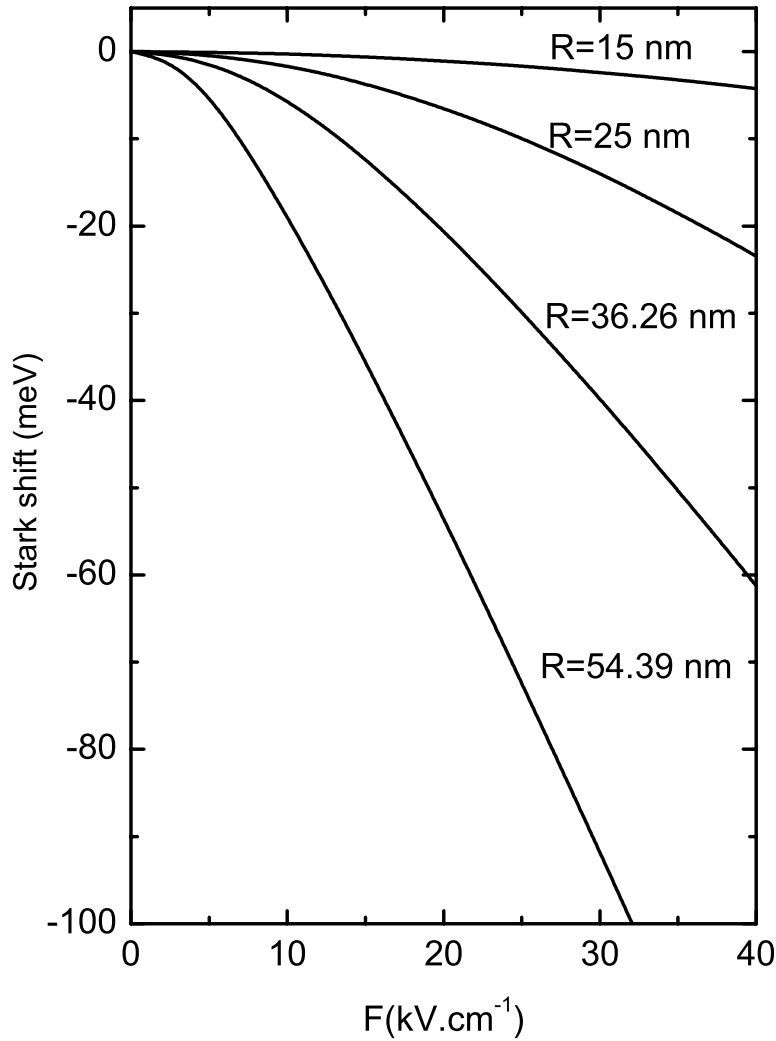


Figura 4.6: Corrimiento Stark lateral en función de la intensidad de campo para diferentes confinamientos $R=15, 25, 36.26$ y 54.39 nm

Vemos en esta figura que en confinamiento fuerte ($R \leq 15$ nm) el corrimiento Stark no es significativo cuando el campo eléctrico crece. Para $R > 15$ nm este desplazamiento se hace obvio y más importante a medida que aumenta el campo eléctrico. Nuestros cálculos revelan que para confinamiento fuerte el corrimiento Stark puede considerarse como aproximadamente cuadrático y con un término lineal con el campo despreciable. Pero para confinamiento débil e intermedio, la descrip-

ción completa del efecto Stark lateral requiere tanto de un término lineal como otro cuadrático con F , lo que significa que el excitón posee tanto un momento dipolar lateral como una polarizabilidad distintos de cero. Sin embargo para campos eléctricos elevados el desplazamiento Stark es puramente lineal. Además, para confinamiento fuerte, el electrón y el hueco se comportan como dos partículas independientes. En tal caso la función de onda excitónica puede tomarse como producto de dos funciones de onda independientes que conducen a un comportamiento cuadrático del efecto Stark ($E_{e,h} \propto F^2$) [22]. Para confinamiento débil e intermedio la correlación entre el electrón y el hueco no es despreciable, lo que afecta a la energía excitónica y la componente lineal en F se hace significativa, cambiando a su vez el carácter del efecto Stark.

En vistas a verificar nuestros cálculos, hemos aplicado nuestro método a diferentes materiales (InAs, InGaN, CdSe) y tamaños diferentes de puntos cuánticos citados en otros artículos [18][19][22][33][34]. En cada caso los resultados del efecto Stark se han ajustado usando la ecuación $\Delta E = \mu F + \alpha F^2$ que nos permite hacer una estimación de los valores de μ y α . La comparación con algunas de las referencias citadas la hemos agrupado en la tabla 4.2.

Nuestros cálculos revelan que en todos los casos el desplazamiento Stark posee una contribución lineal y cuadrática no nula por lo que la componente del momento dipolar en la dirección lateral hay que tenerla en cuenta. Para el InAs nuestros resultados de la polarizabilidad α están en buen acuerdo con los valores experimentales.

Por otra parte, nuestros resultados para el InGaN/GaN y CdSe/ZnSe distan mucho de los valores obtenidos por Robinson [33] y Seufert [34]. Además, en estos sistemas, la influencia de la constante dieléctrica y las diferencias entre las masas efectivas en uno y otro material son importantes y afecta considerablemente a los resultados, que dependen también del tamaño. Las estimaciones teóricas del momento dipolar lateral permanente listadas en la tabla 4.2 sugieren en cualquier caso la existencia de un momento dipolar no nulo [33]. Lo destacable del modelo es que determina bien el parámetro α y mal el parámetro μ , es decir no está claro que este modelo y la función variacional escogida den buena cuenta del valor de μ , quizá

Material	Literatura	Nuestro trabajo
InAs[22]	$\alpha_{th} = 3 \times 10^{-2}$ $\alpha_{exp} = 3,1 \times 10^{-4}$ $\mu = 0$	$\alpha = 4,4 \times 10^{-4}$ $\mu = 5 \times 10^{-5}$ (para $R = 10$ nm)
InAs[18]	$\alpha_{exp} = (2,6 \dots 3,7) \times 10^{-3}$ $\mu = 0$	$\alpha = (3,0 \dots 3,7) \times 10^{-4}$ $\mu = (4,76 \dots 7,34) \times 10^{-3}$ (para $R = 17$ nm \dots 18 nm)
InAs[19]	$\alpha_{exp} = 4 \times 10^{-3}$ $\mu = 0$	$\alpha = 3,7 \times 10^{-3}$ $\mu = 7,34 \times 10^{-3}$ (para $R = 18$ nm)
InGaN[33]	$\alpha_{exp} = 1,47 \times 10^{-3}$ $\mu = 9,49 \times 10^{-2}$	$\alpha = 2 \times 10^{-5}$ $\mu = 2 \times 10^{-5}$ (para $R = 30$ nm)
CdSe[35]	$\alpha_{exp} = 4,9 \times 10^{-3}$ $\mu = 0$	$\alpha = 7 \times 10^{-4}$ $\mu = 2 \times 10^{-5}$ (para $R = 50$ nm)

Tabla 4.2: Comparación entre resultados experimentales y teóricos de la polarizabilidad α en unidades de $\text{meV cm}^2 (\text{kV})^{-2}$ y del momento dipolar permanente μ en unidades de $\text{meV cm} (\text{kV})^{-1}$. En los resultados de todos los ajustes, tanto μ como α tienen signos negativos.

hubiera que tener en cuenta otros factores o fenomenología física complementaria. Podemos concluir que la descripción del efecto Stark en un disco cuántico requiere una serie de potencias de F en la que todos los términos hasta el segundo orden son importantes. La polarizabilidad y el momento dipolar dependen fuertemente del tamaño y del potencial de confinamiento.

Si el efecto Stark puede realmente ajustarse por una expresión de la forma

$$\Delta E = \mu F + \alpha F^2 \quad (4.21)$$

significa que el máximo de energía no se alcanza en $F = 0$, sino que haciendo la derivada tenemos que el campo al ocurre esto es

$$F_m = -\frac{\mu}{2\alpha} \quad (4.22)$$

Usando esta expresión en los resultados de la tabla 4.2 el valor del campo al cual se alcanzaría la energía máxima varía entre -0.037 kV/cm para discos grandes y -8 kV/cm para los más pequeños. Dadas las características de las gráficas y de los valores del campo estos máximos no los podemos observar.

Otra manera de visualizar estos resultados es la que se muestra en el apéndice E. Hemos hecho un estudio analítico para discos grandes con campo eléctrico. En este caso al estar muy separados el electrón y el hueco por efecto del campo la interacción coulombiana tiene poca importancia. Se ha tomado una función de onda adecuada para tener en cuenta estas características. La expresión analítica que se obtiene tras realizar todo el cálculo, E.15, muestra claramente que no podemos hacer un ajuste a un polinomio cuadrático. En tal caso podemos hacer un desarrollo en serie a segundo orden de E.15 con lo que se obtiene una dependencia solamente cuadrática en f

$$E(f, R) = \frac{6}{R^2} - \frac{(3e - 8)^2 f^2 R^4}{4(e - 2)^2} \quad (4.23)$$

De igual manera también se explica un comportamiento lineal del corrimiento Stark a campos altos en discos grandes. En este caso, de nuevo la expresión E.15 se puede aproximar, pudiéndose escribir ahora

$$E(f, R) = \frac{19e - 50}{3e - 8} \frac{1}{R^2} - \sqrt{\frac{3e - 8}{2(e - 2)}} f R \quad (4.24)$$

Recordemos que en estas últimas fórmula e representa a la base de los logaritmos neperianos ($e = 2,718281$). En la gráfica correspondiente al desplazamiento Stark con $R = 54,39$ nm, se muestra muy claramente este comportamiento lineal a campos altos.

Vamos a estudiar igualmente las propiedades ópticas de los excitones en un disco cuántico sometido a un campo eléctrico lateral. La fuerza de oscilador para excitones en sistemas de baja dimensión ha sido definida de varias maneras en la literatura [36][37][38][39][40], salvo constantes de proporcionalidad. La fuerza del oscilador, f_{osc} , normalizada a la del excitón libre en semiconductores tridimensionales f_{ex} es proporcional a la integral óptica I_{OSC}^X

$$\frac{f_{osc}}{f_{ex}} \propto I_{OSC}^X \quad (4.25)$$

donde I_{OSC}^X viene dada por

$$I_{OSC}^X = \left| \int \Psi_X(\rho_e - \rho_h, \varphi_e - \varphi_h) \delta(\rho_e - \rho_h) \delta(\varphi_e - \varphi_h) dS \right|^2 \quad (4.26)$$

Vamos a centrarnos en el cálculo de la integral óptica. En la figura 4.7 se reportan las variaciones de I_{OSC}^X en función del radio R y para $F=0, 5, 10$ y 15 kV cm⁻¹.

En todos los casos, para tamaños del punto cuántico por debajo de 15 nm, la dependencia de la integral óptica con el campo eléctrico es mucho más débil y hasta casi despreciable. El potencial de confinamiento se hace más importante que el de Coulomb y la energía dipolar, y la fuerza del oscilador tiende a un valor límite que se corresponde con la fuerza de oscilador del par electrón-hueco independientes. Como podemos ver, al aplicar campo eléctrico el valor de I_{OSC}^X aumenta y presenta un máximo en R_c , magnitud que depende de la intensidad del campo. Tras este valor la disminución de la fuerza de oscilador con el tamaño del disco es más acusada al crecer el campo debido a la reducción de la superposición de las funciones de onda del electrón y el hueco, lo que conlleva a su vez un aumento del tiempo de vida

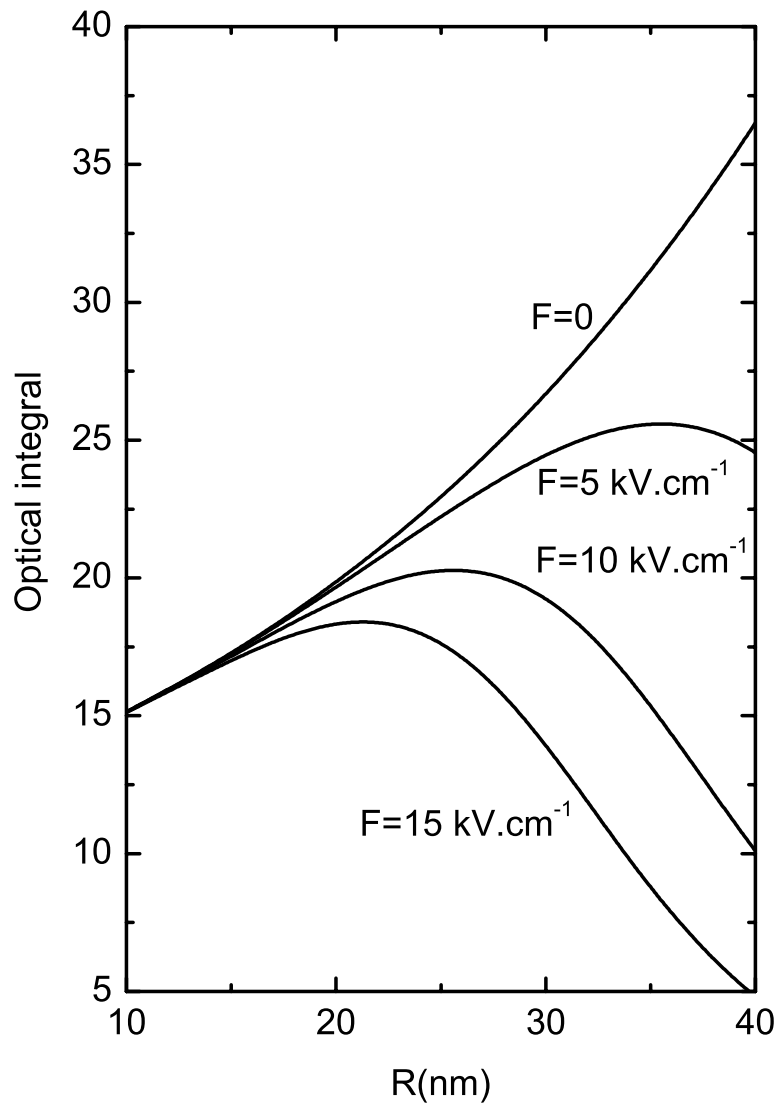


Figura 4.7: Variación de la integral óptica en función del radio del disco para diferentes intensidades del campo eléctrico ($F=0, 5, 10$ y 15 kV cm^{-1})

excitónico.

4.5. Densidades de probabilidad

A fin de visualizar el comportamiento excitónico vamos a representar gráficamente las densidades de probabilidad correspondientes a las funciones de onda calculadas. Es algo puramente ilustrativo cuyo significado no conviene extrapolar más allá de lo que realmente significa. Se suele interpretar la densidad de probabilidad desde el punto de vista de la física clásica, con lo que estaríamos haciendo un flaco favor a la esencia propia de la mecánica cuántica.

Por definición, el cuadrado de la función de onda $|\Psi_X(\rho, \varphi)|^2$ es igual a la probabilidad por unidad de área si tratamos con un problema bidimensional

$$\frac{dP}{dA} = |\Psi_X(\rho, \varphi)|^2 \quad (4.27)$$

donde dP es el elemento de probabilidad y $dA = r dr d\varphi$

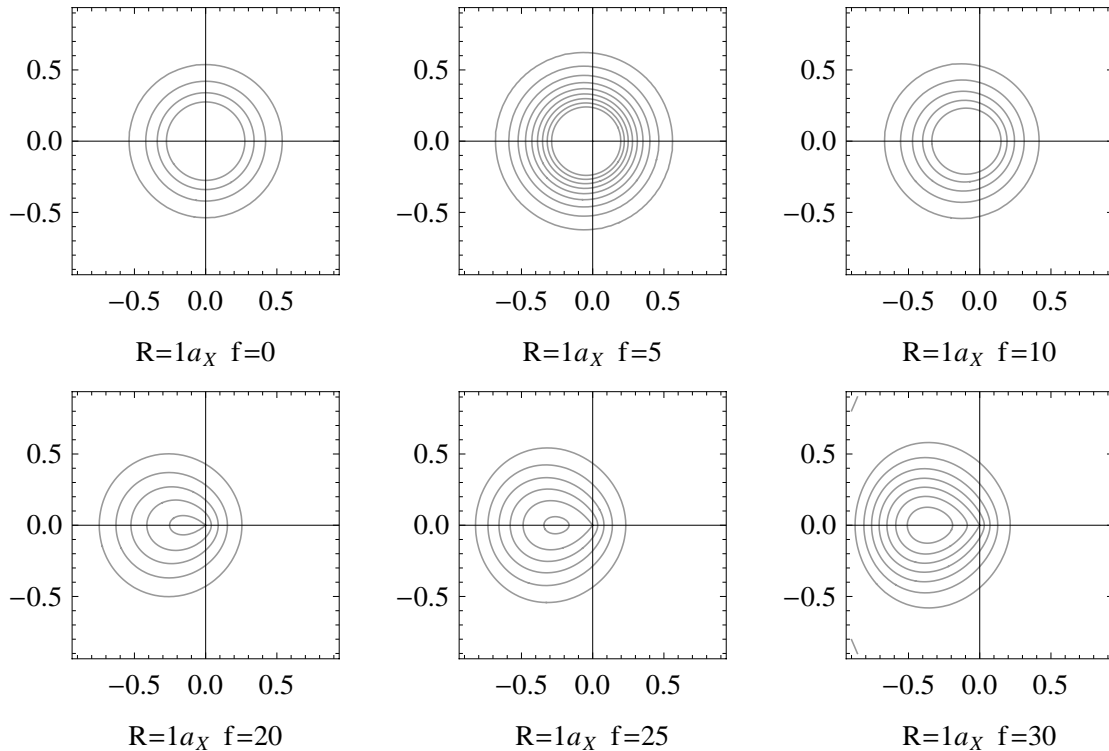


Figura 4.8: Gráfico de la densidad de probabilidad del excitón en función del campo eléctrico. ($F=0, 5, 10, 20, 25$ y 30 en unidades de f_X). Disco de tamaño $1 a_X$. Las gráficas están trazadas con la aplicación *Mathematica*. ©Wolfram Research.

En la Figura 4.8 podemos ver como el gráfico de densidad se va desplazando en sentido contrario a la aplicación del campo. La cantidad de líneas de nivel de las gráficas son proporcionales al valor de la probabilidad. Más curvas de nivel indican una mayor concentración y localización, como ocurre para $f = 30$, en donde el excitón se confina en el borde del disco cuántico.

4.6. Conclusión

Podemos resumir este capítulo diciendo pues que hemos realizado un estudio del efecto Stark sobre excitones confinados en discos cuánticos utilizando el procedimiento variacional. Hemos demostrado que dentro de la aproximación de la masa efectiva el hamiltoniano excitónico se puede separar en dos partes independientes (la correspondiente al centro de masas y la relativa), siendo en esta última donde se analiza y estudia la física del confinamiento lateral. El análisis del corrimiento Stark muestra que en discos, para cualquiera que sea el campo eléctrico aplicado, la descripción completa del corrimiento Stark requiere de una serie de potencias en F hasta segundo orden, en contra de lo que pasa en esferas cuánticas en las que solo aparece un término cuadrático [11]. El comportamiento de la integral óptica muestra que el tiempo de vida del excitón es mayor con campo que sin campo eléctrico debido a la polarización inducida por el campo. Este modelo puede mejorarse incluyendo otros efectos relevantes tales como pozos de potencial con barreras finitas y cargas de polarización inducidas. Estos resultados pueden ser de utilidad en el campo tecnológico para controlar los niveles de energía excitónicos ajustando el tamaño del disco y aplicando un campo eléctrico adecuado.

Bibliografía

- [1] A. D. Yoffe, *Adv. Phys.* **42**, 173 (1993).
- [2] A. D. Yoffe, *Adv. Phys.* **5**, 1 (2001).
- [3] A. Barenco, D. Deutch, A. Ekert and R. Josza "Conditional Quantum Dynamics and Logic Gates", *Phys. Rev. Lett* **74**, 4083 (1995).
- [4] G. P. Berman and G. D. Doolen, *Supperlattices Microstruct.* **27**, 89 (1993).
- [5] Y. Arakawa and H. Sakaki "Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current", *Appl. Phys. Lett.* **40**, 939 (1982).
- [6] M. Asada, Y. Miamoto and Y. Suematsu, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-22**, 1915 (1986).
- [7] D. A. B. Miller, D. S. Chemla and S. Smith-Rink "Electroabsorption of highly confined systems: Theory of the quantum-confined Franz-Keldysh effect in semiconductor quantum wires and dots", *Appl. Phys. Lett.* **52**, 2154 (1988).
- [8] K. G. Ravikumar, T. Aizawa, K. Matsubara and Y. Suematsu, *J. Lightwave Technol.* **9**, 1376 (1991).
- [9] S. I. Pokutnil "Two-dimensional Wannier-Mott exciton in an uniform electric field", *Fiz. Tekh. Poluprovodn* **43**, 888 (2001).
- [10] D.A.B. Miller and D.S.Chelma, S.Schmitt-Rink "Relation between electroabsorption in bulk semiconductors and in quantum wells: The quantum-confined Franz-Keldysh effect ", *Phys. Rev. B* **33**, 6976 (1986).

- [11] G.W. Wen, J.Y. Lin, H. X. Jiang "Quantum-confined Stark effects in semiconductor quantum dots", *Phys. Rev. B* **52**, 5913 (1995).
- [12] Benito Alén, José Bosch, D. Granados, Juan Martínez-Pastor, Jorge M. García, and Luisa González "Oscillator strength reduction induced by external electric fields in self-assembled quantum dots and rings", *Phys. Rev. B* **75**, 045319 (2007).
- [13] D. M. Schmidt-Rink, S. "Theory of the linear and nonlinear optical properties of semiconductor microcrystallites", *Phys. Rev. B* **35**, 8113 (1987).
- [14] H. Ham & Harold N. Spector "Stark effect of electrons in a semiconducting quantum disk", *Physica B* **381**, 53 (2006).
- [15] H. Gotoh, H. Kamada, H. Ando and J. Temmyo "Lateral electric-field effects on excitonic photoemissions in InGaAs quantum disks", *Appl. Phys. Lett.* **76**, 867 (2000).
- [16] K. Kowalik, O. Krebs, A. Lemaitre, B. Eble, A. Kudelski, P. Voisin, S. Seidl and J. A. Gaj, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183104 (2007).
- [17] Korkusinski, M. Reimer, M. E. Williams and Hawrylak, *Phys. Rev. B* **79**, 035309 (2009).
- [18] M. M. Vogel, S. M. Ulrich, R. Hafenbrak, P. Michler, L. Wang, A. Rastelli and O. G. Schmidt, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 051904 (2007).
- [19] B. D. Gerardot, S. Seidl, P. A. Dalgarno, R. J. Warburton, D. Granados, J. M. García, K. Kowalik, O. Krebs, K. Karrai, A. Badolato and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 041101 (2007).
- [20] S. Ritter, P. Gartner, N. Baer and F. Jahnke, *Phys. Rev. B* **76**, 165302 (2007).
- [21] Thirring W., *Quantum mathematical physics: atoms, molecules and large systems* (Springer, Berlin, 2002).

- [22] M.E. Reimer, M. Korkusinski, D. Dalacau, J. Lefebvre, J. Lapointe, P.J. Poole, G.C. Aers, Phys. Rev. B **78**, 195301 (2008).
- [23] C. Sikorski, U. Merkt "Spectroscopy of electronic states in InSb quantum dots", Phys. Rev. Lett **62**, 2164 (1989).
- [24] F. M. Peeters, V. A. Schweigert "Two-electron quantum disks", Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996).
- [25] A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard and L. Jacak, Phys. Rev. B **54**, 5604 (1996).
- [26] A. Oukerroum, E. Feddi, J. Bosch Bailach, J. Martínez-Pastor, F. Dujardin and E. Assaid, J. Phys.:Condens. Matter **22**, 375301 (2010).
- [27] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, 1990).
- [28] H. A. Sarkisyan Modern Phys. Lett. B **16**, 835 (2002).
- [29] Alberto Galindo Pedro Pascual, *Mecánica cuántica II* (Eudema Universidad, Madrid 1989).
- [30] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg, Phys. Rev. B **59**, 5688 (1999).
- [31] S. Le Goff and B. Stébé "Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors", Phys. Rev. B **47**, 1383 (1993).
- [32] S. Le Goff and B. Stébé , Solid State Commun. **83**, 555 (1992).
- [33] J. Robinson, J. Rice, K. Lee, J. Na, R. Taylor, D. Hasko, R. Oliver, M. Kappers, C. Humphreys and G. Briggs , Appl. Phys. Lett. **86**, 213103 (2005).
- [34] J. Seufert, M. Obert, M. Rambach, G. Bacher, A. Forchel, T. Passow, K. Leonardi and D. Hommel , Physica E **13**, 147 (2002).
- [35] J. Seufert, M. Obert, M. Scheibner *et al* "Stark effect and polarizability in a single CdSe/ZnSe quantum dot", Appl. Phys. Lett. **79**, 1033 (2001).

- [36] I. C. Andreani and F. Bassani, *Solid. State Commun.* **77**, 641 (1991).
- [37] L. Ivchenko, A. V. Kavokin, Av. P. Kochereshko, P. S. Kop'ev, and N. N. Ledentsov, *Superlatt. Microstruct.* **12**, 317 (1992).
- [38] E. I. Rashba and G. E. Gurgenshili, *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)*, *Sov. Phys. Solid State* **4**, 759 (1962).
- [39] D. S. Citrin, *Superlatt. Microstruct.* **13**, 303 (1993).
- [40] L. Ivchenko, A. V. Kavokin, V. P. Kochereshko, G. R. Pozina, I. N. Uraltsev, D. R. Yakovlev, G. Landwehr, R. N. Bicknell-Tassius, and A. Waag, *Phys. Rev. B* **46**, 7713 (1992).

Capítulo 5

Competición entre recombinación radiativa y efecto túnel. Influencia del campo eléctrico

5.1. Introducción

El efecto Stark cuántico confinado, como ya se expuso en capítulos precedentes, se estudió primero en pozos cuánticos y con el campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento. En presencia del campo, el efecto túnel, ya sea de electrones o huecos fuera del pozo y a través de la barrera triangular de potencial que lo separa del vacío, compite con otros procesos de recombinación que determinan el tiempo de vida efectivo de los portadores confinados. Los actuales métodos de crecimiento permiten despreciar el hecho de que existan transiciones no radiativas a baja temperatura y centrarnos en solo dos mecanismos que compiten entre sí. En el presente capítulo vamos a analizar la competición entre estos dos mecanismos en puntos cuánticos autoensamblados de In(Ga)As embebidos en un dispositivo capaz de aplicar campo eléctrico en la dirección de crecimiento. La disminución en la señal de fotoluminiscencia está directamente relacionada con el efecto túnel de los portadores a valores elevados del campo eléctrico [1].

A campos eléctricos moderados la recombinación radiativa aún es importante y debe tenerse en cuenta cuando se realiza detección óptica o manipulación de los estados en puntos cuánticos [2]. Los modelos que vamos a realizar dan cuenta de manera más o menos cuantitativa de los resultados experimentales observados en puntos y en anillos cuánticos. Vamos a emplear una geometría cilíndrica para calcular la función de onda excitónica del estado fundamental y su energía en función del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje de simetría del cilindro. Con ayuda de funciones de onda variacionales se estimará igualmente la fuerza del oscilador de la transición excitónica. El tiempo de escape por efecto túnel lo calcularemos mediante el método de la función envolvente. En este capítulo se recogen algunos resultados experimentales publicados en [3] *Oscillator strength reduction induced by external electric fields in self-assembled quantum dots and rings*, Phys. Rev. B, **75**, 045319 (2007), así como las principales aportaciones teóricas en este artículo y en el publicado posteriormente en [4], *Competition between carrier recombination and tunneling in quantum dots and rings under the action of electric fields*, Superlattices and Microstructures, **43**, 582-587 (2008). El estudio experimental de puntos cuánticos con campo eléctrico se comenzó mucho antes [5] *Exciton recombination in self-assembled InAs/GaAs small quantum dots under an external electric field*, phys. stat. sol. (a), **190**, 599-603 (2002), lo que constituyó la memoria de DEA (Diploma de Estudios Avanzados) del autor de la presente memoria.

5.2. Resultados experimentales

Se han investigado dos muestras conteniendo puntos y anillos cuánticos autoensamblados, embebidos en la zona intrínseca de un diodo Schottky. Se han realizado espectros de fotoluminiscencia (PL) en onda continua (CW) y resueltos en tiempo (TRPL) a 15 K usando un laser de Ti:zafiro con emisión en $\lambda = 820$ nm en CW o pulsado (2 ps) a 76 MHz de frecuencia de repetición. La luz proveniente de la muestra es recogida por un objetivo de baja amplificación, se dispersa con un espectrómetro ($f = 0.5$ m) para realizar las medidas de TRPL y detectada con una

cámara *streak* dando una resolución total en tiempo de 40 ps. La luz colectada en medidas de CW se dispersó usando un monocromador de longitud focal 0.3 m y detectada con un módulo de contaje de fotones tipo S1 para las muestras de puntos cuánticos. Para la muestra de anillos se empleó un dispositivo de carga acoplada (CCD), enfriado e iluminado desde atrás.

La figura 5.1a muestra la evolución de la banda de PL medida en la muestra de puntos cuánticos en función del voltaje aplicado.

La banda se desplaza hacia energías menores cuando incrementamos el voltaje negativo aplicado a la muestra, como se espera al hablar del efecto Stark cuántico confinado (QCSE). En la figura 5.1b vemos los espectros de TRPL en donde se puede apreciar que hay un decaimiento monoexponencial dentro de la ventana temporal escogida. Con ambas contribuciones, el tiempo de recombinación radiativo y el tiempo de efecto túnel, se obtiene un tiempo efectivo de recombinación que viene dado por la regla de Mathiessen

$$\frac{1}{\tau_{ef}} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_t} \quad (5.1)$$

Cuando el campo eléctrico es pequeño, $\tau_r < \tau_t$ y el tiempo de recombinación es el dominante.

5.3. Descripción del modelo

Los puntos y los anillos cuánticos estudiados tienen una relación altura/diámetro pequeña, ($H/R \ll 1$), lo que da unas energías de emisión entre 1.18 y 1.31 eV aproximadamente. De esta forma la magnitud del QCSE depende principalmente del confinamiento vertical y la función de onda tenderá a extenderse en el plano lateral de la nanoestructura. Por tanto vamos a elegir una geometría cilíndrica a fin de resolver la ecuación de Schrödinger usando la aproximación adiabática y la de la masa efectiva para un par confinado electrón-hueco. Para el confinamiento lateral tomaremos un potencial de oscilador armónico y en el vertical un pozo de potencial finito con el campo eléctrico en esa dirección. Para confinamiento fuerte el

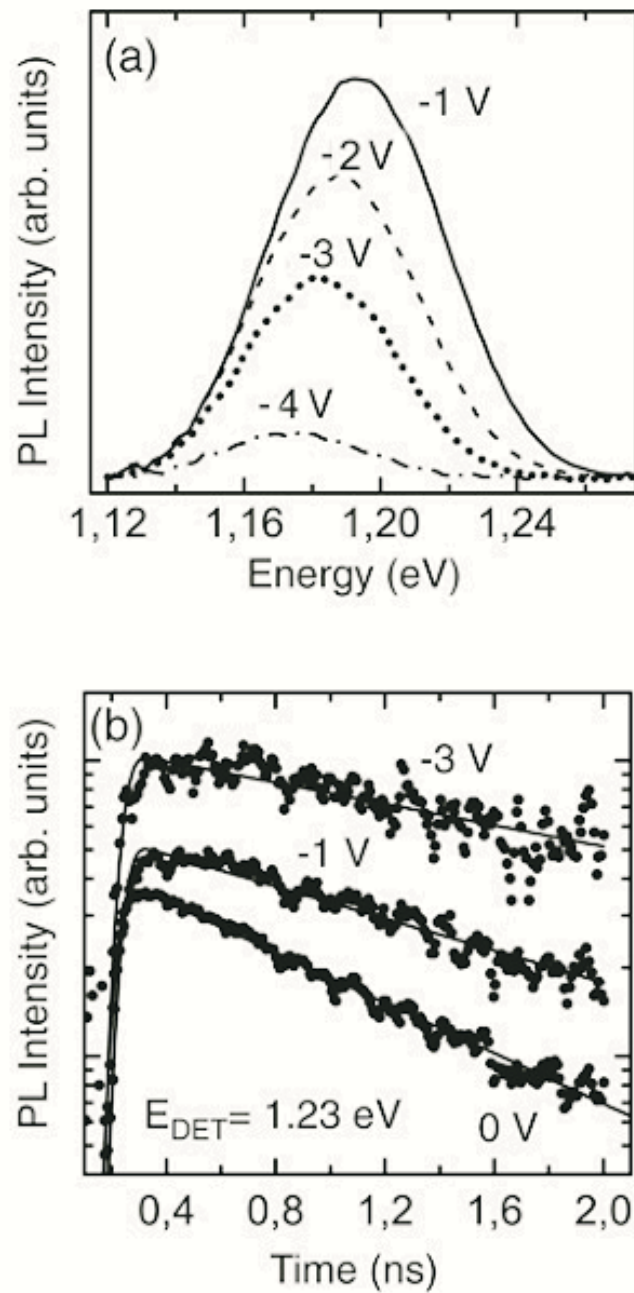


Figura 5.1: Espectro de PL (a) y de TRPL (b) a diferentes voltajes aplicados

movimiento radial y azimutal pueden separarse con lo que función de onda podemos escribirla como [6]

$$\Psi_X(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}, z_e, z_h) = s_e(\rho_e) s_h(\rho_h) f_e(z_e) f_h(z_h) \exp(-\alpha \rho_{eh}) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2) \quad (5.2)$$

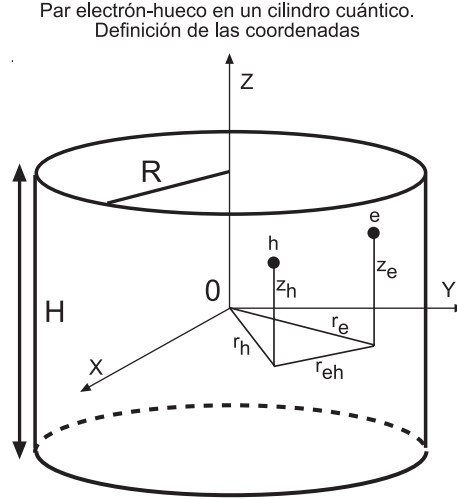


Figura 5.2: Electrón y hueco en una caja cilíndrica. Definición de las coordenadas de Hylleraas.

La definición de las coordenadas puede verse en la figura 5.2 y el cálculo del Hamiltoniano en el apéndice D. La parte radial de esta función de onda es la correspondiente al estado fundamental del oscilador armónico, $s_i = \exp(-r_i^2/2l_i^2)$, donde l_i es la longitud de confinamiento del portador ($l_i = \sqrt{\hbar/m_i\omega_i}$), e $i = e, h$ [7]. La parte azimutal corresponde con la solución del pozo finito triangular de potencial como consecuencia de la aplicación de un campo eléctrico. Estas funciones de onda se han determinado con el método de las funciones de Airy complejas [8]. El apéndice A muestra todos los detalles del cálculo matemático empleado.

La interacción coulombiana entre el electrón y el hueco la hemos considerando añadiendo dos funciones, $\exp(-\alpha \rho_{eh})$ para la parte radial, y $\exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)$ para la parte azimutal, siendo α y γ los parámetros variacionales. Los desajustes de banda se calculan suponiendo una heteroestructura con tensión biaxial de InAs/GaAs, con potenciales de deformación, constantes elásticas y perfiles de banda tomados de [9]. Hemos considerado una constante dieléctrica promedio a través de la heteroestructura y una diferencia de masas efectivas en los bordes del punto cuántico.

La figura 5.3 muestra los resultados obtenidos para la energía excitónica minimizando para los valores de α y γ .

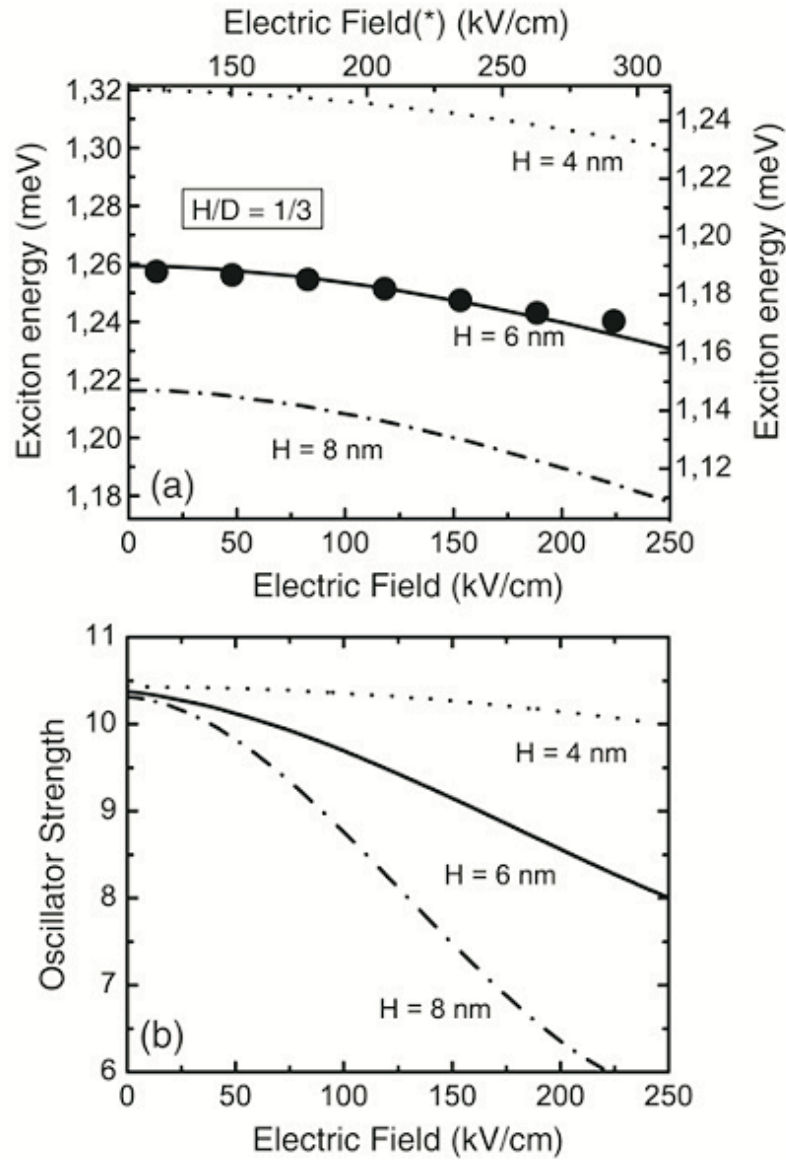


Figura 5.3: (a) Energías del excitón calculadas en función del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje del cilindro para tres diferentes alturas y manteniendo la relación $H/D = 1/3$; los picos de la energía de la PL experimental están comparados con las estimaciones teóricas pero desplazando el origen del campo eléctrico y la energía como consecuencia del momento dipolar intrínseco del punto cuántico. (b) Fuerza del oscilador adimensional del punto cuántico cilíndrico en función del campo eléctrico.

El corrimiento hacia el rojo de la energía debido al QCSE es prácticamente cuadrático, como sucede para los resultados experimentales (círculos gruesos), tras haber desplazado los valores del campo eléctrico como consecuencia del momento dipolar permanente en nuestros puntos cuánticos en forma de lenteja. La polarizabilidad se define como el coeficiente cuadrático que multiplica al campo eléctrico y que da cuenta de la dependencia de la energía de la transición óptica. Hemos desplazado también los valores de la energía experimental a fin de hacerlos coincidir con la curva calculada para $H = 6$ nm, a fin de compararlos mejor. El valor $H/D = 1/3$ se basa en una estadística realizada en una muestra similar mediante el microscopio de fuerzas atómicas. En cualquier caso vamos a tomar nuestras estimaciones como semicuantitativas, tanto para la energía como para la fuerza del oscilador. Recordemos que la geometría del modelo es cilíndrica y nuestros puntos cuánticos reales son lenticulares.

La fuerza del oscilador para la transición óptica al estado fundamental puede estimarse con la expresión [10]

$$f = \frac{E_p}{2E} \left| \int \Psi_X(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}, z_e, z_h) \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h) dV \right|^2 \quad (5.3)$$

donde E_p y E son la energía de Kane ($E_p = 25.7$ eV para el GaAs) y la energía calculada para la transición excitónica respectivamente. Dado que esta energía disminuye con el campo, ver figura 5.3a, la integral de superposición determinará la fuerza de oscilador. Si la superposición entre el electrón y el hueco fuera la unidad, la fuerza de oscilador alcanzaría el valor $f = 10.4$ para un punto cuántico que emitiera a 1.23 eV. Este es un valor típico encontrado en experimentos de absorción en puntos cuánticos aislados y agrupados [11]. Si llamamos $a = l_e/l_h$, la integral de superposición de las funciones radiales tiene expresión analítica, $\langle s_e | s_h \rangle = 2a/(1+a^2)$. Para excitones en su estado fundamental, los huecos están más confinados que los electrones y tenemos $a \sim 1.5 - 3$, luego $\langle s_e | s_h \rangle \sim 0.92 - 0.6$, dependiendo de la dimensión lateral de la nanoestructura. La integral de superposición de las funciones de onda en z para los electrones y huecos determinará la fuerza del oscilador a lo largo del eje del cilindro. La figura 5.3b muestra la variación para los mismos tres

valores de H , usados en la figura 5.3a. Se observa una clara disminución en todos los casos, siendo despreciable para $H = 4$ nm, de un 20% para $H = 6$ nm y de alrededor del 50% para $H = 8$ nm. Es claro que la separación entre electrón y hueco inducida por el campo eléctrico es la causa principal para la disminución calculada de la fuerza del oscilador. Cuando el tamaño de los puntos cuánticos es suficientemente pequeño, la separación entre electrón y hueco apenas puede aumentar con el campo. Por el contrario, esta reducción es cada vez más importante cuando aumenta la altura del punto cuántico. El comportamiento es a su vez consistente con una mayor polarizabilidad al aumentar el tamaño, como se observa en la figura 5.3a.

5.4. Recombinación radiativa *versus* efecto túnel

Una vez obtenida la fuerza del oscilador adimensional podemos estimar el tiempo de vida radiativo mediante la expresión

$$\tau_r = \frac{6\pi\epsilon_0 m_0 c^3 \hbar^2}{e^2 n f E^2} [11] \quad (5.4)$$

El tiempo de vida excitónico es inversamente proporcional a la fuerza del oscilador, lo cual significa un aumento monótono con el campo eléctrico, más importante en puntos cuánticos grandes. Hemos de tener en cuenta además el tiempo de efecto túnel que hará disminuir el tiempo radiativo para campos relativamente altos. Podemos estimar el tiempo de túnel en función del campo mediante el método WBK, (Wentzel-Kramers-Brillouin) con

$$\frac{1}{\tau_t} = \frac{\hbar}{8m_e^* H^2} \exp \left[-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_e^*}}{e\hbar F} (\Delta E_c - E_e)^{3/2} \right] \quad (5.5)$$

aunque el campo eléctrico a cuyo valor la curva del tiempo túnel cruza a la del tiempo radiativo es inesperadamente alto, como ya han registrado otros autores.

En vistas a obtener unos tiempos de túnel más realistas hemos usado el método de las amplitudes complejas de Airy, ver apéndice A

$$\Gamma = 2 \frac{D_3(E_r)}{C_3'(E_r)} \quad (5.6)$$

donde C y D son las amplitudes de las funciones de Airy fuera y dentro de la barrera triangular de potencial.

El tiempo empleado por los portadores en hacer túnel es, de acuerdo con el principio de incertidumbre energía-tiempo,

$$\tau_t = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (5.7)$$

La figura 5.4a muestra la variación obtenida dentro de nuestro modelo y para los tres valores de H tratados en este artículo.

Por una parte, el tiempo de recombinación crece significativamente para puntos cuánticos con $H > 4$ nm. De hecho, para $H = 8$ nm, τ_{ef} crece hasta un factor dos. Por otra parte, el campo eléctrico para el cual tiene lugar el valor máximo de τ_{ef} se reduce fuertemente al disminuir la altura del cilindro. El campo eléctrico máximo viene determinado por el tiempo de túnel, y se hace significativamente bajo para los puntos más pequeños, pues el nivel de energía debido al electrón se halla muy cerca de la banda de conducción de las barreras de GaAs. Esto es lo que se observa experimentalmente, como se muestra en la figura 5.4b. Vemos como el tiempo máximo de decaimiento medido en los puntos cuánticos es menor para energías de detección mayor (cilindros con altura menor). Esta tendencia se confirma en anillos cuánticos de In(Ga)As, ya que éstos son especialmente de poca altura.

Notemos que hay un desplazamiento de alrededor de 100 kV/cm en el último caso con respecto a los puntos cuánticos debido al diferente signo del momento dipolar permanente. Además, la influencia del efecto túnel electrónico es solo dominante sobre la recombinación radiativa por arriba de campos eléctricos moderados (100-150 kV/cm) en el caso de puntos y anillos que emiten a energías por arriba de 1.3 eV (alturas reales por debajo de 4-5 nm). Para cilindros con H mayor (emisión por debajo de 1.3 eV) la recombinación radiativa del excitón domina en toda la región de campos eléctricos que se pueden aplicar experimentalmente.

Podemos concluir pues diciendo que con el modelo variacional hemos sido capaces de hallar las energías del excitón en función del campo eléctrico y las fuerzas de oscilador, permitiéndonos calcular el tiempo de recombinación radiativa. Con el

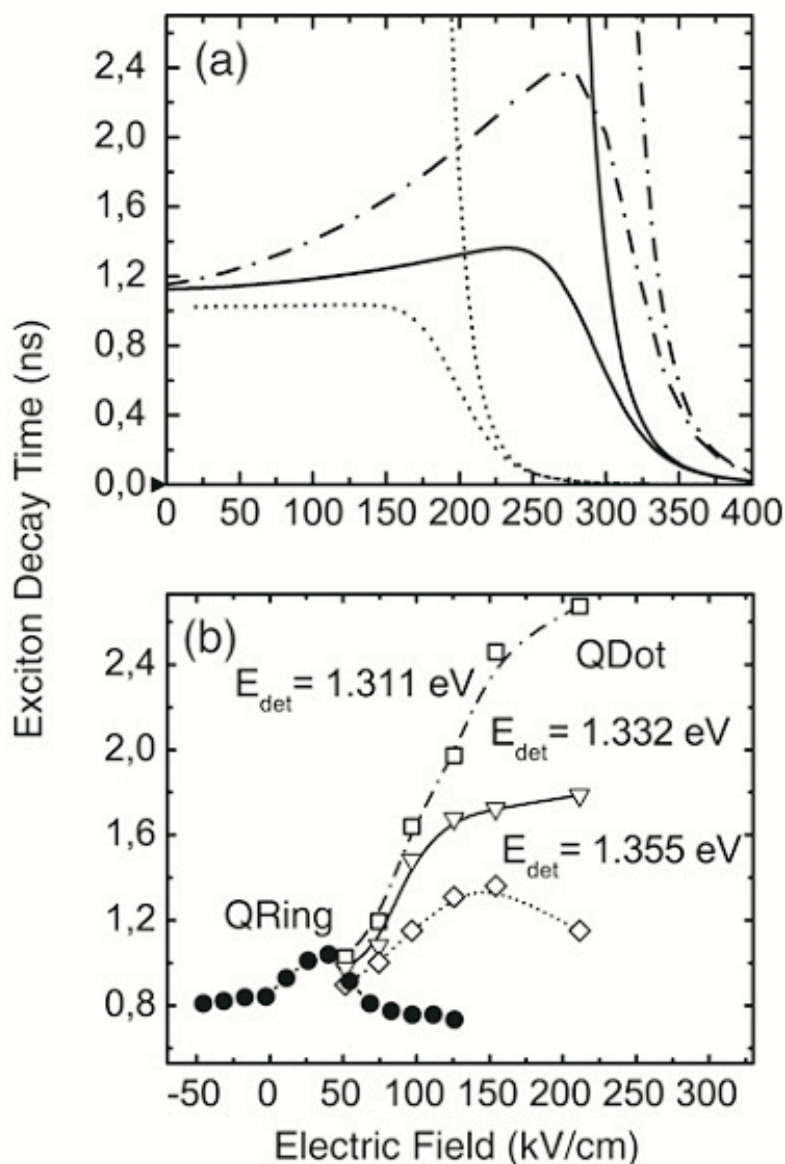


Figura 5.4: (a) Tiempo de efecto túnel (gráficas con gran pendiente) y tiempo efectivo excitónico calculado para diferentes alturas del cilindro (4, 6 y 8 nm con $H/D = 1/3$, como en la figura 5.3, a valores elevados del campo. (b) Evolución con el campo eléctrico del tiempo de decaimiento excitónico, medido a diferentes energías de detección para puntos cuánticos de In(Ga)As (símbolos blancos) y anillos cuánticos (símbolos negros).

método de las funciones de Airy hemos determinado el tiempo de efecto túnel y cómo se establece una competición entre los dos mecanismos. En nanoestructuras grandes los niveles se encuentran bastante por debajo de la barrera de potencial, por lo que

la probabilidad de efecto túnel disminuye. A su vez, el tiempo radiativo aumenta con el campo, pues la separación entre electrón y hueco crece. Los tiempos de efecto túnel se ve que poseen una dependencia exponencial decreciente con el campo, por lo que solo a elevados valores de éste y, en especial, en estructuras pequeñas con niveles resonantes con la barrera, adquieren valores comparables e incluso llegan a dominar sobre el tiempo radiativo. Esto justifica a su vez el decaimiento de la señal de PL en las muestras.

5.5. Recombinación de excitones en puntos cuánticos autoensamblados bajo la acción de un campo eléctrico externo

Los puntos cuánticos autoensamblados de InAs tienen como ya hemos visto en capítulos precedentes una propiedades ópticas y electrónicas peculiares. Son potenciales candidatos para láseres y memorias ópticas [12][13][14][15] y eficientes detectores de infrarrojo lejano bajo incidencia normal [16][17]. Bajo la acción de un campo eléctrico sobre la nanoestructura se observa el efecto Stark cuántico confinado (QCSE). A su vez este campo puede llegar a influir de manera dramática en el tiempo de recombinación radiativa, en la intensidad de la fotoluminiscencia y en la fotocorriente. Uno de los temas de investigación en espectroscopia de puntos cuánticos es su particular estructura electrónica como consecuencia de las diferentes condiciones de crecimiento que determinan su forma, dimensiones y densidad. En este capítulo vamos a presentar los resultados más sobresalientes en puntos cuánticos pequeños autoensamblados (3-4 nm de altura) de InAs embebidos en un diodo Schottky semitransparente a partir de los resultados de la fotoluminiscencia (PL) y fotocorriente (PC) bajo la acción de un campo.

5.5.1. Muestras y experimento

La muestra fue crecida por MBE en un sustrato semiaislante (001)-GaAs. En primer lugar se depositaron $29 \times (2 + 2)$ nm de espesor de una superred de periodo corto (SPS) de AlAs/GaAs a una temperatura de $T_S = 615$ °C sobre una capa tampón de GaAs para suavizar la superficie del sustrato. El contacto posterior del diodo Schottky lo forman una capa de 10 nm de espesor de GaAs intrínseco y 20 nm de n^+ -GaAs, crecidas a una temperatura de $T_S = 600$ °C, dopada con silicio, de concentración $N_d = 2 \times 10^{18}$ cm⁻³. A continuación se depositó una capa de 25 nm de espesor de GaAs intrínseco, crecido también a $T_S = 600$ °C y que separa el contacto posterior de la capa de cajas cuánticas de InAs. La capa con cajas cuánticas (QD de 2.5 monocapas) tiene añadido un recubrimiento de 5 nm de GaAs crecido a una temperatura de $T_S = 480$ °C. La estructura acaba con una capa de 25 nm de GaAs intrínseco, una SPS de AlAs/GaAs de $29 \times (3 + 1)$ nm y un recubrimiento de 5 nm de espesor de GaAs, crecidos a $T_S = 600$ °C (GaAs) y $T_S = 615$ °C (SPS), todas sin dopar. El contacto Schottky está formado por una capa semitransparente de 15 nm de Cr y una aleación recocida a 600 °C de Ni-AuGe que proporciona el contacto ohmico con la capa interna dopada n^+ -GaAs por difusión. La figura 5.5 muestra un esquema de la estructura estudiada.

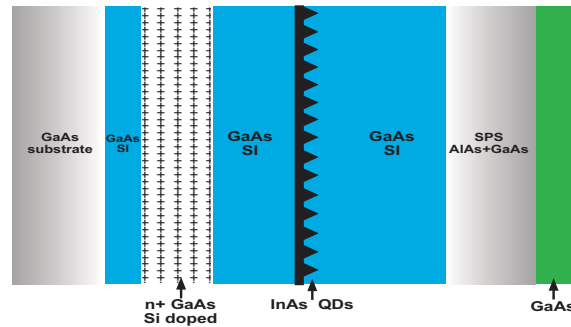


Figura 5.5: Esquema de la muestra estudiada

El tamaño de las cajas cuánticas presenta un cierto grado de dispersión. La altura varía entre 2 y 11 nm y el diámetro de la base entre 16 y 29 nm, como muestra la imagen de AFM de una muestra similar a la estudiada sin recubrir, figura 5.6. El

gráfico de la figura 5.7 muestra una estadística de tamaños de las cajas en la imagen de la figura 5.6, en la que se aprecia una correlación lineal entre el diámetro y la altura. Entre los extremos de esta distribución de tamaños, el factor D/h , conocido como relación de aspecto, varía entre $1/8$ y $1/3$, aproximadamente, para las cajas más pequeñas y más grandes, respectivamente.

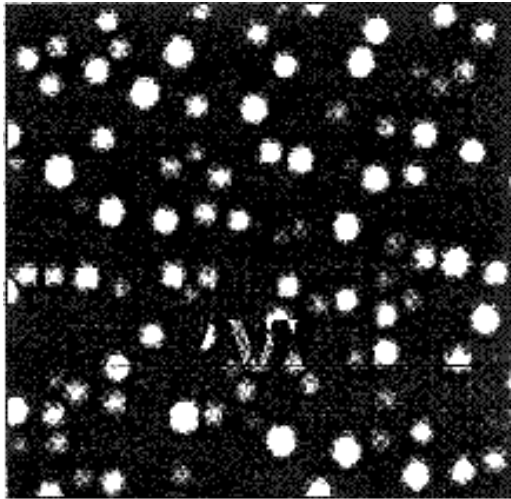


Figura 5.6: Imagen de AFM de la muestra estudiada

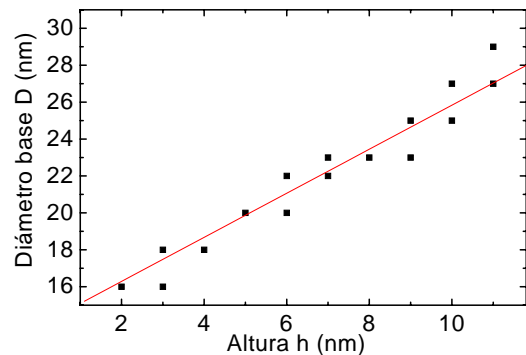


Figura 5.7: Relación entre anchuras y alturas de las cajas cuánticas

5.5.2. Láseres empleados en la caracterización óptica

A la hora de medir la fotoluminiscencia se han usado diversos tipos de láseres que enumeramos [18]:

1. Argón modelo Coherent Innova 90C-6 operado en modo "línea simple", y en modo "multilínea". Este modelo de láser forma parte de la categoría de láseres iónicos de plasma. En el interior del tubo se encuentra el gas a baja presión al que se somete a una descarga eléctrica mantenida. Esto produce un gas de iones y electrones que se denomina plasma. La descarga eléctrica hace que los iones pasen a estados excitados con unas energías y distribución determinadas. Bajo condiciones cuidadosamente escogidas de corriente, voltaje y presión del gas podemos llegar a una configuración de los estados iónicos que dé lugar a la

inversión de población necesaria para que se produzca la emisión estimulada. La ganancia del láser va a depender de la diferencia de población entre niveles. Al haber varios estados disponibles tendremos en principio varias líneas de emisión. En el láser Coherent Innova 90C-6 las líneas más destacables con su potencia de emisión son: $\lambda = 514,5$ nm (1.20 W), $\lambda = 488,0$ nm (0.90 W) y $\lambda = 457,9$ nm (0.21 W). Para pasar del modo multilínea al modo de simple línea se intercambia el espejo final de la cavidad por un prisma con el que se selecciona la longitud de onda deseada.

2. Ti:Zafiro ($\text{Ti:Al}_2\text{O}_3$). Posee tres rangos sintonizables de longitudes de onda (corta, $\lambda \in [700, 800]$, media, $\lambda \in [800, 900]$ y larga, $\lambda \in [900, 1000]$ nm, respectivamente). El bombeo se produce con el láser de argón operando en el modo multilínea. El espectro de fluorescencia del cristal del Ti:zafiro es muy ancho y mediante ópticas adecuadas podemos cambiar el rango de longitudes de onda de la emisión estimulada. Otra ventaja es que puede pulsarse en *ps* y *fs*. Para la formación del pulso intervienen muchos fenómenos y cabe destacar el bloqueo de modo (mode-locking). En la cavidad resonante del láser hay muchos modos que cumplen la condición de resonancia y que están presentes simultáneamente. Podemos hacer que la fase entre diferentes modos sea fija y no aleatoria, con lo que se obtiene una señal intensa y de poca anchura de banda. Hay muchos procesos involucrados, como el efecto Kerr, la modulación de autofase y la dispersión de la velocidad de grupo que no vamos a discutir aquí, y que determinan la formación y estabilidad del pulso final.

3. Láser de diodo de estado sólido con emisión en $\lambda = 810$ nm. En un láser de este tipo se hace pasar corriente en sentido directo a través de la unión semiconductor p-n. Los electrones y huecos pueden entonces recombinarse radiativamente dentro de la unión con una energía próxima a la banda prohibida del material de la zona activa. La anchura de línea de esta emisión espontánea es de varios cm^{-1} . Para un cierto valor umbral de la corriente, determinado por el semiconductor elegido para el diodo, la radiación en la unión se hace

$f(mm)$	$f/\#$	$\Delta\lambda(nm)$	$\Delta E(meV)$
480	7.8	2.0	1.1
110	3.9	4.4	2.5

Tabla 5.1: Resolución espectral en nanómetros y meV para los espectrómetros utilizados.

lo suficientemente intensa como para que la tasa de emisión inducida exceda a la espontánea, a los procesos de recombinación no radiativa y las pérdidas en la cavidad. La radiación puede amplificarse mediante reflexiones múltiples dentro del medio semiconductor y hacerse intensa dentro de la unión p-n antes de que otros procesos desactiven la inversión de población. Las longitudes de onda del láser vienen dadas por el perfil de ganancia espectral y por los estados propios del resonador.

En cada caso, y dependiendo de la naturaleza del experimento, se han puesto espejos a lo largo del camino óptico para dirigir el haz del láser utilizado sobre la muestra. La luz de la emisión procedente de las muestras se focaliza mediante un sistema óptico a la entrada de un monocromador o espectrómetro. Estos dispositivos están formados por una o varias redes de difracción controladas por un ordenador, de tal forma que mediante una calibración previa del aparato, podemos saber qué longitud de onda está seleccionando la red. La luz que sale del espectrómetro es ahora enviada a un dispositivo de detección como puede ser un fotomultiplicador o un fotodiodo y, mediante una electrónica de detección, amplificar y recoger la señal de forma automatizada.

5.5.3. Resultados y discusión

La figura 5.8 muestra varios espectros de PL a diferentes energías de excitación comparadas con el espectro de PC, todos ellos medidos a 77 K y sin voltaje aplicado.

La banda de PL es aproximadamente gaussiana en todos los casos, aunque la energía del pico de la PL y la anchura de banda dependen apreciablemente de la longitud de onda y de la densidad de excitación. Al aumentar la densidad de emisión

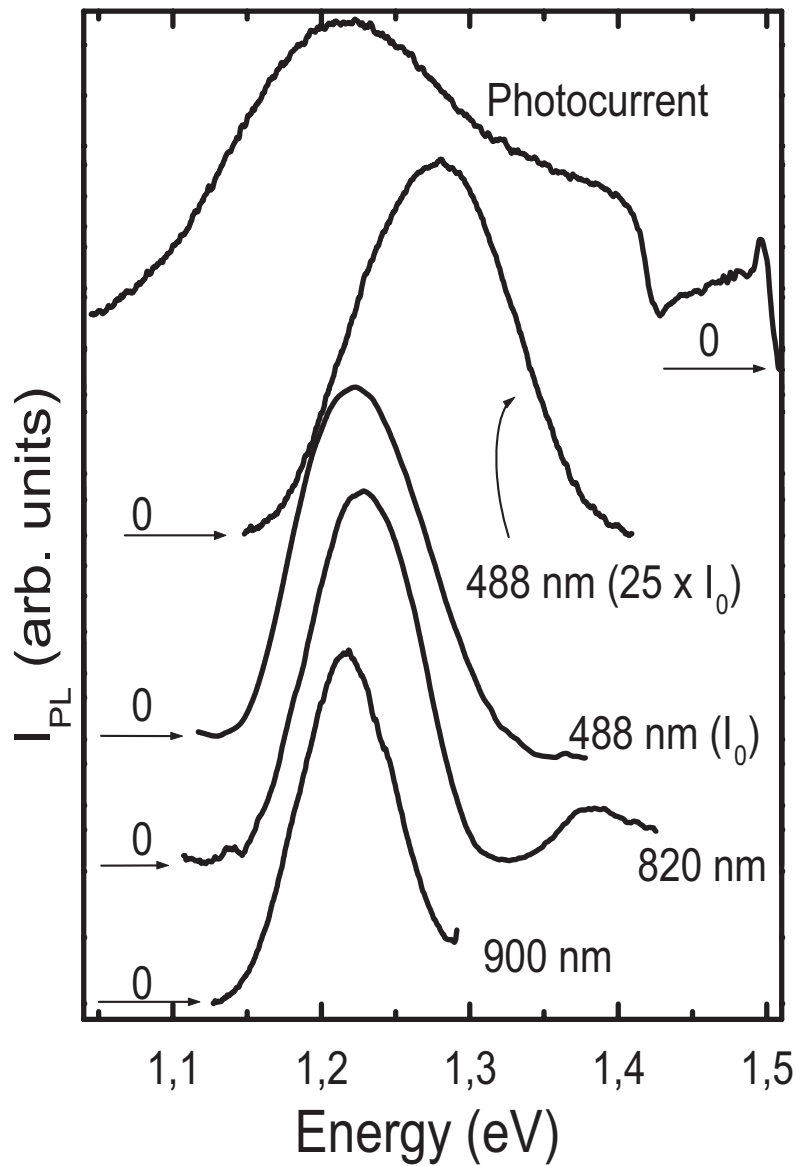


Figura 5.8: Espectros de PL a diferentes longitudes de onda de excitación y espectro de PC (sin aplicar voltaje), según se indica en el gráfico. Se muestran dos espectros de PL a dos potencias diferentes ($I_0 = 100 \text{ W/cm}^2$) para una excitación a $\lambda = 488 \text{ nm}$. Las delgadas líneas horizontales indican el cero para los espectros de PL y PC, los cuales se han desplazado por claridad.

del láser se produce un importante corrimiento hacia el azul de la banda de PL (del orden de 55 meV), aunque no se puede atribuir a estados de alta energía hacia estados con $n \neq 0$, según apuntan las referencias [19][20]. La energía de excitación también produce cambios en la banda de PL debido a la promoción de portadores fotogenerados hacia puntos cuánticos de diferente tamaño. Esto último podemos

constatarlo en el aumento de la anchura de banda de la PC que observamos en la figura. Conforme nos acercamos a condiciones resonantes la anchura de banda de la PL disminuye. A una energía de excitación de 1.36 eV ($\lambda = 910$ nm), el pico de PL y la anchura gaussiana son mínimos, con valores de 1.20 eV y 70 meV respectivamente.

La PL se desplaza ahora hacia el azul unos 25 meV y se hace de nuevo más ancha, alrededor de unos 80 meV, bajo condiciones más resonantes de excitación ($1.30 \text{ eV} < E_{exc} < 1.36 \text{ eV}$). Los espectros de PL observados son típicos de puntos cuánticos pequeños (3-4 nm) de altura, lo que se debe a una baja temperatura del sustrato durante el proceso de crecimiento por MBE, con lo que solo se espera que tengan un único estado electrónico [19]. Las transiciones prohibidas desde el nivel $n = 0$ de electrones al nivel $n = 1$ de huecos pueden aparecer bajo excitación elevada. Estas recombinaciones prohibidas en puntos pequeños pueden ser las responsables del importante corrimiento hacia el azul obtenido con nuestras muestras. El espectro de PC es consistente con la situación descrita arriba.

Por una parte a bajas temperaturas la señal de PC de los puntos es observable y a temperatura ambiente es incluso menos intensa, que no es el caso para puntos grandes (9-10 nm de altura) [21]. Esto significa que la probabilidad de que se produzca escape por efecto túnel de los electrones es mayor en nuestro sistema, lo que viene a demostrar la naturaleza superficial de los niveles confinados electrónicos [20].

Por otra parte la PC está centrada a 1.22 eV (transiciones 0-0), cercana a los valores encontrados de PL a 0 V, y su espectro es más ancho, reflejando mejor que la PL la distribución real promedio de tamaños. La banda de PL puede desplazarse ligeramente hacia energías menores o mayores, alrededor de la distribución promedio de puntos cuánticos, dependiendo de la longitud de onda de excitación, de la potencia o de la temperatura. Los portadores fotogenerados a la energía de la transición óptica 0-1 y los excitones en la capa mojante (WL) pueden contribuir a la parte de alta energía del espectro de PC. La WL tiene una emisión alrededor de 1.37 eV, como se muestra en las figuras 5.8 y 5.9 (810 nm de excitación).

Por arriba de esta energía la señal de PC cae hasta alcanzar la región de absorción del GaAs (excitones ligados a impurezas principalmente). La baja señal de

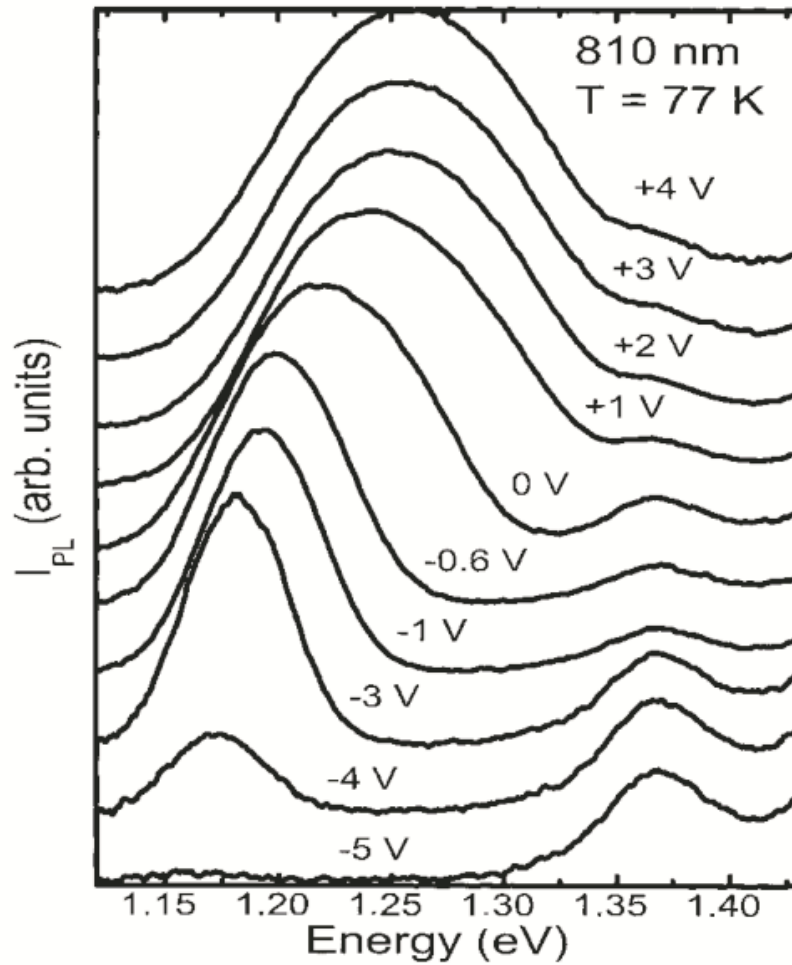


Figura 5.9: Espectros de PL en función del voltaje aplicado a 77 K y con $\lambda = 810$ nm. En este gráfico los espectros de PL han sido normalizados por conveniencia. La diferencia real de intensidad se muestra en la siguiente figura.

PC medida en el borde de la banda del GaAs es aparente, pues este espectro está registrado con la fase del lock-in maximizada al pico de energía de los puntos cuánticos, la cual está prácticamente en fase con la señal de referencia. Por el contrario, el máximo de señal de PC a las energías del GaAs está en contrafase, y es un factor cinco veces mayor que la de los picos de energía de los puntos cuánticos. Este efecto puede deberse a la capa de acumulación de huecos formada en la superred de GaAs, donde el gas bidimensional puede formarse como consecuencia del pozo de potencial triangular a 0 V (potencial intrínseco) y por la polarización inversa.

La dependencia de la banda de PL con el campo eléctrico es especialmente interesante. No obstante la fenomenología observada puede solo obtenerse con condiciones de baja excitación y es más pronunciada bajo excitación resonante. Por encima de 1 kV/cm^2 (488 nm de excitación) no se observan cambios apreciables en la PL con voltaje, debido al apantallamiento del campo efectivo cuando gran parte de los portadores fotogenerados llenan los puntos cuánticos. La figura 5.9 muestra los espectros de PL medidos a 77 K bajo diferentes voltajes aplicados, de directos a inversos, usando una energía de excitación de 1.53 eV, justo por arriba de la banda prohibida del GaAs. Tres regiones diferentes pueden distinguirse en el comportamiento de la PL con el campo eléctrico según se observa en la figura 5.10.

En esta figura se han hecho ajustes a una gaussiana para polarización inversa y a dos gaussianas para polarización directa partiendo de los datos experimentales de la PL y la WL.

La región I ($F > 85 \text{ kV/cm}$, polarización inversa) está dominada por el efecto túnel de los electrones hacia fuera de los puntos cuánticos, pues domina la extinción de la PL en esta zona. Simultáneamente el espectro de PC no cambia apreciablemente en esta región, debido posiblemente a la capa de huecos bidimensional en la interfase GaAs/SPS. Dado que el efecto túnel es más efectivo en los puntos más pequeños de nuestra distribución (poseen niveles más confinados), el corrimiento hacia el rojo de los picos de la PL se puede deber a dos contribuciones: por una parte el efecto Stark de la transición 0-0 y por otra la extinción de la PL en la banda de altas energías. De hecho observamos simultáneamente una reducción de la anchura de banda. El borde entre las regiones I y II viene determinado por el alineamiento del nivel de Fermi con el estado fundamental de los electrones en los puntos cuánticos. La región II ($0 < F < 85 \text{ kV/cm}$, polarización inversa) se caracteriza por un rápido cambio de la banda de emisión: la intensidad integrada crece en un factor 6, la anchura de línea prácticamente se duplica y la energía del pico de PL se desplaza unos 30 meV. En esta región el nivel de Fermi sube y la capa dopada n^+ puede proporcionar electrones extra para la recombinación. Los electrones fotogenerados e inyectados pueden ser atrapados en los puntos, pero no todos los huecos fotogenera-

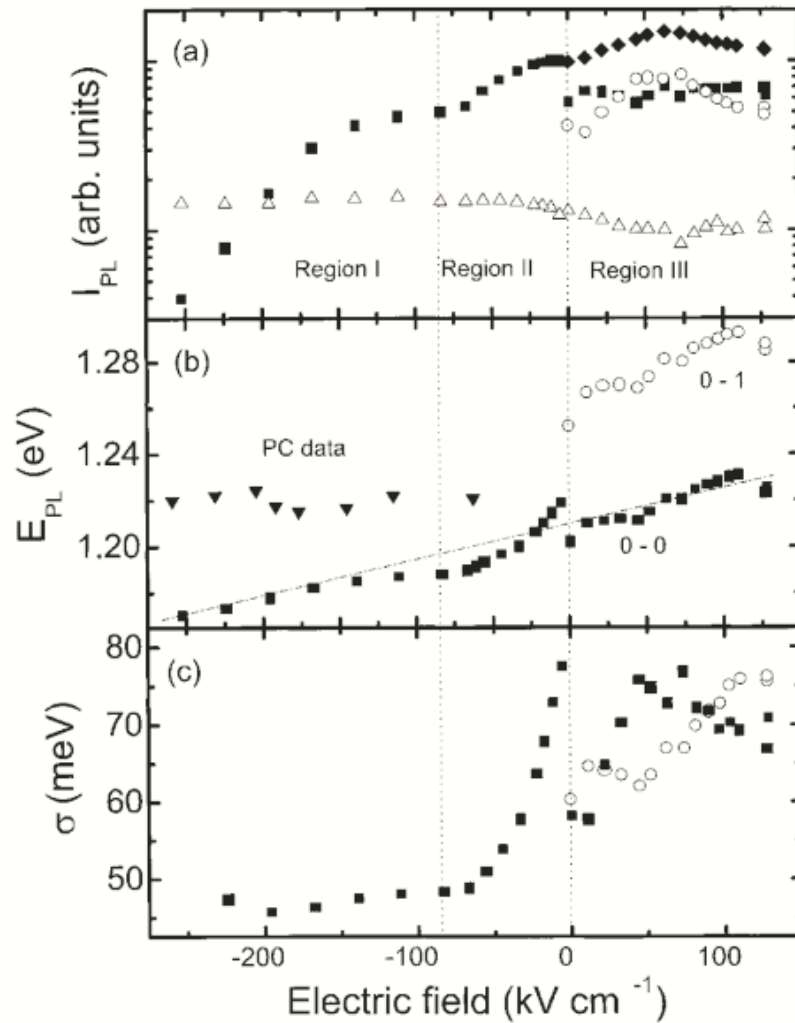


Figura 5.10: a) Intensidad integrada de la PL, b) energía del pico de la PL y c) anchuras gaussianas obtenidas con una (polarización inversa) o dos gaussianas (polarización directa) para ajustar la PL en función del campo eléctrico.

dos, ya que la capa bidimensional de huecos en la interfase de GaAs/SPS aún existe a 0 voltios. En la región III (polarización directa) el pozo triangular se reduce progresivamente al igual que la capa bidimensional de huecos. Por tanto tenemos más huecos fotogenerados disponibles para producir la recombinación. En esta región son precisas dos gaussianas para explicar bien la evolución de la PL. Dado que los huecos provenientes de la capa son atrapados en los puntos, la gaussiana de alta energía puede deberse a la recombinación de los electrones del estado fundamental con los

huecos del primer estado excitado, algo similar a como ocurría con la PL obtenida a alta potencia. Esta recombinación de alta energía se separa unos 60 meV de la energía de recombinación del estado fundamental, de acuerdo a la referencia.

Podemos concluir diciendo pues que en puntos cuánticos pequeños, de entre 3 y 4 nm la recombinación se debe a los excitones en el estado fundamental. Los estados excitados de los huecos pueden jugar cierto papel cuando la población de huecos en los puntos es bastante elevada. El efecto túnel que sufren los electrones a través de estos puntos es muy eficiente debido a la naturaleza superficial de estos estados, lo que determina a su vez una fuerte señal de PC en la transición óptica fundamental y una extinción de la PL a campos eléctricos elevados [19].

5.6. Conclusión

En este capítulo hemos estudiado la influencia de un campo eléctrico en la dirección vertical, la de máximo confinamiento, sobre las propiedades excitónicas. Se ha tomado un modelo cilíndrico para los puntos cuánticos. En el eje z hemos tomado un pozo de barreras finitas lo que nos permite calcular de manera bastante aproximada el efecto túnel que hacen los portadores a través de la barrera. El tiempo de efecto túnel, responsable de la extinción de señal de fotoluminiscencia, compite con el de recombinación radiativa, mostrándose claramente su comportamiento en los resultados experimentales.

El efecto Stark cuántico confinado observado en las muestras de puntos cuánticos de InAs/GaAs es prácticamente cuadrático, dando a entender que no tenemos presente un momento dipolar intrínseco. El campo eléctrico produce un comportamiento diferente en la muestra según excitemos en el visible o en el infrarrojo. En el infrarrojo (excitación en la barrera de GaAs) se observa un corrimiento hacia el rojo al aumentar el campo eléctrico aplicado y una disminución de la intensidad de la banda de luminiscencia, como ya se ha apuntado más arriba.

Los estudios realizados con la potencia de excitación muestran un claro corrimiento hacia el azul de la banda de fotoluminiscencia típica de un llenado de bandas. El

pico de baja energía crece linealmente con la potencia y el de alta energía superlinealmente, hecho que refuerza el que los dos picos provengan de dos familias con tamaños diferentes.

Bibliografía

- [1] D. Haft, R. J. Warburton, K. Karrai, S. Huant, G. Medeiros-Ribeiro, J. M. García, W. Schoenfeld, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2946 (2001).
- [2] S. Seidl, M. Kroner, A. Hegele, K. Karrai, R. J. Warbuton, A. Badolato, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 203113 (2006).
- [3] B. Alén, J. Bosch, D. Granados, J. Martínez-Pastor, J. M. García, L. González "Oscillator strength reduction induced by external electric fields in self-assembled quantum dots and rings", *Phys. Rev. B* **75**, 045319 (1-7) (2007).
- [4] J. Bosch, B. Alén, J. martínez-Pastor, D. Granados, J. M. García and L. González "Competition between carrier recombination and tunneling in quantum dots and rings under the action of electric fields", *Supperlattices Microstruct.* **43**, 582-587 (2008).
- [5] J. Martínez-Pastor, J. Bosch, D. Biswas, B. Alén, J. L. Valdés, J. M. García and L. González "Exciton recombination in self-assembled InAs/GaAs small quantum dots under an external electric field", *phys. stat. sol. (a)* **2**, 599-603 (2002).
- [6] S. Le Goff, B. Stébé, *Phys. Rev. B* **47**, 1383 (1993).
- [7] J. A. Barker, R. J. Warburton, E. P. O'Reilly , *Phys. Rev. B* **69**, 035327 (2004).
- [8] B. K. Panda, *Pramana journal of physics* **56**, 809 (2001).
- [9] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg ,*Phys. Rev. B* **59**, 5688 (1999).

- [10] H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. (Cambridge University Press, 2000).
- [11] B. Alén, F. Bickel, K. Karrai, R. J. Warbuton, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2235 (2003).
- [12] D. Bimberg, N. Kirstaedter, N. Ledentsov, A. I. Alferov, P. S. Kopev y M. Ustinov, *IEEE Sel. Topics Quantum Electron* **3**, 196 (1997).
- [13] F. Heinrichsdorff, M.-H. Mao, N. Kirstaedter, A. Krost y D. Bimberg, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 22 (1997).
- [14] G. Yusa y H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 345 (1997).
- [15] J. J. Finley, M. Skalitz, M. Arzberger, A. Zrenner, G. Böhm y G. Abstreiter, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2618 (1998).
- [16] H. C. Liu, M. Gao, J. McCaffrey, Z. R. Wasilewski y S. Fafard, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 79 (2001).
- [17] Z. L. Chen, O. Baklenov, E. T. Kim, I. Makhmetzhanov, J. Tie, A. Madhukar, Z. Ye y J. C. Campbell, *J. Appl. Phys.* **89**, 4558 (2001).
- [18] W. Demtröder, *Laser Spectroscopy* (Springer-Verlag, 1998).
- [19] Z. L. Chu, M. Arzberger, G. Böhm y G. Abstreiter, *J. Appl. Phys.* **85**, 2355 (1999).
- [20] Z. K. H. Schmidt, G. Medeiros-Ribeiro, M. Oestreich y P. M. Petroff, *Phys. Rev. B* **54**, 11346 (1996).
- [21] W.-H. Chang, T. M. Hsu, C. C. Huang, S. L. Hsu, C. Y. Lai, N. T. Yeh y J. I. Vhyi, *phys. stat. sol. (b)* **224**, 85 (2001).

Capítulo 6

Efecto del campo eléctrico lateral sobre un dopante embebido en un disco cuántico

6.1. Introducción

Los avances tecnológicos en la fabricación de dispositivos a escala nanométrica ha permitido en los últimos años la fabricación de un amplio abanico de estructuras con diferente dimensionalidad. En general esta reducción de dimensiones ha permitido descubrir nuevos comportamientos de la materia en lo que a propiedades ópticas y de transporte se refiere.

Entre estos dispositivos optoelectrónicos merece destacarse los discos cuánticos por sus aplicaciones tales como la generación de un solo fotón o en pares de fotones acoplados. En estos discos obtenidos controlando cuidadosamente las condiciones de crecimiento, el tamaño lateral es mucho mayor que su espesor [1][2][3]. Por otra parte, el dopado de puntos cuánticos semiconductores permite afinar muchas de las propiedades de los dispositivos cuánticos [4]. Dopando a su vez los puntos cuánticos con impurezas podemos controlar sus propiedades electrónicas [5][6].

La incorporación de impurezas a los puntos cuánticos afecta considerablemente

a las propiedades ópticas y de transporte y puede explicar las transiciones en fotoluminiscencia debidas a la existencia de complejos excitónicos ligados como (D^+,X) , (D^0,X) , (A^-,X) o (A^0,X) y son la causa de la emisión en el ultravioleta de puntos de ZnO [7][8]. El control de la cantidad de impurezas abre la vía a dispositivos con nuevos rendimientos. Como destacan Koenraad y Flatté [9], estas nuevas aplicaciones requieren el uso de una única impureza dopante en dispositivos tales como los de espín único (definiría un qubit en futuros dispositivos de computación cuántica). Hemos de recalcar que desde Bastard [10], se han desarrollado muchos estudios tanto teóricos como experimentales para comprender el comportamiento de las impurezas bajo diferentes condiciones de confinamiento [11-17]. Además, este modelo nos permite hacer una analogía entre el comportamiento de un dador y el de un hueco con una gran masa efectiva. Hay que recordar que la energía de ligadura de una impureza D^0 en el centro de un punto cuántico ha sido estudiado usando diferentes métodos de cálculo y potenciales de confinamiento de varias formas [18-21]. Muchos de estos trabajos suponen que la impureza D^0 se halla en el centro del punto cuántico. No obstante, ha quedado bien establecido que la posición D^0 de la impureza afecta fuertemente a la energía de ligadura y al espectro de absorción [22-25].

Usando un campo eléctrico externo como perturbación se ha encontrado una buena prueba para estudiar los estados cuánticos de D^0 . La aplicación de un campo eléctrico afecta a los estados electrónicos por impurezas D^0 y da lugar al desdoblamiento de los estados degenerados introduciendo nuevas transiciones. Por otra parte, la aplicación del campo eléctrico en un medio confinado da lugar a dos fenómenos que compiten entre sí. El primero de ellos es el desplazamiento al rojo¹ debido a que el campo eléctrico deforma el potencial de confinamiento dando lugar al corrimiento Stark. El otro efecto viene dado por la polarización generada por la separación de las cargas opuestas [26-28].

¹Hemos de hacer notar a este respecto que esta afirmación es una frase hecha. Los puntos cuánticos suelen emitir en el infrarrojo así que un corrimiento hacia el rojo supondría un aumento de la energía de la transición. Esto obviamente no es así. Por corrimiento al rojo se entiende que la energía disminuye. En el ámbito de los puntos cuánticos quizá fuera más coherente usar la expresión "corrimiento hacia el infrarrojo lejano"

Se han dedicado varios trabajos al efecto del campo eléctrico en los estados electrónicos de una impureza en el interior de diferentes geometrías. Lien y Trinh [30] han estudiado cómo afecta el campo eléctrico sobre impurezas hidrogenoides en puntos cuánticos de GaAs para geometría esférica y tipo disco. Estos autores suponen que el confinamiento es parabólico y que el campo eléctrico se aplica en la dirección z , cuando se trata de la esfera, y en la dirección x cuando se aplica sobre el disco. Sus resultados muestran que la energía de ligadura disminuye a medida que el campo aumenta y que el corrimiento Stark depende de la forma del potencial de confinamiento parabólico. Usando métodos de forma de potencial, Terzis y Baskoutas [31] han calculado la energía de ligadura de una impureza bajo un campo magnético y eléctrico. Assaid et al. [26] han estudiado a su vez el efecto del campo eléctrico en una impureza dadora fuera del centro en un nanocristal esférico usando un pozo de potencial finito. Sus trabajos ponen de manifiesto que la posición del dador y la dirección del campo eléctrico afecta significativamente a sus propiedades ópticas. Determinan también la polarizabilidad en el caso de una impureza centrada. El efecto magnético sobre la polarizabilidad eléctrica ha sido estudiado con anterioridad por E. Feddi [32]. La conclusión es que, en presencia de campo eléctrico, el campo magnético reduce la extensión de la función de onda y, por ende, la polarizabilidad del punto cuántico. Más recientemente, Xie et al. [33] han calculado la energía de ligadura de diferentes estados y el coeficiente de absorción óptica usando teoría de perturbaciones y considerando un confinamiento lateral parabólico. Yuan et al. [24] han investigado el efecto de un campo eléctrico en el estado fundamental de un dador en puntos cuánticos esféricos por un método de perturbaciones degeneradas y bajo confinamiento fuerte. Demuestran estos autores que la energía de ligadura depende de la posición de la impureza y de la intensidad de campo.

Sin embargo, nuevos experimentos concernientes al efecto del campo eléctrico lateral en un disco delgado muestran la posibilidad de ajustar las propiedades ópticas de un único punto cuántico para la emisión de pares de fotones entrelazados. A fin de comprender las propiedades ópticas más relevantes, se ha desarrollado un modelo variacional que tenga en cuenta la elección adecuada de la función de on-

da. Tratándose de un disco delgado el confinamiento viene mejor descrito por dos potenciales: un pozo cuadrado infinito en la dirección de crecimiento, el eje z , y un oscilador armónico bidimensional en el plano xy .

En el estudio siguiente damos cuenta de un cálculo teórico de una impureza localizada en cualquier lugar del del disco cuántico semiconductor. Hay varios parámetros que intervienen en el problema: el tamaño del disco, la posición del dador, la intensidad del campo eléctrico y su orientación relativa al eje que contiene la impureza ionizada D^+ . Teniendo en cuenta todos estos parámetros determinaremos su influencia sobre la energía de ligadura y sobre la densidad de probabilidad electrónica. En la siguiente sección se da todo el formalismo teórico y en la última los resultados numéricos y la discusión. Este estudio se recoge en el artículo del autor [25], *Effect of a lateral electric field on an off-center single dopant confined in a thin quantum disk*, J. Appl. Phys., **111**, 034317 (2012).

6.2. Formalismo teórico

Consideremos una impureza dadora en un disco cuántico de diámetro D mucho mayor que su altura, $D \gg H$, bajo la influencia de un campo eléctrico lateral \vec{F} que forma un ángulo θ con el eje x , es decir $\vec{F} = (F \cos \theta, F \sin \theta, 0)$. Dada la simetría cilíndrica de nuestro problema vamos a tomar para las coordenadas del electrón $\vec{\rho} = (\rho, \varphi, z)$ y para la impureza $\vec{\rho}_0 = (\rho_0, \varphi_0, z_0)$. El confinamiento lateral lo vamos a tomar como un oscilador armónico bidimensional y el vertical como un pozo de paredes infinitas. Supondremos a su vez, sin pérdida de generalidad, que la impureza se mueve a lo largo del eje x , con lo que podemos hacer $\varphi_0 = 0$ y $z_0 = 0$. En la Fig 6.1. podemos ver un esquema de nuestro sistema con el detalle de las coordenadas que se van a emplear.

Dentro de la aproximación de la masa efectiva y tomando como unidades de distancia y energía las relativas al dador ($R_D = m^*e^4/2\hbar^2\varepsilon^2$, $a_D = \hbar^2\varepsilon/m^*e^2$), el hamiltoniano es

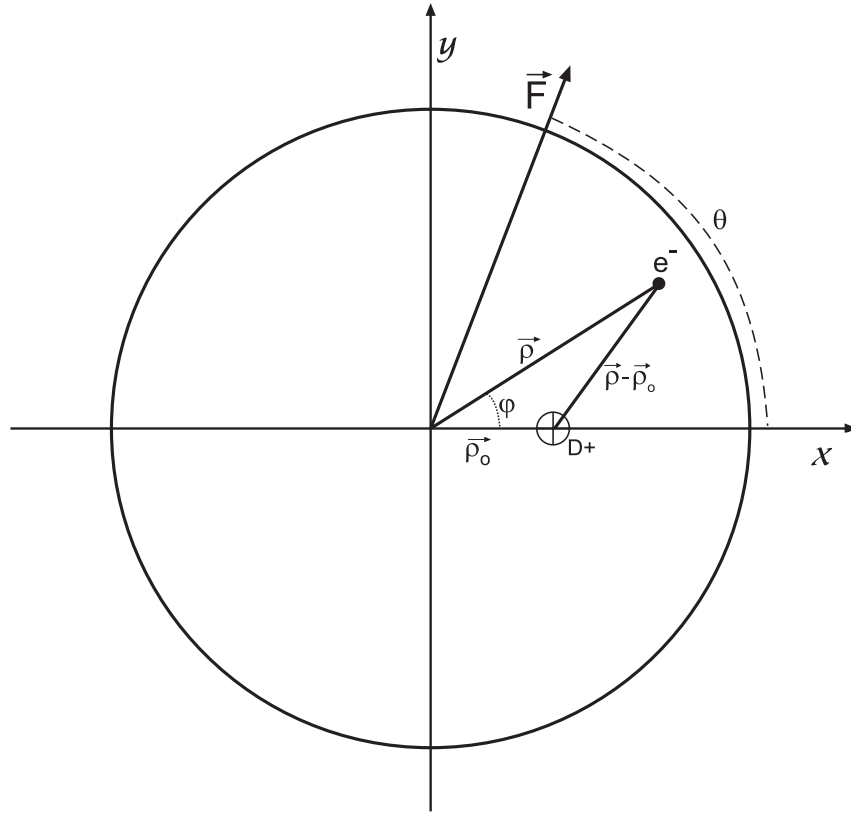


Figura 6.1: Sistema de coordenadas para un punto cuántico con una impureza ionizada D^+ .

$$H = H_0 + W \quad (6.1)$$

donde H_0 es el hamiltoniano sin perturbar

$$H_0 = -\Delta(\rho, \varphi, z) + \gamma_e \rho^2 - 2/\sqrt{\rho^2 + \rho_0^2 - 2\rho\rho_0 \cos \varphi} + V_w(z) \quad (6.2)$$

$\gamma_e = 1/R^2$ es un parámetro que mide la intensidad del potencial armónico, según vimos en el capítulo 4, fórmula 4.5 y $V_w(z)$ es el potencial de confinamiento en el eje z . Al trabajar dentro de la aproximación adiabática, hemos supuesto que hay independencia entre la dinámica en el plano xy y la del eje z , por eso en la expresión de la interacción coulombiana solo hemos considerado la separación radial que es mucho más importante. En la dirección vertical, de hecho, podemos suponer que el electrón se halla en el estado confinado de más baja energía. W representa el término de interacción con el campo eléctrico externo

$$W = e\vec{F}\vec{\rho} = -f\rho\cos(\theta - \varphi) \quad (6.3)$$

siendo $f = eFa_D/R_D$ un parámetro adimensional que caracteriza la intensidad del campo eléctrico aplicado en el interior del disco. En ausencia de campo eléctrico la energía del estado fundamental y su función de onda son soluciones de la ecuación de Schrödinger

$$H_0\Psi_0(\rho, \varphi, z) = E_0\Psi_0(\rho, \varphi, z) \quad (6.4)$$

Debido a la presencia del potencial coulombiano esta última ecuación no tiene solución analítica. Por tanto, el estado fundamental se calcula mediante el método variacional con la siguiente función de prueba

$$\begin{aligned} \Psi_0(\rho, \varphi, z) = & \exp(-\gamma_e\rho^2) {}_1F_1(-a_{01}, 1, \gamma_e\rho^2) \cos(\pi z/h) \\ & \times \exp\left(-\alpha\sqrt{\rho^2 + \rho_0^2 - 2\rho\rho_0\cos\varphi}\right) \end{aligned} \quad (6.5)$$

donde α es un parámetro variacional, ${}_1F_1(-a_{01}, 1, \gamma_e\rho^2)$ es la función hipergeométrica confluyente o función de Kummer [34], solución del problema de partícula única [35]. a_{01} es el primer cero de la función ${}_1F_1(-a_{01}, 1, \gamma_e\rho^2)$ en $\rho = R$, que por lo general no suele ser un número entero.

En presencia de un campo eléctrico lateral, el estado fundamental y su correspondiente función de onda vienen determinados tras resolver la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi(\rho, \varphi, z) = E_{D^0}\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (6.6)$$

Esta ecuación también la resolveremos variacionalmente, usando como función de prueba

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \Psi_0(\rho, \varphi, z) \exp(\beta f\rho\cos(\theta - \varphi)) \quad (6.7)$$

Para determinar la energía del estado fundamental minimizamos el valor esperado de H con respecto a α y β

$$E_{D^0} = \min[\langle \Phi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle] \quad (6.8)$$

Le energía de ligadura se define generalmente como

$$E_b = E_e - E_{D^0} \quad (6.9)$$

donde E_e es la energía del electrón en unidades del dador, dadas en [27]

$$E_e = 4\gamma_e \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) - \frac{f^2 R^4}{4} \quad (6.10)$$

6.3. Resultados y discusión

En el pozo parabólico la energía de confinamiento de una partícula se estima en $\hbar\omega = \hbar\gamma_e/m_e^*$. De esa manera es fácil verificar que la medida del confinamiento lateral γ_e va como $1/R^2$ [36], donde R es el radio del disco. Introducimos también la razón $\xi = \rho_0/R$ que describe la localización del dador sobre el eje x ($0 \leq \xi \leq 1$), $\xi = 0$ y $\xi = 1$ corresponden respectivamente a la localización del dador en el centro y en el borde del disco cuántico. El problema de una impureza fuera del centro depende de los siguientes parámetros: el radio del disco, la posición de la impureza D^+ en el disco, la intensidad del campo eléctrico y su orientación relativa θ respecto al eje x . En esta sección vamos a analizar su influencia en la energía de ligadura y en las densidades de probabilidad.

La figura 6.2 resume los resultados correspondientes al dador centrado en un disco cuántico para $\theta = 0$ y $\xi = 0$. En esta figura presentamos la energía de ligadura en función del radio R del disco para diferentes intensidades del campo eléctrico, ($f = 0, 0,5, 1$). Como era de esperar la energía de ligadura disminuye al aumentar el tamaño y la intensidad del campo. En el límite de confinamiento fuerte ($R \ll a_D$), el efecto del campo eléctrico es insignificante y se hace algo más relevante al crecer el radio del disco. Esto último se debe a la competición entre el confinamiento, la atracción de Coulomb y la tendencia del campo a separar los portadores.

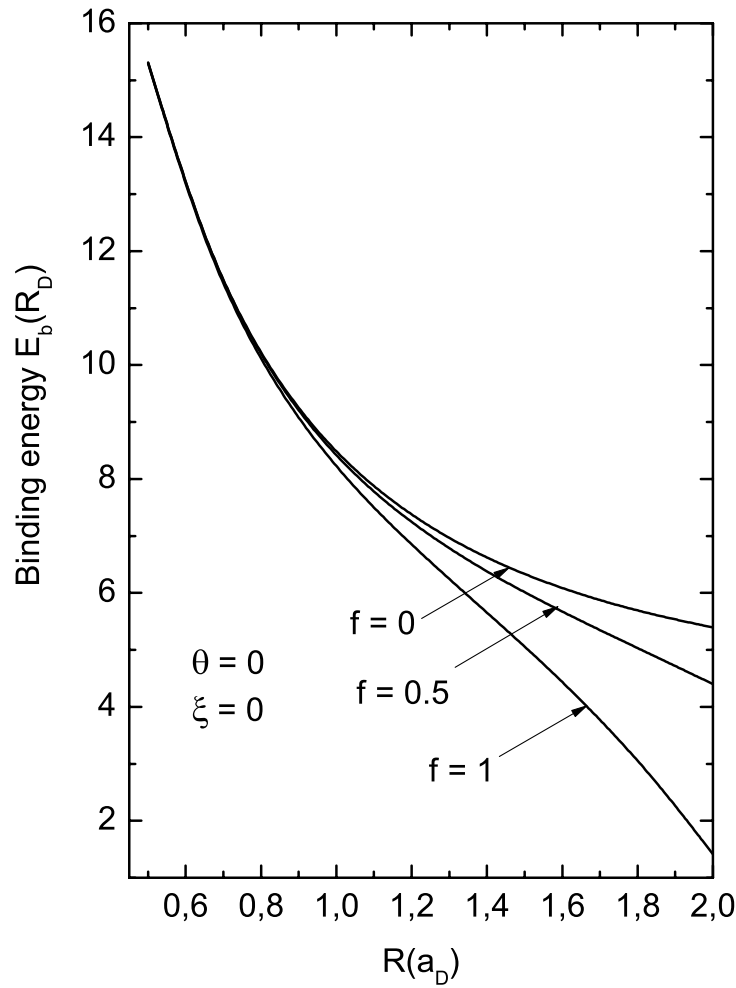


Figura 6.2: Energía de ligadura electrónica con un dador en el centro del disco para diferentes intensidades de campo eléctrico lateral, ($f = 0, 0,5, 1$)

Vamos a tratar ahora el efecto de la posición de la impureza cuando el campo lateral es paralelo al eje x ($\theta = 0$), discutiendo su variación en función del radio del disco y nos centraremos en el caso de una impureza localizada a una distancia del centro $\rho_0 = R/2$, que corresponde a $\xi = 0,5$. Como se puede ver en la figura 6.3 la deslocalización de la impureza trae consigo una disminución de la energía de ligadura y el dador ionizado tiende a ser más sensible al efecto del campo eléctrico. Este comportamiento es más pronunciado para grandes intensidades de campo donde

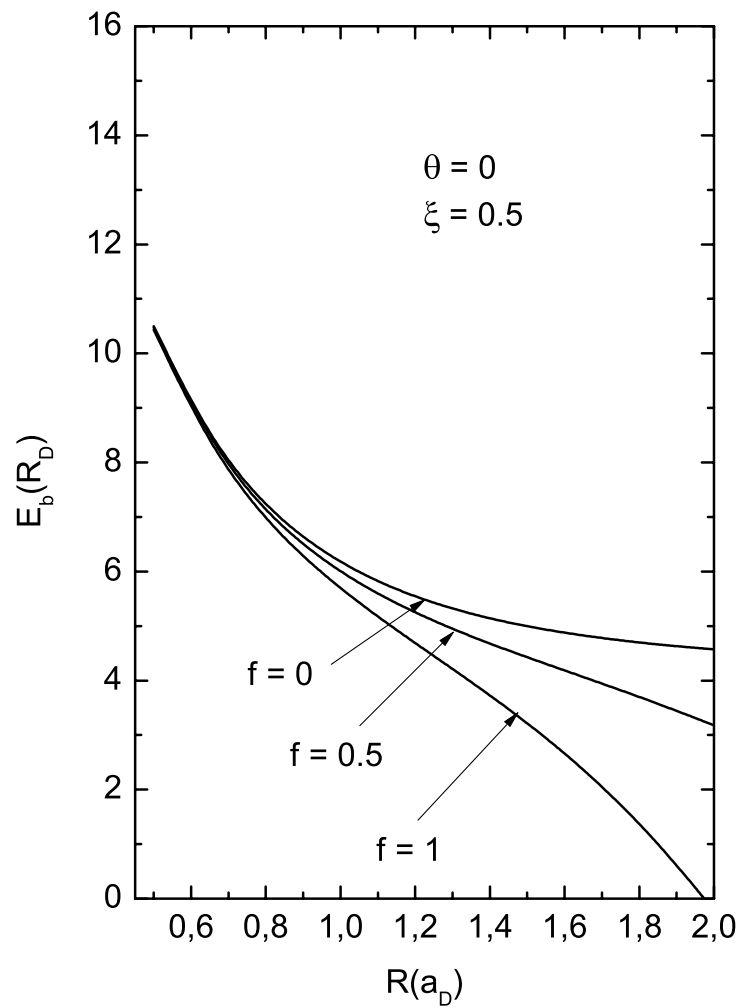


Figura 6.3: Energía de enlace de un electrón ligado a una impureza localizada en $\rho_0 = \frac{R}{2}$ para un campo eléctrico paralelo al eje x ($\theta = 0$) y con diferentes intensidades de campo eléctrico lateral, ($f = 0, 0,5, 1$)

se ve un rápido descenso de la energía de enlace. Esto se debe a que el campo tiende a empujar al electrón en la dirección opuesta ($x < 0$), lejos del centro D^+ , con lo que se halla menos ligado y por consiguiente con menor energía de enlace.

Otro caso importante es cuando la impureza se ubica en el borde del disco, caso que vemos representado en la figura 6.4. El electrón es empujado lejos del ion por el campo, alcanzando la dirección opuesta. La distancia entre ambos crece conforme el

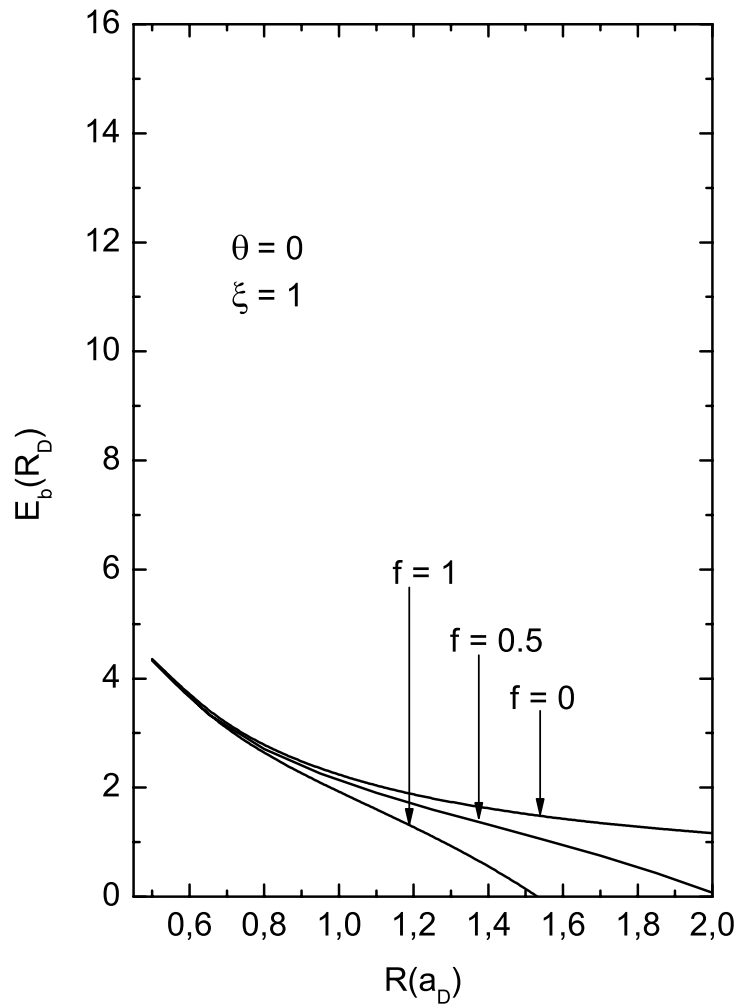


Figura 6.4: Energía de enlace de un electrón ligado a una impureza localizada en $\rho_0 = R$ para un campo eléctrico paralelo al eje x ($\theta = 0$) y con diferentes intensidades de campo eléctrico lateral, ($f = 0, 0,5, 1$)

campo, perdiéndose la correlación y disminuyendo por tanto la energía de ligadura, de forma todavía más acusada que en el caso anterior.

Sin embargo hemos de recalcar que cuando la impureza se sitúa en el centro del disco el sistema es invariante con respecto a la dirección del campo. A fin de analizar el papel de la orientación del campo eléctrico lateral vamos a centrar nuestra atención en el dador fuera del centro. Como veremos más tarde, esta orientación juega un

importante papel en la determinación de la energía. En vistas a completar nuestra discusión vamos a tomar $\xi = \frac{1}{2}$ para tres valores representativos de θ ($\theta = 0$, $\theta = \frac{\pi}{2}$, y $\theta = \pi$). La figura 6.5 resume la variación de la energía de ligadura para $f = 1$ y para los tres valores de θ en función del radio del disco.

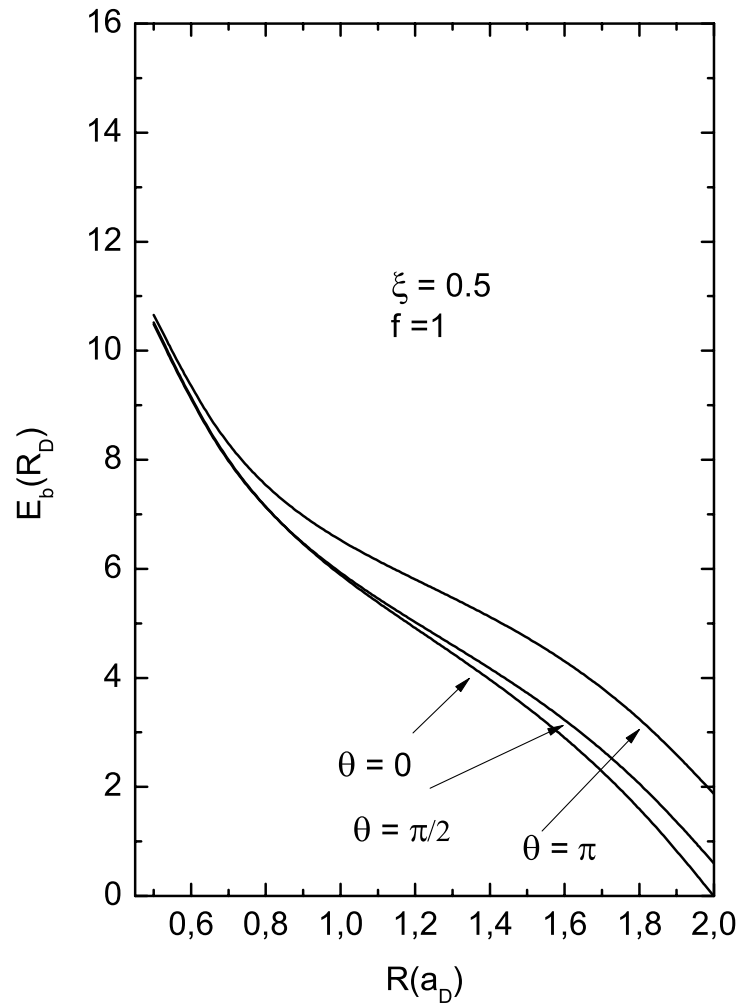


Figura 6.5: Energía de enlace de un electrón ligado a una impureza localizada en $\rho_0 = \frac{R}{2}$ en función del tamaño del disco para tres orientaciones del campo ($\theta = 0$, $\theta = \frac{\pi}{2}$, y $\theta = \pi$)

Se observa que para un radio dado que la energía aumenta al crecer θ . La disminución más acusada se observa para $\theta = \pi$ donde el campo eléctrico tiene una proyección negativa sobre el eje x con lo que el electrón se ve impelido hacia el ion,

lo que tenderá a reducir la separación espacial entre ellos.

En la figura 6.6 mostramos la energía de enlace del dador en función de la razón $\xi = \rho_0/R$ para $R = a_D$ y para un campo fijo $f = 1$. Podemos ver que la energía de enlace disminuye conforme la impureza ionizada se mueve desde el centro ($\xi = 0$) hasta la periferia ($\xi = 1$).

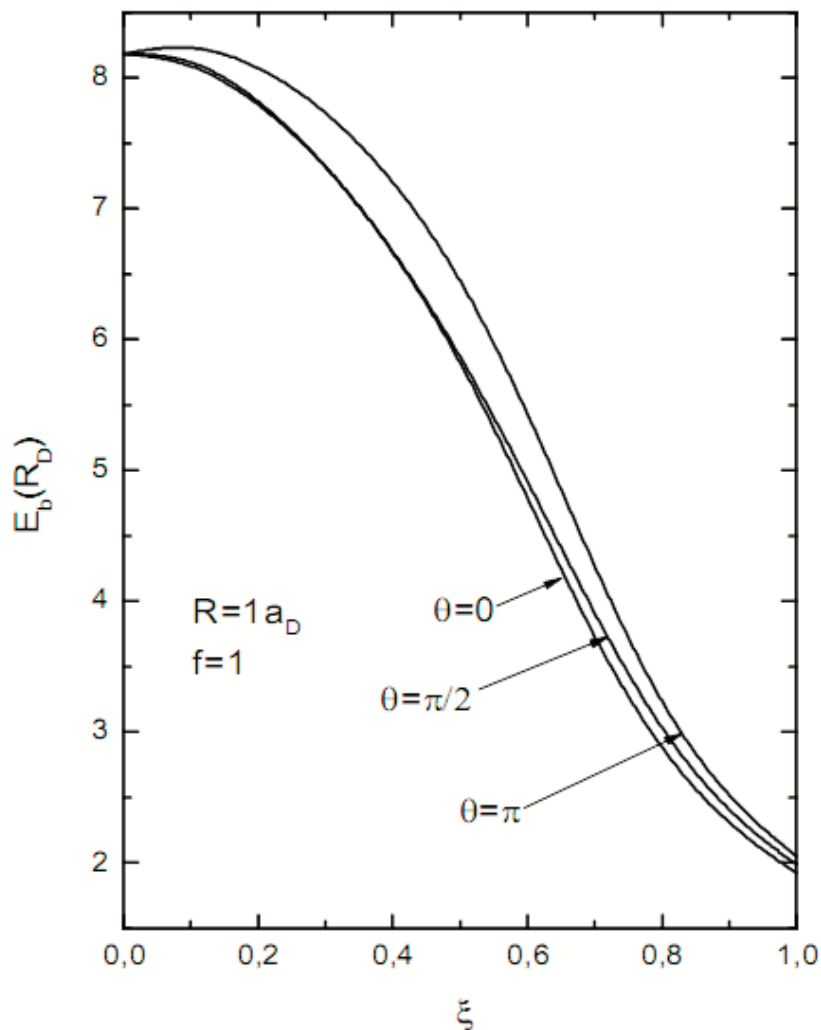


Figura 6.6: Energía de ligadura del electrón ligado a la impureza en función de la razón $\xi = \rho_0/R$ para tres orientaciones diferentes del campo eléctrico ($\theta = 0, \pi/2$ y π) con $f = 1$ y $R = 1$.

En segundo lugar podemos ver que la mayor energía de ligadura corresponde a la dirección $\theta = \pi$, lo que refuerza nuestros resultados previos. Sin embargo, para todas

las orientaciones del campo eléctrico el sistema tiene la energía más baja cuando el ion se localiza en el borde del disco. Además, con el ion situado en la periferia el electrón puede escapar con mayor facilidad de la atracción coulombiana, lo cual conduce de nuevo a una disminución de la energía de enlace.

En vistas a clarificar el efecto de la orientación del campo eléctrico lateral de un dador fuera de eje, en las figuras 6.7 y 6.8 se representan, respectivamente, para $\xi = 0,5$ y $\xi = 1$, las energías de ligadura en función de θ , para discos de radio $R = a_D$ y para dos valores del campo $f = 0.5$ y $f = 1$.

Como podemos ver las energías correspondientes a la situación $\xi = 0.5$ tienen un mínimo localizado alrededor de $\theta = 0.4\pi$ para $f = 0.5$ y $\theta = 0.3\pi$ para $f = 1$.

Después de estos mínimos asistimos a un rápido crecimiento de la energía de enlace cuando θ es mayor que $\pi/2$. Para $\theta = \pi$ se alcanza un máximo porque el electrón se sitúa cerca del dador debido a la dirección de la fuerza electrostática. Todos estos resultados están en perfecto acuerdo con las discusiones previas. Cuando la impureza se localiza cerca del borde, el mínimo se obtiene más próximo a $\theta = 0$ porque la fuerza electrostática empuja al electrón en la dirección opuesta y hace disminuir la atracción coulombiana.

Vamos a estudiar por último la influencia de la posición del dador, la intensidad del campo eléctrico y su orientación sobre la densidad de probabilidad. En general la distribución de probabilidad se mueve acorde con la posición del ion, la orientación y la intensidad del campo. Todas las imágenes mostradas en la figura 6.9 ilustran la densidad de probabilidad mediante curvas de nivel. Esta densidad se define como $|\Psi(\rho, \varphi)|^2$.

A fin de poder observar bien la distorsión de la densidad de probabilidad hemos escogido $R = 2a_D$ y $f = 5$. La primera fila muestra el caso de la impureza centrada. Para campo nulo se observa una simetría completa. Al aplicar el campo la densidad se distorsiona indicando que el electrón se mueve hacia la izquierda para $\theta = 0$. Al rotar el campo se aprecia también una rotación de la densidad. La segunda y tercera fila corresponden, respectivamente, a $\xi = 0.5$ y $\xi = 1$; como ya dijimos para $f = 0$, la densidad de probabilidad se concentra sobre todo alrededor de la posición del ion. Al

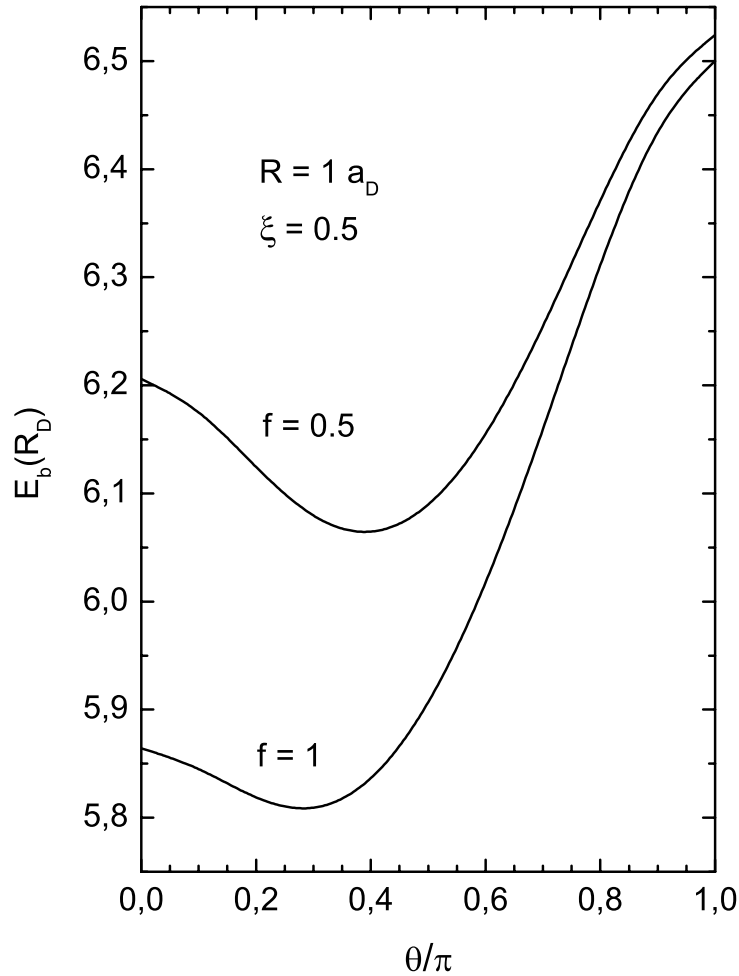


Figura 6.7: Energía de enlace del electrón ligado a una impureza D^+ en función de todas las posibles orientaciones del campo eléctrico ($0 \leq \theta \leq \pi$) para $R = 1 a_D$ y $f = 0$, $f = 1$. La impureza se halla en $\rho_0 = R/2$, $\xi = 0,5$

aumentar la intensidad del campo la densidad se distorsiona más, mientras continua su rotación. Es de destacar que cuando $\theta = \pi$ la densidad se hace más importante junto a la impureza. Cuando $\theta = \pi/2$ el electrón es atraído hacia la parte derecha del disco por el potencial coulombiano del dador y es a su vez empujado hacia abajo por la fuerza electrostática. La competición entre estos dos efectos es la responsable de la tendencia diagonal observada en la densidad. El comportamiento de la densidad de

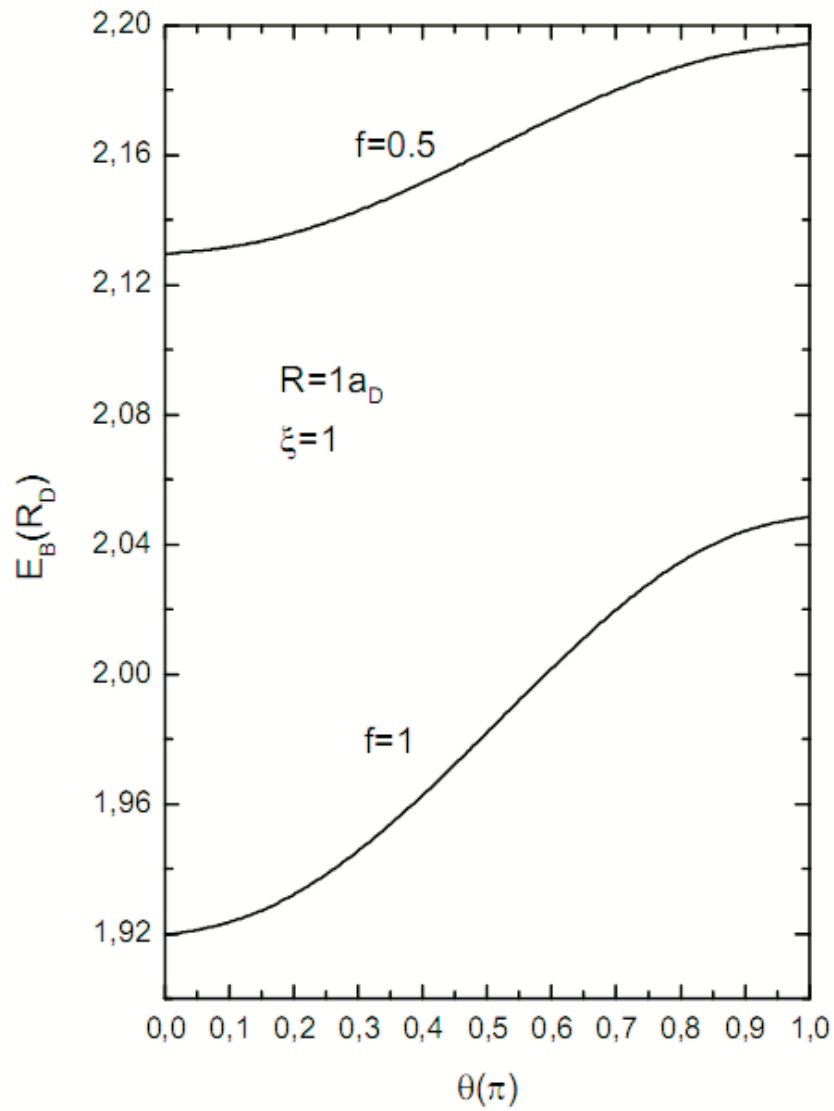


Figura 6.8: Energía de enlace de un electrón ligado a una impureza en función de todos los posibles valores de la orientación del campo eléctrico ($0 \leq \theta \leq \pi$) para $R = 1 a_D$ y $f = 0$, $f = 1$. La impureza se halla en $\rho_0 = R$, $\xi = 1$

probabilidad es consistente con las interpretaciones previas que hemos hecho sobre la energía de ligadura.

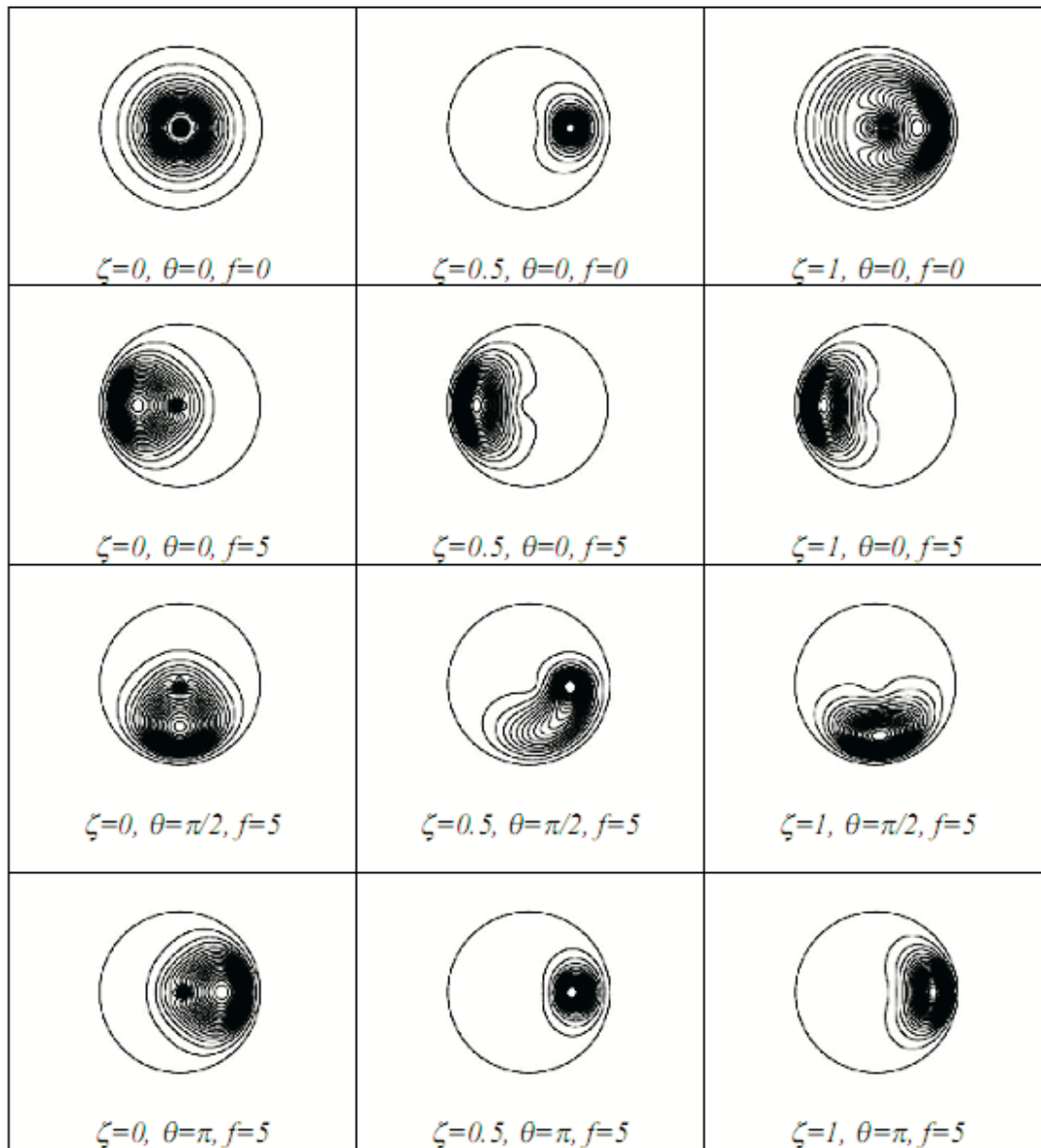


Figura 6.9: Curvas de nivel de las densidades de probabilidad electrónica obtenidas para varios campos y orientaciones del campo, y a su vez diferentes posiciones de la impureza.

6.4. Conclusión

En el estudio realizado en este capítulo hemos visto como afecta un campo eléctrico a la energía de enlace de un electrón confinado en un disco cuántico y en presencia de una impureza dadora ionizada. Hemos observado que la posición de la impureza tiene consecuencias dramáticas en lo que se refiere a la energía de ligadura

de un electrón ligado a un dador en el interior de un disco cuántico, toda vez que la dirección del campo eléctrico. Abundando en lo dicho, la densidad de probabilidad presenta unas peculiares características de asimetría y de comportamiento diagonal fruto de la competencia entre el campo y la posición de la impureza. El presente estudio puede contribuir a una mejor comprensión de los puntos cuánticos conteniendo impurezas y de las posibilidades tecnológicas que abren, siempre y cuando se pueda controlar el dopado de los puntos cuánticos. Además, el uso del campo eléctrico lateral es un potente método para localizar la posición de la impureza y controlar los niveles de energía ajustando la dirección del campo eléctrico.

Bibliografía

- [1] D. G. Gammon, E. S. Show, B. V. Shanabrook, D. S. Katzer and D. Park, Phys. Rev. Lett. **76**, 3005 (1996).
- [2] M. Notomi, T. Furuta, H. Kamada, J. Temmyo and T. Tamamura, Phys. Rev. B **53**, 15743 (1996).
- [3] H. Kamada, H. Ando, J. Temmyo and T. Tamamura, Phys. Rev. B **58**, 16243 (1998).
- [4] Y. Masumoto and T. Takagahara, *Semiconductor Quantum Dots* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2002).
- [5] D. Mocatta, G. Cohen, J. Schattner, O. Millo, E. Rabani and U. Nanin, Science **323**, 77 (2011).
- [6] G. Muñoz-Matutano, B. Alén, J. Martínez-Pastor, L. Seravalli, P. Frigeri and S. Franchi, Nanotechnology **19**, 145711 (2008).
- [7] V. A. Fonoberov and A. A. Balandin, Appl. Phys. Lett. **85**, 5971 (2004).
- [8] V. A. Fonoberov and A. A. Balandin, Phys. Rev. B **85**, 195410 (2004).
- [9] P. M. Koenraad and M. E. Flatté, Nature Materials **10**, 91 (2011).
- [10] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981).
- [11] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1486 (1996).
- [12] G. Lamouche and Y. Lépine, Phys. Rev. B **51**, 1950 (1995).

- [13] M. Singh, V. Rajan and V. A. Singh, *Int. J. Mod. Phys. B* **14**, 1753 (2000).
- [14] A. H. Rodríguez, C. Trallero-Giner, S. E. Ulloa and J. Marin-Antuña, *Phys. Rev. B* **63**, 125319 (2001).
- [15] P. Lelong and G. Bastard, *Solid State Commun.* **98**, 819 (1996).
- [16] D. M. T. Kuo and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* **61**, 11051 (2000).
- [17] M. Califano and P. Harrison, *Phys. Rev. B* **61**, 10959 (2000).
- [18] Ch. Bose, *J. Appl. Phys.* **83**, 3089 (1998).
- [19] H. A. Kassim, *J. Phys. Condens. Matter* **19**, 036204 (2007).
- [20] J. L. Movilla and J. Planelles, *Phys. Rev. B* **71**, 0753190 (2005).
- [21] J. Silva-Valencia and N. Porrás-Montenegro, *J. Appl. Phys.* **81**, 901 (1997).
- [22] I. F. I. Mikhail, I. M. M. Ismail, *phys. stat. sol. (b)* **244**, 3647 (2007).
- [23] G. Wang and P. Zhang, *J. Appl. Phys.* **103**, 063713 (2008).
- [24] Jian-Hui Yuan and Chao Liu, *Physica E* **41**, 41 (2008).
- [25] F. Dujardin, A. Oukerroum, E. Feddi, J. Bosch Bailach, J. Martínez-Pastor and M. Zazi, *J. Appl. Phys.* **111**, 034317 (2012).
- [26] E. Assaid, E. Feddi, M. Khaider, F. Dujardin and B. Stébé, *Physica Scripta* **63**, 329 (2001).
- [27] A. Oukerroum, E. Feddi, J. Bosch Bailach, J. Martínez-Pastor, F. Dujardin and E. Assaid, *J. Phys. Condens. Matter* **22**, 375301 (2010).
- [28] S. Ritter, P. Gartner, N. Baer and F. Jahnke, *Phys. Rev. B* **76**, 165302 (2007).
- [29] M. E. Reimer, M. Korkusinski, D. Dalacu, J. Lefebvre, J. Lapointe, P. J. Poole, G. C. Aers, W. R. McKinnon, P. Hawrylak and R. L. Williams, *Phys. Rev. B* **78**, 195301 (2008).

- [30] N. V. Lien and N. M. Trinh, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, 2563 (2001).
- [31] A. F. Terzis and S. Baskoutas, *Journal of Physics: Conference Series* **10**, 77 (2005).
- [32] E. Feddi, E. Assaid, F. Dujardin, B. Stébé and J. Diouri, *Physica Scripta* **62**, 88 (2000).
- [33] Wenfang Sie and Qiao Xie, *Physica B* **404**, 1625 (2009).
- [34] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Dover publications, Inc. New York, 1972).
- [35] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [36] Weiming Que, *Phys. Rev. B* **45**, 11036 (1992).
- [37] J. El Khamkhami, E. Feddi, E. Assaid, F. Dujardin, B. Stébé and J. Diouri, *Physica E* **15**, 99 (2002).

Capítulo 7

Efecto del campo magnético sobre el complejo excitónico (D^+, X) embebido en una esfera cuántica

7.1. Introducción

El estudio de las propiedades optoelectrónicas de puntos cuánticos dopados con impurezas ha despertado un notable interés por sus posibles aplicaciones tecnológicas, destacando entre ellos los dispositivos de generación de fotones únicos y de pares de fotones entrelazados. La incorporación de una impureza a una nanoestructura cuántica afecta de manera dramática a sus propiedades ópticas, al igual que su ubicación dentro de ella.

En puntos cuánticos el confinamiento da lugar a una mayor superposición entre las funciones de onda del electrón y el hueco y en consecuencia los complejos excitónicos (D^+, X) , (D^0, X) , (A^-, X) y (A^0, X) se hallan más ligados que en el semiconductor masivo. Es de esperar pues que resulte más fácil observar excitones ligados en estructuras de baja dimensión. Desde la primera predicción [1] de un excitón ligado a una impureza dadora (D^+, X) , se ha trabajado tanto en modelos experimentales como teóricos. El análogo en física atómica correspondiente al complejo (D^+, X) sería el ión H_2^+ . En semiconductores tridimensionales se ha probado

mediante métodos variacionales y dentro de la aproximación de la masa efectiva que el complejo (D^+, X) es estable solo para valores de la relación entre la masa del electrón y el hueco $\sigma = m_e^*/m_h^*$ menores que un determinado valor crítico $\sigma_c = 0.426$ [2]. Sin embargo para el caso bidimensional Stauffer y Stébé [3, 4] han demostrado que este complejo es estable para $\sigma \leq \sigma_c = 0.88$, un valor que es más del doble del obtenido para el caso tridimensional.

Más recientemente, el complejo (D^+, X) se ha estudiado con más profundidad en semiconductores de baja dimensionalidad. Usando una aproximación variacional, los mismos autores [5] han calculado la energía del estado fundamental del (D^+, X) en un pozo cuántico de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs con barreras finitas en función de la anchura del pozo y del porcentaje de aluminio. En puntos cuánticos esféricos, Stébé *et al.* [6, 7] han estudiado teóricamente las propiedades electrónicas y ópticas del complejo (D^+, X) en función del radio de la esfera y de la relación de masas efectivas, en concreto la fuerza de oscilador y la integral óptica para diferentes valores de σ . Estos autores han demostrado que el confinamiento cuántico da lugar a una gran fuerza de oscilador en comparación con los semiconductores masivos. Xie [8] ha estudiado la energía de enlace del (D^+, X) usando un potencial de confinamiento parabólico. Sus resultados muestran que este complejo no forma un estado ligado cuando la distancia entre el ion fijo positivo sobre el eje z y el plano del punto cuántico es menor de 0.2 nm. Liu *et al.* [9] han calculado la energía de enlace del (D^+, X) en pozos cuánticos de GaAs/Al_xGa_{1-x} con la impureza dadora localizada en el centro y en el borde del pozo. Sus resultados muestran un incremento de la energía de enlace conforme el tamaño del pozo crece hasta los 30Å, tras lo cual la energía de enlace disminuye. Con un modelo parabólico, Xie *et al.* [10] proponen un procedimiento basado en la resolución de la ecuación de Schrödinger usando una aproximación adiabática hiperesférica para la determinación de la energía de enlace del complejo (D^+, X). Este modelo es estable para cualquier valor de σ . Más reciente es el trabajo de Avetisyan *et al.* [11] en el que se calcula la energía de enlace del (D^+, X) en un punto cuántico usando modelos con barreras finitas e infinitas con potencial parabólico. Se trata también de un modelo variacional con aproximación

de la masa efectiva.

Baskoutas *et al.* [12] han calculado la energía de transición óptica, energía de enlace y tasa de recombinación radiativa para el (D^+, X) en un pozo cuántico bidimensional usando el formalismo de de Hartree con el método *Potential Morphing Method* (PMM). Sus resultados nos muestran que el (D^+, X) es inestable para R menor que un radio crítico R_c que depende de la posición de la impureza. Como ejemplo para la impureza a 0.2 nm del centro de la esfera el radio crítico es de aproximadamente 3 nm, mientras que si se desplaza 1 nm el radio crítico pasa a ser de 7 nm. Niculescu *et al.* [17] han empleado un modelo sencillo basado en un procedimiento perturbativo-variacional a fin de investigar el estado fundamental del complejo (D^+, X) en un pozo cuántico parabólico. Estos autores usaron un potencial apantallado para la interacción entre el dador ionizado y el hueco. Se observan dos efectos: primero una rotura de degeneración de los estados para impurezas simétricamente posicionadas en el pozo y, segundo, la existencia de estados ligados que dependen del potencial apantallado y de la intensidad del campo eléctrico.

Entre las investigaciones experimentales podemos citar las medidas de fotoluminiscencia realizadas sobre capas epitaxiales de GaN [13, 14], donde B. Santic y R. A. Mair identifican el (D^+, X) a partir de una línea relativa a la recombinación de excitones ligados a donantes ionizados superficiales, en buen acuerdo con las predicciones teóricas. Fonoverov y Baladin [15] intentan explicar el origen de la fotoluminiscencia ultravioleta en puntos cuánticos de ZnO. Calculan las transiciones relativas a un excitón confinado y a un excitón ligado a un donante ionizado o impureza aceptora localizada en la superficie del punto cuántico. El interés de su modelo estriba en que usan un modelo multibanda para la masa efectiva. Meyer *et al.* [16] demuestran que para el ZnO la energía del complejo excitónico sigue la regla de Haynes $E(D^+, X) = 0,5 E_D - 23,0 (meV)$ y $E(D^0, X) = 0,37 E_D - 4,2 (meV)$ para excitones ligados a un donante ionizado y neutro respectivamente, siendo E_D la energía de enlace de la impureza dadora.

La aplicación de un campo magnético externo permite establecer la diferencia entre los niveles energéticos del donante. Cuando la diferencia es igual a la energía

del fonón LO tiene lugar la interacción resonante. En consecuencia, la espectroscopia infrarroja de los estados del donante en un campo magnético dará información acerca de la interacción entre electrones y fonones. Además, el desplazamiento diamagnético es una potente herramienta para evaluar la masa efectiva reducida y para demostrar el origen de la fotoluminiscencia.

El efecto de un campo magnético sobre los electrones y los huecos y, en general, sobre los excitones ha sido ampliamente estudiado en la literatura, toda vez que también experimentalmente. Los estudios se han focalizado tanto en los materiales masivos como en estructuras semiconductoras de dimensionalidad reducida. A primera vista, y teniendo en cuenta la naturaleza hidrogenoide del excitón los efectos que cabe esperar son similares a sus homólogos en física atómica. Por una parte, cuando el campo magnético aplicado es débil, una primera aproximación la obtenemos mediante teoría de perturbaciones independientes del tiempo. Es decir, la corrección energética viene dada por el valor esperado del término magnético. Esto es lo que normalmente conocemos como efecto Zeeman, el cual da lugar a un desdoblamiento de los niveles electrónicos en función de los números cuánticos magnéticos.

Por otra parte, cuando el campo magnético es intenso, el potencial vector asociado al campo magnético aplicado da lugar a un momento lineal, $\frac{e}{c} \vec{A}$, que ha de tenerse en cuenta al evaluar la energía cinética del excitón. En tal caso el modelo conduce a la cuantización de las órbitas ciclotrónicas, siguiendo con la analogía atómica, que a su vez se conoce como niveles de Landau.

En la literatura se han estudiado los efectos del campo magnético sobre los complejos excitónicos en nanoestructuras cuánticas semiconductoras, pero pocos trabajos hay que hayan tratado el caso de una impureza que ocupa una posición arbitraria. En este capítulo vamos a dar cuenta del efecto de un campo magnético sobre los niveles de energía del excitón en el interior de una esfera cuántica ocupada por una impureza D^+ localizada en el centro de la esfera. En un trabajo posterior analizaremos la forma en que afecta la posición de la impureza a los niveles electrónicos. Primero analicemos algunos de los trabajos teóricos que consideramos más

relevantes para el presente trabajo.

Corella *et al.* [18] hacen el estudio de un electrón confinado en una esfera con barreras de potencial infinitas y con una impureza hidrogenoide. Usando un modelo variacional con un parámetro y cuando la impureza se halla en el centro, la energía de enlace del estado fundamental aumenta conforme el radio del punto cuántico disminuye. La aplicación del campo magnético da lugar a un aumento de la energía en el caso de radios grandes. A medida que la impureza se aparta del centro la energía de enlace del estado fundamental es menor que cuando se halla en el centro y crece con el campo magnético de forma más suave.

K. L. Janssens *et al.* [19] hacen un estudio del excitón confinado en un disco cuántico con campo magnético. Utilizan un modelo de diferencias finitas para calcular la energía del estado fundamental y la de los excitados, al igual que el desplazamiento diamagnético. Sus modelos dan cuenta de un aumento tanto de la energía del estado fundamental como la de enlace conforme el campo magnético aumenta. Sus resultados del desplazamiento diamagnético están de acuerdo con los resultados experimentales de otros autores. El campo magnético hace que la energía de los excitones tienda a un valor constante a radios grandes, comportamiento que es más destacado que cuando no hay campo aplicado.

Por su parte Z. Xiao [20] tratan el problema del excitón confinado en una esfera y con potencial de confinamiento parabólico. El aumento del potencial parabólico conlleva una notable localización de electrones y huecos al igual que incrementa el acoplamiento coulombiano. El campo magnético tiene como efecto que la energía de enlace sea más importante.

Un interesante análisis del corrimiento diamagnético en excitones con cálculos del coeficiente diamagnético γ_2 lo realizan Walck *et al.* [21] en diferentes geometrías. Mediante un método basado en transformaciones *gauge* generalizadas, estos autores llegan a encontrar expresiones analíticas para γ_2 , lo que permite conocer el comportamiento de la energía excitónica en presencia de campos magnéticos.

En hilos cuánticos, y con resultados similares tenemos los trabajos de Gang Li *et al.* [22] y Galván-Moya *et al.* [23]. Mediante métodos variacionales y con confi-

namientos finito e infinito estudian el comportamiento de excitones confinados en presencia de campos magnéticos dirigidos a lo largo del eje del cilindro. Una vez más el campo externo da lugar a un aumento de la energía de enlace excitónica. Es de destacar el hecho de que para confinamiento finito la energía de enlace alcanza un máximo para un determinado valor del campo magnético.

Los estados excitados de un excitón confinado en un disco en presencia de campo magnético y con potencial de confinamiento gaussiano los analizan respectivamente Barticevic *et al.* [24] y Juan Gu *et al.* [25]. Las curvas que representan la energía de enlace excitónica en función del tamaño del disco y del campo aplicado son coherentes con modelos anteriores. Cuando el potencial de confinamiento es gaussiano el espectro de energías excitónico es más sensible al campo magnético que al confinamiento.

Los puntos cuánticos acoplados y con campo vertical se estudian en otro artículo de Janssens *et al.* [26]. Su trabajo presenta un cálculo del valor de la integral óptica en función del potencial de confinamiento para electrones y huecos y la forma en que varía el espectro según la distancia entre puntos cuánticos. Tienen lugar transiciones del estado fundamental debidas al momento angular y roturas espontáneas de simetría a consecuencia de la interacción de Coulomb y el campo magnético.

Hay otros autores que hacen un análisis más complejo y difícil de interpretar, como es el caso del artículo de H. Akbas *et al.* [27] en el que define la energía de enlace normalizada.

La mayoría de autores usan la aproximación de la masa efectiva en sus cálculos con campo magnético. No obstante hay modelos que tienen en cuenta la variación de aquella en función de éste. Para campos magnéticos intensos es de esperar un acoplamiento fuerte entre bandas que dé lugar a masas efectivas que sean función del campo magnético. En el laboratorio los campos magnéticos pueden alcanzar de manera puntual y momentánea intensidades de hasta 200 T (en régimen pulsado), que se usan precisamente para estudiar la variación de la masa efectiva. En el caso de barreras de potencial existe una discontinuidad de la masa efectiva dentro y fuera de la barrera que depende del campo magnético. H. Asnani *et al.* [28] hacen un

riguroso tratamiento comparando los casos para una, dos y tres dimensiones y en cómo afecta el campo magnético a la manera en que las funciones de onda penetran la barrera.

En un trabajo realizado por Gerlach *et al.* [29] se emplea un método perturbativo modificado para encontrar soluciones analíticas exactas para excitones en presencia de campos magnéticos. Su método permite obtener a su vez el comportamiento asintótico para valores de \mathbf{B} pequeños y grandes.

Con relación a la presencia de impurezas en puntos cuánticos también hay bibliografía, por lo que vamos a comentar una selección de bibliografía. Podemos dividirlos en dos grandes grupos. El primero de ellos analiza el caso de un electrón (confinado en el punto cuántico) en presencia de una impureza y de un campo magnético externo, mientras que en el segundo caso se considera un excitón confinado juntamente con la impureza. El artículo de Ribeiro *et al.* analiza la influencia de los campos eléctrico y magnéticos sobre puntos cuánticos con pozos de potencial en el eje z y oscilador armónico en el plano [30]. Al igual que en otros artículos la energía de enlace a impurezas dadoras presenta máximos para determinados valores del campo y en posiciones concretas.

Ferreira *et al.* llegan a la conclusión de que la energía de enlace del estado fundamental decrece monótonamente conforme la impureza se mueve perpendicularmente al plano $x - y$ en puntos cuánticos [31]. Si la impureza se desplaza radialmente la energía también disminuye ya sea para campos débiles o elevados. Igual comportamiento se obtiene para los estados excitados.

Los complejos (D^+, X) los estudian L. Liu *et al.* [32], W. Xie *et al.* [33], B. Stébé *et al.* [34][35] y A. P. Djotyan *et al.* [36] entre otros. Varios de ellos tratan los diferentes procesos de disociación, $(D^+, X) \rightarrow D^+ + X$ y $(D^+, X) \rightarrow D^0 + h$, obteniendo diferentes valores cuando se trata de la energía de enlace. En [33] se hace un interesante trabajo del cálculo de los coeficientes de absorción óptica, tanto lineal como a tercer orden, cuyos valores dependen más del confinamiento y, de manera algo más débil, del campo magnético. En cualquier caso los dos coeficientes se desplazan hacia altas energías a campos magnéticos mayores. El trabajo de Stébé

[35] compara las energías en 2D y 3D y su otro artículo [34] trata de la estabilidad de los complejos donador-excitón.

El modelo que vamos a desarrollar en el presente artículo usa un formalismo similar al de los artículos de Stébé. Los campos externos, como se ha dicho más arriba, tienden a mezclar los estados. El procedimiento se aplica tanto para campo eléctrico como magnético, y la mejor manera de obtener con el modelo la rica fenomenología observada experimentalmente consiste en una buena elección de la función de onda de prueba variacional [37]. Se analiza primero el caso de impurezas sin campo magnético, hallando los parámetros variacionales geométricos que minimizan la energía del sistema. Con campo magnético se añade otra función variacional que da cuenta de esta nueva interacción, procediendo de nuevo a la minimización correspondiente. Con las funciones así calculadas ya se pueden determinar parámetros como el coeficiente diamagnético y la fuerza de oscilador de las transiciones ópticas, como magnitudes más relevantes. Se ha analizado el caso de una impureza que se desplaza a lo largo del eje z y un campo \mathbf{B} aplicado según el eje z .

Se ha aplicado al caso de puntos cuánticos coloidales de CdSe (en esférico) donde existe un gran interés actual y se realizan mayor número de experimentos de espectroscopia óptica y de aplicaciones optoelectrónicas, si bien es fácilmente trasladable a puntos cuánticos coloidales basados en otros materiales II-VI (CdSe, CdTe, CdS, ZnSe, ZnS y ZnO, como los más importantes). Las funciones de onda variacionales empleadas en nuestro trabajo son formalmente similares a la de los otros autores, en lo que a la parte variacional se refiere. La diferencia estriba en las funciones de onda para describir el problema. Nuestro modelo parte del hecho de que la interacción con el campo magnético da lugar a una superposición de estados, lo que justifica mejor la fenomenología del sistema.

Los resultados de este capítulo constituyen un *preprint* que será enviado para su publicación en breve.

7.2. Formalismo teórico

Vamos a centrar nuestro problema en un sistema con geometría esférica como el representado en la figura 7.1. La impureza D^+ está en un primer momento en el centro de la esfera y luego haremos variar su posición a lo largo del eje z . Esta posición la denotaremos mediante el parámetro adimensional $\zeta = \rho/R$, así variando ζ de 0 a 1 la impureza se mueve del centro al borde superior de la esfera. Posteriormente el modelo contemplará el caso en el que la impureza se desplace a lo largo del eje y .

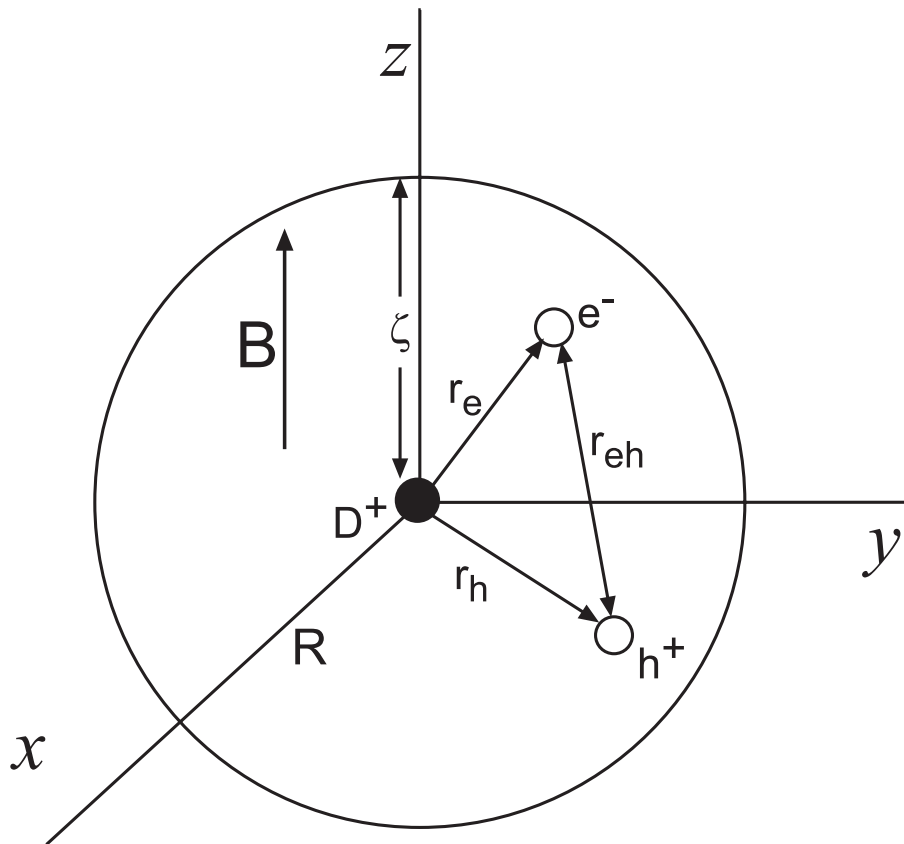


Figura 7.1: Geometría de una esfera cuántica con impureza D^+ y con campo magnético aplicado según el eje z . El parámetro ζ especifica la posición de la impureza a lo largo del eje. Las coordenadas de Hylleraas r_e , r_h , r_{eh} , z_e y z_h se discuten en el texto.

El hamiltoniano excitónico se puede escribir como

$$H_{(D^+,X)} = T_e + T_h + V_C + M \quad (7.1)$$

donde T_e y T_h son respectivamente la energía cinética del electrón y el hueco, V_C es la interacción coulombiana que tiene en cuenta tanto la atracción electrón-hueco como electrón-impureza, como la repulsión entre impureza y hueco. M es el término que describe la interacción con el campo magnético externo. Los detalles del cambio de unidades pueden consultarse en el apéndice B. Este término es pues

$$M = \frac{\Gamma^2}{4(1+\sigma)} [r_e^2 - z_e^2 + \sigma(r_h^2 - z_h^2)] \quad (7.2)$$

Tomando como unidades de energía la correspondiente al excitón ($R^* = \mu e^4/2 \varepsilon^2 \hbar^2$) y como distancia las del radio de Bohr ($a^* = \varepsilon \hbar^2/\mu e^2$), el hamiltoniano 7.1, se puede escribir como

$$H_{(D^+, X)} = -\frac{1}{1+\sigma} \Delta_e - \frac{\sigma}{1+\sigma} \Delta_h + \frac{2}{r_h} - \frac{2}{r_e} - \frac{2}{r_{eh}} + \frac{\Gamma^2}{4(1+\sigma)} [r_e^2 - z_e^2 + \sigma(r_h^2 - z_h^2)] \quad (7.3)$$

con $\sigma = m_e^*/m_h^*$ y $\Gamma = \hbar \omega_c/2R^*$, siendo ω_c la frecuencia ciclotrón

$$\omega_c = \frac{eB}{\mu} \quad (7.4)$$

El hamiltoniano 7.3 puede obtenerse teniendo en cuenta lo expuesto en la sección 3.7.2. En el contexto analizado el sistema satisface simetría axial, así que es oportuno introducir las coordenadas de Hylleraas, $\{r_e, r_h, r_{eh}, z_e, z_h\}$, con lo que la laplaciana Δ_e pasa a ser

$$\begin{aligned} \Delta_e = & -\frac{\partial^2}{\partial r_e^2} - \frac{\partial^2}{\partial r_{eh}^2} - \left(\frac{r_e^2 - r_h^2 + r_{eh}^2}{r_e r_{eh}} \right) \frac{\partial^2}{\partial r_e \partial r_{eh}} \\ & - \frac{2}{r_e} \frac{\partial}{\partial r_e} - \frac{2}{r_{eh}} \frac{\partial}{\partial r_{eh}} - 2 \frac{z_e}{r_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e \partial r_e} \\ & - 2 \left(\frac{z_e - z_h}{r_{eh}} \right) \frac{\partial^2}{\partial z_e \partial r_{eh}} - \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \end{aligned} \quad (7.5)$$

siguiendo una línea similar a la expuesta en el apéndice D. Para el hueco la expresión es idéntica pero haciendo la sustitución $e \rightarrow h$.

En estas coordenadas recordemos que el elemento de volumen que hay que tener en cuenta para realizar todas las integrales es

$$dV = \frac{8 \pi r_e r_h r_{eh} dr_e dr_h dr_{eh} dz_e dz_h}{\sqrt{4(r_e^2 - z_e^2)(r_h^2 - z_h^2) - (r_e^2 + r_h^2 - r_{eh}^2 - 2 z_e z_h)^2}} \quad (7.6)$$

La ecuación de Schrödinger del excitón confinado en una nanoestructura en presencia de una impureza D^+ es

$$H_{(D^+,X)} \Psi_X(r_e, r_h, r_{eh}, z_e, z_h) = E_{(D^+,X)} \Psi_X(r_e, r_h, r_{eh}, z_e, z_h) \quad (7.7)$$

La función de onda que escogemos es

$$\Psi_X = \sum_{mnp} C_{lmnpq} |lmnpq\rangle \quad (7.8)$$

ya que el campo magnético da lugar a una superposición de los estados y donde C_{lmnpq} son coeficientes lineales y las funciones de onda que representan a los estados son

$$|lmnpq\rangle = r_e^l r_h^m r_{eh}^n z_e^p z_h^q e^{-\beta r_e - \eta r_{eh}} j_0(r_e) j_0(r_h) \quad (7.9)$$

donde $j_0(r_e)$ y $j_0(r_h)$ son las funciones esféricas de Bessel de orden cero que tienen la forma $j_0(r_i) = \frac{\sin(\frac{\pi r_i}{R})}{\frac{\pi r_i}{R}}$. El producto $r_e^l r_h^m r_{eh}^n$ tiene en cuenta la correlación espacial entre las diferentes partículas y el producto $z_e^p z_h^q$ se introduce para tener en cuenta la posible distorsión que pueda producir el campo magnético sobre la función de onda; l, m, n, p y q son números enteros positivos o iguales a cero [38]. La primera exponencial, $e^{-\beta r_e}$ describe la correlación espacial coulombiana entre el electrón y la impureza dadora, mientras que la segunda, $e^{-\eta r_{eh}}$, representa la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco. β y η son parámetros variacionales. Se podría argumentar que la interacción coulombiana del dador con el hueco también debería contener una dependencia exponencial, pero como los electrones son los que llevan gran parte de la dinámica excitónica, no es perentorio incluirlo en la función de onda, pues de hacerlo se complicaría sobremanera el cálculo numérico del problema.

La expresión dada para los estados 7.9 es aplicable también si estamos tratando con un campo eléctrico, ya que en presencia de éste se mezclan los estados. Si los campos no son muy intensos y se preserva bastante la simetría en el eje Z podemos tomar como condición para la superposición de estados que $l + m + n \leq 2$ y que $p = q = 0$ [39]. Así pues podemos escribir con bastante aproximación la función de onda de nuestro sistema como

$$\Psi_X = e^{-\beta r_e - \eta r_{eh}} (1 + r_e + r_h + r_{eh}) j_0(r_e) j_0(r_h) \quad (7.10)$$

La energía del estado fundamental se obtiene usando el método variacional para hallar los parámetros β y η que minimizan la energía del sistema como se ha hecho otras veces. Esto último es cierto para el caso de campo magnético nulo. La presencia del campo magnético añade otra modificación a la función de onda que podemos expresar, teniendo en cuenta la dependencia funcional del término magnético M , como $e^{-\alpha \Gamma^2 (r_e^2 - z_e^2 + r_h^2 - z_h^2)}$ con lo que la función de onda adecuada para analizar el excitón en presencia de un campo magnético externo toma la forma

$$\Psi_X^\Gamma = e^{-\beta r_e - \eta r_{eh}} (1 + r_e + r_h + r_{eh}) j_0(r_e) j_0(r_h) e^{-\alpha \Gamma^2 (r_e^2 - z_e^2 + r_h^2 - z_h^2)} \quad (7.11)$$

El término variacional magnético que depende del parámetro α tiene esa dependencia con las distancias ya que esa es la forma que tiene el término magnético M . Se podría argüir que la dependencia funcional de 7.11 sería más correcta si contuviera el coeficiente σ que da cuenta de la relación entre las masas del electrón y el hueco en la parte exponencial. No obstante como la dinámica principal del sistema la manifiestan los electrones, el parámetro α ya engloba de manera bastante adecuada gran parte de las propiedades magnéticas del sistema. Esta manera de proceder es consecuencia de los modelos usados en física atómica. Para ello puede consultarse en el libro de Galindo y Pascual [40], el punto 10.9, donde hace un buen análisis de este procedimiento de cálculo con numerosos ejemplos. Una vez determinados los parámetros β y η se aplica de nuevo el método variacional para obtener el parámetro α .

La función de onda 7.11 es válida en el caso de que la impureza se halle en el centro de la esfera. Si ésta se desplaza a lo largo del eje z hay que realizar modificaciones pues ahora la distancia de la impureza al electrón es diferente. La figura 7.2 muestra como determinar r'_e .

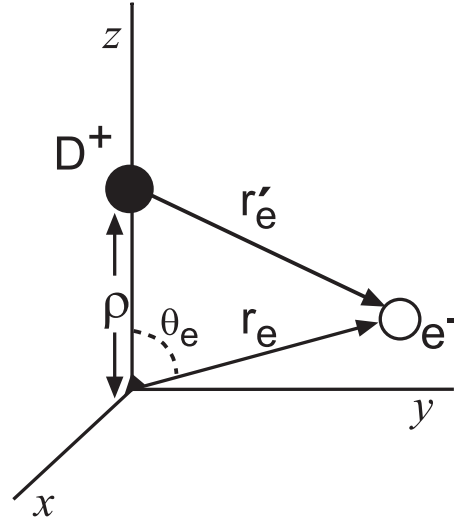


Figura 7.2: Geometría de una esfera cuántica con impureza D^+ excéntrica. La distancia de la impureza al electrón se representa por r'_e . Para el hueco sería igualmente r'_h . No aparece en el dibujo por simplicidad.

Aplicando el teorema del coseno al triángulo formado por el centro de la esfera, la posición de la impureza y la posición del electrón tenemos que

$$r'_e = \sqrt{r_e^2 + \rho^2 - 2r_e\rho \cos \theta_e} \quad (7.12)$$

y como $z_e = r_e \cos \theta_e$ y $\rho = \zeta R$ sustituyendo en 7.12

$$r'_e = \sqrt{r_e^2 + \zeta^2 R^2 - 2\zeta R z_e} \quad (7.13)$$

Para el hueco tendremos igualmente

$$r'_h = \sqrt{r_h^2 + \zeta^2 R^2 - 2\zeta R z_h} \quad (7.14)$$

Por tanto el término de interacción coulombiana que hay que considerar en el hamiltoniano es ahora

$$V_c = \frac{2}{r'_h} - \frac{2}{r'_e} - \frac{2}{r_{eh}} \quad (7.15)$$

Siguiendo un razonamiento análogo la parte variacional que caracteriza la función de onda que relaciona al electrón con la impureza será ahora

$$e^{-\beta\sqrt{r_e'^2 + \zeta^2 R^2 - 2\zeta R z_e}} \quad (7.16)$$

La energía del complejo excitónico (D^+, X) se determina minimizando el funcional $\langle \Psi_X | H_{(D^+, X)} | \Psi_X \rangle / \langle \Psi_X | \Psi_X \rangle$, es decir

$$\langle E_{(D^+, X)} \rangle = \text{mín} \frac{\langle \Psi_X | H_{(D^+, X)} | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} \quad (7.17)$$

La energía de correlación del complejo (D^+, X) se define como

$$E^C = E_e + E_h - \langle E_{(D^+, X)} \rangle \quad (7.18)$$

donde E_e y E_h son las energías del electrón y hueco consideradas como partícula única e independiente. De igual manera, si consideramos el excitón solo sin impureza, su energía de enlace es

$$E_X^B = E_e + E_h - \langle E_X \rangle \quad (7.19)$$

y la energía de enlace del complejo (D^+, X) tiene por expresión

$$E_{(D^+, X)}^B = E^C - E_X^B = \langle E_X \rangle - \langle E_{(D^+, X)} \rangle \quad (7.20)$$

donde hemos usado 7.18 y 7.19.

7.3. Resultados y discusión

Vamos a analizar primero el complejo (D^+, X) en relación al excitón. Nos centraremos en el caso de semiconductores del grupo II-VI para los que se ha tomado

$\sigma = 0.29$ (CdSe). La figura 7.3 representa las energías total del excitón y la del complejo (D^+, X) en función del tamaño de la esfera y para diferentes valores del campo magnético con la impureza en el centro de la esfera.

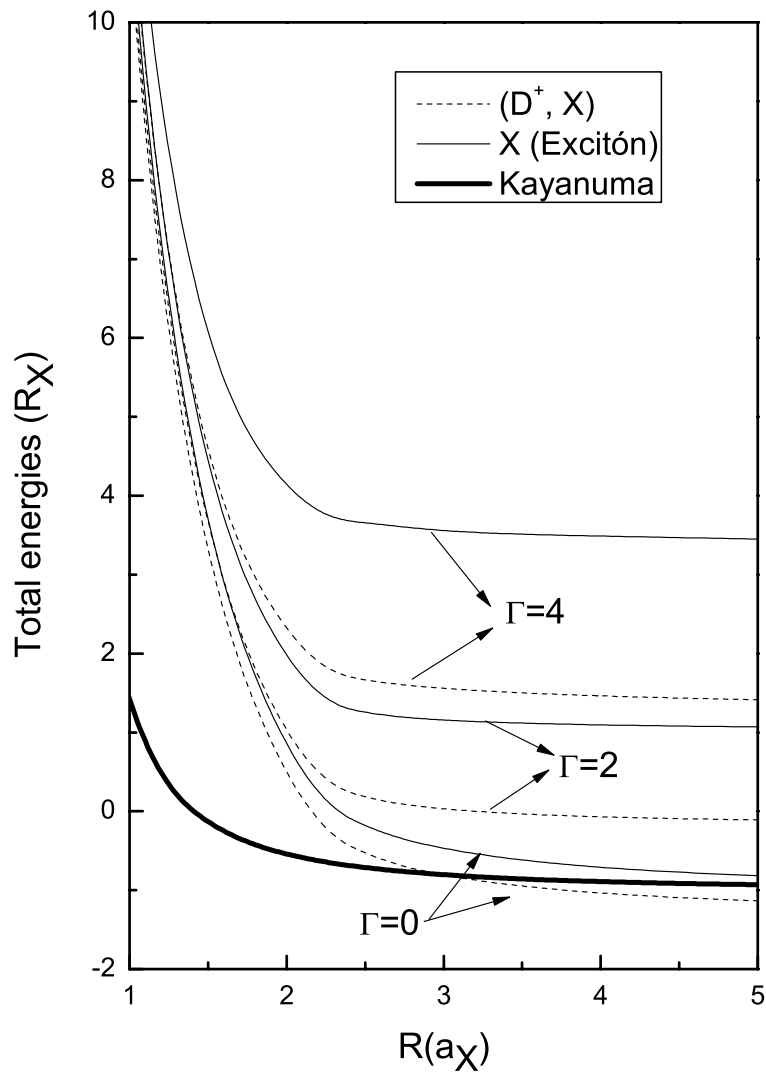


Figura 7.3: Comparación entre las energías del excitón y del complejo (D^+, X) en función del tamaño de la esfera cuántica y para diferentes valores del campo magnético. Se incluye también la curva asintótica de Y. Kayanuma (7.21) en línea continua. La impureza se halla en el centro de la nanoestructura.

Los perfiles de la curva excitónica en ausencia de campo magnético se ajustan

bien a la expresión asintótica dada por Y. Kayanuma [41]

$$E_X = -1 + \frac{\sigma}{(1 + \sigma)^2} \frac{\pi^2}{R^2} \quad (7.21)$$

expresada en unidades excitónicas, aplicable para el excitón sin campos externos y válida para $R \rightarrow \infty$.

En nuestro caso particular, con $\sigma = 0.29$ y $\varepsilon = 6.1$ (CdSe), un valor de $\Gamma = 1$ equivale a un campo magnético de $B \simeq 72$ T. Sin aplicar campo magnético vemos que para el caso excitónico la energía tiende al valor constante de -1 en unidades de R_X^* que es el correspondiente al semiconductor masivo. En esferas pequeñas el confinamiento es más importante que la interacción magnética. A medida que crece su radio la diferencia entre la energía del complejo y la del excitón es mayor conforme aumenta el campo magnético y el complejo (D^+, X) es más sensible al campo magnético que el excitón. Independientemente de la aplicación o no del campo magnético la energía total del complejo es siempre menor que la del excitón. Esto puede explicarse por el hecho de que al aumentar el tamaño, la impureza D^+ y el hueco que forman el excitón tienden a alejarse lo máximo uno del otro y esto influye a su vez sobre la posición media del electrón que ha de resultar lógicamente mayor y por tanto la energía del complejo menor.

El campo magnético da lugar a una disminución del tamaño de las órbitas ciclotrónicas, el tamaño del excitón disminuye y se encuentra más cerca de la impureza en promedio. La situación es equivalente a un mayor confinamiento. De hecho el campo magnético, al acoplarse al momento de los electrones da lugar a un potencial oscilador armónico cuya frecuencia se ve aumentada por la frecuencia ciclotrónica.

La figura 7.4 muestra la variación del incremento de energía asociado al campo ($\Delta E = E(B) - E(0)$) en función del campo magnético para dos tamaños diferentes, tanto para el excitón como para el complejo (D^+, X).

La energía del complejo aumenta conforme lo hace el campo magnético. Esto es lógico ya que el campo hace que las partículas estén más cerca una de la otra (el radio ciclotrónico disminuye) y por tanto se hallan enlazadas más fuertemente. Para campos pequeños domina más el confinamiento y conforme aumenta se hace

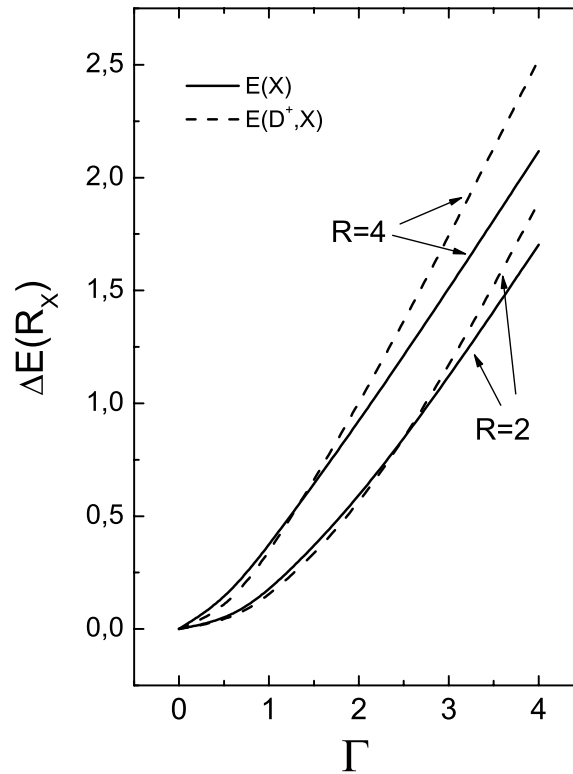


Figura 7.4: Comparación entre las energías $\Delta E = E(B) - E(0)$ del excitón y del complejo (D^+ , X) en función del campo magnético para esferas de radios $2 a_X$ y $4 a_X$.

patente una relación prácticamente lineal de la energía con el campo, debido a la formación de los niveles de Landau. La curva es similar a la obtenida por Janssens y Peeters [19]. Estos autores analizan el corrimiento diamagnético para el caso del excitón. Una definición y procedimientos de cálculo pueden verse en la referencia [42]. Cuando el campo es débil, $\Delta E_X = \beta B^2$ y el corrimiento es puramente cuadrático y $\beta = e^2 \langle \rho_{eh}^2 \rangle / 8\mu$ es el coeficiente diamagnético con $\langle \rho_{eh}^2 \rangle$ la distancia cuadrática media entre el electrón y el hueco a campo nulo y μ la masa reducida, ver fórmula 3.92. A campo elevado predomina más la dependencia lineal y Janssens y Peeters toman la fórmula

$$\Delta E_X = \frac{\beta B^2}{1 + \alpha B} \quad (7.22)$$

que ajusta muy bien a los resultados teóricos. Nuestro caso es un excitón ligado a una impureza. Hemos hecho un ajuste de los datos de la figura 7.4 a una expresión de la forma 7.22 con $R = 2$. Para el excitón $\beta = 0.21696$ y $\alpha = 0.25811$ y para el complejo $\beta = 0.15587$ y $\alpha = 0.07881$. Del valor de α obtenido para el complejo se deduce que el valor del campo magnético ha de ser más alto que en el caso excitónico para que se comporte su energía de manera lineal con el campo. No obstante el comportamiento del complejo y el excitón tiene sus diferencias. Inicialmente el excitón es más sensible al campo magnético que el complejo. A partir de determinado valor del campo magnético el comportamiento se invierte siendo desde entonces el complejo (D^+, X) más afectado por el campo. En cualquier caso se observa que la energía varía linealmente con campos elevados, siendo la pendiente mayor para el complejo que para el excitón.

En la figura 7.5 se representa el valor esperado de la distancia promedio entre el electrón y el hueco, $\sqrt{\langle \rho_{eh}^2 \rangle}$, en función del campo magnético.

Vemos claramente que para el complejo, el electrón y el hueco se hallan más separados que cuando se trata del excitón. Esto es lógico ya que el electrón con carga negativa se ve al mismo tiempo atraído por el hueco y la impureza, ambas con carga positiva. Se observa a su vez que al aumentar el campo disminuye la distancia promedio como consecuencia de la disminución del tamaño de las órbitas ciclotrónicas. Algo que resulta llamativo es que aún siendo mayor en promedio la distancia para el complejo su coeficiente diamagnético sea menor. La justificación de ello viene del hecho de que en el caso del complejo, al tratarse de un problema de tres cuerpos, más que la distancia promedio entre el electrón y el hueco hay que tener en cuenta la distancia promedio del electrón a la impureza fija. Es decir, para el cálculo del coeficiente diamagnético habría que sustituir $\langle \rho_{eh}^2 \rangle$ por $\langle \rho_e^2 \rangle$. Como caso particular, realizando el cálculo para la esfera de radio $2 a_X$ tenemos que $\langle \rho_{eh} \rangle = 1.22217$, para el electrón $\langle \rho_e \rangle = 0.83371$ y para el hueco $\langle \rho_h \rangle = 1.05762$. En el caso del excitón solo sin impureza $\langle \rho_{eh} \rangle = 1.13815$. Podemos concluir por tanto que en promedio el electrón se halla más cerca de la impureza en el complejo excitónico, por lo que su coeficiente diamagnético será menor, algo que justifican los resultados del modelo y

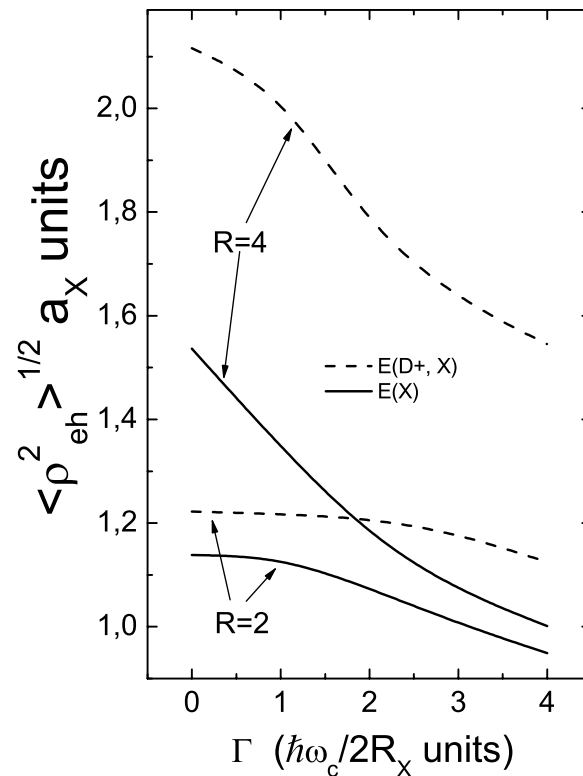


Figura 7.5: Comparación entre las distancias promedio electrón-hueco $\sqrt{\langle \rho_{eh}^2 \rangle}$ del excitón y del complejo (D^+, X) en función del campo magnético para esferas de radios $2 a_X$ y $4 a_X$.

explica los valores de β obtenidos a partir de la gráfica 7.4.

Como ya se ha apuntado anteriormente existen en este sistema tres efectos que compiten entre sí. Por una parte el confinamiento, cuya energía viene dada por la geometría de la nanoestructura y que depende del radio de la esfera. Por otra, la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco junto con la interacción con la impureza que da lugar a la aparición de tres términos, dos atractivos y uno repulsivo. Y por último la interacción con el campo magnético externo que tiende a confinar a los portadores de carga.

Una manera interesante de comparar los efectos de estas dos últimas interacciones es ver cual de ellas es la dominante en función de la geometría y en función del campo. La figura 7.6 muestra la relación entre el valor esperado del término coulombiano y

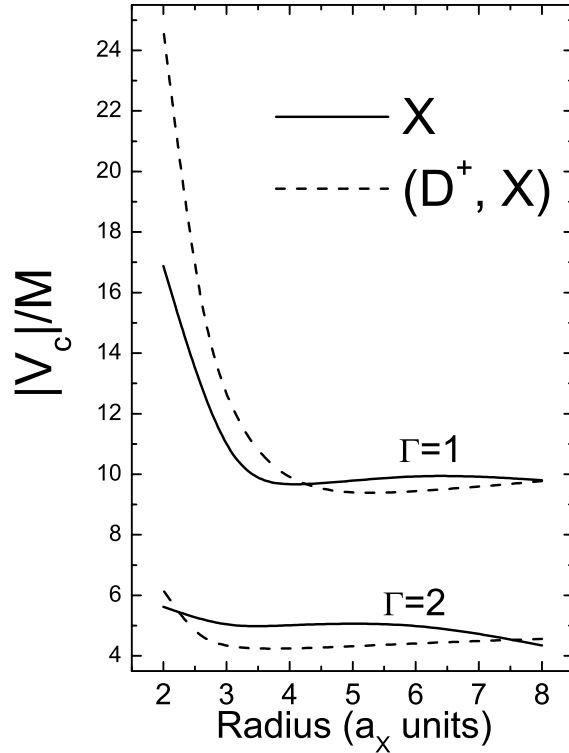


Figura 7.6: Variación del cociente entre el término coulombiano y magnético en función del tamaño de la esfera y del campo magnético, para el excitón y para el complejo (D^+, X).

magnético, $|V_C|/M$, con $V_C = \langle \Psi_{(D^+, X)} | \frac{2}{r_h} - \frac{2}{r_e} - \frac{2}{r_{eh}} | \Psi_{(D^+, X)} \rangle$ y el término magnético $M = \langle \Psi_{(D^+, X)} | \frac{\Gamma^2}{4(1+\sigma)} [r_e^2 - z_e^2 + \sigma(r_h^2 - z_h^2)] | \Psi_{(D^+, X)} \rangle$. Igualmente se representa la misma variación para el excitón solo.

El término coulombiano varía como $-\frac{1}{R}$ y el diamagnético como $\gamma_2 R^2$, por tanto en esferas pequeñas el término coulombiano domina la dinámica del sistema. A partir de cierto tamaño crítico la relación entre los dos términos es prácticamente constante siendo más importante siempre la interacción coulombiana. A campos magnéticos mayores la tendencia es similar aunque ahora la relación entre los términos es menor, por tanto conforme aumenta el campo la interacción coulombiana y magnética se hacen comparables. Esta situación es lógica ya que el campo magnético produce una disminución de las órbitas ciclotrónicas con lo que la energía coulombiana crece. A

campos aún mayores la relación disminuye lo cual indica que la interacción magnética va ganando importancia frente a la coulombiana. La relación entre los términos para el excitón tiene un comportamiento similar aunque con algunas ligeras diferencias. A radios pequeños y campos pequeños el término coulombiano es menos importante que para el caso del complejo excitónico. A radios mayores la relación es muy parecida, siendo ahora el valor de la relación entre términos mayor para el excitón.

Otra manera interesante de comparar las energías del excitón y la del complejo excitónico es estudiando la diferencia entre ellas en función del tamaño y del campo magnético. Es decir, hacer algo similar a lo que hemos hecho en la figura 7.3 pero con la diferencia $E_X - E_{(D^+,X)}$, lo que se conoce también con el nombre de energía de localización [16] o también como energía de enlace del complejo excitónico, véase la fórmula 7.20. Esto es útil también porque a menudo la energía del excitón y del complejo son muy similares y una enmascara a la otra. La figura 7.7 muestra este desplazamiento energético entre el excitón y el complejo.

Como ya hemos visto la energía del excitón es mayor que la del complejo, por tanto la diferencia de energías entre uno y otro es siempre positiva. En ausencia de campo magnético la diferencia es pequeña y disminuye con el radio de la esfera tendiendo a un valor constante. A medida que aumenta el campo magnético la diferencia es más notable y crece de manera prácticamente lineal con el radio hasta cierto valor, a partir del cual la diferencia de nuevo se mantiene constante. Todo esto es consecuente con lo observado en las otras gráficas y con los tres efectos que compiten. En esferas pequeñas el confinamiento y la interacción de Coulomb son importantes y dominan sobre los efectos magnéticos. A medida que aumenta el tamaño entran en juego las otras interacciones y la diferencia es muy notable porque es ahora el campo quien domina el escenario frente al confinamiento. En esferas grandes tanto el excitón como el complejo (D^+, X) son sistemas similares que se diferencian en un valor constante de la energía y en una respuesta y sensibilidad diferente al campo magnético. A campos elevados la figura 7.7 nos indica que hay una relación lineal entre la energía de enlace del complejo y el radio de la esfera

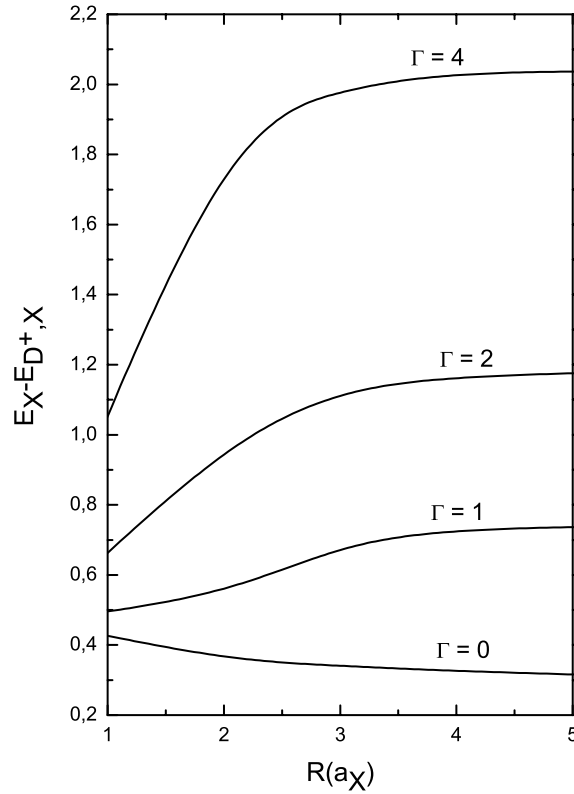


Figura 7.7: Diferencia de energías entre el excitón y el complejo excitónico (D^+, X) en función del radio de la esfera y para diferentes valores del campo magnético.

con una pendiente mayor a medida que es mayor el campo magnético aplicado. Esta tendencia se mantiene siempre hasta un determinado tamaño de la esfera a partir del cual la energía de enlace se mantiene constante.

Hasta ahora hemos supuesto que la impureza se halla en el centro de la esfera. En la literatura tenemos varios trabajos relativos a este tema en los que se muestra que su posición afecta de manera dramática a la energía del complejo. Vamos a presentar nuestros resultados de acuerdo a la formulación que hemos realizado con las expresiones 7.12–7.16. La figura 7.8 muestra como varía la energía del complejo (D^+, X) sin campo magnético y con la impureza que se desplaza a lo largo del eje z , $0 < \zeta < 1$, para tamaños diferentes. Con $\zeta = 0$ la impureza está en el centro y con $\zeta = 1$ en el borde de la esfera.

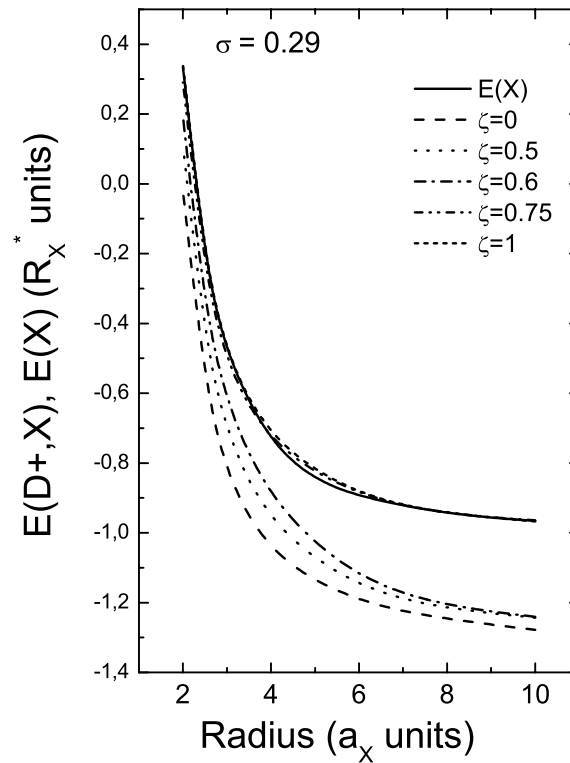


Figura 7.8: Variación de la energía del complejo excitónico (D^+, X) en función del radio de la esfera y para diferentes posiciones de la impureza a lo largo del eje z . Se ha incluido también en línea continua la curva correspondiente al excitón solo sin impureza. El campo magnético es nulo.

Se ha incluido también la curva correspondiente al excitón sin impureza para poder comparar. Como ya hemos constatado antes la introducción de la impureza afecta de manera radical a la energía del sistema, haciendo que disminuya. Lo que se ve claramente es que a medida que movemos la impureza a lo largo del eje z en el sentido positivo la energía empieza a aumentar de manera que en un principio parece lineal para luego cambiar bruscamente. Es muy notorio el cambio entre $\zeta = 0.6$ y $\zeta = 0.75$. A medida que la impureza se acerca al borde de la esfera la energía del complejo tiende a la del excitón sin impureza y se acerca asintóticamente a $-1 R_X^*$. Observamos también que en esferas pequeñas la posición de la impureza afecta poco a la energía del complejo.

La figura 7.9 representa la forma en que cambia la energía en función de la posición de la impureza para diferentes radios.

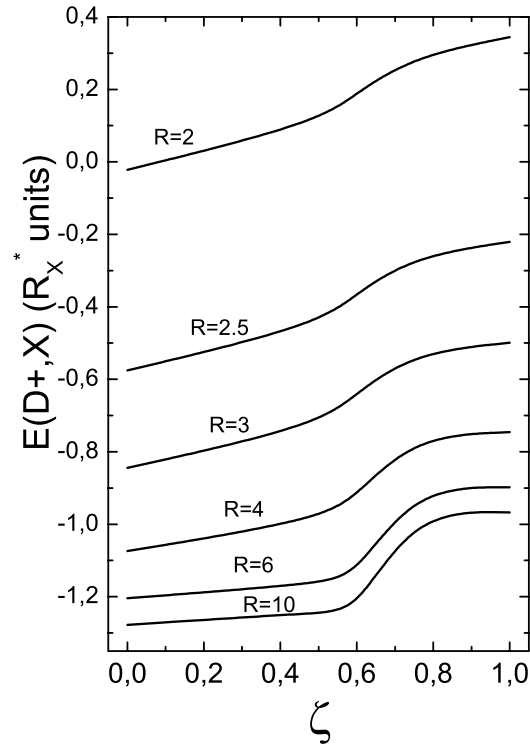


Figura 7.9: Variación de la energía del complejo excitónico (D^+, X) en función de la posición de la impureza a lo largo del eje z y para diferentes radios. El campo magnético es nulo.

En ella vemos de manera muy clara como la posición afecta a la energía del complejo excitónico de una manera muy particular. En esferas grandes aumenta la energía muy débilmente hasta que la impureza se sitúa en $\zeta = 0.55$. A partir de ahí hay un aumento importante de la energía que en el caso de las esferas grandes se acerca al valor de la energía del excitón sin impureza en el semiconductor masivo. Conforme la esfera disminuye su tamaño también se aprecia un incremento de la energía con una pendiente más pronunciada y con un súbito cambio no tan pronunciado alrededor de $\zeta = 0.55$. Estos resultados son coherentes con los del trabajo de Xiao y Zhu [43] en el que se analiza la forma en que la posición de la impureza afecta a la energía de enlace de un electrón en una esfera con una impureza cargada

positivamente.

Hemos realizado también el estudio del efecto del campo magnético con la impureza desplazada del centro de la esfera.

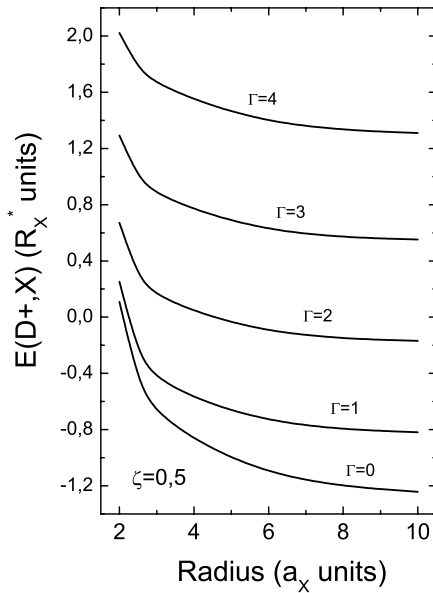


Figura 7.10: Variación de la energía del complejo excitónico (D^+, X) en función del radio y para diferentes valores del campo magnético. La impureza está situada en $\zeta = 0.5$.

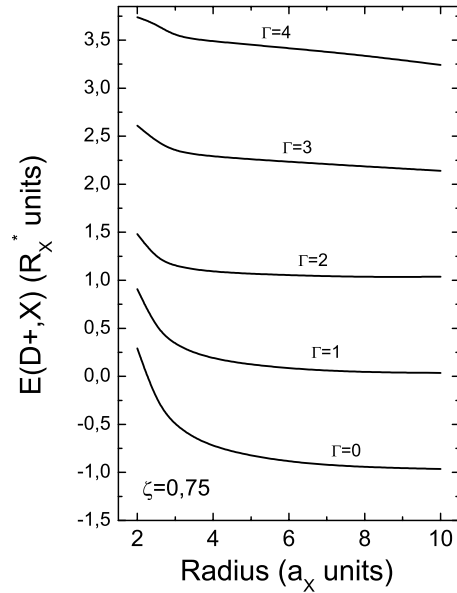


Figura 7.11: Variación de la energía del complejo excitónico (D^+, X) en función del radio y para diferentes valores del campo magnético. La impureza está situada en $\zeta = 0.75$.

Las figuras 7.10 y 7.11 muestran los resultados. Son comparables a los de la figura 7.3 con algunas diferencias. Se observa una disminución de la energía con el tamaño y un incremento con el campo magnético y su forma depende claramente de la posición de la impureza. En estas curvas se observa, no obstante, que la posición de la impureza produce que la disminución de la energía con el radio sea menos acusada que cuando la impureza se halla en el centro, resultado que también se observa para $\zeta = 0.75$. En la gráfica de la figura 7.3 las curvas correspondientes vendrían a situarse entre la del excitón sin impureza y la del excitón con la impureza en el centro. Una vez más el desplazamiento de la impureza tiende a hacer que se recuperen los valores correspondientes al excitón sin impureza. Lo obtenido aquí está también de acuerdo con el trabajo de Ribeiro *et al.* [30] en donde se analiza la posición de la impureza

para el caso de un electrón ligado a una impureza en presencia de campo eléctrico y magnético.

A nivel experimental cabe citar algunas referencias, centradas principalmente en el estudio de excitones. N. Miura *et al.* [44] hacen un estudio del corrimiento diamagnético de los excitones en semiconductores del grupo II-IV. En la figura 7.12 mostramos la curva obtenida por estos autores.

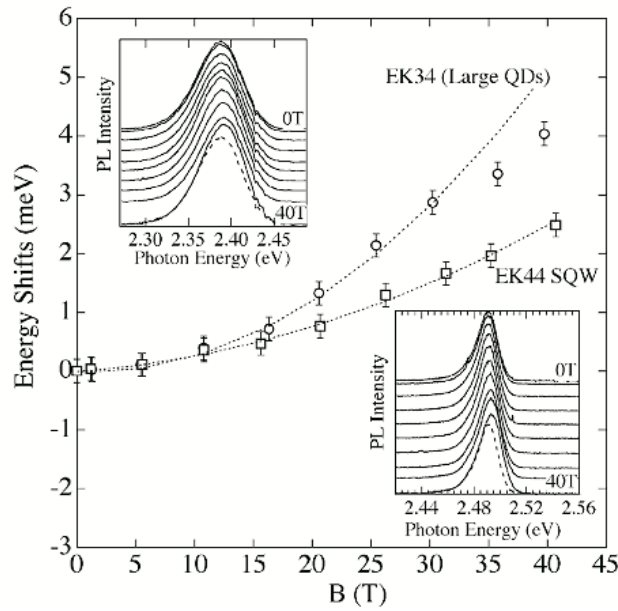


Figura 7.12: Desplazamiento diamagnético en puntos cuánticos de CdSe según el trabajo de N. Miura *et al.* [44]

A partir de los valores de la figura 7.12 podemos obtener que

$$\Delta E = (2,23 \pm 0,12) \times 10^{-3} B^2 \quad (7.23)$$

donde el coeficiente diamagnético tiene unidades de meV/T^2 . Estos resultados coinciden aproximadamente con los obtenidos en nuestro modelo, véase la figura 7.4. Según esa figura y haciendo un ajuste a un polinomio cuadrático en Γ y teniendo en cuenta las unidades del campo magnético ($\Gamma = 1$ son 72 T y $R_X = 16$ meV) se obtiene un coeficiente diamagnético de $(2.662 \pm 0.046) \times 10^{-3} \text{ meV}/\text{T}^2$, valor que está de acuerdo con los resultados experimentales de N. Miura *et al.* [44]. En

la figura 7.4, si hacemos el ajuste a la curva correspondiente al complejo (D^+, X) obtenemos un valor del coeficiente diamagnético de $(1.670 \pm 0.081) \times 10^{-3} \text{ meV/T}^2$, valor que es inferior al experimental pero no muy lejano. Podemos decir pues que experimentalmente pueden existir complejos excitónicos (D^+, X) ya que su energía se halla bastante próxima a la de los excitones.

Por su parte, Q. Ren *et al.* [45] estudian los efectos de carga inducida que producen los campos magnéticos en puntos cuánticos aislados de CdSe, véase la figura 7.13 obtenida de su artículo. En sus experimentos se observa también un comportamiento parabólico de la energía en función del campo magnético hasta valores del orden de 2 T. Un ajuste a un polinomio de segundo grado con los datos de la figura 7.13 da un valor del coeficiente diamagnético de $(51.4 \pm 1.4) \times 10^{-3} \text{ meV/T}^2$. Este valor está un orden de magnitud por arriba del obtenido por N. Miura y por los ajustes de nuestro modelo. Por arriba de 2 T los autores observan que la energía crece más rápidamente que B^2 debido al campo eléctrico local producido por los electrones que ahora se hallan más ligados por el campo magnético y por la disminución del radio de las órbitas ciclotrónicas, con lo que este comportamiento podría ser el responsable del elevado valor del coeficiente diamagnético.

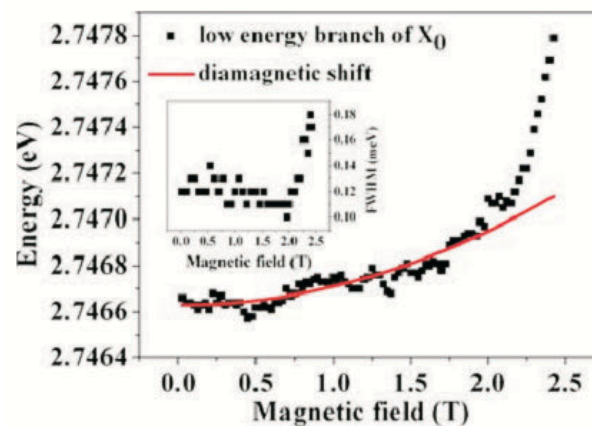


Figura 7.13: Desplazamiento diamagnético en puntos cuánticos de CdSe a campos magnéticos inferiores a 2 T según el trabajo de Q. Ren *et al.* [45]. Se observa un claro comportamiento parabólico que ajusta bien con los datos del modelo. La gráfica interior muestra la dependencia de la anchura de línea de emisión en función del campo magnético.

7.4. Conclusión

Hemos desarrollado en este capítulo un procedimiento basado en el método variacional que nos permite determinar la energía del complejo excitónico (D^+, X) con un campo magnético aplicado a lo largo del eje z y cambiando la posición de una impureza dadora. Pocos son los estudios consagrados al estudio del complejo excitónico con campo magnético. La mayoría de trabajos se centran en electrones ligados a impurezas dadoras. Los resultados están de acuerdo con los modelos que aparecen en la literatura, recuperándose siempre los valores correspondientes al caso del excitón en el semiconductor masivo a radios grandes y también cuando la impureza se aleja del centro de la esfera. Es notorio a este respecto las variaciones no lineales que presenta la energía del complejo excitónico. Nuestros resultados teóricos, en lo que se refiere al excitón, están de acuerdo con resultados experimentales obtenidos por varios investigadores. El trabajo abre la posibilidad de estudiar con este mismo modelo el complejo ($D0, X$) y, a su vez, encontrando un *gauge* adecuado, poder desplazar la impureza a lo largo del eje x para ver su efecto sobre los estados de los complejos excitónicos.

Bibliografía

- [1] M. A. Lampert, Phys. Rev. Letters **1**, 450 (1958).
- [2] T. Skettrup, M. Suffczynski, and W. Gorzkowski, Phys. Rev. B **4**, 512 (1971).
- [3] L. Stauffer and B. Stébé, Phys. Rev. B **39**, 5345 (1989).
- [4] B. Stébé and L. Stauffer, Superlattice and Microstructures **5**, 451 (1989).
- [5] L. Stauffer and B. Stébé, Solid State Commun. **80**, 983 (1991).
- [6] B. Stébé, E. Assaid, F. Dujardin and S. Le Goff, Phys. Rev. B **54**, 17785 (1996).
- [7] B. Stébé, E. Assaid, S. Le Goff and F. Dujardin , Solid State Commun. **100**, 217 (1996).
- [8] W. Xie, Physics Letters A **270**, 343 (2000).
- [9] J. J. Liu, S. F. Zhang, Y. X. Li and X. J. Kong, Eur. Phys. J. B **19**, 17 (2001).
- [10] W. Xie and J. Gu, Physica B **337**, 58 (2003).
- [11] A. A. Avetisyan, A. P. Djotyan and E. M. Kazaryan, phys. stat. sol. (c) **0**, 734 (2003).
- [12] S. Baskoutas, W. Schommers, A. F. Terzis, V. Kapaklis, M. Rieth and C. Politis, Physics Letters A **308**, 219 (2003).
- [13] B. Santic, C. Merz, U. Kaufman, R. Niebuhr, H. Obloh and K. Bachem, App. Phys. Letters **71**, 1837 (1997).

- [14] R. A. Mair, J. Li, S. K. Duan, J.Y. Lin and H. X. Jiang, *App. Phys. Letters* **74**, 513 (1999).
- [15] V. A. Fonoberov, A. A. Balandin, *App. Phys. Letters* **85**, 5971 (2004).
- [16] B. K. Meyer, J. Sann, S. Lautenschläger, M. R. Wagner, and A. Hoffmann, *Phys. Rev. B* **76**, 184120 (2007).
- [17] E. Niculescu, L. Burileanu, I. Sandulescu, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* **7**, 2775 (2005).
- [18] A. Corella-Madueño and R. Rosas, J. L. Marín and R. Riera, *J. Appl. Phys.* **90**, 2333 (2000).
- [19] K. L. Janssens, F. M. Peeters and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **63**, 205311 (2001).
- [20] Zhigang Xiao, *J. Appl. Phys.* **86**, 4509 (1999)
- [21] S. N. Walck and T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B* **57**, 9088 (1998)
- [22] Gang Li, Spiros V. Branis and K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **77**, 1097 (1994)
- [23] J. E. Galván-Moya, W. Gutiérrez and C. Moscoso. *Journal of Physics: Conference Series* **210** (2010) 012039
- [24] Z. Barticevic, M. Pacheco, C. A. Duque and L. Oliveira, *Eur. Phys. J. B* **56**, 303 (2007)
- [25] Juan Gu, Jiu-Qing Liang, *Physics Letters A* **323**, 132 (2004)
- [26] K. L. Janssens, B. Partoens and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **66**, 075314 (2002).
- [27] H. Akbas, C. Dane, A. Guleroglu and S. Minez, *Physica E* **41**, 605 (2009).
- [28] H. Anani, R. Mahajan, P. Pathak and V. A. Singh, *Pramana journal of physics* **73**, 573 (2009)

- [29] B. Gerlach and D. Richter, J. Pollmann, Z. Phys. B Condensed Matter **66**, 419 (1987)
- [30] F. J. Ribeiro and L. Latgé, M. Pacheco, Z. Barticevic, J. Appl. Phys. **82**, 270 (1997)
- [31] J. M. Ferreyra, P. Bosshard and C. R. Proetto, Phys. Rev. B **55**, 13682 (1996).
- [32] Lei Liu and Jian-Jun Liu, J. Appl. Phys. **106**, 053704 (2009).
- [33] Liangliang Lu and Wenfang Xie, Superlattices and Microstructures **50**, 40 (2011).
- [34] I. Essaoudi, B. Stébé, A. Ainane and M. Saber, Physica E **14**, 336 (2002).
- [35] L. Stauffer and B. Stébé, Phys. Rev. B **39**, 5345 (1989).
- [36] A. P. Djotyan, A. A. Avetisyan, E. M. Kazaryan and M. Mouloupouloa, phys. stat. sol. (c) **3**, 1087 (2006).
- [37] F. Dujardin, E. Feddi, E. Assaid and A. Oukerroum, Eur. Phys. J. B **56**, 507 (2010)
- [38] B. Stébé, E. Assaid, F. Dujardin and S. Le Goff, Phys. Rev. B **54**, 17785 (1996).
- [39] El Mahdi Assaid, *Etude des propriétés électroniques et optiques des complexes D^+ dans les microcristallites de semi-conducteur de forme sphérique* (Université de Metz. Thèse de doctorat, 1995).
- [40] Alberto Galindo y Pedro Pascual, *Mecánica cuántica, vol. 2* (Editorial Eudema Universidad. Manuales, 1989).
- [41] Yosuke Kayanuma, Phys. Rev. B **38**, 9797 (1988).
- [42] S. N. Walck and T. L. Reinecke, Phys. Rev. B **57**, 9088 (1997).
- [43] Zhigang Xiao, Jiqian Zhu and Fengai He J. Appl. Phys. **79**, 9181 (1996).

- [44] N. Miura, K. Uchida, T. Yasuhira, E. Kurtz, C. Klingshirn, H. Nakashima F. Issiki and Y. Shiraki *Physica E*. **13**, 263-268 (2002).
- [45] Qijun Ren, Lihui Bai, Akihiro Murayama, Zhanghai Chen and Xuechu Shen *Phys. Status Solidi B* **246**, 791-794 (2009).

Capítulo 8

Conclusiones

Llegados a este punto es el momento de analizar brevemente el trabajo expuesto hasta aquí, hacer como no, autocrítica, viendo como se enmarcan los resultados obtenidos y vislumbrando cuales serán las posibles directrices futuras.

La teoría básica de los semiconductores y el concepto de excitón con su formulación cuántica explican muchas de sus propiedades ópticas cuando se hallan confinados. La aplicación de un campo eléctrico externo produce un rico comportamiento no lineal con múltiples aplicaciones optoelectrónicas. El corrimiento Stark presenta un carácter notablemente anómalo cuando se reduce la dimensión del sistema. De igual manera el campo eléctrico aplicado en dirección vertical donde hay presente un gran confinamiento, da lugar a una extinción de la fotoluminiscencia debida al efecto túnel de los portadores, estableciéndose una competición entre éste y la recombinación radiativa. La adición de impurezas hemos visto que también tiene consecuencias dramáticas sobre la energía excitónica, como se demuestra en el capítulo 6.

Se ha modelizado también el campo magnético sobre excitones con impurezas en esferas. Los modelos explican razonablemente bien el corrimiento diamagnético y el hecho de que los niveles excitónicos y de impureza se hallen tan cerca da pie a pensar que siempre están presentes.

La idea general de la tesis ha sido la de desarrollar modelos cuánticos variacionales que nos permitieran escribir funciones de onda adecuadas a fin de deter-

minar las propiedades ópticas de excitones confinados en nanoestructuras cuánticas en presencia de campos eléctrico y magnético. En muchos casos se ha conseguido explicar razonablemente bien los datos obtenidos en experimentos y en otros no. La aplicabilidad de los métodos expuestos depende de la validez de la masa efectiva y en la mayoría de los casos se ha estudiado la energía del estado fundamental. La función de onda siempre se ha tomado como función separable, lo que se denomina producto de Hartree. Está claro que esto limita su aplicabilidad al caso de confinamiento fuerte y constantes dieléctricas grandes.

El uso del método variacional ha sido tan extensivo que se podría achacar a esta tesis que es demasiado monotemática. Esto último es cierto, al igual que también lo es el significado de todo lo que se obtiene del método. Las funciones de onda poseen gran parte de la información del sistema físico estudiado y es por ello que el procedimiento variacional es muy ilustrativo. Permite entender muy bien por qué aparece cada uno de los términos en la función de onda, cual es su carácter en la fenomenología global y el valor de los parámetros variacionales obtenidos dan muy buena cuenta de la dimensionalidad de las nanoestructuras.

Otros métodos de cálculo son igual de válidos e incluso más realistas, como por ejemplo la interacción de la configuración (que también es variacional), enlace fuerte (*tight binding*), aplicable a estructura de bandas, combinación lineal de orbitales atómicos o LCAO, etc. Estos procedimientos de cálculo mezclan varias interacciones y a veces ensombrecen la esencia de lo que se quiere analizar. Son también más exigentes a la hora del cálculo numérico.

Lo estudiado en esta tesis es extensible a otras geometrías, incluso algunas de ellas con dimensión no entera. Es bien conocido que los conjuntos fractales poseen dimensión fraccionaria y suponen un desafío que motiva mucho a hacer su análisis. En geometrías del tipo de cinta de Moebius se han hecho varios modelos ya. Muchas propiedades de la Naturaleza no se han podido comprender bien hasta que no se ha podido desarrollar la matemática adecuada para analizarla, siendo un caso paradigmático el de la teoría de la relatividad general de Einstein. El análisis matemático de las geometrías fractales supone, según el particular entender del autor de esta

tesis, una posibilidad de comprender lo que le acontece a la materia cuando se la obliga a ocupar menos espacio que el ocuparía de manera natural.

Apéndice A

A.1. Pozo de potencial con barreras infinitas sometido a un campo eléctrico

La ecuación de Schrödinger para este caso es de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) + eFz\psi(z) = E\psi(z) \quad (\text{A.1})$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón o el hueco. Para el caso del hueco la parte del campo eléctrico será $-eFz$ y la resolución es similar a la que vamos a presentar. Si el pozo tiene un tamaño H , las condiciones de contorno obligan a que la función de onda se anule en los extremos del pozo, es decir, $\psi(\pm \frac{H}{2}) = 0$. Para campo eléctrico nulo la solución es conocida,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2}{H^2} n^2 \quad (\text{A.2})$$

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{H}} \cos\left(\frac{n\pi}{H} z\right)$$

El problema ahora se resuelve tomando como unidad de energía la correspondiente al estado fundamental

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2}{H^2} \quad (\text{A.3})$$

y como unidad de campo eléctrico F_1 la obtenida de hacer $eF_1H = E_1$. O sea, podemos definir unas nuevas magnitudes normalizadas, ω y f como

$$\omega = \frac{E}{E_1} \quad f = \frac{F}{F_1} \quad (\text{A.4})$$

La ecuación A.1 se transforma en la ecuación diferencial de Airy tomando ahora como nueva variable Z , la definida por

$$Z = - \left(\frac{2m^*}{(e\hbar F)^2} \right)^{1/3} (E + eFz) \quad (\text{A.5})$$

El factor $[(e\hbar F)^2/2m^*]^{1/3}$ tiene dimensiones de energía, así pues la nueva variable Z es adimensional y la ecuación A.1 toma ahora la forma

$$\frac{d^2}{dZ^2}\zeta(Z) - Z\zeta(Z) = 0 \quad (\text{A.6})$$

cuyas soluciones son

$$\zeta(Z) = a\text{Ai}(Z) + b\text{Bi}(Z) \quad (\text{A.7})$$

donde a y b son dos constantes y $\text{Ai}(Z)$ y $\text{Bi}(Z)$ son las funciones de Airy. Las condiciones de contorno exigen que la función de onda $\zeta(Z)$ se anule en $\pm\frac{H}{2}$. Por tanto de la ecuación A.7 llegamos a

$$\text{Ai}(Z_+)\text{Bi}(Z_-) - \text{Ai}(Z_-)\text{Bi}(Z_+) = 0 \quad (\text{A.8})$$

con $Z_{\pm} = Z(\pm\frac{H}{2})$. Resolviendo numéricamente la ecuación A.8 obtenemos la energía de los electrones o huecos en presencia de campo eléctrico y poniendo una constante en función de la otra y con la condición de normalización determinamos completamente la función de onda de nuestro problema.

A.2. Pozo de potencial finito con campo eléctrico

Si ahora consideramos un pozo con paredes de altura finita al que aplicamos un campo eléctrico dirigido en la dirección Z , tendremos que

$$V(z) = \begin{cases} eFz, & \text{si } |z| < H/2 \\ V_0 + eFz, & \text{si } |z| \geq H/2 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

cuya representación gráfica la vemos en la Fig. A.1. Ahora la función de onda estará definida sobre tres regiones.

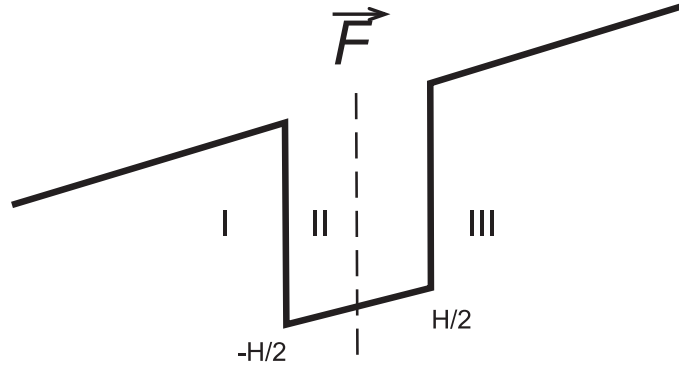


Figura A.1: Efecto de la aplicación de un campo eléctrico a un pozo cuadrado de potencial.

La solución más general que podemos dar en este caso es,

$$\psi(\eta) = \begin{cases} C_1 \text{Ai}(\eta), & \text{si } z \geq H/2 \\ C_2 \text{Ai}(\eta) + D_2 \text{Bi}(\eta), & \text{si } |z| < H/2 \\ C_3 \text{Ai}(\eta) + D_3 \text{Bi}(\eta), & \text{si } z \leq -H/2 \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

siendo η la nueva coordenada definida de manera similar a la dada en la ecuación A.5

$$\eta = - \left(\frac{2m^*}{(e\hbar F)^2} \right)^{1/3} (E - V_0 - eFz) \quad (\text{A.11})$$

En A.10, C_1 , C_2 , D_2 , C_3 y D_3 son constantes. De las propiedades de la función de Airy se tiene que $\text{Bi}(\eta)$ aumenta con η y se hace infinita si η tiende a infinito. El valor de las constantes se halla imponiendo como siempre condiciones de continuidad para la función de onda y sus derivadas en $z = \pm H/2$.

$$\psi^i(z)|_{z=z_0} = \psi^{i+1}(z)|_{z=z_0} \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{1}{m^*_i} \frac{d\psi^i(z)}{dz} \Big|_{z=z_0} = \frac{1}{m^*_{i+1}} \frac{d\psi^{i+1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_0} \quad (\text{A.13})$$

donde el subíndice " i " se refiere a cada una de las regiones I, II y III en que queda definido el espacio y z_0 será $\pm H/2$ según el caso.

Usando las condiciones de continuidad A.12 y A.13 obtenemos cuatro ecuaciones

que pueden compactarse como

$$M \begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \\ C_3 \\ D_3 \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} Ai(\eta_b^{+1}) \\ \frac{Ai'(\eta_b^{+1})}{m(x)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

donde la matriz M viene dada por

$$M = \begin{pmatrix} \frac{Ai(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Bi(\eta_a^{+1})}{m(0)} & 0 & 0 \\ \frac{Ai'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Bi'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & 0 & 0 \\ -\frac{Ai(\eta_a^{-1})}{m(0)} & -\frac{Bi(\eta_a^{-1})}{m(0)} & \frac{Ai(\eta_b^{-1})}{m(x)} & \frac{Bi(\eta_b^{-1})}{m(x)} \\ \frac{Ai'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & \frac{Bi'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & \frac{Ai'(\eta_b^{-1})}{m(x)} & \frac{Bi'(\eta_b^{-1})}{m(x)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

donde $m(x) = [m(x)]^{2/3}$, $m(0) = [m(0)]^{2/3}$ y los valores de η son

$$\eta_{\pm 1}^{\pm 1} = - \left[\frac{2m^*(0)}{(e\hbar F)^2} \right]^{1/3} \left(E \mp eF \frac{H}{2} \right) \quad (\text{A.16})$$

$$\eta_{\pm 1}^{\pm 1} = - \left[\frac{2m^*(x)}{(e\hbar F)^2} \right]^{1/3} \left(E - V_0 \mp eF \frac{H}{2} \right) \quad (\text{A.17})$$

El determinante Wronskiano de $Ai(\eta)$ y $Bi(\eta)$ es

$$Ai(\eta)Bi'(\eta) - Ai'(\eta)Bi(\eta) = \frac{1}{\pi} \quad (\text{A.18})$$

por lo que el determinante de la matriz M es

$$|M| = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{1}{m^*(0)m^*(x)} \right)^{2/3} \quad (\text{A.19})$$

A partir de la ecuación A.14 podemos hallar el valor de los coeficientes $C_1(E)$, $C_2(E)$, $D_2(E)$, $C_3(E)$ y $D_3(E)$, en función de $C_1(E)$. Puesto que este último coeficiente es arbitrario a la hora de normalizar, podemos hacer sin pérdida de generalidad $C_1(E) = 1$. Los coeficientes $C_3(E)$ y $D_3(E)$ se obtienen con los determinantes,

$$C_3 = \frac{1}{|M|} \begin{pmatrix} \frac{Ai(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Bi(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Ai(\eta_b^{+1})}{m(x)} & 0 \\ \frac{Ai'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Bi'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Ai'(\eta_b^{+1})}{m(x)} & 0 \\ -\frac{Ai(\eta_a^{-1})}{m(0)} & -\frac{Bi(\eta_a^{-1})}{m(0)} & 0 & \frac{Bi(\eta_b^{-1})}{m(x)} \\ \frac{Ai'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & \frac{Bi'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & 0 & \frac{Bi'(\eta_b^{-1})}{m(x)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

y

$$D_3 = \frac{1}{|M|} \begin{pmatrix} Ai(\eta_a^{+1}) & Bi(\eta_a^{+1}) & 0 & Ai(\eta_b^{+1}) \\ \frac{Ai'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & \frac{Bi'(\eta_a^{+1})}{m(0)} & 0 & \frac{Ai'(\eta_b^{+1})}{m(x)} \\ -Ai(\eta_a^{-1}) & -Bi(\eta_a^{-1}) & Ai(\eta_b^{-1}) & 0 \\ -\frac{Ai'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & -\frac{Bi'(\eta_a^{-1})}{m(0)} & \frac{Ai'(\eta_b^{-1})}{m(x)} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

Las raíces de $|C_3| = 0$ dan las energías de los estados.

A.3. Método del corrimiento de fase

Las resonancias en el efecto Stark se caracterizan por un rápido crecimiento en un factor π de la fase ϕ , donde

$$\tan \phi = \frac{D_3}{C_3} \quad (\text{A.22})$$

En este método E_r y Γ se relacionan con $\tan \phi$ en el formalismo de Breit-Wigner mediante

$$\tan \phi = \frac{\Gamma}{2(E_r - E)} \quad (\text{A.23})$$

A partir de la ecuación A.23 vemos que E_r se obtiene del polo de $\tan \phi$. De la ecuación A.22 encontramos que esta condición se satisface cuando

$$C_e(E_r) = 0 \quad (\text{A.24})$$

El valor de Γ se calcula de la siguiente manera. De las ecuaciones A.22 y A.23 encontramos que

$$\Gamma = 2(E_r - E) \frac{D_3}{C_3} \quad (\text{A.25})$$

Desarrollando $C_3(E)$ en serie de Taylor y usando la ecuación A.24 obtenemos

$$C_3(E) = C_3(E_r) + (E_r - E)C_3'(E_r) + \dots = (E_r - E)C_3'(E_r) \quad (\text{A.26})$$

donde se han despreciado los términos de orden dos y superior y

$$C'_3(E_r) = \left. \frac{dC_3(E)}{dE} \right|_{E_r} \quad (\text{A.27})$$

Sustituyendo la ecuación A.26 en la A.25 encontramos para la expresión de Γ

$$\Gamma = 2 \frac{D_3(E_r)}{C'_3(E_r)} \quad (\text{A.28})$$

y el tiempo de efecto túnel, usando la relación de incertidumbre energía-tiempo

$$\tau_t = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (\text{A.29})$$

A.4. Cálculo de la energía en un pozo cuántico por el método variacional

La ecuación de Schrödinger de un electrón en un pozo cuántico de barreras infinitas, de anchura L , y en presencia de un campo eléctrico externo f es

$$H\psi(z) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + e f z \psi(z) = E \psi(z) \quad (\text{A.30})$$

donde m^* es la masa reducida del electrón, e la carga electrónica y E su energía. Si el campo eléctrico es intenso la función de onda variacional de prueba que se toma es

$$\psi(z) = N \cos \left[\frac{\pi z}{L} \right] \exp \left[-\beta \left[\frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right] \right], \quad \frac{|z|}{L} < \frac{1}{2} \quad (\text{A.31})$$

Con esta función de onda y usando A.30 la energía en función de β resulta,

$$E(\beta) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{(3\beta^2 + \pi^2) f L^3 m^* e - \beta (\beta^2 + \pi^2) f L^3 m^* e \coth(\beta) + \beta (\beta^2 + \pi^2)^2 \hbar^2}{2\beta (\beta^2 + \pi^2) L^2 m^*} \quad (\text{A.32})$$

Si el campo no es muy intenso podemos desarrollar en serie A.32 hasta segundo orden

$$E(\beta) = \beta f L e \left(\frac{1}{\pi^2} - \frac{1}{6} \right) + \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m^* L^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} \quad (\text{A.33})$$

y encontrar el valor de β que hace mínima la expresión A.33

$$\beta_{min} = \frac{L^3 m^* (\pi^2 f e - 6 f e)}{6 \pi^2 \hbar^2} \quad (\text{A.34})$$

Sustituyendo este valor en A.33 y simplificando se llega a

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m^* L^2} - \frac{1}{8} \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right]^2 \frac{m^* e^2 f^2 L^4}{\hbar^2} \quad (\text{A.35})$$

expresión que es la dada en el artículo de Bastard.

Apéndice B

Unidades excitónicas

Partiendo del hamiltoniano 4.12 vamos a expresarlo en unidades del radio de Bohr y la energía excitónica. Como

$$R_X = \frac{\mu e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2}, \quad a_X = \frac{\varepsilon \hbar^2}{\mu e^2} \quad (\text{B.1})$$

sustituyendo el valor de las constantes fundamentales que pueden consultarse en el apéndice F se deduce para la unidad de energía

$$E = 13,6 \frac{\mu}{m_o} \varepsilon^{-2} \text{ eV} \quad (\text{B.2})$$

y para la unidad de distancia

$$a = 0,05992 \frac{\mu}{m_o} \varepsilon \text{ nm} \quad (\text{B.3})$$

teniendo en cuenta por la definición dada en B.1 que

$$R_X = \frac{\hbar^2}{2\mu a_X^2} \quad (\text{B.4})$$

para la energía cinética tenemos

$$H_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_x^2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (\text{B.5})$$

Como la frecuencia del oscilador es $\omega = \frac{\hbar}{\mu R^2}$ la energía potencial del oscilador armónico es

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2 = \frac{1}{2}\mu\left(\frac{\hbar}{\mu R^2}\right)^2\rho^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{\mu R^4}\rho^2 \quad (\text{B.6})$$

y expresándolo en unidades de a_X la anterior fórmula queda

$$\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{\mu R^4}\rho^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{\mu R^4 a_X^4}a_X^2\rho^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{\mu a_X^2}\frac{\rho^2}{R^4} = R_X\gamma_X^2\rho^2 \quad (\text{B.7})$$

donde $\gamma_X = \frac{1}{R^2}$

y de esa manera la energía del oscilador armónico también la hemos puesto en función de R_X .

Veamos ahora el término del potencial de Coulomb

$$\frac{e^2}{\varepsilon\rho} = \frac{e^2}{\varepsilon\rho a_X} = \frac{e^2}{\varepsilon\frac{\varepsilon\hbar^2}{\mu e^2}\rho} = \frac{\mu e^4}{\varepsilon^2\hbar^2}\frac{1}{\rho} = 2R_X\frac{1}{\rho} \quad (\text{B.8})$$

La parte de interacción con el campo eléctrico, sin considerar $\cos\varphi$

$$eF\rho = R_X f a_X \rho \quad (\text{B.9})$$

por lo tanto las nuevas unidades del campo eléctrico f son ahora $f = \frac{e a_X}{R_X} F$

Haciendo pues todas las sustituciones con las fórmulas expuestas el Hamiltoniano 4.12 pasa a ser el 4.14.

Sustituyendo los valores de R_X y a_X tenemos para las unidades del campo eléctrico

$$f = \frac{E}{e a} = \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon}\right)^3 \frac{1}{e} = 5,142 \times 10^{11} \left(\frac{m}{m_o}\right)^2 \varepsilon^{-3} \frac{\text{V}}{\text{m}} \quad (\text{B.10})$$

Para el campo magnético vamos a hacer uso del término diamagnético del hamiltoniano 3.87, en el que vamos a tomar unidades del sistema internacional

$$\frac{e^2}{2m_e^*c^2}(A(\vec{r}_e))^2 + \frac{e^2}{2m_h^*c^2}(A(\vec{r}_h))^2 = \frac{1}{8}m_e^*\omega_e^2 r_e^2 + \frac{1}{8}m_h^*\omega_h^2 r_h^2 \quad (\text{B.11})$$

en donde ahora $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$, siendo ω_e y ω_h las frecuencias ciclotrónicas para el electrón y el hueco respectivamente

$$\omega_{e(h)} = \frac{eB}{m_{e(h)}^*} \quad (\text{B.12})$$

Tras hacer una farragosa reordenación algebraica de los términos diamagnéticos se llega a

$$\frac{1}{8} m_e^* \omega_e^2 r_e^2 + \frac{1}{8} m_h^* \omega_h^2 r_h^2 = \frac{1}{4} \frac{\Gamma^2}{1 + \sigma} (r_e^2 + \sigma r_h^2) \quad (\text{B.13})$$

siendo $\sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}$ y

$$\Gamma = \frac{\hbar \omega_c}{2R_X} \quad (\text{B.14})$$

con $\omega_c = \frac{eB}{\mu}$

Teniendo en cuenta el valor de todas las constantes fundamentales podemos al igual que para el campo eléctrico, expresar las unidades del campo magnético en función de μ y ε como

$$B = \frac{\sqrt{mE}}{ea} = \frac{m^2}{\hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} \right)^2 \frac{1}{e} = 2,351 \times 10^5 \left(\frac{m}{m_o} \right)^2 \varepsilon^{-2} \text{ T} \quad (\text{B.15})$$

Como ejemplo, si tomamos el GaAs, con $m_e = 0,076 m_o$, $m_h = 0,50 m_o$ y $\varepsilon = 13,1$ se obtiene

$$E = 9,37 \text{ meV}$$

$$a = 11,7 \text{ nm}$$

$$f = 7,98 \text{ kV/cm}$$

$$B = 5,94 \text{ T}$$

Apéndice C

El oscilador armónico bidimensional

La función de onda $\Phi(\rho, \varphi)$ puede separarse de la forma

$$\Phi(\rho, \varphi) = g(\rho) \exp(im\varphi) \quad (\text{C.1})$$

y sustituyendo en la ecuación diferencial 3.70 llegamos a

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial g}{\partial \rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} g + (E - \gamma_X^2 \rho^2) g = 0 \quad (\text{C.2})$$

Hacemos ahora un nuevo cambio de función

$$g(\rho) = \rho^{|m|} \exp\left(-\frac{\gamma_X \rho^2}{2}\right) f(\rho) \quad (\text{C.3})$$

con lo que después de algunos cálculos la ecuación diferencial queda

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \left(\frac{2|m|+1}{\rho} - 2\gamma_X \rho \right) \frac{df}{d\rho} - (2\gamma_X(|m|+1) - E) f = 0 \quad (\text{C.4})$$

Si además hacemos $\gamma_X \rho^2 = \xi$ se llega a la ecuación diferencial hipergeométrica confluyente

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} + (\beta - \xi) \frac{df}{d\xi} + \alpha f = 0 \quad (\text{C.5})$$

cuya solución es $f(\xi) = F_1^1(\alpha, \beta, \xi)$, con

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{E}{4\gamma_X} - (|m| + 1) \\ \beta &= |m| + 1\end{aligned}\tag{C.6}$$

De las condiciones de contorno sabemos que la función de onda ha de anularse en $\rho = R$, y haciendo $\alpha = -n_\rho$

$$F_1^1(-n_\rho, |m| + 1, \gamma_X R^2) = 0\tag{C.7}$$

la cual nos permite hallar la energía.

$$E = 4\gamma_X \left(n_\rho + \frac{|m| + 1}{2} \right)\tag{C.8}$$

El estado fundamental lo obtenemos haciendo $n_\rho = 0$ y $m = 0$.

Apéndice D

Las coordenadas de Hylleraas

El análisis de las propiedades excitónicas resulta útil hacerlo mediante las denominadas coordenadas de Hylleraas. Esta formulación fue introducida en 1929 por el físico noruego Egil Hylleraas al aplicar la ecuación de Schrödinger al átomo de helio. Su trabajo original está citado en la referencia 5 del capítulo 1 de esta tesis.

El estudio del excitón vamos a hacerlo de igual manera, suponiendo que el electrón y el hueco son dos partículas que ejecutan un movimiento alrededor de su centro de masas. La Figura D.1 muestra la forma en que se definen las coordenadas cilíndricas de Hylleraas¹. He optado por introducir el cálculo de estas coordenadas con todos sus detalles porque considero importante que se puedan reproducir por parte de otros investigadores. En el capítulo 7 de la tesis se usan estas coordenadas pero en versión esférica. Aquí se presentan en versión cilíndrica y su adaptación a esféricas es bastante sencilla, solo hay que sustituir unos términos al final del hamiltoniano.

Las dos partículas a considerar, el electrón y el hueco vamos a representarlas por facilidad con la notación con las etiquetas 1 y 2. En coordenadas cilíndricas tendríamos $(\rho_e, \phi_e, z_e, \rho_h, \phi_h, z_h)$. El hamiltoniano es invariante por rotación global del sistema alrededor del eje del cilindro. La parametrización en cilíndricas que hemos realizado no da cuenta de este hecho, así que vamos a definir los ángulos

¹Los resultados que se muestran en este apéndice son un breve extracto y adaptación particular del modelo desarrollado en la tesis doctoral de Serge Le Goff "*Etude des états excitoniques dans les nanostructures de semi-conducteur de forme cylindrique*". Université de Metz, décembre 1982.

Par electrón-hueco en un cilindro cuántico.
Definición de las coordenadas

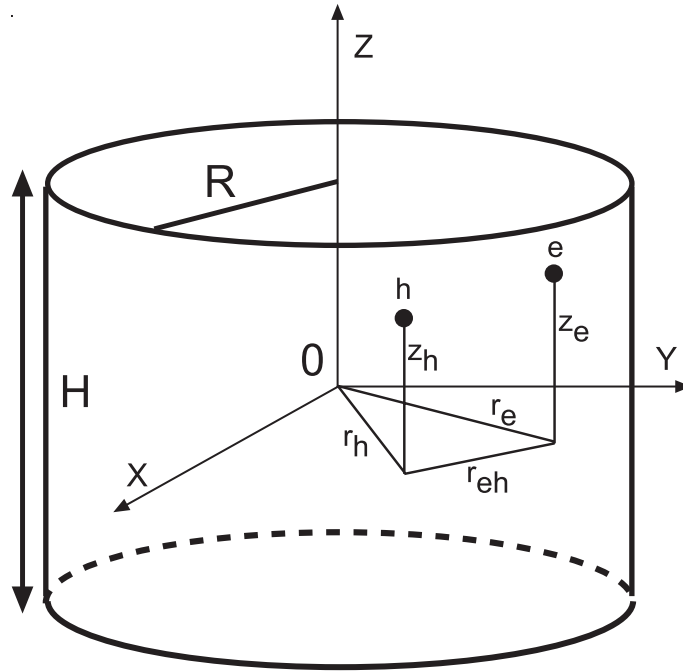


Figura D.1: Electrón y hueco en una caja cilíndrica. Definición de las coordenadas de Hylleraas. En el texto se han nombrado de manera diferente. En la figura, r_e , r_h y r_{eh} se corresponden en el texto con ρ_e , ρ_h y ρ , respectivamente.

$$\chi = \phi_h - \phi_e \quad \phi = (\phi_h + \phi_e)/2 \quad (\text{D.1})$$

De esta manera el ángulo χ guarda relación con las distancias ρ , ρ_e y ρ_h sin más que aplicar el teorema del coseno

$$\rho = \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \chi} \quad (\text{D.2})$$

Así pues nuestro problema se reduce a 5 coordenadas $(\rho_e, z_e, \rho_h, z_h, \rho)$. El único inconveniente de esta parametrización es que no es biyectiva, pues dos valores de χ pueden dar un mismo valor de ρ .

La relación entre las coordenadas cartesianas y estas nuevas que acabamos de

definir son

$$\begin{aligned}
\rho_e^2 &= x_e^2 + y_e^2 \\
\rho_h^2 &= x_h^2 + y_h^2 \\
\rho^2 &= (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 \\
&= x_e^2 - 2x_e x_h + x_h^2 + y_e^2 - 2y_e y_h + y_h^2 \\
&= \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2(x_e x_h + y_e y_h)
\end{aligned} \tag{D.3}$$

Vamos a hacer el desarrollo para la coordenada x_e . Para x_h es lo mismo *mutatis mutandis*.

D.1. Operador Hamiltoniano en coordenadas de Hylleraas

Supongamos que estamos interesados en el estado fundamental, así que nos vamos a limitar al caso de una función de onda independiente de ϕ , por tanto

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = F(\rho_e, z_e, \rho_h, z_h, \rho) \tag{D.4}$$

Si designamos por V_{w1} y V_{w2} los potenciales de confinamiento respectivos de las dos partículas, el Hamiltoniano total del sistema es de la forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_{w1} + V_{w2} \tag{D.5}$$

y en coordenadas cartesianas

$$\nabla_e^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \tag{D.6}$$

Evaluemos las derivadas parciales con respecto a x_e utilizando la parametrización dada en D.3

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_e} = \frac{\partial \rho_e}{\partial x_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{\partial \rho}{\partial x_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} = \frac{x_e}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{x_e - x_h}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \tag{D.7}$$

así pues, para la derivada segunda

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_e^2} = \frac{\partial}{\partial x_e} \left[\frac{x_e}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{x_e - x_h}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right] \quad (\text{D.8})$$

A la hora de hacer estas derivadas ha de tenerse en cuenta la propia definición de derivada que hemos hecho en D.7. El cálculo es algo que hay que realizar con cuidado dándose cuenta de todos los cambios y sustituciones :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_e^2} &= \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} - \frac{x_e}{\rho_e^2} \frac{\partial \rho_e}{\partial x_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{x_e}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial x_e} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} \right) \\ &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{(x_e - x_h)^2}{\rho^3} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(x_e - x_h) x_e}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} + \frac{(x_e - x_h)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \\ &= \left(1 - \frac{x_e^2}{\rho_e^2} \right) \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{x_e^2}{\rho_e^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_e^2} + \frac{2(x_e - x_h) x_e}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} \\ &\quad + \left(1 - \frac{(x_e - x_h)^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(x_e - x_h)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Procediendo de igual manera se obtiene la derivada segunda con respecto de y_e :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y_e^2} &= \left(1 - \frac{y_e^2}{\rho_e^2} \right) \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{y_e^2}{\rho_e^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_e^2} + \frac{2(y_e - y_h) y_e}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} \\ &\quad + \left(1 - \frac{(y_e - y_h)^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(y_e - y_h)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Sumando D.9 y D.10 obtenemos $\nabla_e^2 \Psi$:

$$\begin{aligned}
\nabla_e^2 \Psi &= \left(2 - \frac{\rho_e^2}{\rho_e^2}\right) \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{\rho_e^2}{\rho_e^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_e^2} + \frac{2(x_e^2 + y_e^2 - x_e x_h - y_e y_h)}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} \\
&+ \left(2 - \frac{\rho^2}{\rho^2}\right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\rho^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_e^2} \\
&= \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_e^2} + \frac{2(\rho_e^2 - x_e x_h - y_e y_h)}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} \\
&+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_e^2}
\end{aligned} \tag{D.11}$$

Esta última expresión admite simplificación si tenemos en cuenta

$$\begin{aligned}
\rho^2 &= (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 \\
&= x_e^2 - 2x_e x_h + x_h^2 + y_e^2 - 2y_e y_h + y_h^2 \\
&= \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2(x_e x_h + y_e y_h)
\end{aligned} \tag{D.12}$$

de donde se llega a

$$2(x_e x_h + y_e y_h) = \rho_e^2 + \rho_h^2 - \rho^2 \tag{D.13}$$

siendo finalmente:

$$\begin{aligned}
\nabla_e^2 \Psi &= \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_e} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_e^2} + \frac{2(\rho^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2)}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_e} \\
&+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_e^2}
\end{aligned} \tag{D.14}$$

Y para la segunda partícula

$$\begin{aligned} \nabla_h^2 \Psi = & \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_h} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_h^2} + \frac{2(\rho^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2)}{\rho \rho_h} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_h} \\ & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_h^2} \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

El Hamiltoniano tiene finalmente la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} H_X = & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{2(\rho^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2)}{\rho \rho_e} \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \rho_e} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2m_h} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} + \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} + \frac{2(\rho^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2)}{\rho \rho_h} \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \rho_h} + \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right] - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + V_{w1} + V_{w2} \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

Así pues $H\Psi$ es una función sólo de las variables ρ_e , z_e , ρ_h , z_h y ρ .

D.2. Elemento de volumen en coordenadas de Hylleraas

Al cambiar de variables hemos de determinar el nuevo elemento de volumen con el cual han de realizarse todas las integrales. El espacio de configuración del sistema es el producto tensorial de los espacios de configuración respectivos de cada una de las partículas. En coordenadas cartesianas:

$$d\tau = d\tau_e d\tau_h \quad (\text{D.17})$$

con

$$d\tau_e = dx_e dy_e dz_e \quad d\tau_h = dx_h dy_h dz_h \quad (\text{D.18})$$

Como las coordenadas de Hylleraas afectan a x e y podremos poner

$$d\tau = d\Sigma dz_e dz_h \quad (\text{D.19})$$

con $d\Sigma = dx_e dy_e dx_h dy_h$

En coordenadas cilíndricas el elemento de volumen es

$$d\Sigma = |J_c| dr_e d\phi_e dr_h d\phi_h \quad (\text{D.20})$$

con

$$|J_c| = \left| \frac{D(x_e, y_e, x_h, y_h)}{D(\rho_e, \phi_e, \rho_h, \phi_h)} \right| = \rho_e \rho_h \quad (\text{D.21})$$

En coordenadas de Hylleraas, al igual que hacemos para las cilíndricas

$$d\Sigma = |J_H| \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h d\rho d\phi \quad (\text{D.22})$$

y

$$|J_H| = \left| \frac{D(\rho_e, \phi_e, \rho_h, \phi_h)}{D(\rho_e, \rho_h, \rho, \phi)} \right| = \left| \frac{D(\rho, \phi)}{D(\phi_e, \phi_h)} \right| = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi_e} - \frac{\partial \rho}{\partial \phi_h} \right) \quad (\text{D.23})$$

Vamos a evaluar las derivadas anteriores

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \phi_e} &= \frac{\partial}{\partial \phi_e} \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos(\phi_h - \phi_e)} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{2\rho_e \rho_h \sin(\phi_h - \phi_e)}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos(\phi_h - \phi_e)}} \\ &= -\frac{\rho_e \rho_h}{\rho} \sin(\phi_h - \phi_e) \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \phi_h} &= \frac{\partial}{\partial \phi_h} \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos(\phi_h - \phi_e)} \\ &= +\frac{1}{2} \frac{2\rho_e \rho_h \sin(\phi_h - \phi_e)}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos(\phi_h - \phi_e)}} \\ &= +\frac{\rho_e \rho_h}{\rho} \sin(\phi_h - \phi_e) \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

El valor del jacobiano $|J_H|$ es entonces

$$|J_H| = \frac{\rho}{\rho_e \rho_h |\sin(\phi_h - \phi_e)|} \quad (\text{D.26})$$

La fórmula D.26 se puede expresar en funciones de las coordenadas ρ , ρ_e , ρ_h con lo que resulta más operativa a la hora de realizar las integrales. Como

$$\cos(\phi_h - \phi_e) = \frac{\rho_e^2 + \rho_h^2 - \rho^2}{2\rho_e \rho_h} \quad (\text{D.27})$$

por trigonometría

$$\begin{aligned} |\sin(\phi_h - \phi_e)| &= \sqrt{1 - \cos^2(\phi_h - \phi_e)} \\ &= \frac{1}{2\rho_e \rho_h} \sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho^2][\rho^2 - (\rho_e^2 - \rho_h^2)]} \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

El elemento de volumen D.20 queda finalmente

$$d\Sigma = \frac{2\rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h \rho d\rho d\phi}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho^2][\rho^2 - (\rho_e^2 - \rho_h^2)]}} \quad (\text{D.29})$$

D.3. Límites de integración en el sistema de coordenadas de Hylleraas

Con las nuevas coordenadas cambian obviamente los límites de integración de todas las variables. Vamos a demostrar como plantear el cálculo de las integrales con esta nueva parametrización.

Denotemos por \mathcal{D}_{12} el dominio de integración en el espacio de configuración del sistema de las dos partículas. Sea $F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h)$ una función independiente de la variable ϕ . En la mayoría de nuestros problemas físicos vamos a tener esta situación dada la simetría cilíndrica. La integral de F sobre \mathcal{D}_{12} es una integral múltiple de 5 variables. Los límites de integración son:

$$\begin{aligned}
\rho_e &\in [0, R] \\
\rho_h &\in [0, R] \\
\rho &\in [|\rho_e - \rho_h|, \rho_e + \rho_h] \\
z_e &\in [-H/2, H/2] \\
z_h &\in [-H/2, H/2]
\end{aligned} \tag{D.30}$$

por tanto la integral queda

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{D}_{12}} F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) d\tau &= \int_0^R (\rho_e d\rho_e \int_0^R (\rho_h d\rho_h \\
&\int_{-\pi}^{\pi} (d\phi \int_{-\pi}^{\pi} (d\chi \int_{-H/2}^{H/2} (dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h))))))
\end{aligned} \tag{D.31}$$

Como F es independiente de ϕ , podemos hacer esta primera integral quedando

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{D}_{12}} F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) d\tau &= 2\pi \int_0^R (\rho_e d\rho_e \int_0^R (\rho_h d\rho_h \\
&\int_{-\pi}^{\pi} (d\chi \int_{-H/2}^{H/2} (dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h))))))
\end{aligned} \tag{D.32}$$

El paso de las coordenadas $(\rho_e, \rho_h, \chi, z_e, z_h)$ a las $(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h)$ requiere de ciertas precauciones pues como ya se dijo no hay una correspondencia biyectiva entre las viejas y las nuevas coordenadas. Para un mismo valor de (ρ_e, ρ_h, ρ) existen dos posibles configuraciones que se muestran en la figura D.2.

Ambas configuraciones corresponden a dos valores opuestos de χ . Según esto si parametrizamos por χ , la función a integrar es par en χ y el dominio de integración en χ pasa de ser $[-\pi, \pi]$ a ser $[0, \pi]$ con la aparición de un factor 2. Por tanto D.32 es ahora

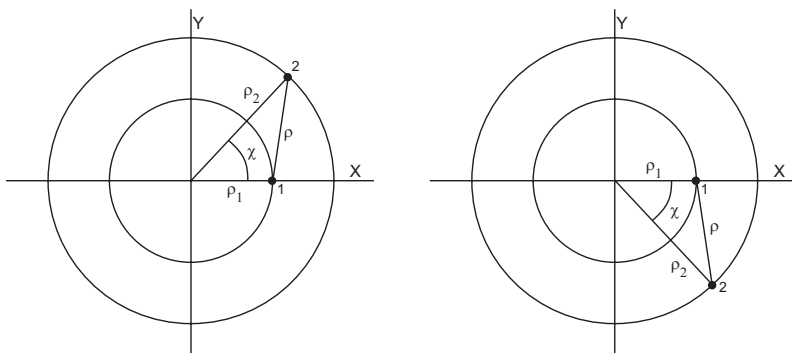


Figura D.2: Posibles configuraciones para la coordenada χ . A la izquierda con $\phi_e > \phi_h$ y a la derecha con $\phi_e < \phi_h$ ($\chi = \phi_e - \phi_h$)

$$\int_{\mathcal{D}_{12}} F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) d\tau = 4\pi \int_0^R (\rho_e d\rho_e \int_0^R (\rho_h d\rho_h \int_0^\pi (d\chi \int_{-H/2}^{H/2} (dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h)))))) \quad (\text{D.33})$$

La correspondencia entre las viejas y las nuevas coordenadas se convierte en biyectiva con

$$\begin{aligned} \rho &= |\rho_e - \rho_h| & \text{para} & \quad \chi = 0 \\ \rho &= \rho_e + \rho_h & \text{para} & \quad \chi = \pi \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

Utilizando la expresión de $d\Sigma$ obtenida anteriormente llegamos a:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}_{12}} F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) d\tau &= 8\pi \int_0^R (\rho_e d\rho_e \int_0^R (\rho_h d\rho_h \int_{|\rho_e - \rho_h|}^{\rho_e + \rho_h} \left(\frac{\rho d\rho}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho^2][\rho^2 - (\rho_e^2 - \rho_h^2)]}} \right) \int_{-H/2}^{H/2} (dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h)))))) \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

Finalmente la fórmula para hacer todas las integrales con el nuevo elemento de volumen es

$$\int_{\mathcal{D}_{12}} F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) d\tau = 8\pi \int_{\mathcal{D}_{12}} \frac{F(\rho_e, \rho_h, \rho, z_e, z_h) \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h \rho d\rho dz_e dz_h}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho^2][\rho^2 - (\rho_e^2 - \rho_h^2)]}} \quad (\text{D.36})$$

Apéndice E

Obtención de la energía mínima de una partícula sometida a un campo eléctrico externo en un disco mediante el método variacional

En este apéndice vamos a desarrollar un procedimiento analítico para encontrar la energía mínima de una partícula confinada en un disco. La función de onda que hemos tomado en este caso ha sido

$$\psi(\rho, \varphi) = \exp\left(-\frac{\rho^2}{2R^2}\right) \times \left(1 - \frac{\rho^2}{R^2}\right) \times (1 + \beta f \rho \cos \varphi) \quad (\text{E.1})$$

donde la parte exponencial y polinómica coinciden con la solución del oscilador armónico. El último término tiene en cuenta la influencia del campo eléctrico externo aplicado. Con E.1 hemos de calcular

$$E(f, R, \beta) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{E.2})$$

El Hamiltoniano es

$$H = -\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + \gamma_X^2 \rho^2 + f \rho \cos \varphi \quad (\text{E.3})$$

que podemos reescribir como

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + \gamma_X^2 \rho^2 + f \rho \cos \varphi \quad (\text{E.4})$$

Evaluamos primero el *ket* haciendo cada una de las derivadas

$$\begin{aligned}
 |H|\psi\rangle &= -\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) + \gamma_X^2\rho^2\psi + f\rho\cos\varphi\psi \\
 \frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2} &= 2f\beta\left(-\frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\left(1-\frac{\rho^2}{R^2}\right)\rho}{R^2} - \frac{2e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\rho}{R^2}\right)\cos(\varphi) \\
 &+ \left(\frac{4e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\rho^2}{R^4} + \left(\frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\rho^2}{R^4} - \frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}}{R^2}\right)\left(1-\frac{\rho^2}{R^2}\right) - \frac{2e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}}{R^2}\right)(f\beta\rho\cos(\varphi) + 1)
 \end{aligned} \tag{E.5}$$

que convenientemente simplificado se reduce a

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2} = \frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}(-3R^4 + 6\rho^2R^2 - \rho^4 - f\beta\rho(9R^4 - 8\rho^2R^2 + \rho^4)\cos(\varphi))}{R^6} \tag{E.6}$$

De igual manera la derivada primera es

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial\psi}{\partial\rho} &= e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}f\beta\left(1-\frac{\rho^2}{R^2}\right)\cos(\varphi) - \frac{2e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\rho(f\beta\rho\cos(\varphi) + 1)}{R^2} \\
 &- \frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}\rho\left(1-\frac{\rho^2}{R^2}\right)(f\beta\rho\cos(\varphi) + 1)}{R^2}
 \end{aligned} \tag{E.7}$$

que simplificando se reduce a

$$\frac{\partial\psi}{\partial\rho} = \frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}(\rho^3 - 3R^2\rho + f\beta(R^4 - 4\rho^2R^2 + \rho^4)\cos(\varphi))}{R^4} \tag{E.8}$$

La derivada segunda con respecto a φ es

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = -e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}}f\beta\rho\left(1-\frac{\rho^2}{R^2}\right)\cos(\varphi) \tag{E.9}$$

Combinando los resultados de E.6, E.8 y E.9 y simplificando de nuevo tenemos

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = \frac{e^{-\frac{\rho^2}{2R^2}} (-6R^4 + 7\rho^2 R^2 - \rho^4 - f\beta\rho(12R^4 - 9\rho^2 R^2 + \rho^4) \cos(\varphi))}{R^6} \quad (\text{E.10})$$

La expresión anterior hay que cambiarla de signo y sumarle los términos correspondientes a la energía del oscilador armónico y de interacción con el campo eléctrico externo. Los límites de integración en ρ son de 0 a R y en φ de 0 a 2π .

Por otra parte la integral de normalización es

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_0^R \int_0^{2\pi} \psi^* \psi \rho d\rho d\varphi = \frac{(-8 + 3e)f^2\pi\beta^2 R^4 + 2(-2 + e)\pi R^2}{2e} \quad (\text{E.11})$$

En la fórmula anterior e se refiere a la base los logaritmos neperianos, $e = 2.718281$ y no a la carga electrónica obviamente. Haciendo por último la integral con el *bra* y usando el resultado de la integral de normalización llegamos a

$$E(f, \beta, R) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{2(e(f^2\beta(3R^2 + 10\beta)R^2 + 6) - 2(f^2\beta(4R^2 + 13\beta)R^2 + 6))}{R^2(-8f^2R^2\beta^2 + e(3f^2R^2\beta^2 + 2) - 4)} \quad (\text{E.12})$$

Ahora hemos de hallar el valor de β que minimiza la expresión anterior. Haciendo la derivada de E.12 con respecto a β obtenemos

$$\frac{dE}{d\beta} = \frac{2f^2(-8 - 3e)^2 f^2 \beta^2 R^4 + 2(-2 + e)(-8 + 3e)R^2 + 4(-2 + e)^2 \beta}{((8 - 3e)f^2 R^2 \beta^2 - 2e + 4)^2} \quad (\text{E.13})$$

Igualando a 0 la fórmula E.13 tenemos dos valores de β . El valor de β correspondiente al mínimo resulta

$$\beta_{min} = \frac{-\sqrt{2(-2 + e)(-8 + 3e)^3 f^2 R^6 + 4(-2 + e)^4} + 2(-4 + e)e + 8}{(8 - 3e)^2 f^2 R^4} \quad (\text{E.14})$$

Por último lo que hay que hacer es sustituir el valor de β_{min} en E.12. El trabajo de simplificación algebraica que hay que realizar llegados a este punto es rayano

en la paciencia humana. Recomendamos al lector hacer uso de alguna aplicación informática que permita operar simbólicamente, como *Mathematica*. El resultado final simplificado de la energía de una partícula en un disco cuántico en presencia de un campo eléctrico externo es

$$E(f, R) = -\frac{\sqrt{2(-2+e)(-8+3e)^3 f^2 R^6 + 4(-2+e)^4 + 2(88-19e)e - 200}}{2(-2+e)(-8+3e)R^2} \quad (\text{E.15})$$

Resulta interesante en la expresión E.15 hacer un desarrollo en serie a segundo orden, aplicable en el caso de campos pequeños,

$$E(f, R) = \frac{6}{R^2} - \frac{(3e-8)^2 f^2 R^4}{4(e-2)^2} \quad (\text{E.16})$$

Para campos débiles obtenemos de nuevo una dependencia cuadrática con el campo y una dependencia con la cuarta potencia del tamaño. Aún podemos hacer una aproximación más en E.15 para el caso de puntos cuánticos grandes. En tal caso se obtiene fácilmente que

$$E(f, R) = \frac{19e-50}{3e-8} \frac{1}{R^2} - \sqrt{\frac{3e-8}{2(e-2)}} f R \quad (\text{E.17})$$

teniendo ahora el efecto Stark cuántico confinado una componente lineal con el campo y con el radio.

Apéndice F

Constantes fundamentales

Cantidad	Símbolo	Valor	Unidad (SI)
Velocidad de la luz en el vacío	c	2.997925×10^8	m/s
Carga elemental	e	1.602176×10^{-19}	C
Constante de Boltzmann	k_B	$1.3806505 \times 10^{-23}$	J/K
Masa en reposo del electrón	m_0	$9.1093826 \times 10^{-31}$	kg
Permitividad eléctrica del vacío	ϵ_0	$8.8541878 \times 10^{-12}$	F/m
Permeabilidad magnética del vacío	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$	H/m
Constante de Coulomb	$\kappa = 1/4\pi\epsilon_0$	8.854187×10^{-12}	F/m
Constante de Planck reducida	$\hbar = h/2\pi$	1.05457×10^{-34}	J s
Magnetón de Bohr	$\mu_B = e\hbar/2m_0$	9.274009×10^{-24}	J/T
Radio de Bohr	$a_0 = \epsilon_0\hbar^2/m_0e^2$	5.29177×10^{-11}	m
Constante de Rydberg	$Ry = m_0e^4/2\epsilon_0^2\hbar^2$	2.17991×10^{-18}	J
Constante de estructura fina	$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$	1/137.04	
Flujo magnético cuántico	$\phi_0 = hc/e$	4.135708×10^{-15}	Wb
electrón-voltio	eV	1.602176×10^{-19}	J
	1 meV/h	241.8	GHz
	1 meV/k _B	11.60	K
	eV/hc	8.06546×10^5	m ⁻¹

Apéndice G

Consideraciones relativas a la integración numérica con *Mathematica*

A lo largo de toda esta tesis la aplicación fundamental de cálculo, tanto algebraico como numérico, ha sido *Mathematica* © Wolfram Research. La aplicación está implementada para todo tipo de plataformas y sistemas operativos.

Mathematica se puede considerar como un lenguaje orientado a funciones. Definiéndolas de manera adecuada es como podemos sacar buen rendimiento a todo el potencial de cálculo y librerías que posee el programa. Los métodos avanzados de integración numérica con *Mathematica* pueden consultarse en la obra *Advanced Numerical Integration in Mathematica* disponible en la web <http://www.wolfram.com>.

El cálculo de la energía de los excitones y complejos excitónicos pasa siempre por minimizar la energía, determinándose esta última a partir de integrales numéricas que en algunos casos llegan a tener hasta 5 variables. Recordemos que para el complejo (D^+, X) estas variables son r_e , r_h , r_{eh} , z_e y z_e . Cuando se tienen tantas variables a integrar se ha de ser cuidadoso ya que los errores que se pueden cometer pueden ser importantes si no se toman precauciones. El algoritmo básico de integración numérica de *Mathematica* puede considerarse inteligente en el sentido de que muestrea primero la función a integrar por si tuviera oscilaciones rápidas. Si tal es el caso, el incremento en las iteraciones no es constante sino que lo varía dependiendo de la función, haciendo el paso más pequeño para tener en cuenta las

posibles fluctuaciones rápidas de las funciones. Esto conlleva en algunos casos un notable incremento de tiempo de cálculo pero con la garantía de que los resultados son bastante precisos.

No obstante los algoritmos de integración se pueden manipular por el usuario, lo que se conoce en el entorno de *Mathematica* como métodos. Para integrales múltiples uno de los métodos empleados es **"CartesianRule"**, que es como un método trapecoidal pero de varias dimensiones en donde se hace un muestreo de la función sobre el producto Cartesiano de los intervalos. Este método funciona bien en integrales tridimensionales. En integrales de 2 y 3 dimensiones hemos empleado este método.

Para integración multidimensional el método adecuado es **"MultiDimensionalRule"**, donde cada punto tiene asociado el mismo peso y se van permutando los puntos del intervalo de integración. Se puede cambiar el peso de cada punto o intervalo de puntos si es necesario.

Por último, una manera rápida aunque menos precisa de estimar las integrales (lo que permite establecer el rango de variación de los parámetros variacionales para afinar después el cálculo), es mediante los métodos de **"MonteCarlo"** y **"Quasi-MonteCarlo"**. Estos procedimientos son aleatorios a la hora de escoger los puntos sobre los que se va a realizar la integración. Con el primero de ellos se escogen puntos al azar distribuidos uniformemente sobre el intervalo de integración, mientras que con el segundo se usan secuencias calculadas de manera determinista en vez de usar una secuencia uniforme.

Este es un resumen de los métodos de integración numérica que se han empleado en los cálculos de esta tesis. Con los de MonteCarlo se ha hecho una cruda estimación inicial y luego se ha afinado con los otros hasta ver que los resultados eran similares.

Índice de figuras

1.1. Tamaños relativos entre un excitón y un átomo	12
2.1. Excitones de Frenkel y Wannier	22
3.1. Estructura de niveles con campo	52
3.2. QCSE en cajas cuánticas piramidales	56
3.3. Desplazamiento Stark lateral	58
3.4. Desplazamiento Stark lateral en 4 muestras	59
3.5. Niveles de Landau	62
3.6. Masas efectivas	68
4.1. Coordenadas para la descripción del excitón en un disco	77
4.2. Energía del estado fundamental del excitón	81
4.3. Energía del estado fundamental del excitón en función del campo	83
4.4. Potencial de Coulomb medio	84
4.5. Valor esperado de la distancia electrón-hueco	85
4.6. Efecto Stark lateral	86
4.7. Integral óptica	91
4.8. Función de onda con campo eléctrico	92
5.1. Espectros de PL	102
5.2. Coordenadas de Hylleraas cilíndricas	103
5.3. Energía y fuerza del oscilador	104
5.4. Cálculos del tiempo	108
5.5. Esquema de la muestra estudiada	110

5.6.	Imagen de AFM de la muestra estudiada	111
5.7.	Relación entre anchuras y alturas de las cajas cuánticas	111
5.8.	Espectros de PL y PC	114
5.9.	Espectros de PL con campo	116
5.10.	Espectros de PL con campo y PC	118
6.1.	Sistema de coordenadas para un disco cuántico	127
6.2.	Energía de ligadura del dador en el centro	130
6.3.	Energía de ligadura del electrón en $\xi = \frac{1}{2}$	131
6.4.	Energía de ligadura del electrón en $\xi = 1$	132
6.5.	Energía de ligadura del electrón en $\xi = \frac{1}{2}$ y θ variable	133
6.6.	Energía de ligadura del electrón en función de ξ	134
6.7.	Energía de ligadura del electrón en función de θ	136
6.8.	Energía de ligadura del electrón en función de la orientación del campo	137
6.9.	Curvas de nivel de probabilidad	138
7.1.	Curvas de nivel de probabilidad	153
7.2.	Curvas de nivel de probabilidad	157
7.3.	Energía (D^+ , X) y del excitón	159
7.4.	Energía (D^+ , X) y del excitón	161
7.5.	$\langle \rho_{eh}^2 \rangle$	163
7.6.	Relación $ V_C /M$	164
7.7.	Diferencia energética entre el excitón y el (D^+ , X)	166
7.8.	Energía del complejo según la posición y el tamaño	167
7.9.	Energía del complejo según la posición de la impureza	168
7.10.	Energía del complejo para $\zeta = 0.5$	169
7.11.	Energía del complejo para $\zeta = 0.75$	169
7.12.	Desplazamiento diamagnético CdSe	170
7.13.	Pico energético del excitón en CdSe	171
A.1.	Estructura de niveles con campo	183

D.1. Coordenadas de Hylleraas cilíndricas	196
D.2. Límites de integración en coordenadas de Hylleraas	204

Índice de tablas

2.1. Parámetros del excitón para varios materiales	25
3.1. Parámetros de algunos materiales	68
4.1. Parámetros del InAs	80
4.2. Parámetros del InAs	88
5.1. Resolución espectral en nanómetros y milielectronvoltios para los es- pectrómetros utilizados.	113

Lista de publicaciones

- Juan Martínez-Pastor, José Bosch Bailach, D. Biswas, B. Alén, J. L. Valdés, J. M. García, and L. González. *Exciton Recombination in Self-Assembled InAs/GaAs Small Quantum Dots under an External Electric Field*. *phys. stat. sol. (a)* **190**, No. 2, 599-603 (2002)
- Benito Alén, José Bosch Bailach, Daniel Granados, Juan Martínez-Pastor, Jorge M. García, and Luisa González. *Oscillator strength reduction induced by external electric fields in self-assembled quantum dots and rings*. *Phys. Rev. B* **75**, 045319 (2007)
- José Bosch Bailach, B. Alén, Juan Martínez-Pastor, D. Granados, J. M. García, L. González. *Competition between carrier recombination and tunneling in quantum dots and rings under the action of electric fields*. *Superlattices and Microstructures*, **43**, 582-587 (2008)
- A. Oukerroum, E. Feddi, José Bosch Bailach, Juan Martínez-Pastor, F. Dujardin and E. Assaid. *On the anomalous Stark effect in a thin disc-shaped quantum dot*. *J. Phys.: Condens. Matter* **22** (2012) 375301
- F. Dujardin, A. Oukerroum, E. Feddi, José Bosch Bailach, Juan Martínez-Pastor and M. Zazi. *Effect of a lateral electric field on an off-center single dopant confined in a thin quantum disk*. *J. Appl. Phys.* **111**, 034317 (2012)
- F. Dujardin, E. Feddi, A. Oukerroum, José Bosch Bailach, Juan Martínez-Pastor and E. Assaid. *Lateral induced dipole moment and polarizability of excitons in a ZnO single quantum disk*. *J. Appl. Phys.* **113**, 064314 (2013)

- Esteban Pedrueza, Alfredo Segura, Rafael Abargues, José Bosch Bailach, Jean Claude Chervin and Juan Martínez-Pastor. *The effect of quantum size confinement on the optical properties of PbSe nanocrystals under exposure to heat and hydrostatic pressure*. Nanotechnology **24**, 205701 (2013).
- José Bosch Bailach, E. Feddi, Juan Martínez-Pastor and F. Dujardin. *Comparison of exciton, donor and exciton bound to ionized donor in single doped quantum dot in magnetic field*. (Artículo pendiente de ser evaluado)

Agradecimientos

Primero quiero agradecer a mis directores de tesis, D. Juan Martínez-Pastor y El Mustapha Feddi, la ayuda y las ideas que en todo momento han prestado, gracias a las cuales y también a la paciencia que han tenido conmigo, este trabajo se ha convertido en una realidad tangible. Con Juan, catedrático en la Universitat de València y con un gran currículum experimental, hace muchos años que empecé este proyecto, haciendo mis primeros intentos midiendo espectros de sólidos. Y pese a que debido a mis obligaciones docentes no he podido disponer de todo el tiempo de forma continua y ello no fue óbice para que Juan confiara en mi trabajo, esta tesis ha sido una gran suma de pequeñas aportaciones prácticamente diarias. Con Feddi casi hemos hecho un puente entre Valencia, Rabat y Metz, acudiendo cada uno de nosotros en verano a cada una de las ciudades. La colaboración con este último ha sido pues intensísima. En Feddi he encontrado un auténtico maestro con una sólida formación teórica. También hay que mencionar en estas líneas a José Luis Valdés, antiguo decano de la Facultad de Matemáticas y referente en el grupo por sus brillantes ideas.

Traigo a colación algunas de las reflexiones que hace Guillermo Muñoz en los agradecimientos de su tesis doctoral. No deseo, al igual que él, que los agradecimientos sean un estorbo sentimental. Llegados a este punto si hay algo que nos motiva, es la pasión y el sentimiento por conocer la naturaleza de las cosas. La investigación científica, como otros aspectos de la vida está impregnada de una necesidad práctica que puede acabar por destruir una de sus esencias fundamentales, que es la de dar alas a la imaginación y a la elucubración, pilares básicos de la ciencia, del arte y de

otras creaciones humanas. Es cierto que es el científico, muchas veces solo, el que llega a descubrimientos e ideas que revolucionan por completo la idea que del mundo físico tenemos hasta ese momento. Ello debería servirnos como cura de humildad y reconocer, como dijo Robert Hooke, que hemos llegado hasta este punto porque somos enanos que vamos sobre lomos de gigantes. Es digno pues hacer mención y agradecimiento a todos aquellos que mucho antes que nosotros estuvieron aquí y supieron contemplar el mundo bajo un prisma diferente. Debería ser un orgullo para nosotros considerarse sus seguidores. En un mundo cada vez más interconectado y con los nuevos paradigmas que se avecinan los científicos debemos estar más cohesionados.

También he de agradecer a mis compañeros de grupo, J. Benito Alén, Carlos Rudamas, David Fuster, Jordi Gomis, Guillermo Muñoz y Josep Canet, todos doctores, el apoyo que me han brindado. Los dos primeros son los compañeros con quien empecé mis estudios de postgrado y aunque los azares postdoctorales los han llevado a sitios diferentes, no por ello el aprecio que siento por tales personas se ha visto menguado.

Mención especial merece Laura Martín, doctora que durante unos años permaneció en el grupo y por la que profeso un especial aprecio.

De igual manera he de agradecer a los nuevos investigadores del grupo que han ido viniendo, D. Raúl García Calzada, Esteban Pedrueza, Abdelkarim Oukerroum, Kamal Abderrafi, los doctores José Marqués, Pedro Rodríguez y Rafael Abargues los buenos momentos, discusiones y charlas que he tenido con ellos. Sin olvidar a Ernesto Jiménez, persona de hondas, gratas y surrealistas deliberaciones rayanas en la paciencia humana. Hasta aquí todas las personas que directamente han estado relacionadas con la gestación de esta tesis.

Hay otro colectivo cuya relación es indirecta pero no por ello menos importante

pues han tenido también que ser testigos del trabajo. Me es muy grato nombrar aquí a dos mujeres difíciles de olvidar: Rosa Roca, artista y creadora con la que comparto su manera de entender y percibir la vida y que estoy seguro ha tenido una peculiar influencia a la hora de hacer ciencia en la forma en que la he hecho y además tuvo a bien el que le tomara prestado un motivo de uno de sus cuadros y que ha servido para ilustrar la portada de mi tesis. Bergit Widenmann, mujer que me ha aportado una actitud muy cosmopolita y refinada de entender el mundo, actitud que creo que ha de tener todo científico, pues la realidad es a veces muy sutil. Y a Manuel Galindo Widenmann y María Ferrer Torres por tantas cosas cuya enumeración no cabría aquí.

A Eduardo Moya, que aunque ya no se encuentra entre nosotros, siempre fue una persona con la puerta abierta y con quien poder hablar o tomar un café.

De igual manera he de hacer mención aquí a dos de mis compañeros a lo largo de la carrera universitaria: José Luis Castelló y Fermín Hernández. Con el primero de ellos tengo la suerte de compartir mi trabajo como profesor de enseñanza secundaria y bachiller, y muchas otras cosas más. Con Fermín he desarrollado una honda amistad que me ha ayudado a escoger de manera adecuada muchos itinerarios a lo largo de mi vida.

He de mencionar por último a todos aquellos que han estado siempre a mi lado, mi familia y en particular mis hermanos Pilar y Jesús y sobrinos Andreu y Héctor. Es posible que no haya podido estar con ellos todo lo deseable mientras se prolongaba *ab aeterno* la redacción de esta tesis.

Como epílogo, si bien los aciertos de este trabajo son, en buena parte, atribuibles a otros, los fallos y errores, que los habrá, son únicamente de mi responsabilidad.

Valencia, Octubre de 2012

José Bosch Bailach