

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA
BIBLIOTECA CIÈNCIES

→ Física

Nº Registre 6867

DATA 7.10.94

SIGNATURA

231.T.D

Nº LIBIS: 119579251

29 cms.

231 TESIS
DOCTORAL 25-5-94

UNIVERSIDAD DE VALENCIA
Departamento de Física Aplicada

Fisicas
231
T.D



EFECTO RAMAN RESONANTE CON
CAMPOS MAGNÉTICOS INTENSOS EN
HETEROESTRUCTURAS
SEMICONDUCTORAS



Memoria presentada por:
Ana Cros Stötter
para optar al grado de
Doctor en Física.

UMI Number: U603089

All rights reserved

INFORMATION TO ALL USERS

The quality of this reproduction is dependent upon the quality of the copy submitted.

In the unlikely event that the author did not send a complete manuscript and there are missing pages, these will be noted. Also, if material had to be removed, a note will indicate the deletion.



UMI U603089

Published by ProQuest LLC 2014. Copyright in the Dissertation held by the Author.
Microform Edition © ProQuest LLC.

All rights reserved. This work is protected against
unauthorized copying under Title 17, United States Code.



ProQuest LLC
789 East Eisenhower Parkway
P.O. Box 1346
Ann Arbor, MI 48106-1346





DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA

C/. Doctor Moliner, 50

46100 BURJASSOT (VALENCIA) SPAIN

Tels. (96) *386 43 00/386 43 45

Fax (96) 364 23 45

D. ANDRÉS CANTARERO SÁEZ, Profesor Titular de Física Aplicada de la Universidad de Valencia,

CERTIFICA:

Que la presente memoria: "Efecto Raman Resonante con Campos Magnéticos Intensos en Heteroestructuras Semiconductoras" ha sido realizada bajo mi dirección en el Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Valencia, por la licenciada en Física Dña. ANA CROS STÖTTER, y constituye su Tesis para optar al grado de Doctor en Física.

Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente, presenta en la Universidad de Valencia la referida Tesis Doctoral, firmando el presente certificado en

Burjassot, a 8 de Abril de 1994.

A. Cantarero

Fdo. Andrés Cantarero Sáez.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, quiero agradecer a mi director de Tesis, Andrés Cantarero, el estímulo científico, orientación y apoyo personal que me ha ofrecido desde mi llegada a Valencia. Su entusiasmo y paciencia han convertido mi iniciación a la investigación en una de las etapas más intensas de mi vida.

También quisiera agradecer su ayuda a Carlos Trallero-Giner, que contribuyó al desarrollo de este trabajo desde su comienzo. Con su inagotable optimismo he conseguido superar los primeros obstáculos de esta tesis.

Durante los últimos cuatro años he tenido la oportunidad de colaborar con distintos grupos de investigación. Me gustaría agradecer su calurosa acogida al Profesor Ulrich Rössler y a su familia que, junto con todos los componentes de su grupo, me ayudaron a sobrevivir en el gélido invierno de Regensburg.

A Francisco Meseguer le debo el haberme enseñado a desenvolverme en el laboratorio.

Mi más sincero agradecimiento al Profesor Manuel Cardona, por las numerosas ocasiones en las que he podido contagiarme de su entusiasmo, y por haberme brindado la oportunidad de acercarme a la Física experimental. En su grupo aprendí el valor de la discusión científica y tuve ocasión de saborear el peor café y los mejores pasteles de mi vida. Quisiera agradecer especialmente a Tobias Ruf y Jürgen Spitzer su colaboración en la realización de los experimentos. Su contribución al desarrollo de este trabajo ha sido decisiva.

A Luis Viña y José Calleja debo agradecerles las múltiples discusiones que han ido enriqueciendo este trabajo y haber aumentado mi confianza en la ciencia experimental.

Agradezco su hospitalidad a todos los miembros del departamento de Física Aplicada. A Vicente Muñoz, Miguel Andrés y Alfredo Segura por sus prácticos consejos. A Juan Martínez y Alberto García por su inestimable apoyo, y a todos los compañeros del departamento por saber amenizar mi existencia con ese derroche de risas y alguna que otra palmada en el hombro.

No quisiera olvidar a los amigos que dejé en Madrid y que, a pesar de la distancia, han seguido brindándome su apoyo. En especial quiero mencionar a Pilar y Marisol, cuya

sinceridad y honradez me ha orientado en los momentos más difíciles.

Finalmente, quisiera dar las gracias a mis padres y hermanos por su comprensión, y a Emiliano por haber llenado estos años con su presencia.

La vida es breve y la belleza efímera, princesita. Y sería injusto poseerla eternamente ... Lo hermoso es enseñar a volar a un gorrioncillo, porque en su libertad va implícita tu renuncia.

La Tabla de Flandes. Arturo Pérez-Reverte.

A mi hermano Benito.

A mi hermana Helga.

Índice

1	Introducción	1
2	Estructura cristalina y de bandas de los cristales semiconductores	9
2.1	Estructura cristalina	9
2.2	Estructura electrónica de bandas	11
2.3	Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	15
2.4	Estructura de bandas de un pozo cuántico	23
2.5	Estructura electrónica del pozo cuántico en un campo magnético	37
3	Excitaciones elementales y su interacción	51
3.1	Fotones e interacción electrón-radiación	52
3.2	Fonones e interacción electrón-fonón	62
3.2.1	Interacción vía Potencial de Deformación	68
3.2.2	Interacción vía Fröhlich	72
3.3	Fonones en pozos cuánticos y superredes	73
4	Dispersión Raman por fonones	81
4.1	Eficiencia de la dispersión Raman	83
4.2	Dispersión Raman de primer orden. Amplitud de probabilidad	88
5	Dispersión Raman resonante de primer orden con campo magnético intenso: Semiconductores másicos	95
5.1	Modelo parabólico	96
5.1.1	Interacción vía potencial de deformación	99

5.1.2	Interacción vía Fröhlich	105
5.2	Modelo no parabólico. Hamiltoniano de Luttinger	109
5.2.1	Interacción vía potencial de deformación	111
5.2.2	Interacción vía Fröhlich	114
5.3	Corrección excitónica a la energía	117
6	Dispersión Raman resonante de primer orden con campo magnético intenso: Pozos cuánticos	119
6.1	Modelo parabólico	120
6.1.1	Interacción vía potencial de deformación	125
6.1.2	Interacción vía Fröhlich	139
6.2	Modelo no parabólico	145
6.2.1	Interacción vía potencial de deformación.	147
6.2.2	Interacción vía Fröhlich	150
6.3	Corrección excitónica a la energía	156
7	Resultados Experimentales	159
7.1	Descripción de las muestras	159
7.2	Descripción del sistema experimental	160
7.3	Energía de las resonancias en función del campo magnético	163
7.4	Masas efectivas y dispersión de la banda de valencia	171
7.5	Perfiles de magneto-Raman	176
8	Efectos excitónicos	181
8.1	Descripción del experimento	182
8.2	Pares electrón-hueco libres como estados intermedios del proceso de dispersión	187
8.3	Excitones como estados intermedios del proceso de dispersión	192
8.3.1	Cálculo de la amplitud de probabilidad	195
8.3.2	Resultados del modelo	197

ÍNDICE	iii
Resumen	201
A Elementos de matriz del Hamiltoniano de Kane 8×8	205
B Funciones de onda de un pozo cuántico	209
C Potencial del fonón confinado	211
D Elementos de matriz de la interacción coulombiana	215
Abreviaturas y símbolos	225
Publicaciones	231

Capítulo 1

Introducción

Sir C. V. Raman comenzó a interesarse por la dispersión de la luz en sustancias líquidas durante un viaje a Europa en 1921. Al cruzar el Mediterráneo en barco a vapor quedó profundamente impresionado por el color azulado del mar, de forma que tras regresar a la India inició una serie de experimentos con los que pretendía analizar la luz dispersada por distintos líquidos. Fue en el transcurso de estos trabajos cuando, estudiando una muestra de benceno junto con sus colaboradores Krishna y Venkatesvaran,¹ observó una serie de líneas espectrales cuya frecuencia estaba desplazada respecto a la esperada.² Escasamente un mes más tarde y de forma independiente, Mandel'shtam y Landsberg publicaron resultados similares en la interacción de la luz sobre una muestra de cuarzo.³ Corría el año 1928. Aunque Sir Raman no estaba al corriente de ello, el físico Austríaco Smekal había predicho ya en 1923 la existencia de estas líneas espectrales cuya realidad acababa de ser verificada experimentalmente. El éxito de los primeros experimentos permitió determinar con claridad que el nuevo fenómeno, conocido más tarde como *efecto Raman*, constituía una herramienta excelente para el estudio de las excitaciones moleculares y su estructura. Sin embargo aún hubieron de transcurrir treinta años para que, impulsado por el descubrimiento del láser en 1960, el estudio del efecto Raman se generalizara a la investigación de las excitaciones eléctricas, magnéticas y vibracionales de los sólidos cristalinos para convertirse en una de las técnicas más potentes de la espectroscopía de sólidos.



La espectroscopía Raman consiste en la dispersión inelástica de la luz debida a su interacción con las excitaciones del medio (emisión o absorción de fonones, magnones, polaritones etc.), que en el caso que nos atañe es un sólido cristalino. La interacción no se produce de forma directa, sino a través de los estados electrónicos fundamentales del sistema. A lo largo de este trabajo centraremos nuestra atención en la dispersión Raman mediada por fonones ópticos en semiconductores cristalinos. El proceso de emisión de un fonón (dispersión Stokes) más probable (Raman resonante) puede describirse mediante tres pasos sucesivos:

1. El fotón incidente, de frecuencia ω_L y vector de ondas \vec{k}_L , interacciona con los estados electrónicos del cristal, creando un par electrón-hueco virtual.
2. Bien el electrón o bien el hueco emiten un fonón de frecuencia $\omega_{ph}(\vec{q}_{ph})$ y momento \vec{q}_{ph} , pasando, en su caso, a un nuevo estado virtual.
3. El nuevo par electrón hueco se recombina, emitiendo un fotón de frecuencia $\omega_S = \omega_L - \omega_{ph}(\vec{q}_{ph})$ y momento $\vec{k}_S = \vec{k}_L - \vec{q}_{ph}$.

Las distintas etapas de la interacción se representan esquemáticamente en la Figura 1.1.

El proceso resonante se manifiesta con un marcado aumento de la probabilidad de emisión Raman y se produce cuando la dispersión tiene lugar en las proximidades de un punto crítico (punto en el que la densidad de estados es singular) de la estructura electrónica de bandas del cristal, es decir, siempre que la energía del fotón incidente (resonancia de entrada) o dispersado (resonancia de salida) coincida con la energía de una transición interbanda. El análisis del comportamiento resonante de la dispersión Raman aporta información sobre las interacciones que intervienen en el proceso, en nuestro caso interacción electrón-fonón y electrón-fotón, así como sobre los modos de vibración (fonones) y los estados electrónicos del sistema. Por otra parte, las reglas de selección que rigen estos procesos permiten establecer una relación entre la polarización de la luz incidente y dispersada y las propiedades de simetría de las excitaciones inducidas en el sólido. Es posible ampliar aún más la información obtenida si sometemos el cristal a algún tipo de perturbación que modifique sus estados electrónicos o vibracionales. Esto

puede conseguirse mediante campos eléctricos o magnéticos, variando su temperatura, sometiéndolo a presión, o incluso modificando de forma controlada su composición o su

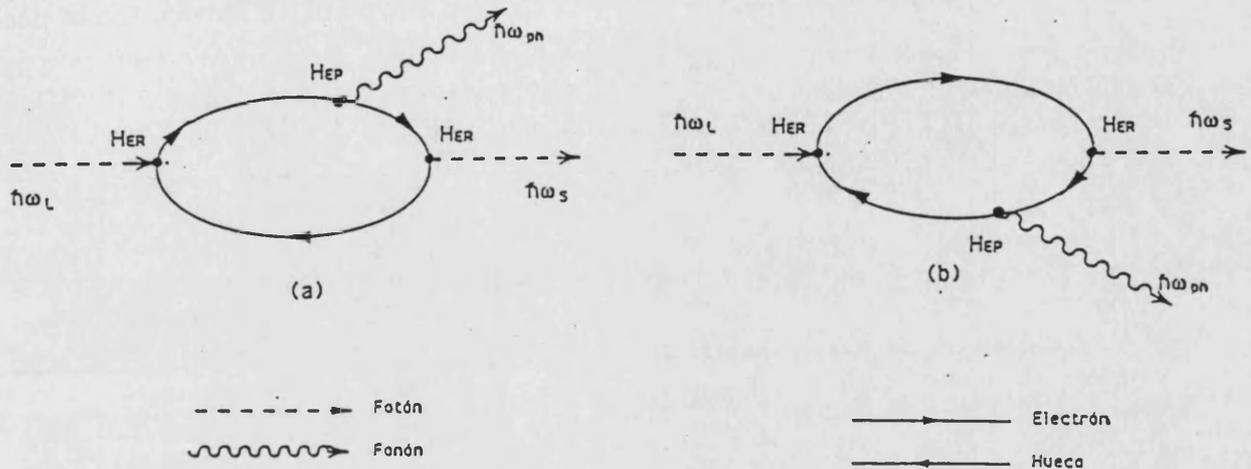


Figura 1.1: Diagramas de Feynman de un proceso Raman resonante con emisión de un fonón (Stokes). (a) El fonón interacciona con el hueco. (b) El fonón interacciona con el electrón.

estructura durante el crecimiento cristalino.

Al aplicar un campo magnético intenso se producen cambios profundos en los estados electrónicos del cristal. La energía queda cuantizada en niveles de Landau y la densidad de estados adquiere un carácter unidimensional. Estos cambios se manifiestan en el espectro Raman mediante un incremento importante de la eficiencia de dispersión. Por otra parte, la posibilidad de obtener un aumento resonante de la señal Raman crece considerablemente, puesto que cada nivel de Landau constituye un punto crítico unidimensional. Estudiando la variación de la intensidad del espectro Raman en función del campo magnético aplicado (magneto-Raman) obtendremos fuertes resonancias^{5,6,8} cuya dependencia con la energía del láser refleja directamente las características de la estructura de bandas del cristal.

La tecnología de semiconductores se ha orientado en los últimos años hacia la obtención de materiales con mayor densidad de estados electrónicos, lo que se consigue

mediante el confinamiento de los portadores de carga en alguna de las direcciones del espacio. En la Figura 1.2 se representa esquemáticamente la evolución de la densidad de estados a medida que aumenta el confinamiento (sistemas tridimensionales (3D), bidimensionales (2D), unidimensionales (1D) y cerodimensionales (0D)). Hoy en día es posible el

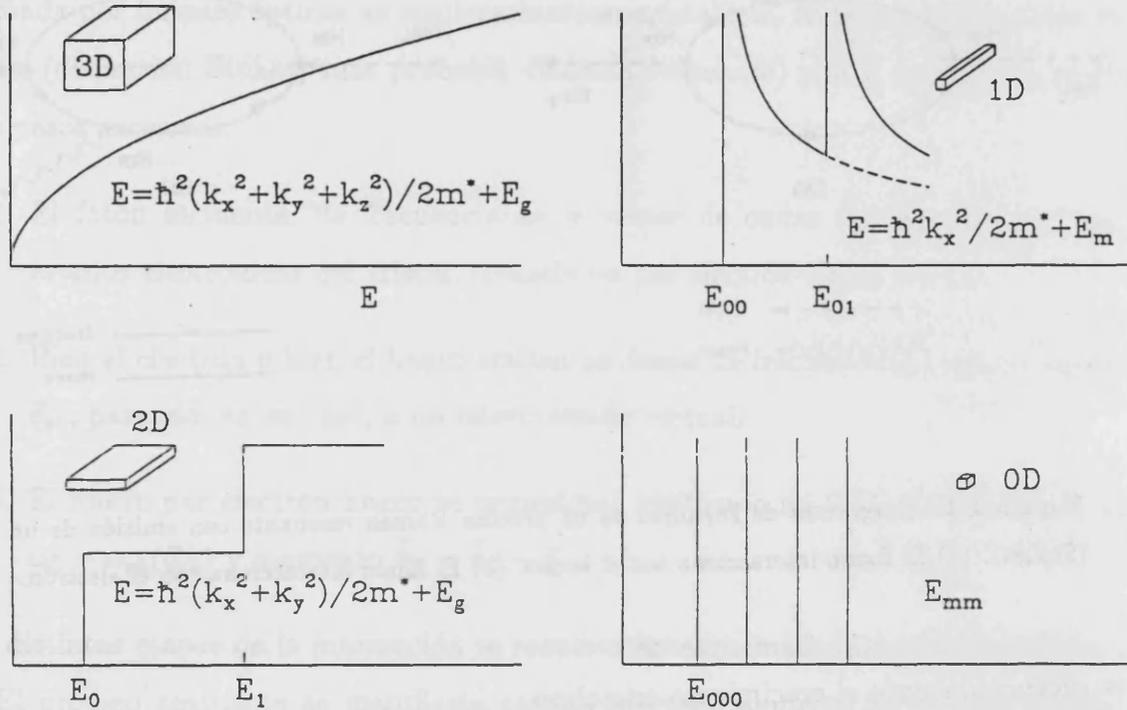


Figura 1.2: Evolución de la densidad de estados electrónicos a medida que aumenta el confinamiento del sistema. 3D corresponde a un sistema tridimensional, 2D a uno bidimensional, 1D unidimensional y 0D cerodimensional.

crecimiento controlado de capas semiconductoras de espesor comparable a la longitud de *de Broglie* de los electrones en el cristal, de forma que sus estados electrónicos reflejan la cuantización de la energía, consecuencia del confinamiento. El estudio de los efectos cuánticos en dispositivos semiconductores se remonta a 1957. Ese año, J. R. Schrieffer,¹⁰ estudiando la corriente de electrones en una unión metal-óxido-semiconductor (MOS), formuló la posibilidad de que su movimiento estuviera cuantizado debido a la forma del potencial en la interfase. Este descubrimiento marcó el inicio del desarrollo de las estructuras semiconductoras de comportamiento cuántico, pero la tecnología de crecimiento de

cristales debía aún alcanzar la madurez suficiente para controlar el diseño de las estructuras cuánticas con la perfección adecuada a las nuevas exigencias. A partir de esa fecha, el avance de las técnicas de crecimiento de películas delgadas, Epitaxia de Haces Moleculares^{11,12} (MBE), Epitaxia Metalo-Orgánica en Fase Gaseosa¹⁴ (MOVPE), Epitaxia en Fase Líquida¹⁵ (LPE) etc., preparó el camino para un desarrollo sin precedentes en el área de las heterouniones y dispositivos cuánticos. Estas técnicas han continuado perfeccionándose, permitiendo hoy en día el control de la anchura de las capas semiconductoras con precisión atómica.¹⁶

Una de las estructuras cuánticas más revolucionarias fue propuesta por Esaki y Tsu en 1970.¹⁷ Idearon el crecimiento de capas delgadas de materiales semiconductores de distintas características, repetidos de forma periódica para formar lo que hoy conocemos como pozos cuánticos múltiples (MQW) y superredes (SL). Poco después de crecer las

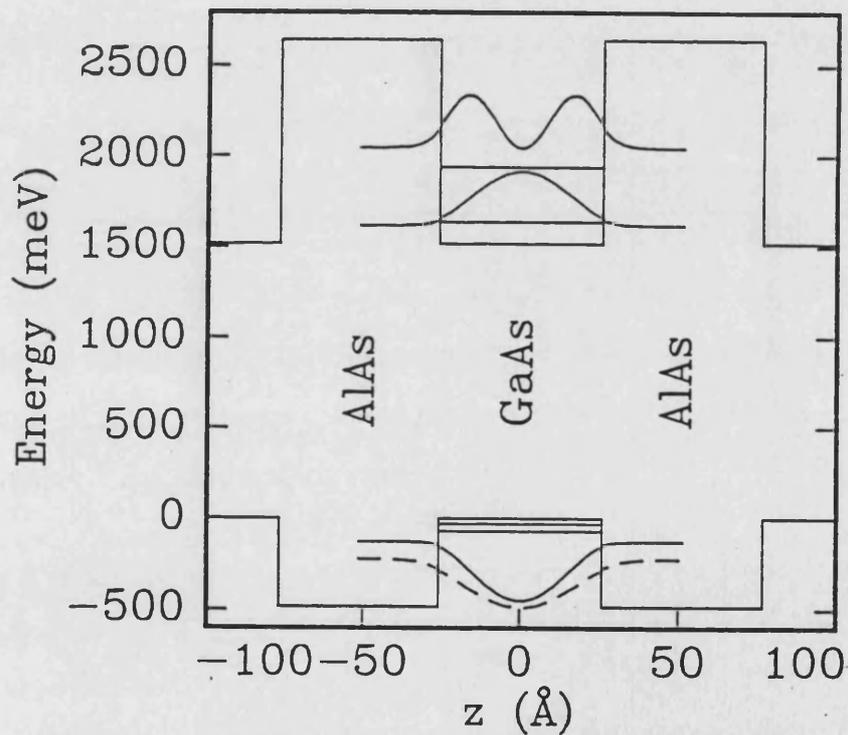


Figura 1.3: Representación esquemática de la estructura de bandas de un pozo cuántico de GaAs/AlAs.

primeras muestras (pozos cuánticos de GaAs/GaAlAs),¹⁸ se llevaron a cabo experimen-

tos de absorción y efecto túnel resonante que permitieron probar la cuantización de los estados electrónicos de la estructura.^{19,20} A partir de estos experimentos, el estudio y aplicación de superredes semiconductoras y pozos cuánticos ha superado las expectativas más optimistas, de forma que hoy en día constituyen el elemento base dispositivos como láseres (en reproductores de Compact Disk) y transistores de bajo ruido y alta movilidad (HEMT).¹³

Las superredes son sistemas de gran interés que presentan dos tipos de propiedades complementarias. Por una parte, si la longitud de onda de *de Broglie* de los portadores de carga es mayor que la anchura de la capas que forman la superred, los efectos cuánticos adquieren un protagonismo especial en la determinación de la estructura electrónica del sistema. La superred presenta además características propias cuyo origen se encuentra en la repetición periódica de las capas que la forman. Al superponer una estructura de período d sobre la periodicidad natural del cristal, aparecen efectos nuevos diferentes de los que cabría esperar del análisis aislado de los materiales que forman cada capa. En el espacio de momentos, la nueva periodicidad se refleja en la aparición de una minizona de Brillouin de tamaño $2\pi/d$ en la dirección de crecimiento. Esta propiedad conduce a cambios profundos en la dispersión de energía y en el comportamiento de las excitaciones del sólido, cambios que han sido observados, por ejemplo, en fonones y plasmones.²²⁻²⁴ Además de superredes y pozos cuánticos, los últimos avances en la tecnología de micrograbado o nanolitografía han permitido obtener estructuras en las que es posible observar efectos cuánticos uni- y cero- dimensionales (hilos cuánticos²⁵ y puntos cuánticos²⁶ respectivamente).

Después de un breve estudio de la dispersión Raman resonante en un cristal tridimensional, en este trabajo nos centraremos en el análisis de las características esenciales del espectro Raman de un pozo cuántico en presencia de un campo magnético intenso. La cuantización de los estados electrónicos debido al confinamiento del pozo, junto con la acción del campo magnético, dan lugar a una densidad de estados cerodimensional que enriquece la información contenida en el espectro Raman resonante. Sin embargo, como veremos en los próximos capítulos, la complejidad del espectro dificulta enormemente su

interpretación. Esta situación conduce a la necesidad de desarrollar un modelo teórico que permita analizar la estructura relevante del experimento.

En la primera parte de esta memoria (Capítulos 2 al 4) se introducen las herramientas teóricas básicas que se utilizarán posteriormente en los Capítulos 5 al 7 para estudiar las características del espectro Raman resonante en presencia de un campo magnético intenso. En el Capítulo 2 nos proponemos dar una visión general de la estructura cristalina y propiedades electrónicas de los cristales semiconductores. La estructura de bandas de energía de este tipo de materiales se analiza en la Sección 2.3, dentro del marco de la teoría $\vec{k} \cdot \vec{p}$. En la Sección 2.4 se estudia la estructura de bandas de un pozo cuántico utilizando la aproximación de la función envolvente. Finalmente, se considera el efecto de un campo magnético sobre los estados electrónicos, tanto en materiales másicos como en pozos cuánticos. En el Capítulo 3 se estudian las excitaciones elementales que intervienen en la dispersión Raman por fonones (fotones y fonones) así como su interacción, particularizando en la segunda parte de este capítulo al caso de pozos cuánticos y superredes. El desarrollo teórico concluye en el Capítulo 4, donde se definen las magnitudes que caracterizan la dispersión Raman resonante de primer orden. En el Capítulo 5 se desarrolla un modelo teórico que permite calcular la eficiencia Raman en materiales másicos en presencia de un campo magnético intenso. Este capítulo introduce los elementos básicos que se utilizan en el Capítulo 6, donde se presenta una teoría semejante aplicable al estudio de la dispersión Raman en pozos cuánticos. El modelo se utiliza en el Capítulo 7 para analizar en detalle dos pozos cuánticos de GaAs/AlAs de anchura diferente. En el Capítulo 8 se analizan los efectos excitónicos más relevantes en el espectro Raman, estudiando con detalle las reglas de selección de los procesos doblemente resonantes. Finalmente se resumen las conclusiones fundamentales de este trabajo.

Capítulo 2

Estructura cristalina y de bandas de los cristales semiconductores

Debido a su importancia tecnológica, los semiconductores III-V pertenecen al grupo de materiales más estudiados. Son fáciles de crecer en capas delgadas y, dado que en la mayoría de ellos el gap de energía prohibida se encuentra en el rango del espectro visible o infrarrojo próximo, pueden ser analizados mediante técnicas ópticas con los láseres de colorante disponibles. Por las razones expuestas, dirigiremos el estudio del efecto Raman resonante a este tipo de materiales. A modo de introducción, repasaremos brevemente su estructura cristalina y de bandas, y desarrollaremos un modelo que permite calcular los niveles de energía de un pozo cuántico teniendo en cuenta la complejidad de las bandas en los semiconductores III-V. Finalmente, estudiaremos el comportamiento del cristal en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento del pozo.

2.1 Estructura cristalina

Centraremos nuestra atención en los semiconductores formados por unión de un elemento del grupo III de la tabla periódica (catión) con otro del grupo V (anión). Los átomos de cada grupo se unen a través de un enlace iónico-covalente entre los cuatro orbitales híbridos sp^3 de cada átomo, por lo que estos semiconductores tienen un cierto

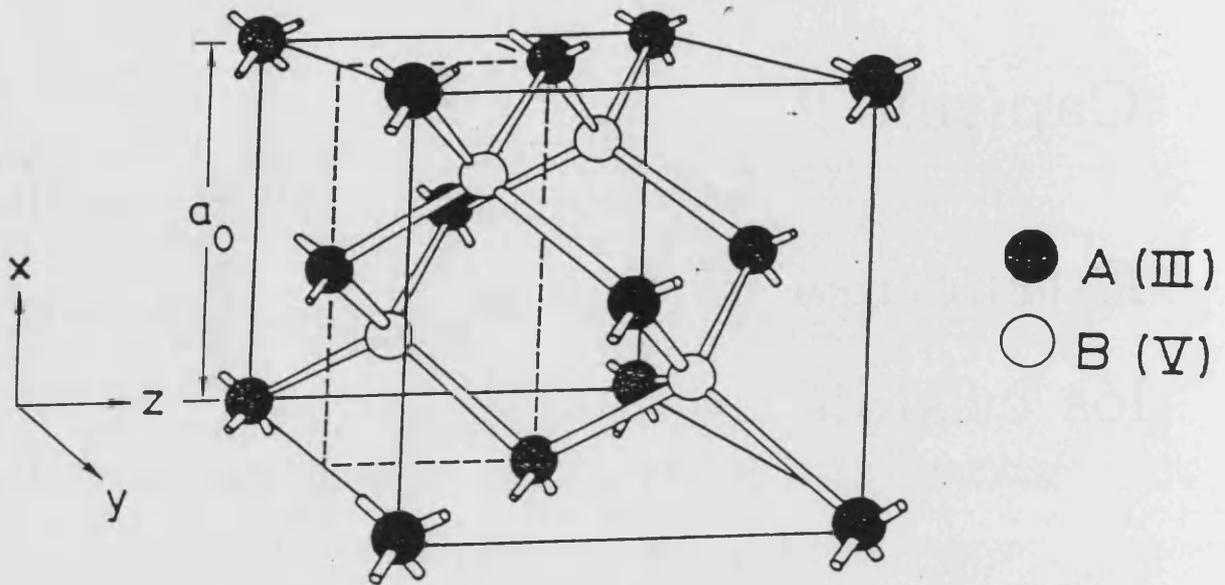


Figura 2.1: Celda cúbica unidad de la estructura del ZnS.

carácter polar. Los orbitales se disponen de forma tetraédrica, y en la estructura resultante cada ión se encuentra en el centro de un tetraedro regular cuyos vértices están ocupados por iones del otro tipo. Esta disposición permite que cada átomo comparta un promedio de cuatro electrones con su vecino para formar el enlace. El resultado es la red característica del sulfuro de zinc o cinc blenda (ZnS): dos redes cúbicas centradas en las caras (fcc), una de aniones y la otra de cationes, desplazadas una respecto de la otra a lo largo de la diagonal del cubo según el vector $\vec{r} = \frac{a}{4}(111)$, donde a es la constante de la red cúbica (Figura 2.1). A diferencia de la estructura de diamante característica de semiconductores como el germanio y el silicio, el sulfuro de cinc carece de simetría de inversión, debido a que las dos redes fcc que forman el cristal están constituidas por átomos diferentes.

2.2 Estructura electrónica de bandas

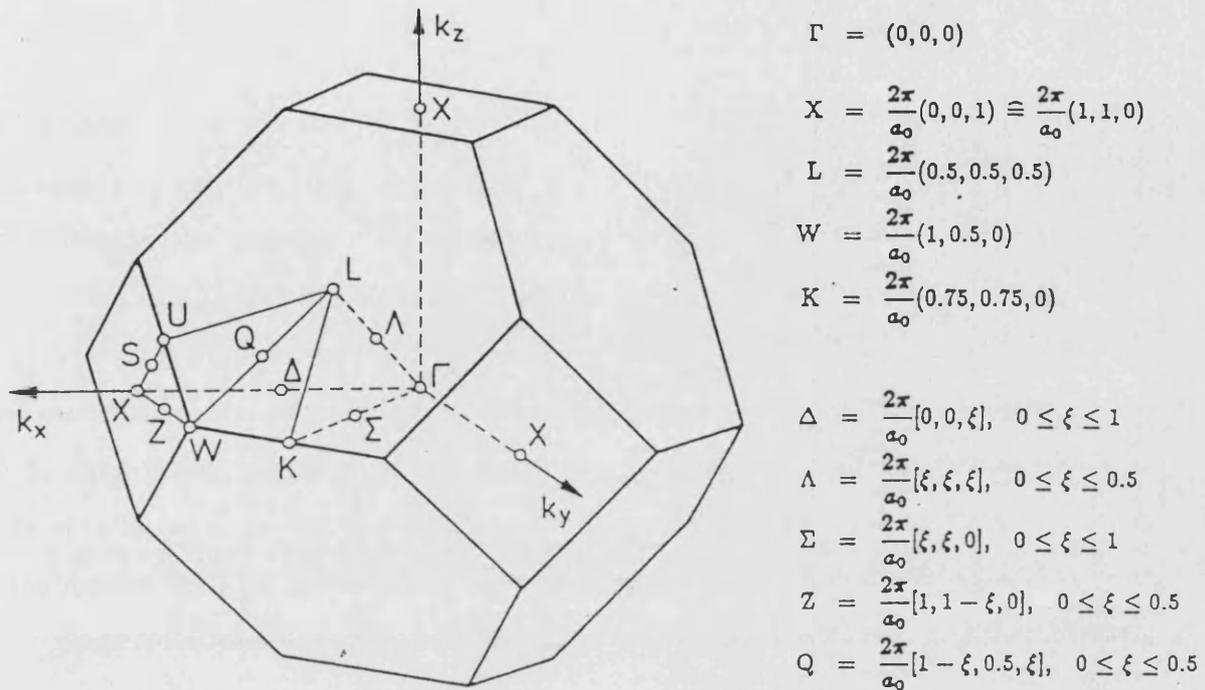


Figura 2.2: Primera zona de Brillouin de una red fcc.

En la Figura 2.2 se representa la primera zona de Brillouin de una red fcc, resaltando las direcciones de mayor simetría. La simetría de la red cristalina influye directamente en las propiedades de los electrones en el cristal. Mediante argumentos de simetría es posible caracterizar sus estados vibracionales y electrónicos, así como su comportamiento óptico.²⁷ Para determinar estos estados sería necesario, en principio, resolver una ecuación de Schrödinger en la que se tuvieran en cuenta la energía cinética de cada una de las partículas del sistema y sus interacciones: iones, electrones de valencia, interacción entre los iones, interacción electrón-electrón e interacción electrón-ion. Este enfoque nos lleva al planteamiento de un problema de muchos cuerpos de difícil solución y que requiere un poder de cálculo imposible de abordar si se tiene en cuenta el número de partículas que intervienen en nuestro sistema, que es del orden del número de Avogadro ($\approx 10^{23}$).

Afortunadamente, no necesitamos conocer la función de onda y la energía de cada una de las partículas, sino que nos basta con calcular los estados macroscópicos del sólido. Este cálculo suele abordarse utilizando dos aproximaciones bien conocidas:

- **Aproximación adiabática.** Debido a la diferencia de masa entre los iones y los electrones (la masa de un ion de galio, por ejemplo, es cinco órdenes de magnitud mayor que la del electrón), podemos desprestigiar en una primera aproximación la energía cinética de los iones y suponer que permanecen en reposo en sus posiciones de equilibrio de la red cristalina. El problema queda simplificado al estudio del movimiento de los electrones bajo el potencial periódico creado por los iones en reposo y la interacción de los electrones entre sí. Esta aproximación es válida si se pretende describir un estado del semiconductor en el que las vibraciones de la red son despreciables. La influencia de estas vibraciones (fonones) sobre el movimiento electrónico puede estudiarse posteriormente mediante teoría de perturbaciones.

Aunque la aproximación adiabática facilita considerablemente la tarea de encontrar el estado fundamental del sólido, nuestro sistema consta aún de un número inmanejable de electrones interaccionando de forma compleja. La siguiente aproximación nos permitirá reducir significativamente los grados de libertad del problema.

- **Aproximación de un electrón.** Mediante esta aproximación se trata de encontrar la mejor forma de describir la energía de un sistema de muchas partículas en función de las propiedades de un modelo en el que interviene un único electrón. Para ello se elige como función de onda del problema de muchas partículas una combinación lineal de determinantes de Slater contruidos en la base de estados de un electrón. Una forma de garantizar que obtenemos la combinación lineal adecuada para describir el estado fundamental del sólido consiste en resolver de forma autoconsistente la conocida ecuación de Hartree-Fock.²⁸ El efecto de la interacción electrón-electrón aparece en forma de un potencial medio que apantalla la interacción de los electrones con los iones de la red.

Estas aproximaciones permiten escribir la ecuación de autovalores del sistema como:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad , \quad (2.1)$$

donde $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ es el operador momento, m_0 la masa del electrón libre y $\phi(\vec{r})$ es la función de onda del electrón en el cristal. El potencial efectivo $V(\vec{r})$ tiene la periodicidad de la red cristalina ($V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$, donde \vec{R} es un vector de la red) e incluye tanto el potencial cristalino como el potencial de Hartree-Fock derivado de las interacciones electrón-ión y electrón-electrón de forma autoconsistente. Debido a que el Hamiltoniano es invariante bajo traslaciones por vectores de la red, la Ecuación (2.1) tiene como solución las funciones de Bloch²⁸:

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad , \quad (2.2a)$$

$$E = E_n(\vec{k}) \quad , \quad (2.2b)$$

donde la función $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ tiene la periodicidad de la red. La energía, como función del vector de ondas \vec{k} , está cuantizada en bandas caracterizadas por el índice n .

Hasta ahora no hemos considerado el efecto del acoplamiento spin-órbita; sin embargo, en muchos semiconductores la estructura de bandas está fuertemente influida por esta interacción, que puede escribirse como²⁹:

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \hat{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad . \quad (2.3)$$

donde las componentes de $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.4)$$

Finalmente, la ecuación de Schrödinger con esta nueva interacción será:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V(\vec{r}) \times \hat{p}) \cdot \vec{\sigma} \right) \phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, s) = E\phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, s) \quad , \quad (2.5)$$

donde la función $\phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, s)$ es un espinor que puede escribirse en forma de un vector con dos componentes:

$$\phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}, s) = \begin{pmatrix} \phi_1(\vec{r}) \\ \phi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad . \quad (2.6)$$

El problema inicial en el cálculo de la estructura de bandas es encontrar el potencial $V(\vec{r})$ característico de cada sistema; para ello se han desarrollado distintos métodos, entre los que destacan los métodos semiempíricos, que determinan el potencial de la red a través de la comparación con el experimento, y los métodos *ab initio*, que parten de funciones atómicas para el cálculo del potencial basándose en principios fundamentales de la física.

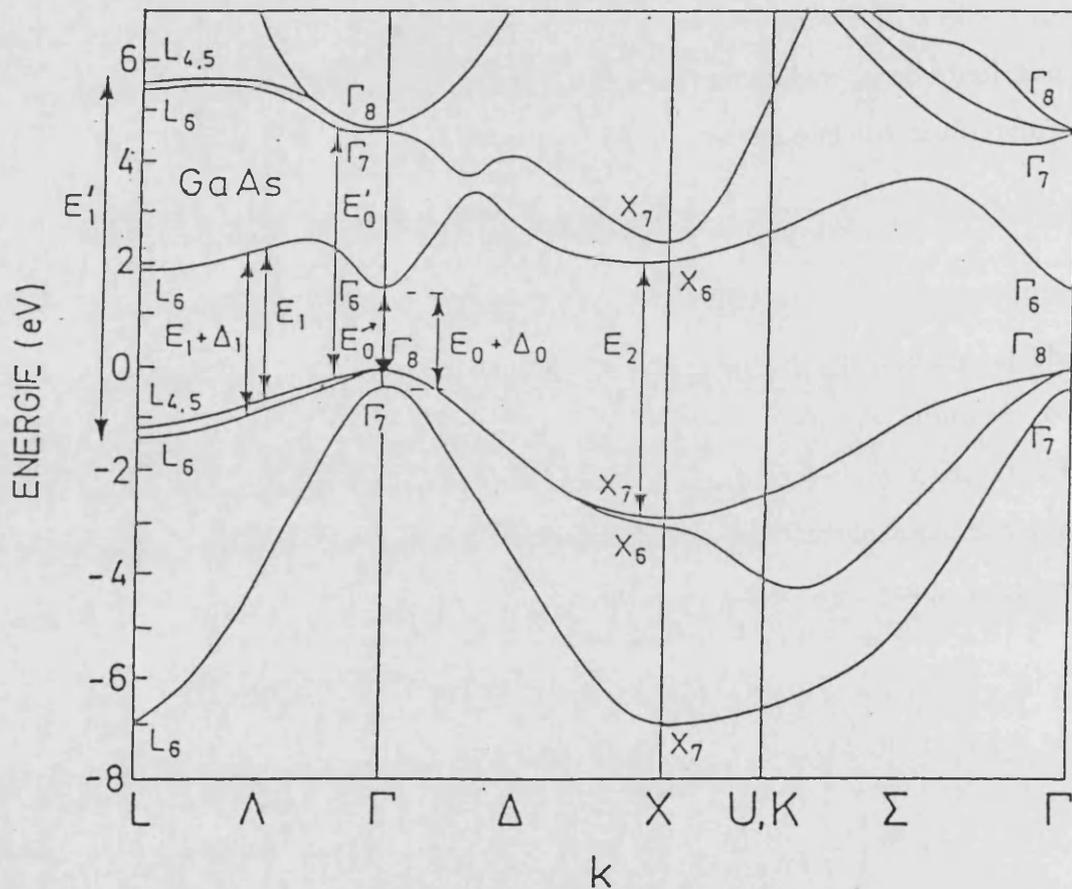


Figura 2.3: Estructura de bandas del GaAs calculada por el método del pseudopotencial no local.

En la Figura 2.3 aparece la estructura de bandas del arseniuro de galio (GaAs) como representante de los semiconductores III-V.³⁰ En la figura se ha tomado el vector de ondas perteneciente a la primera zona de Brillouin (ZB) de la red cristalina. En estos materiales

hay ocho electrones de valencia por celdilla unidad que contribuyen en la formación del enlace, tres pertenecientes al catión (Ga) y los otros cinco al anión (As). Cada orbital s o p de un átomo se hibridiza con otro del átomo vecino dando lugar a dos nuevos orbitales, uno enlazante y otro antienlazante. Debido a la contribución de las distintas celdas del cristal, los niveles de energía resultantes se ensanchan para formar bandas. Dos de los ocho electrones de valencia ocupan los niveles enlazantes tipo s y constituyen las bandas más profundas. Los seis restantes ocupan completamente tres orbitales enlazantes tipo p , dando lugar a las bandas superiores. Las bandas de energía que provienen de orbitales antienlazantes están completamente vacías, y la de menor energía (normalmente de tipo s) forma la banda de conducción del material.

En los materiales III-V el máximo de la banda de valencia se encuentra en el punto Γ de la primera zona de Brillouin, que coincide con el origen de energía de la Figura 2.3. En algunos compuestos (GaAs, InP, InSb, etc.) el mínimo de la banda de conducción se encuentra también en el punto Γ y por lo tanto son de gap directo; en otros (GaP, AlSb, AlAs, etc.) está en los puntos L o X y son de gap indirecto. Cada banda tiene propiedades de simetría características. En el punto Γ , considerando el spin del electrón y la interacción spin-órbita, la primera banda de conducción tiene simetría Γ_6 y está doblemente degenerada, mientras que la primera banda de valencia está cuatro veces degenerada y tiene simetría Γ_8 . Esta degeneración se rompe al alejarnos del centro de la zona de Brillouin, dando lugar a dos bandas de diferente curvatura denominadas huecos pesados (hh) y huecos ligeros (lh), cada una doblemente degenerada. Finalmente, la tercera banda de valencia tiene simetría Γ_7 y recibe el nombre de spin-órbita (spin-orbit splitted, split-off, so). La doble degeneración de las bandas a lo largo de toda la zona de Brillouin es debida a la invariancia del sistema bajo inversión temporal (degeneración de Kramers).³¹

2.3 Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

En muchos de los problemas físicos que se abordan en el estudio de los semiconductores no es necesario conocer con detalle las bandas de energía a lo largo de toda la zona de

Brillouin, sino únicamente en las cercanías de un valor determinado del vector de ondas \vec{k} . Esta situación se da con especial frecuencia en los semiconductores, puesto que sus portadores de carga están localizados normalmente en una pequeña región del espacio \vec{k} , aquella accesible mediante las distintas técnicas experimentales. Desde el punto de vista del estudio del efecto Raman resonante, los valores más interesantes del vector de ondas se encuentran en las proximidades de los puntos críticos, donde la densidad conjunta de estados,

$$Z_{cv}(E) = \frac{2}{8\pi^3} \int_{E=E_c-E_v=\text{const.}} \frac{dS(\vec{k})}{|\nabla_{\vec{k}} \cdot [E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k})]|} \quad , \quad (2.7)$$

es singular. Para abordar este tipo de situaciones se utiliza el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Su punto de partida es la ecuación de Schrödinger (2.5) y permite calcular las bandas de energía cerca de un cierto valor de \vec{k} mediante teoría de perturbaciones. En nuestro caso nos centraremos en el cálculo de bandas alrededor del punto Γ ($\vec{k} = 0$), región de la zona de Brillouin que investigaremos mediante dispersión Raman de primer orden.

Las bandas de energía y los estados electrónicos se determinan desarrollando las funciones de onda $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}, s)$, solución de la ecuación de Schrödinger (2.5), como combinación lineal de las funciones de Luttinger.³³ Estas funciones se definen como producto de una onda plana y la parte periódica de la función de Bloch correspondiente a la banda n en el punto Γ , y forman una base ortonormal completa:

$$\chi_{n\vec{k}}(\vec{r}, s) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n0}(\vec{r}, s) \quad , \quad (2.8)$$

donde $s = \pm 1/2$ representa el spin del electrón. Con el fin de simplificar la notación omitiremos a partir de aquí el índice s , incorporándolo al número cuántico n . En base a esto, las soluciones del problema propuesto en la Ecuación (2.5) pueden expresarse como:

$$\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} c_{nn'}(\vec{k}) \chi_{n'\vec{k}}(\vec{r}) \quad . \quad (2.9)$$

Sustituyendo esta expresión en la Ecuación (2.5) y proyectando el resultado sobre el estado $u_{n0}(\vec{r})$, obtenemos un sistema de Ecuaciones que permite calcular tanto los coeficientes

$c_{nn'}(\vec{k})$ como la energía E_n de cada banda en función del vector de ondas \vec{k} :

$$\sum_{n'} \left\{ \left(E_{n'}(0) - E_n(\vec{k}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left((\vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \hat{p}) \cdot \vec{\sigma} \right)_{nn'} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \left((\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot \vec{k} \right)_{nn'} \right\} c_{nn'} = 0 \quad (2.10)$$

Para llegar a este resultado hemos tenido en cuenta que las funciones $u_{n'0}(\vec{r})$ son solución del problema de autovalores para $\vec{k} = 0$ con energía $E_{n'}(0)$. El vector $\vec{p}_{nn'}$ es el elemento de matriz del operador impulso entre las funciones Bloch u_{n0} y $u_{n'0}$ de las bandas n y n' en el punto $\vec{k} = 0$:

$$\vec{p}_{nn'} = \int_{V_c} u_{n0}^*(\vec{r}) \cdot \hat{p} \cdot u_{n'0}(\vec{r}) d\vec{r} \quad , \quad (2.11)$$

donde V_c es el volumen de la celda unidad. Los demás elementos de matriz que aparecen en la ecuación se definen de forma análoga.

Hasta este punto, el desarrollo es exacto, y si dejamos que los índices n y n' recorran todas las bandas obtenemos un sistema de ecuaciones que nos permite determinar las relaciones de dispersión del cristal para un valor arbitrario de \vec{k} . Sin embargo, conviene recordar que nuestro interés se centra en el estudio de las bandas de energía cerca del punto Γ , donde el valor de \vec{k} es próximo a cero. En esta región, los términos del Hamiltoniano proporcionales a \vec{k} serán pequeños y podremos tratarlos como una perturbación. Otra aproximación usual consiste en restringir el número de bandas consideradas en el sistema de ecuaciones, ^{35,36,29} limitándolo a aquellas que, por su cercanía, pueden tener mayor influencia sobre las bandas cuya energía queremos calcular.

Analicemos atentamente la Ecuación (2.10). El primer sumando es el término parabólico, que representa la energía de la banda n sin tener en cuenta la influencia de las demás bandas. El segundo sumando se denomina interacción $\vec{k} \cdot \vec{p}$; su influencia en la determinación de la energía es fundamental y de él toma el nombre el método de cálculo de bandas que estamos desarrollando. El tercer término es la interacción spin-órbita independiente de \vec{k} y finalmente aparece la interacción spin-órbita dependiente de \vec{k} . Este último sumando es, en general, despreciable frente a los demás.

Desde el punto de vista de la teoría $\vec{k} \cdot \vec{p}$, es posible calcular la dispersión de energía de

un electrón en un sólido como si se tratara de un electrón libre cuyo movimiento está perturbado por el término proporcional a $\vec{k} \cdot \vec{p}$ y la interacción spin-órbita. El efecto del potencial periódico del cristal se introduce a través de los elementos de matriz del operador impulso. Debido a la degeneración de las bandas de energía y a

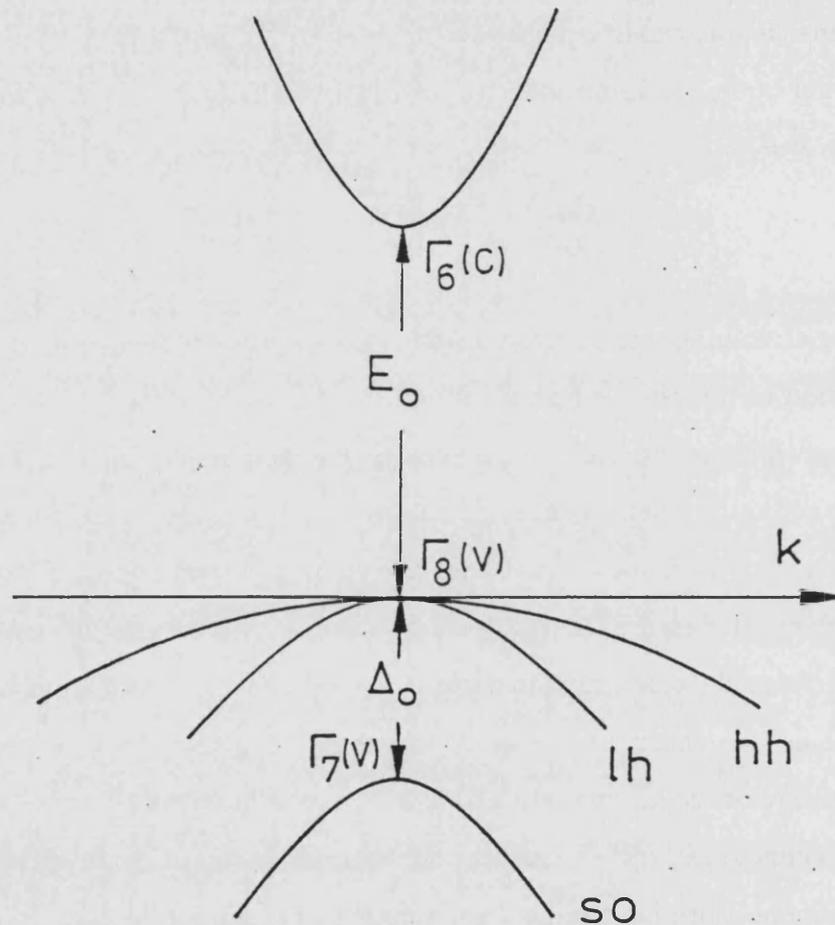


Figura 2.4: Representación esquemática de la estructura de bandas de un semiconductor III-V en las proximidades del punto Γ .

su proximidad, normalmente será necesario resolver el problema de autovalores utilizando la teoría de perturbaciones para estados degenerados. Como es natural, al abordar un problema real no podemos tener en cuenta la influencia de todas las bandas de energía, sino que es necesario restringir el tamaño del sistema de ecuaciones teniendo en cuenta las

características particulares del material que queremos estudiar. En la Figura 2.4 hemos representado esquemáticamente la estructura de bandas de un semiconductor III-V de gap directo (GaAs, InP, InSb) cerca del punto Γ . En el dibujo se señalan las diferencias de energía entre las bandas más relevantes (E_0 y Δ_0). En general, en materiales de gap pequeño, como el InAs, GaSb, GaAs o el InP, es suficiente considerar para el cálculo de bandas de energía las bandas de valencia Γ_7 (*so*) y Γ_8 (*hh, lh*) y la primera banda de conducción Γ_6 . Debido a su simetría, se utilizan combinaciones lineales de las funciones $X \uparrow, X \downarrow, Y \uparrow, Y \downarrow, Z \uparrow, Z \downarrow$ para caracterizar la banda de valencia, mientras que para la banda de conducción son más adecuados los estados $S \uparrow$ y $S \downarrow$. Las flechas \uparrow y \downarrow representan los espinores de spin 1/2 con tercera componente $\pm 1/2$. En esta base, la banda de conducción y las tres primeras bandas de valencia se obtendrán después de diagonalizar una matriz $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 8×8 . La influencia de las bandas más alejadas puede tratarse como una perturbación (teoría de perturbaciones de Löwdin³⁵).

Despreciemos por el momento la interacción spin-órbita frente al término $\vec{k} \cdot \vec{p}$, de forma que el spin del electrón sea un buen número cuántico del sistema. En esta aproximación, es posible dividir la matriz 8×8 en dos bloques 4×4 , uno para cada spin. Utilizando la teoría que hemos expuesto, cada uno de estos bloques puede escribirse como:

$$\begin{matrix} S \\ X \\ Y \\ Z \end{matrix} \begin{pmatrix} (A' + \frac{\hbar^2}{2m_0})k^2 + E_c & Bk_y k_x + iPk_x & Bk_x k_x + iPk_y & Bk_x k_y + iPk_z \\ Bk_y k_x - iPk_x & L'k_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & N'k_x k_y & N'k_x k_z \\ Bk_x k_x - iPk_y & N'k_x k_y & L'k_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & N'k_y k_z \\ Bk_x k_y - iPk_x & N'k_x k_z & N'k_y k_z & L'k_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{pmatrix} \cdot \quad (2.12)$$

Las constantes A, B, L', M, N', P y E_v que aparecen en la matriz son reales y representan sumas de elementos de matriz del operador momento $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ entre estados de las distintas bandas, incluyendo bandas alejadas.³⁶ El elemento de matriz P aparece con frecuencia en la literatura y se define como:

$$P = -i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|\hat{p}_x|X\rangle = -i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|\hat{p}_y|Y\rangle = -i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|\hat{p}_z|Z\rangle \quad (2.13)$$

El factor de fase $-i$ se ha incluido en la definición para que P sea una cantidad positiva

real. Una buena aproximación para P viene dada por:

$$P \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m_0 a} \quad , \quad (2.14)$$

donde a es la constante de la red cúbica y m_0 la masa del electrón libre.

Para completar el cálculo de bandas falta considerar la interacción spin-órbita (Ecuación (2.3)). En la base $S \uparrow (\downarrow)$, $X \uparrow (\downarrow)$, $Y \uparrow (\downarrow)$, $Z \uparrow (\downarrow)$, esta interacción no es diagonal, pero puede diagonalizarse escogiendo una base con la simetría adecuada, como es la formada por las funciones de momento angular total $j = 1/2$ y $3/2$. A pesar de que el momento angular total j y su componente en la dirección de cuantización m_j (tomada como dirección z o $[001]$) no son buenos números cuánticos del cristal cúbico, sus propiedades de transformación bajo las operaciones de simetría del cristal son las adecuadas. Estas funciones pueden relacionarse con combinaciones lineales de las funciones de la base anterior, como puede verse en la Tabla 2.1. Los índices s , v y c se refieren a la banda de

$$\begin{array}{l} \Gamma_6^c \left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : |S \downarrow\rangle \quad c_{-1/2} \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : |S \uparrow\rangle \quad c_{1/2} \end{array} \right. \\ \\ \Gamma_8^v \left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \uparrow \right\rangle \quad v_{3/2}(hh^+) \\ \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{6}}[(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right\rangle \quad v_{1/2}(lh^+) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \right\rangle \quad v_{-1/2}(lh^-) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY) \downarrow \right\rangle \quad v_{-3/2}(hh^-) \end{array} \right. \\ \\ \Gamma_7^v \left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow] \right\rangle \quad s_{1/2}(s^+) \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{3}}[(X - iY) \uparrow - Z \downarrow] \right\rangle \quad s_{-1/2}(s^-) \end{array} \right. \end{array}$$

Tabla 2.1: Representación de las funciones de onda $|j, m_j\rangle$ de las bandas de conducción y valencia en la base de momento angular $j = 1/2, 3/2$.

split-off, valencia y conducción respectivamente. Salvo que se indique lo contrario, los elementos de la base se tomarán en el orden en que aparecen en la Tabla 2.1. Lejos del punto Γ las propiedades de transformación de las funciones de onda se modifican y su

representación en la base de momento angular deja de tener sentido. Sin embargo, este resultado es válido en primer orden en \vec{k} siempre que el vector de ondas sea paralelo al eje de cuantización.

Utilizando los elementos de matriz del operador \hat{p} que aparecen en el Hamiltoniano (2.12) y definiendo para la interacción spin-órbita la constante Δ_0 (Figura 2.4):

$$\Delta_0 = -3i \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right) | Y \rangle \quad , \quad (2.15)$$

el Hamiltoniano completo puede escribirse en seis bloques:

$$\begin{pmatrix} H_{cc} & H_{cv} & H_{cs} \\ H_{cv}^\dagger & H_{vv} & H_{vs} \\ H_{cs}^\dagger & H_{vs}^\dagger & H_{ss} \end{pmatrix} \quad , \quad (2.16)$$

y recibe el nombre de Hamiltoniano de Kane. Los elementos no diagonales reflejan el acoplamiento entre las distintas bandas y el símbolo \dagger indica el adjunto de la matriz correspondiente. La expresión completa de estas matrices en la base de funciones de momento angular 1/2 y 3/2 se incluye en el Apéndice A.

Si el sistema se encuentra sometido a algún tipo de perturbación, representada por el potencial $U(\vec{r})$, el cálculo de niveles de energía puede realizarse en el espacio real haciendo uso de la aproximación de la masa efectiva.³⁷ En esta aproximación, cada una de las componentes del operador momento $\hbar k_\alpha$ del Hamiltoniano H se sustituye por la correspondiente derivada con respecto a las coordenadas espaciales $-i\hbar\partial/\partial x_\alpha$. De esta forma se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales que determinan las energías E y las funciones de onda envolventes $F_j(\vec{r})$ del sistema perturbado. La ecuación de autovalores será:

$$\sum_{j'=1}^8 \left\{ H_{jj'}(-i\hbar\vec{\nabla}) + U(\vec{r})\delta_{jj'} \right\} \phi_{j'}(\vec{r}) = E\phi_j(\vec{r}) \quad , \quad (2.17)$$

donde los índices j y j' recorren todos los elementos del Hamiltoniano H . La función de onda en el espacio real viene dada por

$$\Phi = \sum_{j=1}^8 \phi_j(\vec{r}) u_j(\vec{r}) \quad , \quad (2.18)$$

y las funciones $u_j(\vec{r})$ han sido definidas en la Tabla 2.1. La aproximación de la masa efectiva queda así generalizada al caso en que el efecto de las bandas alejadas no pueda despreciarse. Para describir la influencia de la perturbación $U(\vec{r})$ en las bandas de energía, es necesario resolver simultáneamente este sistema de ocho ecuaciones diferenciales acopladas. Sin embargo, en el estudio de la banda de valencia de algunos materiales como el GaAs suele explotarse el hecho de que, en las proximidades del punto Γ , tanto la banda de conducción como la de split-off se encuentran a una distancia considerable de las bandas de huecos pesados y ligeros (1519 y 340 meV respectivamente). Si no nos alejamos mucho del centro de la zona de Brillouin, la energía de las bandas cambiará sólo en unas decenas de meV, y podremos considerar en algunos cálculos la influencia de la banda de split-off y la banda de conducción como una perturbación. De esta forma, el sistema queda reducido a cuatro ecuaciones diferenciales acopladas que describen las bandas hh y lh . El Hamil-

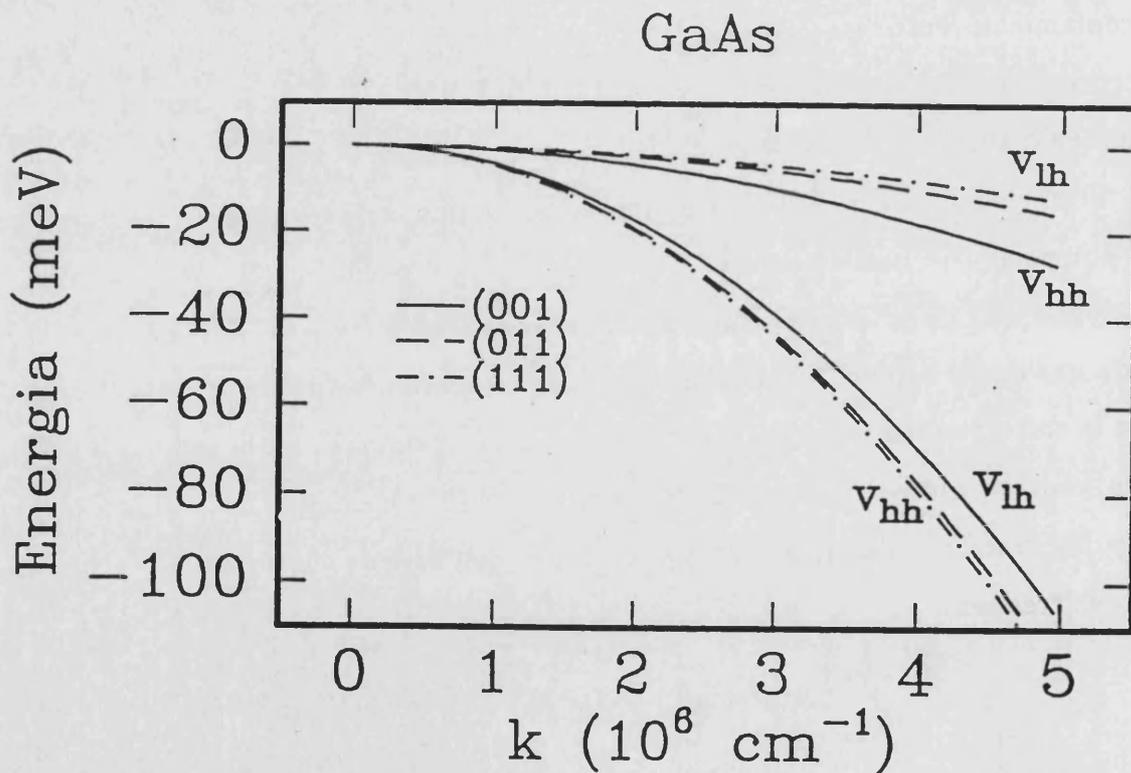


Figura 2.5: Dispersión de las bandas de energía a lo largo de tres direcciones diferentes en el espacio de momentos, calculada mediante el Hamiltoniano de Luttinger H_{vv} utilizando los parámetros característicos del GaAs ($\gamma_1 = 7.1$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9^{38}$). Se señala el carácter de hueco pesado (v_{hh}) o ligero (v_{lh}) predominante en cada banda.

toniano resultante corresponde al bloque H_{vv} de la Ecuación (A.1) (Apéndice A), y recibe el nombre de Hamiltoniano de Luttinger.^{33,34} Más adelante utilizaremos este Hamiltoniano para estudiar las bandas de energía del cristal bajo la acción de un campo magnético; suele expresarse en función de un conjunto de parámetros llamados parámetros de Luttinger, γ_1 , γ_2 y γ_3 . Su relación con los parámetros de Kane se incluye asimismo en el Apéndice A.

Los términos del Hamiltoniano proporcionales a k^2 describen la dispersión isotrópica y parabólica de las bandas, con una masa efectiva para las bandas de huecos pesados y ligeros promediada en todas las direcciones. Los demás términos determinan la dependencia de la energía con la dirección, así como la interacción entre las distintas bandas. Su influencia destruye la isotropía del sistema, hasta el punto en que la banda de huecos pesados es más "ligera" (tiene mayor curvatura) que la de los huecos ligeros en la dirección [011], conservando la curvatura esperada en la dirección [100], como se muestra en la Figura 2.5. Hasta ahora hemos estudiado las características de las bandas de energía en materiales másicos. Una vez introducido el formalismo de la teoría $\vec{k} \cdot \vec{p}$ y la aproximación de la masa efectiva, pasaremos a analizar cómo se modifican estos niveles de energía en un sistema en el que los electrones se encuentran confinados en una dirección (pozo cuántico).

2.4 Estructura de bandas de un pozo cuántico

Un pozo cuántico cuadrado (QW) es una estructura formada por una capa delgada de un semiconductor, al que llamaremos A , encerrada entre dos capas de otro semiconductor B con una banda de energía prohibida diferente. Los pozos cuánticos más estudiados son aquellos en los que la discontinuidad de las bandas de energía en las interfaces se reparte entre la banda de valencia y de conducción de tal forma que tanto los electrones como los huecos se encuentran confinados en el material A .³⁹ Este es el caso de pozos cuánticos de GaAs/GaAlAs, GaInAsP/InP, GaInAs/AlInAs y GaSb/AlSb (QW de tipo I, ver Figura 2.6). Cuando el espesor de la capa de semiconductor A es lo suficientemente pequeño (unos cientos de ångström), se alcanza el régimen cuántico y la energía de los portadores de carga adquiere valores discretos. En estas condiciones el sistema se comporta como si

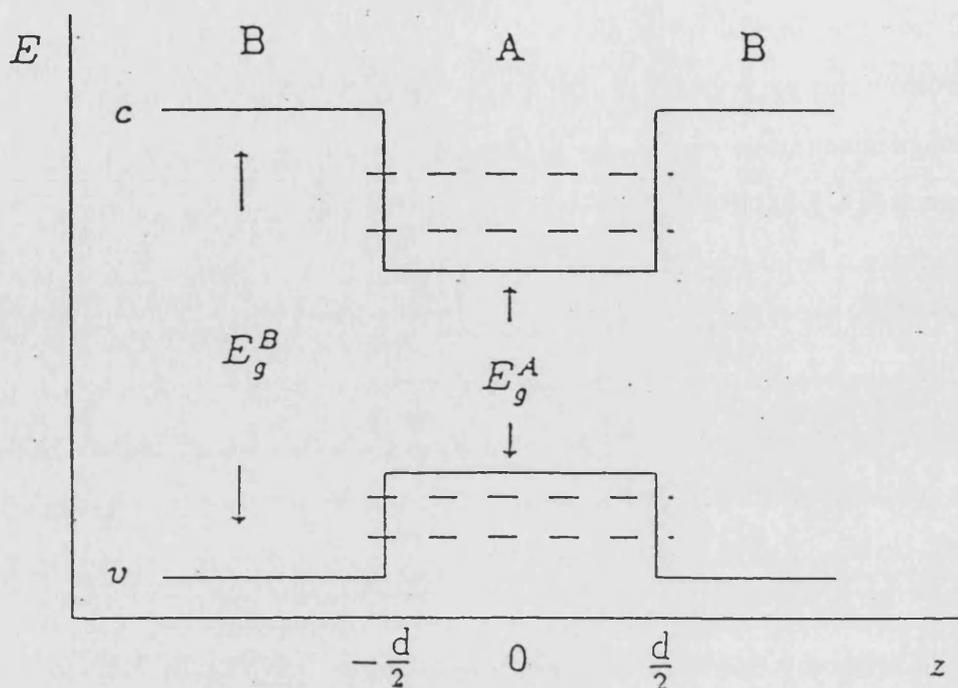


Figura 2.6: Representación esquemática de la estructura de bandas de un pozo cuántico de tipo I.

se tratara de un gas cuasibidimensional. La existencia de niveles de energía discretos en pozos cuánticos ha sido demostrada a través de numerosos experimentos, como el efecto túnel resonante, experimentos de transporte y medidas ópticas.¹⁸⁻²⁰

Para calcular los niveles de energía del pozo cuántico utilizaremos la aproximación de la masa efectiva³⁷ en combinación con el Hamiltoniano de Kane³⁶ (Ecuación (2.16)) introducido en la sección anterior. En este contexto, desarrollaremos un modelo de una sola banda que incorpora la complejidad de las bandas de energía de los semiconductores III-V y el tratamiento adecuado de las condiciones de contorno en la interfase de los materiales *A* y *B*.⁴⁰

En los modelos más sencillos, el movimiento de los electrones (o huecos) en la dirección de crecimiento del pozo cuántico (dirección *z*) se describe mediante un Hamiltoniano efectivo de una sola banda en el que el potencial de confinamiento se incluye por medio de una función escalón. En esta aproximación, el valor de la masa efectiva de los portadores

refleja la influencia del potencial cristalino sobre los estados electrónicos. Puesto que el pozo y la barrera están constituidos por materiales diferentes, el valor de la masa efectiva dependerá de la posición. Esta dependencia deberá tenerse en cuenta al resolver el problema de autovalores y, en particular, al plantear las condiciones de contorno del problema: continuidad de la función de onda y conservación de la corriente de probabilidad a través de la interfase. Si queremos incorporar a la teoría el acoplamiento con otras bandas, es necesario tener en cuenta que su influencia modificará tanto la masa efectiva como las condiciones de contorno.

En la Sección 2.3 vimos que el modelo multibanda adecuado para describir los niveles de energía de un semiconductor depende de las propiedades características del semiconductor que se desee investigar. Para un material como el GaAs resulta adecuado el modelo de Kane,³⁶ que tiene en cuenta las bandas de conducción, huecos pesados, ligeros y split-off. Determinaremos la dispersión de las bandas de energía del pozo cuántico siguiendo dos pasos sucesivos. Primero calcularemos la energía y los estados de las distintas subbandas para $k_{xy} \equiv \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = 0$ y posteriormente extenderemos este resultado al caso general $k_{xy} \neq 0$.

1. Estados del QW en $k_{xy} = 0$:

Igualando en el Hamiltoniano (A.1) del Apéndice A las componentes k_x y k_y del vector de onda del electrón a cero, es posible separar la matriz en dos bloques 4×4 independientes H_1 y H_2 . Estos bloques vienen dados por:

$$H_1 = \begin{pmatrix} E_c + B_c k_z^2 & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} i P k_z & \frac{1}{\sqrt{3}} i P k_z \\ 0 & E_v + B_{hh} k_z^2 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} i P k_z & 0 & E_v + B_{lh} k_z^2 & -\sqrt{\frac{2}{3}} (B_{lh} - B_s) k_z^2 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} i P k_z & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} (B_{lh} - B_s) k_z^2 & E_s + B_s k_z^2 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$H_2 = H_1^* \quad , \quad (2.20)$$

donde $H_{1(2)}$ corresponde a las bandas $c \uparrow (\downarrow)$, $hh^{+(-)}$, $lh^{+(-)}$, $so^{+(-)}$ (Tabla 2.1).

Los autovalores de estas dos matrices son idénticos y bastará con que estudiemos



una de ellas. En su definición hemos utilizado las constantes:

$$\begin{aligned}
 B_c &= A' + \frac{\hbar^2}{2m_0} , \\
 B_{hh} &= M + \frac{\hbar^2}{2m_0} , \\
 B_{lh} &= \frac{1}{3}(M + 2L' + \frac{\hbar^2}{2m_0}) , \\
 B_s &= \frac{1}{3}(L' + 2M + \frac{\hbar^2}{2m_0}) .
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Las energías E_c , E_{hh} , E_{lh} y $E_s = E_v - \Delta_0$ dan la posición de los bordes de las bandas de conducción, hueco pesado, hueco ligero y split-off respectivamente, mientras que las constantes B_c , B_{hh} , B_{lh} y B_s determinan su curvatura en el punto Γ . El valor de estos parámetros es diferente en el material que forma el pozo (P) y en el de la barrera (B). Para aplicar la aproximación de la función envolvente es necesario que la estructura de ambos materiales sea semejante, de forma que la variación de la función de Bloch a través de la interfase sea pequeña y pueda considerarse continua. Supondremos que éste es nuestro caso y tomaremos el elemento de matriz P igual para ambos materiales. Sustituyendo k_z por el operador $-id/dz$, las energías y funciones de onda del pozo cuántico se obtendrán resolviendo un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales acopladas, una para cada banda (Ecuación (2.17)). Sin embargo, al analizar el Hamiltoniano (2.19) se observa que la banda de huecos pesados está desacoplada del resto. Las subbandas de energía del pozo correspondientes a la banda de huecos pesados pueden calcularse entonces con un modelo parabólico de una banda, caracterizada por la masa efectiva $m_{z_{hh}} = 1/B_{hh}$ en la dirección de crecimiento. La ecuación de autovalores correspondiente viene dada por:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{z_{hh}}^{P(B)}} \frac{d}{dz} \right\} \varphi_{hh}(z) = (E - E_v^{P(B)}) \varphi_{hh}(z) . \tag{2.22}$$

La función de onda del hueco debe ser continua a través de la interfase. La condición de contorno para la derivada se obtiene integrando la ecuación de autovalores (2.22)

en una pequeña región que englobe la discontinuidad, es decir:

$$\int_{-\delta}^{\delta} \left\{ \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{zhh}^{P(B)}} \frac{d}{dz} \right\} \varphi_{hh}(z) dz = 0 \quad \text{con } \delta \rightarrow 0 \quad . \quad (2.23)$$

Finalmente se obtienen las condiciones:

$$\begin{aligned} \varphi_{hh} & \text{ continuo,} \\ \frac{1}{m_{zhh}^{P(B)}} \frac{d\varphi_{hh}}{dz} & \text{ continuo.} \end{aligned} \quad (2.24)$$

La primera condición se refiere a la continuidad de la función de onda y la segunda establece la continuidad de la corriente de probabilidad a través de la interfase.

Dado que estamos considerando un pozo cuántico cuadrado, el Hamiltoniano que determina los niveles de energía permanece invariante al sustituir z por $-z$. Esta propiedad permite elegir las soluciones de la ecuación de autovalores con paridad definida. La energía de los estados discretos se obtiene resolviendo la ecuación trascendente:

$$\frac{K_B}{m_{zhh}^B} = \frac{K_P}{m_{zhh}^P} \times \begin{cases} \tan(K_P d/2) & \text{estados pares,} \\ -\cot(K_P d/2) & \text{estados impares,} \end{cases} \quad (2.25)$$

donde d es la anchura del pozo y las constantes $K_{P(B)}$ se relacionan con la energía a través de las expresiones:

$$K_P = \sqrt{2Em_{zhh}^P/\hbar^2} \quad \text{y} \quad K_B = \sqrt{2(V_{hh} - E)m_{zhh}^B/\hbar^2} \quad .$$

Las funciones de onda del pozo para los estados discretos ($0 < |E| < V_{hh}$) se recogen en el apéndice B.

En la Figura 2.7 hemos representado las funciones de onda del pozo de los dos primeros estados. En una ordenación creciente de energía, los estados pares e impares se suceden alternativamente, comenzando siempre por un estado par. Debido a la forma del potencial, los huecos quedan localizados en el pozo con una pequeña probabilidad de penetrar en la barrera, probabilidad que decae exponencialmente con la distancia de penetración y aumenta a medida que la anchura del pozo disminuye.

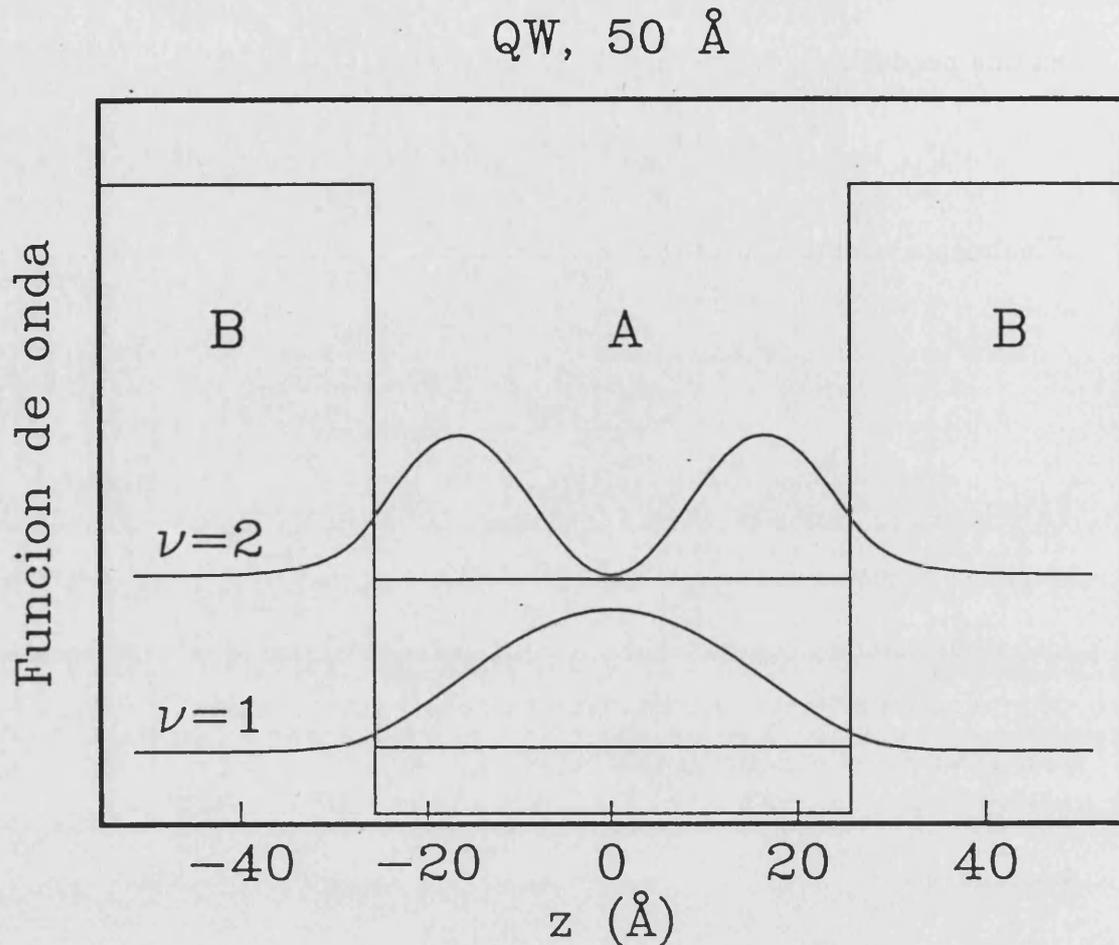


Figura 2.7: Autofunciones del pozo correspondientes a los dos primeros niveles de energía para la banda de conducción de un pozo cuántico de GaAs/AlAs de 50 Å.

Si las bandas de conducción, huecos ligeros y split-off estuvieran desacopladas, los estados del pozo correspondientes se obtendrían de forma análoga, sustituyendo la masa efectiva $m_{z_{hh}}$ por un valor adecuado a cada banda. Sin embargo, en el Hamiltoniano de Kane, los términos no diagonales no son despreciables y es necesario tener en cuenta el acoplamiento entre estas bandas para calcular los niveles del pozo de forma realista. Este cálculo nos obliga a resolver un sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas. Con el fin de simplificar el problema buscaremos la forma más adecuada de describirlo mediante un modelo de una sola banda.⁴⁰ La proyección a una sola banda es posible haciendo uso de la aproximación de la masa efectiva y se obtendrá en el límite en el que los términos cuadráticos en k_z pueden

despreciarse (límite de bandas planas). Esto equivale a eliminar las soluciones con vector de ondas grande, es decir, aquellas que oscilan rápidamente y que carecen de sentido físico en el marco de la aproximación de la masa efectiva.⁴⁰ La ecuación de autovalores en este límite puede escribirse como:

$$\begin{pmatrix} E_c & -\sqrt{\frac{2}{3}}iPk_z & \frac{1}{\sqrt{3}}iPk_z \\ \sqrt{\frac{2}{3}}iPk_z & E_v & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}iPk_z & 0 & E_v - \Delta_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_c \\ \varphi_{lh} \\ \varphi_s \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_c \\ \varphi_{lh} \\ \varphi_s \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Comenzaremos estudiando la banda de conducción. Proyectar el Hamiltoniano sobre esta banda consiste en eliminar, mediante el sistema de ecuaciones (2.26), las funciones φ_{lh} y φ_s , y obtener una ecuación en la que sólo interviene φ_c :

$$-\frac{1}{3}P^2 \left(\frac{2}{E - E_v^{P(B)}} + \frac{1}{E - (E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)})} \right) \frac{d^2\varphi_c}{dz^2} = (E - E_c^{P(B)})\varphi_c \quad (2.27)$$

Con la condición de que tanto la función de onda φ_c como la cantidad

$$\left(\frac{2}{E - E_v^{P(B)}} + \frac{1}{E - (E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)})} \right) \frac{d\varphi_c}{dz} \quad (2.28)$$

sean continuas a través de la interfase. Estas condiciones adquieren un aspecto más familiar si definimos una masa $m_{z_c}^{P(B)}$ que caracteriza a la banda de conducción a una energía dada E :

$$\frac{1}{m_{z_c}^{P(B)}} = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{E - E_v^{P(B)}} + \frac{1}{E - (E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)})} \right) \quad (2.29)$$

Con esta definición, las condiciones (2.27) y (2.28) pueden expresarse de forma análoga a como lo hicimos para la banda de huecos pesados (2.22, 2.24):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{z_c}^{P(B)}} \frac{d^2}{dz^2} \varphi_c = (E - E_c^{P(B)})\varphi_c \quad , \quad (2.30)$$

con las condiciones de contorno:

$$\begin{array}{ll} \varphi_c & \text{continuo,} \\ \frac{1}{m_{z_c}^{P(B)}(E)} \frac{d\varphi_c}{dz} & \text{continuo.} \end{array} \quad (2.31)$$

La solución se obtiene resolviendo una ecuación trascendente del tipo (2.25), con la única diferencia de que ahora la masa efectiva depende de la energía.

Con la banda de huecos ligeros se procede de forma análoga, aunque el resultado es un poco más laborioso. Eliminando del sistema de ecuaciones (2.26) las funciones φ_c y φ_s , obtenemos una ecuación diferencial que determina φ_{lh} :

$$\frac{2}{3}P^2 \frac{1}{E_c^{P(B)} - E} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{E_v^{P,B} - E}{(E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)}) - E} \right] \frac{d^2 \varphi_{lh}}{dz^2} = (E - E_v^{B(P)}) \varphi_{lh}. \quad (2.32)$$

Igual que en el caso anterior, podemos definir una masa efectiva dependiente de la energía que caracteriza la banda de huecos ligeros:

$$\frac{1}{m_{zlh}^{P(B)}} = \frac{4}{3} \frac{P^2}{\hbar^2} \frac{1}{E_c^{P(B)} - E} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{E_v^{P(B)} - E}{(E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)}) - E} \right]. \quad (2.33)$$

Sin embargo, en este caso las condiciones de contorno no tienen por qué garantizar la continuidad de la función de onda $\varphi_{lh}(z)$, sino de las cantidades⁴⁰:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_{zlh}^{P(B)}} \frac{d\varphi_{lh}}{dz} & \quad \text{continuo,} \\ \left[1 + \frac{1}{2} \frac{E_v^{P(B)} - E}{(E_v^{P(B)} - \Delta_0^{P(B)}) - E} \right] \varphi_{lh} & \quad \text{continuo.} \end{aligned} \quad (2.34)$$

La continuidad de la función se recupera al despreciar el acoplamiento de la banda de huecos ligeros con la de split-off.

Teniendo en cuenta estas condiciones de contorno, la energía del sistema se obtiene resolviendo la ecuación trascendente:

$$\frac{K_B}{E_c^B - E} = \frac{K_P}{E_c^P - E} \times \begin{cases} \tan(K_P d/2) & \text{estados pares,} \\ -\cot(K_P d/2) & \text{estados impares,} \end{cases} \quad (2.35)$$

donde es necesario sustituir en la definición de las constantes K_P y K_B la masa efectiva dada en la ecuación (2.33).

La forma usual de expresar los niveles del pozo consiste en definir el origen de energía en el mínimo o máximo de la banda que estemos estudiando, y su signo se elige de forma que todos los estados tengan energía positiva. Esto equivale a tomar para la

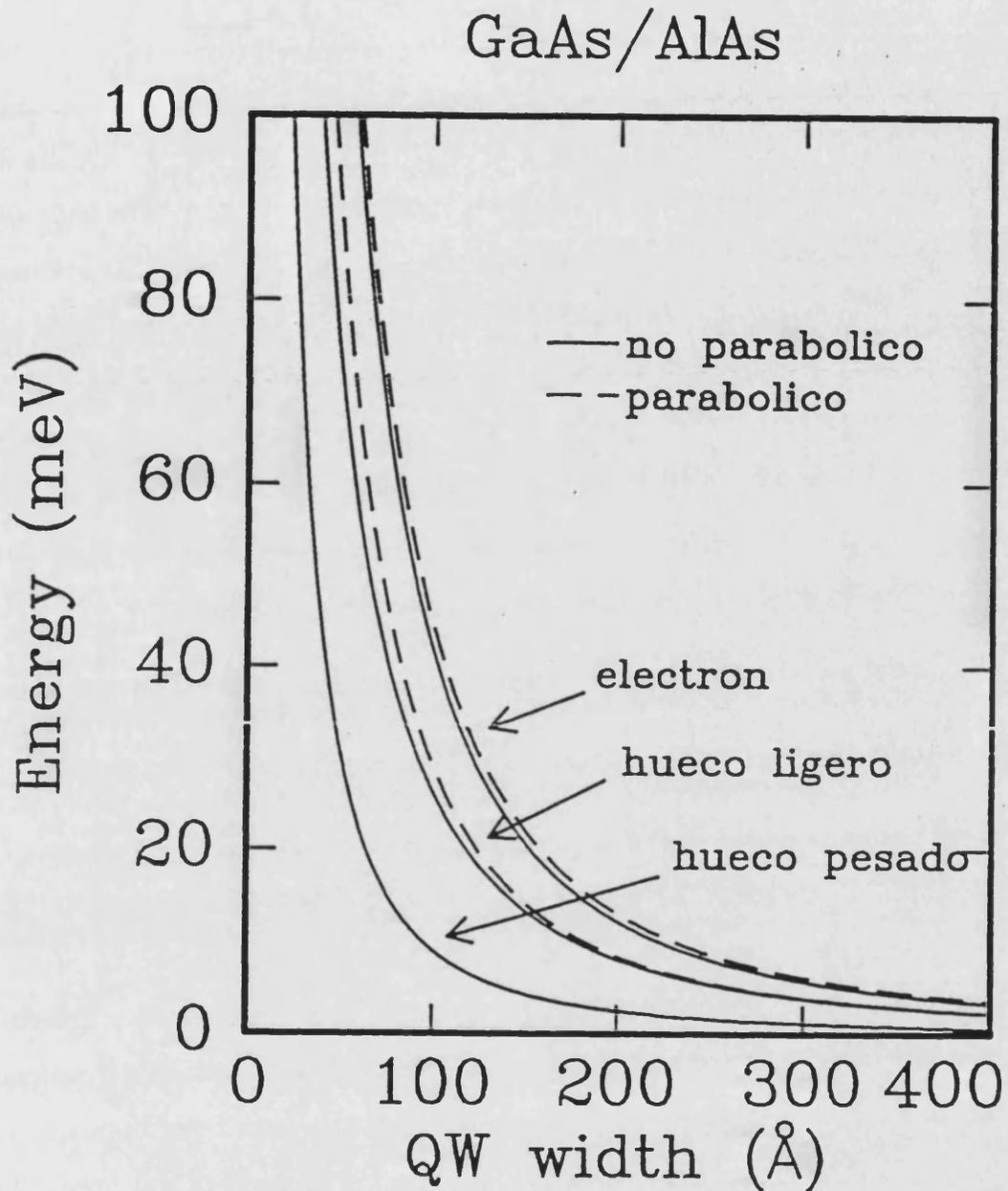


Figura 2.8: Primer nivel de energía de un pozo cuántico en función de la anchura del pozo, d . Con trazo discontinuo aparece el resultado de un modelo de bandas parabólicas, mientras que la línea continua incluye los efectos de no parabolicidad. Ambas líneas coinciden en el caso de huecos pesados.

banda de conducción los valores $E_c^P = 0$, $E_c^B = V_c$, $E_v^P = -E_0^P$ y $E_v^B = V_c - E_0^B$ mientras que en la banda de valencia tendremos $E_c^P = E_0^P$, $E_c^B = -V_{lh} + E_0^B$, $E_v^P = 0$ y $E_v^B = -V_{lh}$ con $E \rightarrow -E$. Las constantes V_c y V_{lh} representan el salto de energía (band offset) entre el pozo y la barrera correspondiente a las bandas de conducción y huecos ligeros respectivamente. Las Ecuaciones (2.25) y (2.35) sólo son válidas cuando la energía de los niveles del pozo es menor que la altura de la barrera, es decir, para estados confinados en el interior del pozo. En la Ecuación (2.35) existe además una segunda limitación: la energía de los estados no puede sobrepasar el valor $\frac{2}{3}\Delta_0$ ya que, debido a la proximidad de la banda de split-off, para este valor de la energía la masa efectiva de la banda lh (Ecuación (2.33)) se hace infinita, con lo que el modelo que hemos obtenido deja de tener sentido.

En la Figura 2.8 se representa la energía de la primera subbanda del pozo cuántico para las bandas de conducción, hh y lh . La línea continua representa el resultado del modelo que acabamos de describir. ⁴⁰ Como referencia se presenta en trazo discontinuo la energía calculada con un modelo parabólico (masa efectiva independiente de la energía). Al tener una masa efectiva diferente, las bandas de huecos pesados y ligeros se separan, rompiéndose su degeneración en el punto Γ . El nivel fundamental pertenece siempre a la banda de huecos pesados, puesto que su masa efectiva es mayor que la de huecos ligeros en la dirección de confinamiento. El carácter del segundo nivel de energía depende de la relación de masas entre las bandas hh y lh , de la altura de la barrera y de la anchura del pozo. Tanto en la banda de conducción como en la de valencia, el acoplamiento con bandas más alejadas tiende a disminuir la energía del primer nivel confinado respecto al modelo parabólico, debido esencialmente a que la masa efectiva de los portadores aumenta. Sin embargo, este efecto puede quedar parcialmente compensado por la modificación que el acoplamiento entre bandas introduce en las condiciones de contorno.

Para referirnos a las funciones de onda de los distintos niveles del pozo cuántico utilizaremos la notación φ_{ν_i} , donde $i = hh, lh, so, e$ hace referencia al tipo de banda y ν es un número cuántico que numera las funciones del pozo en orden creciente de

energía.

2. Estados del QW en $k_{xy} \neq 0$:

Para calcular los niveles de energía del pozo cuántico en puntos cercanos al centro de la zona de Brillouin describiremos la banda de valencia mediante el Hamiltoniano de Luttinger (H_{vv}), tratando el acoplamiento con la banda de conducción como una perturbación.³⁵ Esto es posible si la banda prohibida del semiconductor es lo suficientemente ancha.

Los nuevos autoestados serán combinación lineal de las funciones φ_i , con $i = hh, lh$ obtenidas en el apartado anterior para $k_{xy} = 0$. Para calcularlos es necesario resolver el problema de autovalores definido por el Hamiltoniano:

$$H_{vv} = \begin{pmatrix} E_{hh} & S & R & 0 \\ S^* & E_{lh} & 0 & R \\ R^* & 0 & E_{lh} & -S \\ 0 & R^* & -S^* & E_{hh} \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

donde los términos diagonales son:

$$\begin{aligned} E_{hh} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{k}_z (\gamma_1 - 2\gamma_2) \hat{k}_z + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) + V(z), \\ E_{lh} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{k}_z (\gamma_1 + 2\gamma_2) \hat{k}_z + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) + V(z). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Los términos no diagonales dan lugar a la mezcla entre bandas y son:

$$\begin{aligned} S &= -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} (k_x - ik_y) \frac{1}{2} (\gamma_3 \hat{k}_z + \hat{k}_z \gamma_3), \\ R &= \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} (k_x - ik_y)^2 \\ &+ \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} (k_x + ik_y)^2. \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde $\hat{k}_z = -id/dz$ y hemos tomado la energía de la banda de valencia como positiva, con el origen de energía en su máximo ($E_v = 0$, $H \rightarrow -H$ en el Hamiltoniano H_{vv}). Los parámetros de Luttinger tienen un valor diferente en el pozo y la barrera, por lo que dependen de la coordenada z . Con el fin de mantener el carácter

hermítico del Hamiltoniano, se ha tomado simétrico respecto a los parámetros γ y el operador \hat{k}_z .

La ecuación de autovalores será:

$$\sum_{m'_j=\pm 1/2, \pm 3/2} H_{m_j m'_j} \phi_{m'_j}^\alpha(z) = E^\alpha \phi_{m_j}^\alpha(z) \quad , \quad (2.39)$$

donde las nuevas funciones envolventes vienen dadas por:

$$\phi_i^\alpha = \sum_{\nu_i} C_{\nu_i}^\alpha \varphi_{\nu_i}(z) \quad , \quad (2.40)$$

y los coeficientes $C_{\nu_i}^\alpha$ se obtienen resolviendo el determinante secular:

$$\text{Det} (\langle \varphi_{\nu_i} | H | \varphi_{\nu_j} \rangle - \delta_{\nu_i, \nu_j} \delta_{i,j}) = 0 \quad . \quad (2.41)$$

La expresión completa de los elementos de matriz $\langle \varphi_{\nu_i} | H | \varphi_{\nu_j} \rangle$ se encuentra en el Apéndice B.

Como resultado de la diagonalización del Hamiltoniano H se obtiene la dispersión de las bandas de valencia para $k_{xy} \neq 0$ (Figura 2.9). Como puede observarse en la figura, la dispersión de las bandas en las direcciones [11] y [01] no coincide. Esta anisotropía es debida a la diferencia entre los parámetros de Luttinger γ_2 y γ_3 , que destruye la simetría axial del Hamiltoniano. El efecto recibe el nombre inglés de warping (torsión). La diferencia entre estos dos parámetros es pequeña en materiales como el GaAs y en ocasiones es posible despreciarla, tomando $\gamma_2 - \gamma_3 \approx 0$ (aproximación axial⁸⁶). El acoplamiento entre las bandas produce otro efecto interesante: en el punto $k_{xy} = 0$ la banda lh tiene curvatura cóncava, lo que significa que su masa efectiva es positiva, como la del electrón en la banda de conducción. Al alejarnos del centro de la zona de Brillouin, la banda tiene un punto de inflexión en el que la masa efectiva se hace infinita, pasa posteriormente a ser convexa y cambia de signo para valores mayores del vector de ondas.

Con el fin de simplificar el cálculo de la dispersión de las bandas de energía en el pozo cuántico y facilitar la clasificación de los estados, es conveniente tener en cuenta las propiedades de simetría del Hamiltoniano y de las funciones φ_{ν_i} . Debido

a la simetría del pozo, sus funciones de onda tienen paridad definida. Estudiando detenidamente la paridad de los elementos de matriz del Hamiltoniano H , vemos que tanto los elementos diagonales $E_{hh, lh}$ como el elemento no diagonal R son pares, por lo que acoplan funciones del pozo de la misma paridad. El elemento S , en cambio,

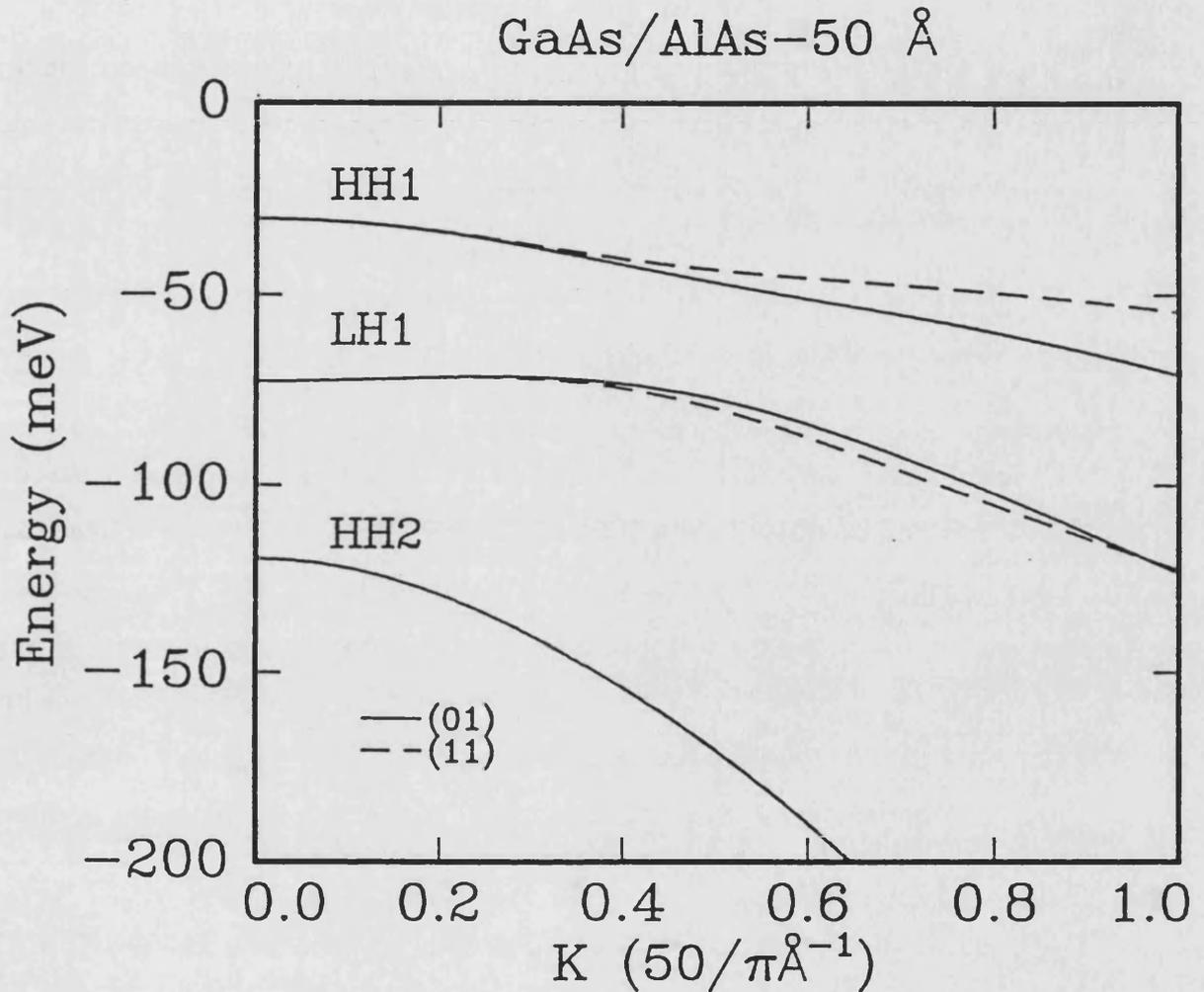


Figura 2.9: Dispersión de las bandas de energía de un pozo cuántico en las direcciones [01] y [11]. Se representan las tres primeras subbandas indicando su componente más importante (hh, lh).

es impar (proporcional a k_z) y acopla estados de paridad diferente. Representando los elementos pares mediante un signo + y los impares mediante un - obtenemos

la siguiente distribución de paridades en el Hamiltoniano de Luttinger:

$$\begin{pmatrix} + & - & + & - \\ - & + & - & + \\ + & - & + & - \\ - & + & - & + \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

donde los elementos nulos de la diagonal secundaria se han tomado como impares. Las componentes de los autovectores correspondientes a una matriz con estas características tienen paridad definida según una de las siguientes ordenaciones⁴¹:

$$\begin{pmatrix} + \\ - \\ + \\ - \end{pmatrix} \quad \text{o bien} \quad \begin{pmatrix} - \\ + \\ - \\ + \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Ordenando los elementos de la base φ_i de forma adecuada, podemos separar el Hamiltoniano en dos bloques independientes. El primer bloque se obtiene tomando para la banda $v_{3/2}$ funciones pares, para $v_{1/2}$ funciones impares, a $v_{-1/2}$ le corresponderían funciones pares y a la banda $v_{-3/2}$ de nuevo funciones impares. El segundo bloque se obtendría de forma análoga, pero comenzando con las funciones impares ($v_{3/2} \rightarrow$ impares, $v_{1/2} \rightarrow$ pares, $v_{-1/2} \rightarrow$ impares y $v_{-3/2} \rightarrow$ pares). Para cada subbanda se obtienen dos estados degenerados de paridad diferente con la estructura mostrada en (2.43), cada uno perteneciente a uno de los bloques.

Es posible extender esta notación a la banda de conducción, aunque en la aproximación considerada se encuentre desacoplada de la banda de valencia. Con este fin incluimos en la base los estados $c_{-1/2}$ y $c_{1/2}$. Para el primer bloque tendrán paridad $+-$ y en el segundo $-+$. Si asociamos a cada bloque un número cuántico b que tome el valor 1 para el primer bloque y 2 para el segundo, la paridad de las componentes de un estado puede determinarse mediante la relación:

$$\pi_{b,m_j} = (-1)^{b+m_j+\frac{3}{2}}, \quad (2.44)$$

donde m_j es la tercera componente del momento angular. Esta clasificación de las componentes según su paridad es útil en el estudio de las interacción electrón-fonón

y electrón fotón en la dispersión Raman (Capítulo 6), ya que simplifica el análisis de las reglas de selección.

Hay que tener en cuenta que las autofunciones del Hamiltoniano de Luttinger así obtenidas sólo satisfacen completamente las condiciones de contorno en la interfase para $k_{xy} = 0$. La aproximación realizada será adecuada si nos mantenemos cerca del centro de la zona de Brillouin.

2.5 Estructura electrónica del pozo cuántico en un campo magnético

Tras estas consideraciones sobre la estructura de bandas de los pozos cuánticos, pasaremos a estudiar la influencia de un campo magnético externo en la estructura electrónica de estos materiales. Comenzaremos analizando la solución propuesta por Landau⁴² para determinar el movimiento de un electrón libre en un campo magnético.

En presencia de un campo magnético \vec{B} , el Hamiltoniano del electrón libre:

$$H = \frac{\tilde{p}^2}{2m_0} \quad (2.45)$$

se convierte en:

$$H = \frac{1}{2m_0} (\tilde{p} + e\vec{A})^2 + \frac{e}{m_0} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad , \quad (2.46)$$

donde \vec{A} es el potencial vector asociado al campo magnético ($\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$) y se ha tenido en cuenta que el electrón tiene carga $-e$. $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ representa el spin del electrón, con autovalores $\hbar m_s = \pm\hbar/2$. Si el campo se aplica en la dirección z ($\vec{B} = B \cdot \hat{z}$) y expresamos el potencial vector en el gauge de Landau:

$$\vec{A} = (0, Bx, 0) \quad , \quad (2.47)$$

el Hamiltoniano resultante puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \boxed{H} &= \frac{1}{2m_0} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + eBx)^2 + \hat{p}_z^2] + \frac{e}{m_0} S_z B \\ &= \boxed{\frac{\tilde{p}^2}{2m_0} + \frac{e^2 B^2}{2m_0} x^2 + \frac{eB}{m_0} x \hat{p}_y + \frac{e}{m_0} S_z B} \end{aligned} \quad (2.48)$$

El movimiento es libre en la dirección del campo magnético (z) y en la dirección y , por lo que la función de onda del electrón será de la forma:

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\hbar^{-1}p_y y} e^{i\hbar^{-1}p_z z} f(x)\chi(m_s) \quad , \quad (2.49)$$

donde hemos escogido la dirección z como dirección de cuantización del spin y $\chi(m_s)$ es un espinor de spin 1/2. Introduciendo esta función en la ecuación de autovalores $H\phi = E\phi$, obtenemos una ecuación diferencial para la función $f(x)$ y la energía del electrón en el campo magnético:

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m_0} + \frac{1}{2}m_0\omega_c^2(x - x_0)^2 \right] f(x) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m_0} - \frac{\hbar e}{m_0}m_s B \right) f(x) \quad . \quad (2.50)$$

Esta es la ecuación de autovalores de un oscilador armónico de frecuencia $\omega_c = eB/m_0$ centrado en el punto $x_0 = -\lambda^2 p_y / \hbar$.⁶⁷ ω_c recibe el nombre de frecuencia ciclotrónica y $\lambda = \sqrt{\hbar/eB}$ es el radio de la órbita ciclotrónica o radio de Landau. Para un campo de 20 T, el radio λ toma un valor de 57Å y aumenta rápidamente al disminuir el campo. La función de onda del electrón será por tanto:

$$\begin{aligned} \phi_{p_x, p_y, N, m_s}(\vec{r}) &= \frac{1}{V^{1/3}} e^{i\hbar^{-1}p_y y} e^{i\hbar^{-1}p_z z} u_N(x - x_0)\chi(m_s) \\ &= \frac{1}{V^{1/3}} e^{i\hbar^{-1}p_y y} e^{i\hbar^{-1}p_z z} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\lambda^2}} \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{\lambda 2^N N!}} H_N\left(\frac{x - x_0}{\lambda}\right)\chi(m_s) \end{aligned} \quad (2.51)$$

donde las funciones $H_N(x)$ son los polinomios de Hermite. La energía del estado correspondiente a esta función de onda es:

$$E_{N, p_x, m_s} = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) + \mu_B g_e m_s B + \frac{p_z^2}{2m_0} \quad (2.52)$$

donde $N = 0, 1, 2, \dots$ es el número cuántico de Landau que caracteriza cada estado, $\mu_B = \hbar e / 2m_0$ es el magnetón de Bohr y $g_e = 2$ el factor de Landé del electrón libre. Por lo tanto, en presencia de un campo magnético la energía del electrón libre queda cuantizada en bandas de energía unidimensionales (como función de p_x) separadas una energía $\hbar\omega_c$ constante, proporcional al campo magnético aplicado (Figura 2.10). Cada estado queda caracterizado por cuatro números cuánticos: N , p_x , p_y y m_s . Puesto que p_y no aparece en la expresión de la energía, los estados están degenerados en este número cuántico.

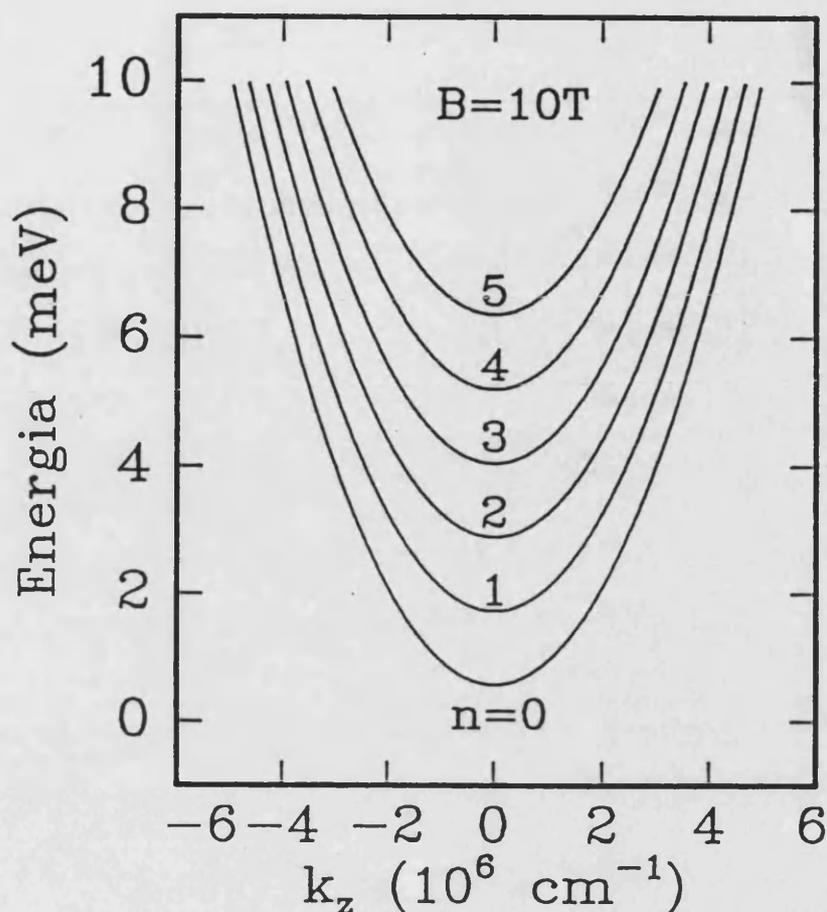


Figura 2.10: Dispersión de las bandas de energía de un electrón libre en un campo magnético aplicado en la dirección z en función de $k_z = p_z/\hbar$.

El grado de degeneración puede calcularse teniendo en cuenta que el centro de la órbita ciclotrónica, x_0 , debe estar contenido en el cristal. Si el cristal se extiende una longitud L_x y L_y a lo largo de los ejes x e y tendremos que:

$$-\frac{L_x}{2} < x_0 = -\frac{\lambda^2 p_y}{\hbar} < \frac{L_x}{2} \quad (2.53)$$

Por supuesto, las dimensiones de la muestra deben ser lo suficientemente grandes como para que podamos despreciar los efectos de borde en el cálculo de autovalores. Por otra parte, los valores permitidos de p_y están uniformemente distribuidos en el espacio de momentos y separados una distancia $2\pi\hbar/L_y$ (condiciones de contorno periódicas aplicadas al eje y). La degeneración de cada nivel de Landau será igual al número de valores posibles

que puede tomar p_y , es decir,

$$\frac{L_x L_y}{2\pi\lambda^2} = \frac{V^{2/3}}{2\pi\lambda^2} \quad (2.54)$$

A pesar de que el número cuántico p_y no interviene en la expresión de la energía, será necesario tenerlo en cuenta en el estudio de perturbaciones que rompan la degeneración de los niveles de Landau. Este puede ser el caso de un campo eléctrico o la aplicación de tensión uniaxial.

El spin del electrón produce una degeneración adicional: todos los estados salvo el fundamental ($N = 0$, $p_z = 0$, $m_s = -1/2$) están doblemente degenerados, puesto que los estados con índices N , $m_s = 1/2$ tienen la misma energía que los estados $N + 1$, $m_s = -1/2$. Si mantenemos fijos el momento y el spin del electrón, y representamos

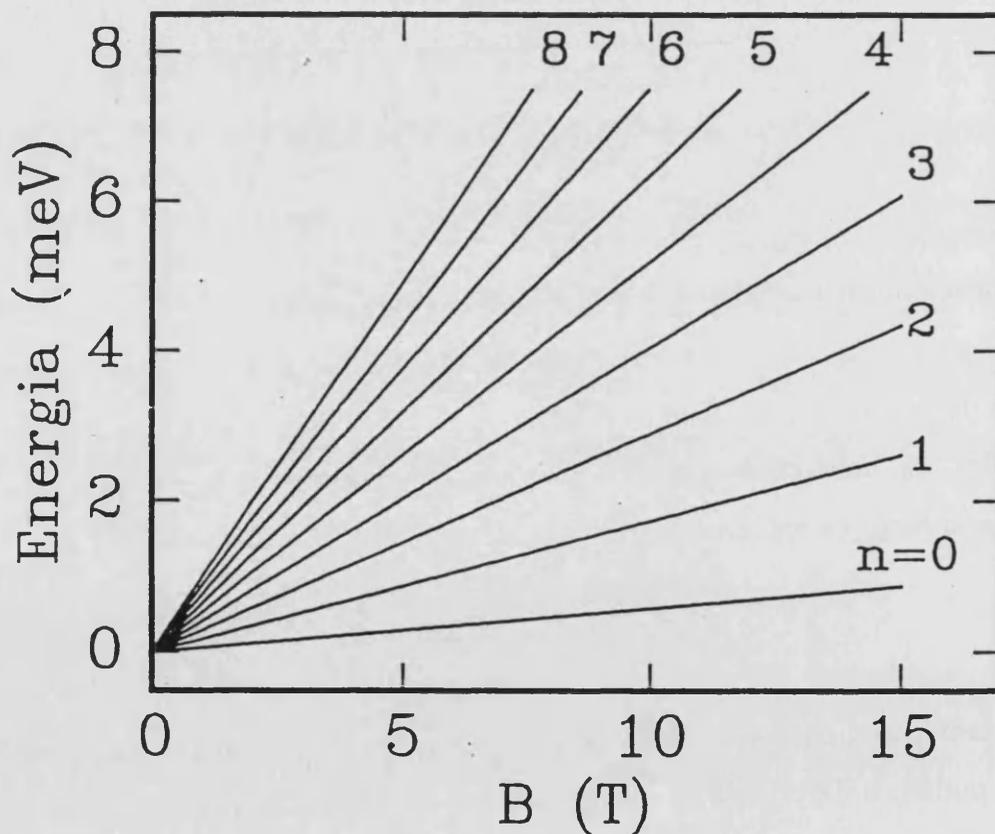


Figura 2.11: Niveles de Landau de un electrón libre en función del campo magnético.

la energía de los distintos estados en función del campo magnético B (Figura 2.11), obtendremos un conjunto de rectas de pendiente diferente que convergen en un origen común a campo cero. Estas rectas representan la dispersión de los niveles de Landau en función del campo magnético. A campo fijo, la diferencia de energía entre dos niveles de Landau contiguos es constante e igual a $\hbar\omega_c$.

Una forma más general de calcular las autofunciones y autovalores del Hamiltoniano se consigue utilizando el formalismo de segunda cuantización. Para ello se definen dos operadores:

$$\hat{a} = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x - i\hat{k}_y), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \quad , \quad (2.55)$$

con:

$$\hbar\hat{k}_x = \hat{p}_x - \frac{\hbar}{2\lambda^2}y, \quad \hbar\hat{k}_y = \hat{p}_y, \quad \hbar\hat{k}_z = \hat{p}_z \quad . \quad (2.56)$$

Los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{k}_z] = [\hat{a}^\dagger, \hat{k}_z] = 0 \quad . \quad (2.57)$$

Si escribimos el Hamiltoniano H en función de estos operadores obtenemos:

$$H = \hbar\omega_c\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \mu_B g_e m_s B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} \quad . \quad (2.58)$$

Los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger tienen el significado usual de operadores de creación y destrucción, lo que significa que, aplicados a un estado $|N\rangle$ de energía $E_N = \hbar\omega_c(N + 1/2)$, cumplen las relaciones:

$$\hat{a}|N\rangle = \sqrt{N}|N-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|N\rangle = \sqrt{N+1}|N+1\rangle \quad . \quad (2.59)$$

Una de las magnitudes que reflejan con mayor claridad los cambios introducidos por el campo magnético en la energía del electrón libre es la densidad de estados electrónicos. En ausencia de campo, la densidad de estados del electrón es proporcional a la raíz cuadrada de su energía, $\rho \propto \sqrt{E}$ (línea de puntos en la Figura 2.12). En un campo magnético los distintos niveles de Landau representan puntos singulares de tipo unidimensional en la densidad de estados. Cada nivel de Landau contribuye con una cantidad proporcional a $1/\sqrt{E - \hbar\omega_c(N + 1/2)}$, que se refleja en la Figura 2.12 como una divergencia (línea continua).

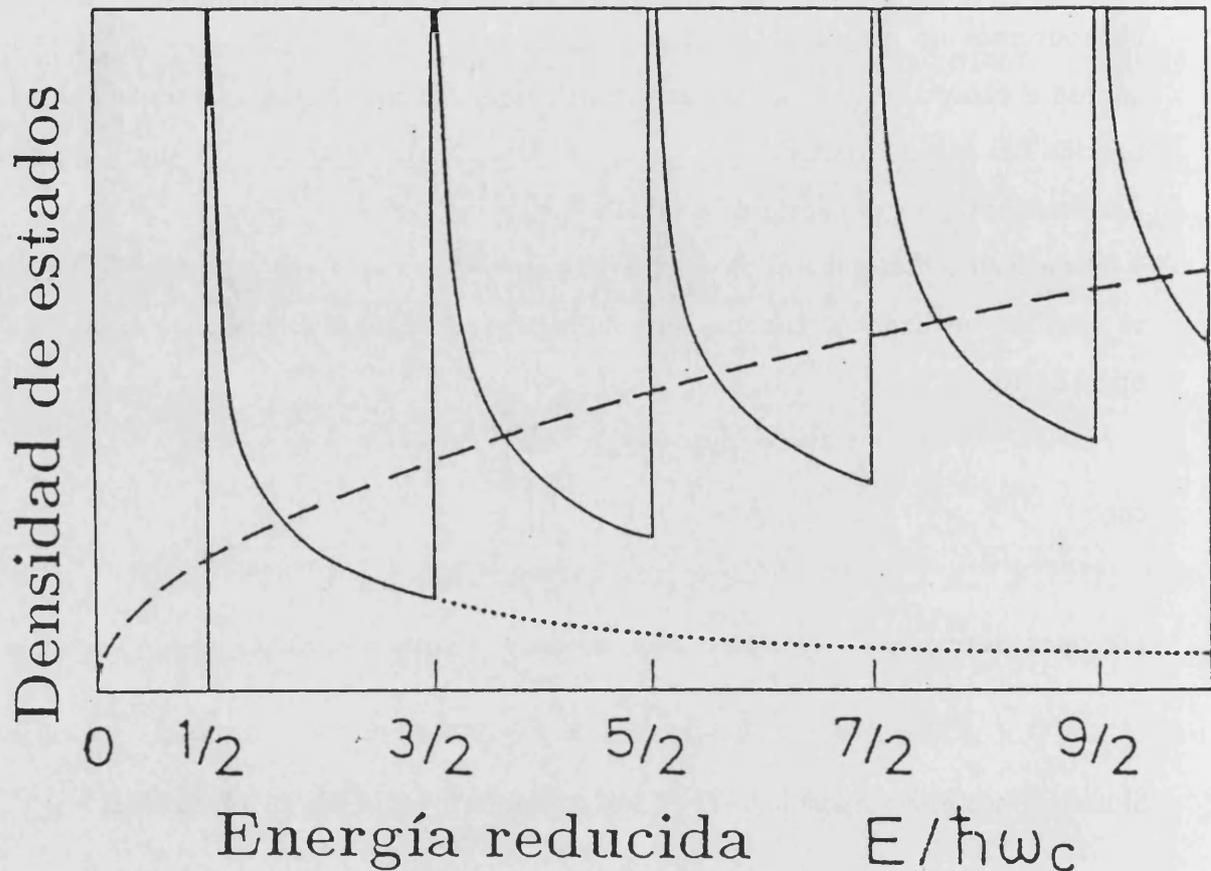


Figura 2.12: Densidad de estados de un electrón libre en presencia de un campo magnético (línea continua) en comparación con la densidad de estados en ausencia de campo (línea discontinua).

Para estudiar las bandas de energía de un sólido en presencia de un campo magnético es necesario generalizar los resultados obtenidos por Landau para incluir la influencia del potencial cristalino sobre los estados electrónicos. En el contexto de un modelo parabólico, esto se consigue sustituyendo la masa del electrón libre por la masa efectiva m_e característica del electrón en esa banda. En el caso en que la dispersión de energía fuera anisotrópica, la frecuencia ciclotrónica vendrá dada por $\omega_{c_e} = eB/m_{xy_e}$, donde m_{xy_e} es la masa reducida en el plano perpendicular al campo magnético. La masa m_{z_e} en la dirección paralela al campo intervendría en la expresión de la energía cinética. El factor de Landé del electrón libre debe sustituirse también por un factor g efectivo, g_e^* . Estos cambios se

reflejará en la pendiente de los niveles de Landau en función del campo magnético, que aumentará o disminuirá dependiendo de la curvatura de la banda en la dirección perpendicular al campo. La degeneración de spin a la que hacíamos alusión queda rota, puesto que el producto $\mu_B g_e^*$ no coincidirá en general con la energía ciclotrónica. La energía tomará la forma:

$$E_{N,p_z,m_s} = \hbar\omega_{c_e}\left(N + \frac{1}{2}\right) + \mu_B g_e^* m_s + \frac{p_z^2}{2m_{z_e}} \quad (2.60)$$

Consideremos ahora el efecto combinado de un pozo cuántico crecido en la dirección z y un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. El potencial de confinamiento del pozo afecta únicamente el movimiento del electrón en la dirección z , cuantizando su energía. Dado que en el Hamiltoniano del sistema el movimiento del electrón en las distintas direcciones del espacio está desacoplado, para tener en cuenta el efecto del pozo cuántico basta sustituir en la Ecuación (2.60) la energía cinética $p_z^2/2m_{z_e}$ el correspondiente al nivel del pozo ν , E_ν , y en la función de onda, la contribución del electrón libre en la dirección z , $\exp(ip_z z/\hbar)$, por la función de onda del electrón en el pozo cuántico, $\varphi_\nu(z)$. Finalmente tenemos:

$$E_{N,\nu,m_s} = E_\nu + \hbar\omega_{c_e}\left(N + \frac{1}{2}\right) + \mu_B g_e^* m_s$$

$$\phi_{\nu,p_y,N,m_s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i p_y y} \varphi_\nu(z) \cdot u_N(x - x_0) \chi(m_s) \quad (2.61)$$

donde L_y es la longitud del cristal a lo largo del eje y . Si representamos los niveles de energía en función del campo, obtenemos un conjunto de niveles de Landau que se repite para cada uno de los distintos estados confinados en el pozo (Figura 2.13). En el caso en que la masa efectiva sea independiente de la energía, los estados con el mismo índice de Landau N pero distinto nivel del pozo ν tendrán la misma pendiente en función del campo magnético. Es importante resaltar que el movimiento del electrón queda completamente cuantizado por la acción conjunta del campo magnético y el pozo cuántico. El pozo cuantiza la componente z del movimiento, mientras que el campo magnético cuantiza el movimiento del electrón en el plano xy . Como consecuencia del confinamiento, la densidad de estados electrónicos se anula salvo en los puntos en los que la energía coincide con los

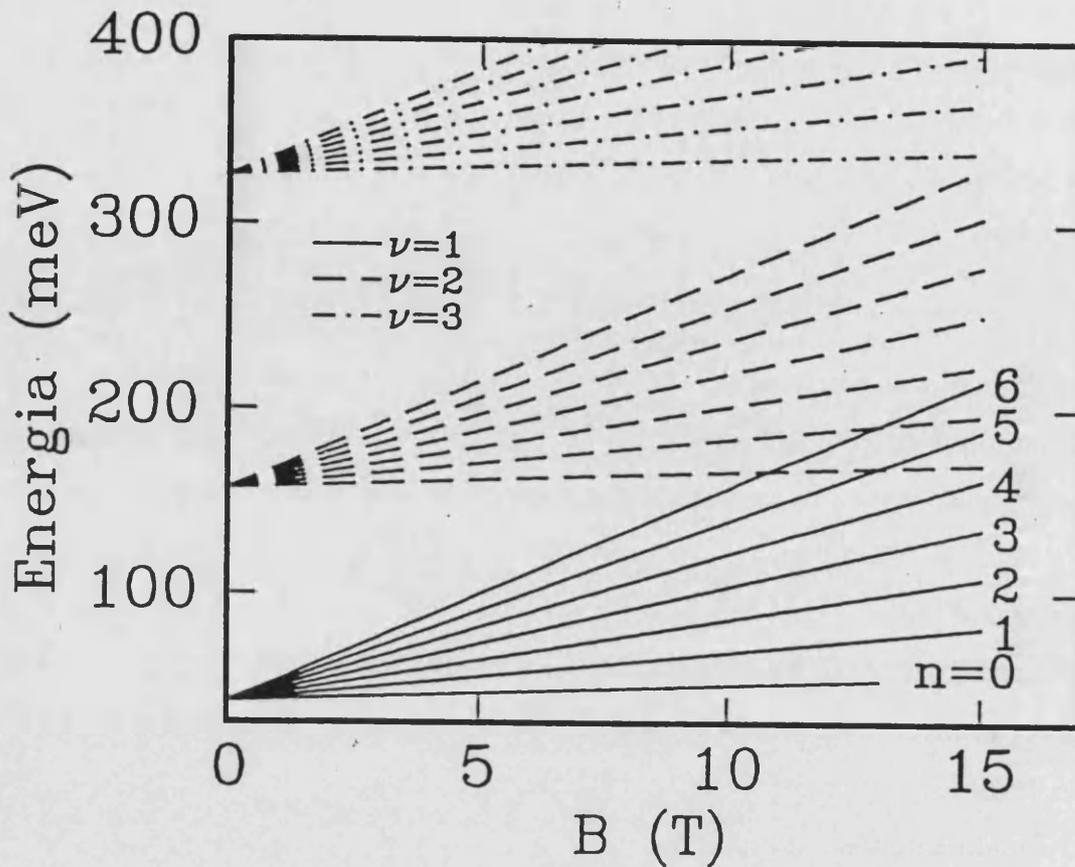


Figura 2.13: Niveles de Landau del electrón en la banda de conducción para las tres primeras subbandas confinadas de un pozo cuántico ($\nu = 1, 2, 3$). Se muestra la variación de la energía en función del campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. Aproximación parabólica.

niveles discretos E_{N,ν,m_s} , que son puntos críticos para los que la densidad de estados se hace infinita. En la Figura 2.14 se representa de forma esquemática la densidad de estados en función de la energía reducida $E/\hbar\omega_c$.

En el caso que nos atañe, de pozos cuánticos de semiconductores III-V, es necesario describir el efecto del campo magnético sobre las bandas de energía del cristal mediante los modelos de bandas que hemos explicado en la Sección 2.4. A lo largo de este trabajo utilizaremos el Hamiltoniano de Luttinger para describir el comportamiento de las bandas de huecos pesados y ligeros y trataremos la banda de conducción mediante un modelo parabólico.

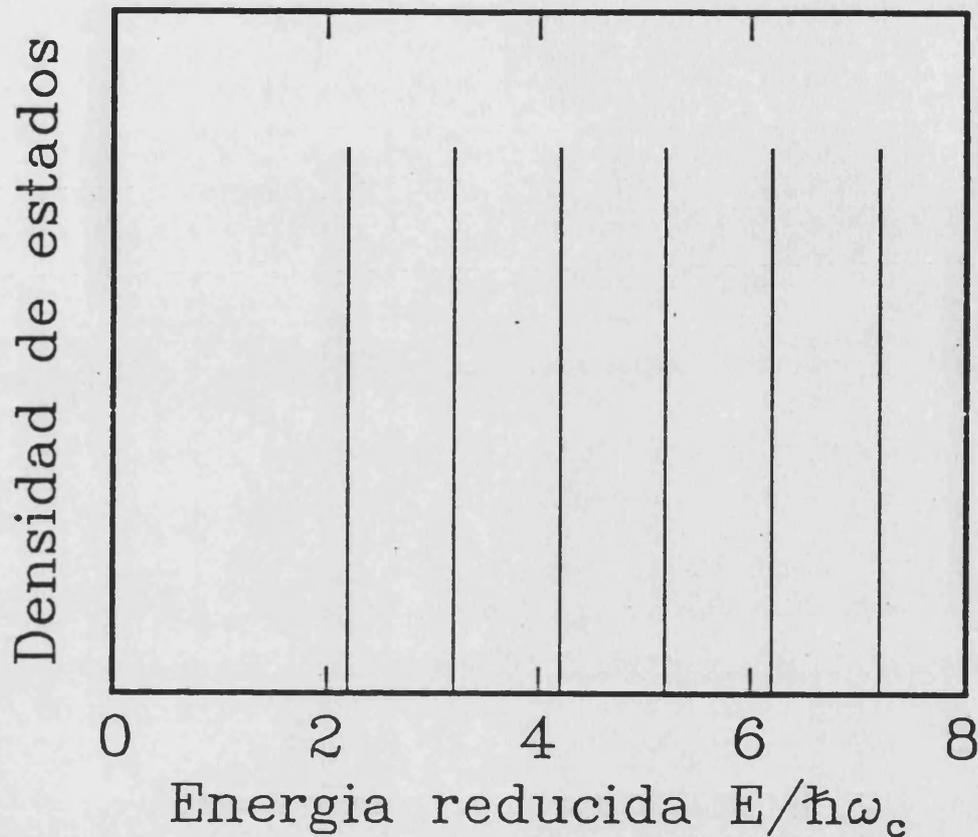


Figura 2.14: Densidad de estados electrónicos de un pozo cuántico en un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento.

En presencia de un campo magnético, el Hamiltoniano de Luttinger incluye en sus elementos diagonales dos términos proporcionales al campo magnético y a las constantes κ y q , que representan las contribuciones isotrópica (κ) y anisotrópica (q) a los factores g de la banda de valencia.⁴⁴ Igual que en el caso de electrones libres, es posible describir la acción del campo magnético mediante el formalismo de segunda cuantización, utilizando los operadores de creación y destrucción definidos en la Ecuación (2.55). Introduciendo en los términos diagonales del Hamiltoniano (2.36) las constantes κ y q , el Hamiltoniano

del sistema toma la forma:

$$H = \begin{pmatrix} E_{hh}^+ & S & R & 0 \\ S^* & E_{lh}^+ & 0 & R \\ R^* & 0 & E_{lh}^- & -S \\ 0 & R^* & -S^* & E_{hh}^- \end{pmatrix}, \quad (2.62)$$

donde los términos diagonales se definen como:

$$\begin{aligned} E_{hh}^\pm &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{k}_z (\gamma_1 - 2\gamma_2) \hat{k}_z + V(z) + \hbar\omega_c (\gamma_1 + \gamma_2) (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) \pm \hbar\omega_c \left(\frac{3}{2}\kappa + \frac{27}{8}q \right), \\ E_{lh}^\pm &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \hat{k}_z (\gamma_1 + 2\gamma_2) \hat{k}_z + V(z) + \hbar\omega_c (\gamma_1 - \gamma_2) (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) \pm \hbar\omega_c \left(\frac{1}{2}\kappa + \frac{1}{8}q \right), \end{aligned} \quad (2.63)$$

y los términos no diagonales dan lugar a la mezcla entre bandas y son:

$$\begin{aligned} S &= -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{\lambda m_0} \hat{a} \frac{1}{2} (\gamma_3 \hat{k}_z + \hat{k}_z \gamma_3) \\ R &= \hbar\omega_c \sqrt{3} \left\{ \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \hat{a}^2 + \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} \hat{a}^{\dagger 2} \right\}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Las autofunciones de este Hamiltoniano pueden escribirse como combinación lineal de funciones de la forma

$$\frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i p_y y} \varphi_\nu(z) u_N(x - x_0) v_{m_j}, \quad (2.65)$$

donde las funciones $\varphi_\nu(z)$ son autofunciones del pozo cuántico y $u_N(x - x_0)$ son las funciones de onda del oscilador armónico definidas en la Ecuación (2.51). El Hamiltoniano de Luttinger no mezcla estados con distinto p_y , por lo que constituye un buen número cuántico del sistema. Por otra parte, si despreciamos la diferencia $\gamma_2 - \gamma_3$ frente al término proporcional a $\gamma_2 + \gamma_3$ en la definición de R (aproximación axial), es posible escribir las autofunciones del Hamiltoniano como:

$$\begin{aligned} \boxed{\Phi_{n,p_y}^{\alpha,b}} &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i p_y y} \cdot \left(\phi_{3/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-3} v_{3/2} + \phi_{1/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-2} v_{1/2} \right. \\ &\quad \left. + \phi_{-1/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-1} v_{-1/2} + \phi_{-3/2}^{\alpha,b,n}(z) u_n v_{-3/2} \right) \\ &= \boxed{\frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i k_y y} \sum_{m_j = \pm 3/2, \pm 1/2} \phi_{m_j}^{\alpha,b,n} u_{n-(m_j+3/2)} v_{m_j}} \end{aligned} \quad (2.66)$$

en la base de momento angular $3/2, |j, m_j\rangle$. Las funciones $\phi_i^{\alpha, b, n}$ son combinaciones lineales de las funciones del pozo similares a las de la Ecuación (2.40):

$$\phi_i^{\alpha, b, n} = \sum_{\nu_i} C_{\nu_i}^{\alpha, b, n} \varphi_{\nu_i}(z) \quad (2.67)$$

El superíndice b se ha incluido en la definición para indicar el bloque al que pertenece la función de onda según su paridad (Ecuación (2.44)). α es un número cuántico que numera los diferentes estados.

En la aproximación axial, el Hamiltoniano de Luttinger mezcla cuatro niveles de Landau diferentes con índices $N = n, n-1, n-2$ y $n-3$, cada uno correspondiente a una banda diferente. El número cuántico n recibe el nombre de número cuántico orbital de Landau y es un buen número cuántico del sistema. La inclusión en el Hamiltoniano del término anisotrópico proporcional a $\gamma_2 - \gamma_3$ produce el acoplamiento de niveles de Landau que difieren en el índice N en cuatro unidades, dando lugar a nuevos fenómenos de anticruze. Sin embargo, el corrimiento absoluto de las bandas de energía que produce es inferior al 10%,⁴⁷ por lo que despreciaremos su efecto.

Como puede verse en la Ecuación (2.66), es posible relacionar el número orbital de Landau n de un estado con el número de Landau N de una cualquiera de sus componentes mediante la expresión: $n = N + m_j + 3/2$, donde la constante $3/2$ se ha introducido para definir n positivo ($N = 0, m_j = -3/2 \rightarrow n = 0$).

Considerando la aproximación parabólica para la banda de conducción, tanto el spin m_s , como el nivel del pozo ν son buenos números cuánticos. En este caso, la función de onda del electrón en esta banda puede escribirse como:

$$\Phi_{n, p_y, m_j}^{c, \nu} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i p_y y} \varphi_{\nu}(z) u_{n-(m_j+3/2)} c_{m_j} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i p_y y} \varphi_{\nu} u_N c_{m_j} \quad (2.68)$$

Alternativamente, podemos utilizar la notación desarrollada al final de la Sección 2.4 y definir la función de onda de la banda de conducción como:

$$\Phi_{n, p_y}^{\alpha, b}$$

de forma equivalente a la de la banda de valencia, donde b indica el bloque al que pertenece la función según la paridad del estado del pozo y α sustituye a los índices c y ν . De esta

forma perdemos parte de la información contenida en la definición (2.68), pero extendemos la notación al caso más general en el que la banda de conducción no pueda considerarse parabólica.

Cada estado del Hamiltoniano tiene paridad definida. Teniendo en cuenta que la paridad de las funciones de Landau u_N es $(-1)^N$, un estado con número orbital de Landau n , perteneciente al bloque b y caracterizado por el número cuántico α tendrá paridad:

$$\pi_{n,b,\alpha} = \pi_{\alpha}(-1)^{n-m_j-3/2} \cdot (-1)^{b+m_j+3/2} = \pi_{\alpha}(-1)^{n+b} \quad ,$$

$$\text{donde } \pi_{\alpha} = \begin{cases} +1 & \text{si } \alpha \in \text{ banda de valencia} \\ -1 & \text{si } \alpha \in \text{ banda de conducción,} \end{cases} \quad (2.69)$$

donde se ha utilizado la Ecuación (2.44) para determinar la paridad de las funciones del pozo. En la Figura 2.15 se representan los niveles de energía de la banda de valencia de un pozo cuántico de 100 Å en función del campo magnético. Comparando este resultado con la Figura 2.13 se observan claras diferencias. Los niveles de Landau de las distintas subbandas no varían linealmente con el campo magnético, y su curvatura depende fuertemente del valor del campo y de la distancia entre las subbandas de pozo pesado y ligero.

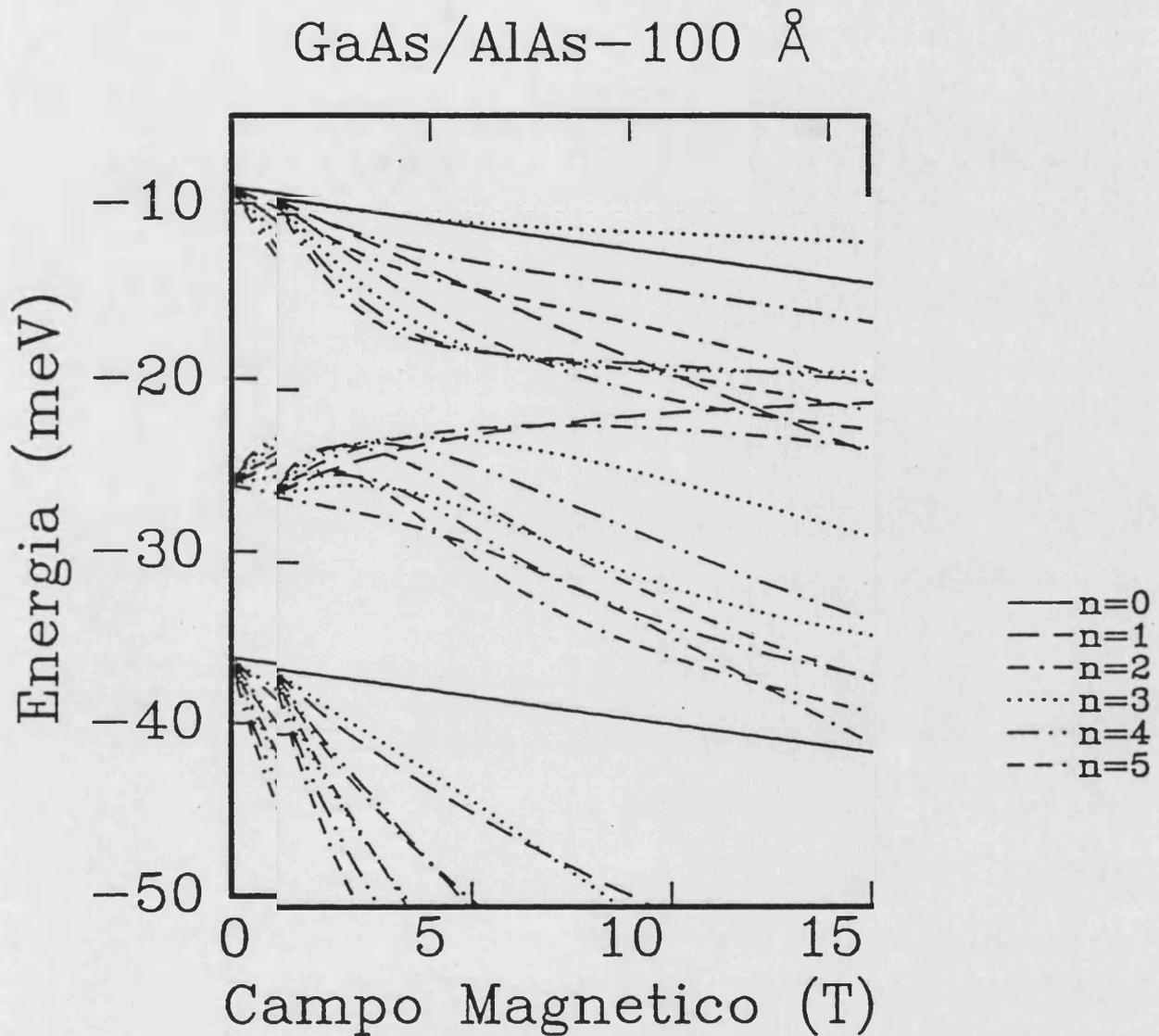


Figura 2.15: Niveles de Landau de la banda de valencia de un pozo cuántico de GaAs/AlAs de 100 Å en función del campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. El acoplamiento entre las distintas subbandas se ha tenido en cuenta mediante el Hamiltoniano de Luttinger 4×4 .

Capítulo 3

Excitaciones elementales y su interacción

En el estudio de la dispersión Raman por fonones hay dos interacciones que desempeñan un papel crucial: la interacción electrón-radiación (H_{ER}), responsable de la absorción y emisión de un fotón, y la interacción electrón-fonón (H_{EP}), que describe la dispersión de un par electrón-hueco debido a la emisión o absorción de un fonón.

Utilizaremos el formalismo de segunda cuantización para expresar los operadores de interacción en función de operadores de creación y destrucción de un electrón en el estado i de la banda λ ($c_{\lambda,i}^\dagger, c_{\lambda,i}$). Teniendo en cuenta la aproximación de electrones libres y la periodicidad del cristal, es fácil demostrar que los dos Hamiltonianos de interacción que estudiaremos pueden escribirse como superposición de operadores monoeléctricos de la forma⁶⁹:

$$H_{int} = \sum_l f(\vec{r}_l) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_l} \quad , \quad (3.1)$$

donde $f(\vec{r})$ es una función con la periodicidad de la red. Si representamos los estados electrónicos mediante las funciones $|\lambda, i\rangle$ de un electrón en el estado i de la banda λ , podremos escribir el Hamiltoniano de interacción como:

$$H_{int} = \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} \langle \lambda', j | f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \lambda, i \rangle \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \quad . \quad (3.2)$$

A continuación deduciremos la expresión de H_{ER} y H_{EP} utilizando el formalismo de segunda cuantización.

3.1 Fotones e interacción electrón-radiación

Para deducir el Hamiltoniano cuántico del campo electromagnético en el vacío e introducir el concepto de fotón, partiremos de las ecuaciones de Maxwell de la electrodinámica clásica.

En ausencia de fuentes, es posible describir el campo electromagnético mediante el gauge de Coulomb o transversal, en el que tanto el potencial escalar como la divergencia del potencial vector se anulan:

$$\varphi(\vec{r}) = 0; \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}) = 0 \quad . \quad (3.3)$$

Los campos eléctrico y magnético de la radiación se obtienen a partir del potencial vector mediante las relaciones:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}; \quad \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad , \quad (3.4)$$

donde hemos expresado las cantidades características del campo electromagnético en el Sistema Internacional de Unidades. A partir de las ecuaciones de Maxwell se deduce que el potencial vector satisface la ecuación de ondas:

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 \quad , \quad (3.5)$$

donde es c la velocidad de la luz en el vacío.

Para cuantizar el campo de radiación electromagnética supondremos que se encuentra encerrado en un volumen V (por ejemplo una caja de lado $L = \sqrt[3]{V}$), que en caso necesario haremos tender a infinito. El potencial vector en el interior de este volumen puede desarrollarse en serie de Fourier como una superposición de ondas planas:

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}} \left(\vec{A}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \vec{A}_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \quad . \quad (3.6)$$

Dado que el potencial vector es transversal a la dirección de propagación del campo, el producto $\vec{k} \cdot \vec{A}$ es nulo y podemos expresar \vec{A} como combinación lineal de dos vectores

ortonormales, en general complejos, $\vec{e}_{\vec{\kappa},1}$ y $\vec{e}_{\vec{\kappa},2}$, perpendiculares a $\vec{\kappa}$:

$$\vec{A}_{\vec{\kappa}} = A_{\vec{\kappa},1}\vec{e}_{\vec{\kappa},1} + A_{\vec{\kappa},2}\vec{e}_{\vec{\kappa},2} \quad , \quad (3.7)$$

y que representan la polarización de la radiación electromagnética.

Es inmediato ver que las Ecuaciones (3.5), (3.6) y (3.7) implican

$$\ddot{A}_{\vec{\kappa},\alpha} + c^2|\vec{\kappa}|^2 A_{\vec{\kappa},\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2 \quad ,$$

donde se ha utilizado la notación \ddot{A} para indicar la segunda derivada temporal de A . Como consecuencia,

$$A_{\vec{\kappa},\alpha}(t) = A_{\vec{\kappa},\alpha}(0)e^{-i\omega(\vec{\kappa})t}, \quad \omega(\vec{\kappa}) = c\kappa \quad .$$

Para cuantizar el campo utilizaremos las variables canónicas reales $Q_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $P_{\vec{\kappa},\alpha}$ definidas como:

$$Q_{\vec{\kappa},\alpha} = \sqrt{V\epsilon_0} (A_{\vec{\kappa},\alpha} + A_{\vec{\kappa},\alpha}^*) \quad , \quad (3.8a)$$

$$P_{\vec{\kappa},\alpha} = -i\omega(\vec{\kappa})\sqrt{V\epsilon_0} (A_{\vec{\kappa},\alpha} - A_{\vec{\kappa},\alpha}^*) = \dot{Q}_{\vec{\kappa},\alpha} \quad , \quad (3.8b)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío. El Hamiltoniano clásico del campo electromagnético en función de las variables $Q_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $P_{\vec{\kappa},\alpha}$ se obtiene a partir de la energía del sistema:

$$\frac{1}{2} \int_V (\epsilon_0 E^2 + \frac{B^2}{\mu_0}) dV \quad ,$$

donde μ_0 es la permitividad magnética del vacío. Utilizando las Ecuaciones (3.4), (3.6), (3.7) y (3.8) e integrando tenemos:

$$H_R = \sum_{\vec{\kappa},\alpha} \left(\frac{1}{2} P_{\vec{\kappa},\alpha}^2 + \frac{1}{2} \omega(\vec{\kappa})^2 Q_{\vec{\kappa},\alpha}^2 \right) \quad . \quad (3.9)$$

Este Hamiltoniano describe el campo electromagnético como una serie osciladores armónicos independientes de frecuencia $\omega(\vec{\kappa})$. La cuantización del campo se obtiene siguiendo el procedimiento usual, es decir, transformando las cantidades $Q_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $P_{\vec{\kappa},\alpha}$ en operadores $\hat{Q}_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $\hat{P}_{\vec{\kappa},\alpha}$ e imponiendo las relaciones de conmutación:

$$[\hat{Q}_{\vec{\kappa},\alpha}, \hat{P}_{\vec{\kappa}',\alpha'}] = i\hbar \delta_{\vec{\kappa},\vec{\kappa}'} \delta_{\alpha,\alpha'} \quad .$$

A partir de aquí podemos definir dos nuevos operadores, $\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}^\dagger$,

$$\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega(\vec{\kappa})}} \left(\omega(\vec{\kappa})\hat{Q}_{\vec{\kappa},\alpha} + i\hat{P}_{\vec{\kappa},\alpha} \right) , \quad (3.10a)$$

$$\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega(\vec{\kappa})}} \left(\omega(\vec{\kappa})\hat{Q}_{\vec{\kappa},\alpha} - i\hat{P}_{\vec{\kappa},\alpha} \right) , \quad (3.10b)$$

en función de los cuales la expresión cuántica del Hamiltoniano (3.9) de la radiación electromagnética es:

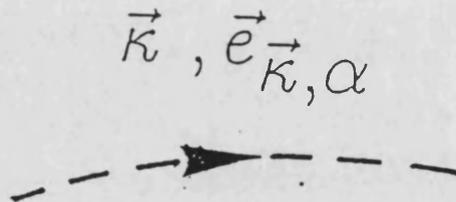
$$H_R = \sum_{\vec{\kappa},\alpha} \hbar\omega(\vec{\kappa}) \left(\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}^\dagger \hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.11)$$

Los operadores $\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}$ y $\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}^\dagger$ cumplen las relaciones de conmutación

$$[\hat{a}_{\vec{\kappa},\alpha}, \hat{a}_{\vec{\kappa}',\alpha'}^\dagger] = \delta_{\vec{\kappa},\vec{\kappa}'} \delta_{\alpha,\alpha'} ,$$

y actúan como operadores de creación y destrucción de los modos de vibración de frecuencia $\omega(\vec{\kappa})$. Estos modos de vibración que cuantizan el campo electromagnético reciben el nombre de **fotones**, y están caracterizados por un vector de onda $\vec{\kappa}$, una frecuencia $\omega(\vec{\kappa})$ y una polarización $\vec{e}_{\vec{\kappa},\alpha}$.

Hemos realizado la deducción del Hamiltoniano cuántico para el campo electromagnético en el vacío. La generalización al caso de un medio material se realiza sustituyendo la velocidad de la luz en el vacío por la correspondiente en el medio, $c \rightarrow c/\eta$ siendo η el índice de refracción del medio. En los diagramas de Feynman representaremos un fotón que evoluciona libremente mediante una línea discontinua:



Para determinar el Hamiltoniano de interacción electrón-radiación, partiremos del Hamiltoniano que representa el movimiento de los electrones del cristal en un campo

electromagnético. Utilizando de nuevo el gauge de Coulomb tenemos:

$$H = \sum_l \frac{1}{2m_0} \left[\tilde{p}_l + e\vec{A}(\vec{r}_l) \right]^2 + V \quad , \quad (3.12)$$

donde V es el potencial de Hartree-Fock.

En el gauge de Coulomb queda garantizado que \vec{A} , a pesar de ser una función de la posición, conmute con el operador momento. El Hamiltoniano resultante puede dividirse en dos partes: la primera corresponde al movimiento de los electrones en el cristal y la segunda representa la interacción del electrón con la radiación,

$$H = \underbrace{\sum_l \frac{\hat{p}_l^2}{2m_0} + V}_{\text{Electrones}} + \underbrace{\sum_l \frac{e}{m_0} \vec{A}(\vec{r}_l) \cdot \tilde{p}_l + \frac{e^2}{2m_0} \vec{A}^2(\vec{r}_l)}_{\text{Interacción electrón-radiación}} \quad . \quad (3.13)$$

Puesto que estamos interesados en estudiar procesos lineales, la contribución del término proporcional a \vec{A}^2 puede despreciarse. Por lo tanto, dentro de la aproximación lineal el Hamiltoniano de interacción electrón radiación viene dado por:

$$H_{ER} = \frac{e}{m_0} \sum_l \vec{A}(\vec{r}_l) \cdot \tilde{p}_l \quad . \quad (3.14)$$

Utilizando las Ecuaciones (3.7), (3.8) y (3.10), este Hamiltoniano puede escribirse en función de los operadores de creación y destrucción de un fotón. Finalmente obtenemos la expresión:

$$H_{ER} = \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta^2\omega V}} \sum_l \sum_{\vec{k},\alpha} \left[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_{\vec{k},\alpha}^* \cdot \tilde{p}_l \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_{\vec{k},\alpha} \cdot \tilde{p}_l \hat{a}_{\vec{k},\alpha} \right] \quad (3.15)$$

Durante un proceso Raman resonante la radiación electromagnética interacciona dos veces con los electrones: en primer lugar se absorbe (destruye) un fotón de frecuencia ω_L , momento \vec{k}_L y polarización \vec{e}_L , creándose un par electrón-hueco en el cristal. En la segunda interacción se emite (crea) un fotón caracterizado por las cantidades ω_S , \vec{k}_S y \vec{e}_S . Si en la Ecuación (3.15) separamos los procesos de creación (H_{ER}^+) y destrucción (H_{ER}^-) de fotones y utilizamos el formalismo de segunda cuantización (Ecuación (3.2)), obtenemos

para la absorción y emisión de un fotón las expresiones:

$$\begin{aligned}
 H_{ER}^- &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \sum_{\lambda, \lambda'} \vec{e}_L \cdot \langle \lambda', j | e^{i\vec{k}_L \cdot \vec{r}} \hat{p} | \lambda, i \rangle \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{a}_{\vec{k}_L, \vec{e}_L} \\
 H_{ER}^+ &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_S^2 \omega_S V}} \sum_{\lambda, \lambda'} \vec{e}_S^* \cdot \langle \lambda', j | e^{-i\vec{k}_S \cdot \vec{r}} \hat{p} | \lambda, i \rangle \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{a}_{\vec{k}_S, \vec{e}_S}^\dagger
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Para expresar este resultado en el sistema de unidades Gaussiano basta con sustituir $e/\sqrt{4\pi\epsilon_0}$ por e .

El Hamiltoniano de interacción electrón-radiación actúa como una perturbación sobre el Hamiltoniano electrónico, que representamos en el capítulo anterior en la base de funciones de momento angular 1/2 y 3/2 (Ecuación (2.16)). La interacción electrón-radiación inducirá transiciones entre un estado electrónico inicial $|I\rangle$ y otro final $|F\rangle$ siempre que la amplitud de probabilidad del proceso,

$$\langle F | H_{ER} | I \rangle, \tag{3.17}$$

sea distinta de cero. Para investigar las reglas de selección de esta transición despreciaremos la dependencia espacial del potencial vector, tomando $e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1$ (aproximación dipolar). Esta aproximación es adecuada para describir la mayor parte de los procesos que vamos a tratar, puesto que el momento de la luz visible es muy pequeño comparado con las dimensiones de la primera zona de Brillouin (unos tres órdenes de magnitud menor). Sin embargo, es necesario tener presente que el momento de la luz, aunque pequeño, puede inducir transiciones observables experimentalmente en determinados procesos doblemente resonantes.^{6,43} Un análisis en profundidad de las reglas de selección para transiciones inter e intrabanda entre niveles de Landau fue desarrollado por Trebin, Rössler y Ranvaud⁴⁸ para materiales con la estructura del sulfuro de zinc. Más adelante comentaremos sus resultados, pero es conveniente familiarizarse primero con el cálculo mediante un modelo más sencillo. Consideremos un proceso de absorción, es decir, destrucción de un fotón con creación de un par electrón-hueco. En la aproximación dipolar la amplitud de probabilidad de esta transición desde el estado inicial $|I\rangle$ al estado final $|F\rangle$ es proporcional al

elemento de matriz:

$$\langle F | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | I \rangle \quad (3.18)$$

El estado inicial será aquel en el que los electrones ocupen completamente la banda de valencia, mientras que en el estado final tendremos un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia. La amplitud de probabilidad será por tanto proporcional al elemento de matriz:

$$\langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v \rangle \quad (3.19)$$

Utilizando la definición de las funciones $|v\rangle$ y $|c\rangle$ de la Tabla 2.1 y recordando que

$$P = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | \hat{p}_x | X \rangle = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | \hat{p}_y | Y \rangle = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle \quad (3.20)$$

podemos calcular con facilidad el valor de estos elementos de matriz. El resultado se recoge en la Tabla 3.1 para el caso de polarización circular y radiación incidente a lo largo del eje z . Las reglas de selección se resumen en la condición $\Delta m_j = \pm 1$ para luz circularmente polarizada (\vec{e}_\pm), donde m_j es la tercera componente del momento angular de los estados electrónicos. Para describir un proceso de emisión, basta trasponer y conjugar

$\vec{e}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)$		$\vec{e}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - i\vec{e}_y)$	
Transición	$\langle c \vec{e}_+ \cdot \hat{p} v \rangle$	Transición	$\langle c \vec{e}_- \cdot \hat{p} v \rangle$
$v_{hh}^- \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} P$	$v_{hh}^+ \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} P$
$v_{lh}^- \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \frac{P}{\sqrt{3}}$	$v_{lh}^+ \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \frac{P}{\sqrt{3}}$
$v_{so}^- \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{3}} P$	$v_{so}^+ \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{3}} P$

Tabla 3.1: Reglas de selección para un proceso de absorción en la aproximación dipolar (bandas parabólicas). Se ha considerado luz circularmente polarizada.

los elementos de matriz que aparecen en la tabla.

Estudiemos a continuación el proceso de absorción en un sistema formado por un pozo cuántico, con un campo magnético en la dirección de crecimiento (eje z). Por simplicidad, consideraremos de momento la energía del sistema dentro de un modelo parabólico de bandas. La absorción de un fotón excitará un electrón desde la banda de valencia hasta la banda de conducción c , nivel de Landau N_e y subbanda del pozo ν_e , dejando en la banda v un hueco caracterizado por los números cuánticos N_h y ν_h . La amplitud de probabilidad de este proceso es proporcional al producto:

$$\langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | \nu \rangle \cdot \langle N_e | N_h \rangle \cdot \langle \nu_e | \nu_h \rangle \quad , \quad (3.21)$$

donde el elemento de matriz del operador momento aparece multiplicado por la integral de solapamiento de las funciones de onda del pozo ($|\nu\rangle$) y de los niveles de Landau ($|N\rangle$) en la banda de conducción (e) y de valencia (v). Como consecuencia de la ortogonalidad de las funciones del oscilador armónico, la transición será permitida únicamente si $N_e = N_h$. Por el contrario, las funciones del pozo cuántico correspondientes a estados en la banda de conducción y de valencia no son ortogonales: la diferencia en la masa efectiva de electrones y huecos y la altura finita de la barrera hacen que el elemento de matriz $\langle \nu_e | \nu_h \rangle$ se anule únicamente cuando las dos funciones $|\nu_h\rangle$ y $|\nu_e\rangle$ tienen distinta paridad. Sin embargo, la probabilidad de la transición disminuye rápidamente para estados de la banda de conducción y de valencia correspondientes a distintas subbandas del pozo.

Si tenemos en cuenta la no parabolicidad de las bandas de energía, los estados electrónicos serán una combinación lineal de funciones de la forma $|j, m_j, \nu, N\rangle$. Debido a la mezcla entre estados de distintas subbandas, las reglas de selección que acabamos de deducir se relajan en cierta medida. La nueva situación puede describirse de forma general mediante el Hamiltoniano (A.1) del Apéndice A. Recogiendo los resultados de Trebin et al.,⁴⁸ el elemento de matriz de la transición dipolar eléctrica para el caso de absorción viene dado en función del operador velocidad como:

$$\langle F | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | I \rangle \propto \langle F | e_+ \hat{v}_- + e_- \hat{v}_+ + e_z \hat{v}_z | I \rangle \quad , \quad (3.22)$$

donde $\hat{v} = \partial H / \partial \hbar \vec{k}$ y se han utilizado las cantidades e_z , $e_\pm = (e_x \pm i e_y) / \sqrt{2}$; \hat{v}_z y $\hat{v}_\pm = (\hat{v}_x \pm i \hat{v}_y) / \sqrt{2}$, que son las componentes del vector de polarización \vec{e} de los fotones

y del operador velocidad. Analizaremos el proceso de absorción para luz circularmente polarizada. Con esta elección, el momento angular del fotón está bien definido, lo que nos permitirá separar las transiciones ópticas entre distintas bandas eligiendo luz polarizada a la derecha o a la izquierda. Para que la notación no induzca a error, conviene resaltar que las constantes e_x , e_y y e_z son las componentes del vector de polarización \vec{e}_L a lo largo de los ejes x , y y z . Por lo tanto, si la luz incide en la dirección z y $e_+ = 1$ tendremos radiación circularmente polarizada a la izquierda ($\vec{e}_L = \vec{e}_-$), y en el caso de que $e_- = 1$, estará polarizada a la derecha ($\vec{e}_L = \vec{e}_+$). Las componentes \hat{v}_+ , \hat{v}_- y \hat{v}_z pueden relacionarse fácilmente con el Hamiltoniano del sistema y los operadores de creación y destrucción (\hat{a} , \hat{a}^\dagger) que actúan sobre los niveles de Landau:

$$\begin{aligned}\hat{v}_z &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_z} , \\ \hat{v}_+ &= \frac{\lambda}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{a}} = -\frac{\lambda}{\hbar} [\hat{a}^\dagger, H] , \\ \hat{v}_- &= \frac{\lambda}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \hat{a}^\dagger} = \frac{\lambda}{\hbar} [\hat{a}, H] .\end{aligned}\tag{3.23}$$

Utilizando este resultado, podemos escribir los elementos de matriz de la transición como:

$$\begin{aligned}\langle F | \hat{v}_- | I \rangle &= \frac{\lambda}{\hbar} \langle F | \hat{a} | I \rangle (E_I - E_F) , \\ \langle F | \hat{v}_+ | I \rangle &= \frac{\lambda}{\hbar} \langle F | \hat{a}^\dagger | I \rangle (E_I - E_F) ,\end{aligned}\tag{3.24}$$

donde E_I y E_F son las energías de los estados electrónicos $|I\rangle$ y $|F\rangle$ en presencia de un campo magnético y un pozo cuántico en la dirección z . Nos limitaremos a comentar las reglas de selección del proceso para transiciones interbanda en la configuración de Faraday ($\vec{k}_L \parallel \vec{B}$) con luz circularmente polarizada. Consideraremos el Hamiltoniano del sistema dentro de la aproximación axial.

En el Capítulo 2 representamos los estados electrónicos del sistema mediante la función $\Phi_{n,k_y}^{\alpha,b}$, caracterizada por los números cuánticos n , k_y , b , α , donde n es el número cuántico orbital de Landau, $k_y = p_y/\hbar$ el vector de ondas en la dirección y , b determina la paridad de las funciones del pozo y α numera los distintos estados. Por conservación de la cantidad de movimiento durante la interacción electrón-fotón, en la aproximación dipolar obtenemos la condición trivial $\Delta k_y = \kappa_y \approx 0$. De la ecuación (3.24) se deduce la segunda regla de

selección: las transiciones permitidas se producirán entre estados de la banda de valencia y de conducción con $\Delta n = \pm 1$. Mediante la ecuación $n = N + m_j + 3/2$ es posible relacionar n con los números cuánticos N y m_j de cada una de las componentes del estado $\Phi_{n,k_y}^{\alpha,b}$. Esto nos permite obtener las reglas de selección que gobiernan estas componentes durante la transición. La condición $\Delta n = \pm 1$ nos indica que, o bien el número cuántico de Landau se conserva ($\Delta N = 0$) y el momento angular cambia en una unidad ($m_j = \pm 1$), o bien cambian simultáneamente el nivel de Landau ($\Delta N = \pm 2$) y el momento angular ($m_j = \mp 1$). Las demás posibilidades quedan excluidas por conservación del spin. Las transiciones con $\Delta N = \pm 2$ son debidas a términos del Hamiltoniano de orden superior en teoría de

$\langle n_e, k_{y_e}, b_e, \alpha_e \vec{e}_{\pm} \cdot \hat{p} n_h, k_{y_h}, b_h, \alpha_h \rangle$	
$\vec{e}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)$	$\vec{e}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - i\vec{e}_y)$
$\Delta k_y = 0$	$\Delta k_y = 0$
$n_e - n_h = 1$	$n_e - n_h = -1$
$b_e - b_h = -1$	$b_e - b_h = 1$
$m_{j_e} - m_{j_h} = 1$	$m_{j_e} - m_{j_h} = -1$
$\Delta N = 0$	$\Delta N = 0$

Tabla 3.2: Reglas de selección para una transición dipolar entre los niveles de Landau de un pozo cuántico en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento ($\vec{B} \parallel [001]$). Se ha considerado la configuración de Faraday ($\vec{k} \parallel \vec{B}$) y luz circularmente polarizada (\vec{e}_{\pm}). Los estados electrónicos se caracterizan mediante los números cuánticos n , b , k_y y α . Las reglas de selección de las componentes que intervienen en la transición se incluyen en las dos últimas líneas.

perturbaciones que no consideraremos en este trabajo, y que dan lugar a transiciones con una amplitud de probabilidad muy pequeña. Las componentes que intervienen en las transiciones más intensas cumplen por tanto las condiciones $\Delta N = 0$ y $\Delta m_j = \pm 1$, de forma equivalente a lo que ocurría en el modelo parabólico. Por último, la paridad de las funciones del pozo debe conservarse. En el capítulo anterior, aprovechando la simetría de inversión del pozo cuántico, separamos el Hamiltoniano en dos bloques independientes y

dedujimos una expresión para la paridad de las funciones del pozo que componen cada estado:

$$\text{Paridad} = \pi_{b,m_j} = (-1)^{b+m_j+\frac{3}{2}} \quad (3.25)$$

Puesto que las transiciones permitidas cumplen $\Delta m_j = \pm 1$, la paridad se conservará si

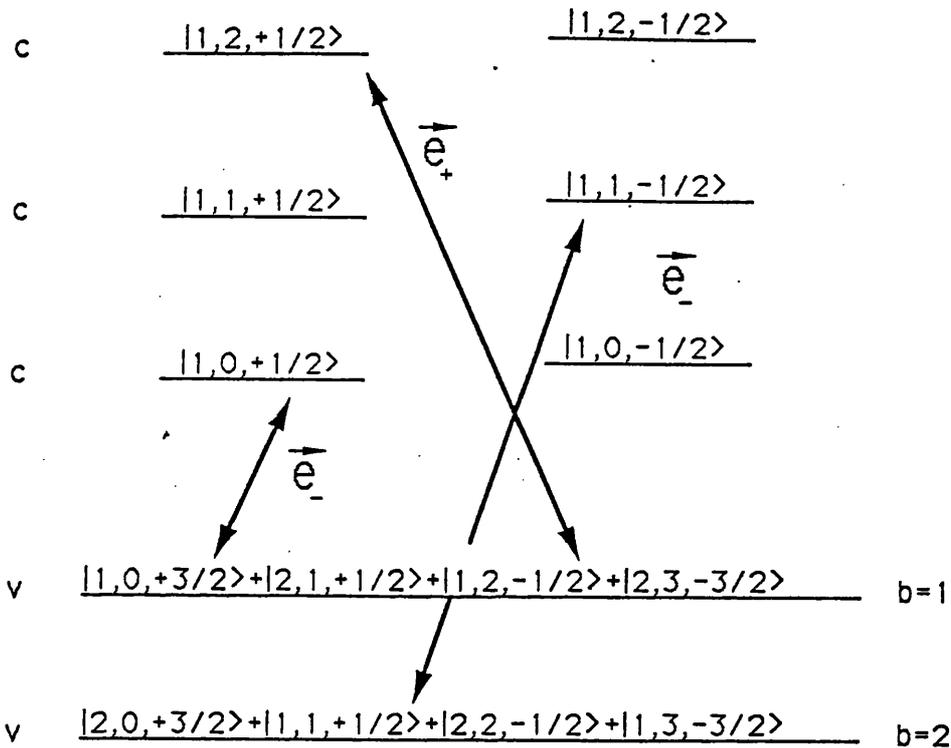


Figura 3.1: Transiciones magnetoópticas interbanda en la aproximación axial para un pozo cuántico. Se presentan las transiciones permitidas con luz circularmente polarizada \vec{e}_{\pm} entre dos niveles de Landau de la banda de valencia (Hamiltoniano de Luttinger) y la banda de conducción (modelo parabólico) en el caso de un pozo cuántico con dos estados confinados tipo lh y dos hh .

$\Delta b = \mp 1$, y las transiciones se producen siempre entre estados de la banda de valencia de uno de los bloques ($b_h = 1, 2$) y estados de la banda de conducción del bloque complementario ($b_e = 2, 1$). Las reglas de selección se resumen en la Tabla 3.2 y se utilizarán más adelante para analizar las transiciones permitidas en un proceso Raman.

3.2 Fonones e interacción electrón-fonón

En el Capítulo 2 utilizamos la aproximación adiabática para desacoplar el movimiento iónico y electrónico, considerando que los iones permanecen en reposo en sus posiciones de equilibrio dentro de la red cristalina. Despreciando la interacción ion-ion, obtuvimos un potencial efectivo $V(\vec{r})$ que determinaba el movimiento de los electrones en el cristal. En esta sección estudiaremos el movimiento iónico, determinando la frecuencia de los modos normales de vibración del cristal (fonones) y su influencia sobre el sistema de electrones mediante la deducción del Hamiltoniano de interacción electrón-fonón.

Representaremos la red de iones mediante un modelo con N celdas elementales con condiciones de contorno cíclicas. La posición instantánea del ion α en la celda n puede escribirse como:

$$\vec{R}_{n,\alpha} + \vec{u}_{n,\alpha}(t) = \vec{R}_n + \vec{R}_\alpha + \vec{u}_{n,\alpha}(t) \quad , \quad (3.26)$$

donde el vector $\vec{R}_{n,\alpha}$ representa la posición de equilibrio del ion y $\vec{u}_{n,\alpha}$ es el desplazamiento instantáneo de esta posición. Representaremos la interacción ion-ion mediante la energía potencial $\Phi(\vec{r})$. Esta función depende de las coordenadas de los iones, y podremos desarrollarla en serie de Taylor alrededor de sus posiciones de equilibrio. Si los desplazamientos $u_{n,\alpha}$ son pequeños en comparación con el parámetro de red, podemos interrumpir la serie en los términos cuadráticos, despreciando los de orden superior (aproximación armónica). Por otra parte, dado que en las posiciones de equilibrio de los iones el potencial toma su valor mínimo, los términos lineales del desarrollo se anulan. El término constante se elimina definiendo adecuadamente el origen del potencial iónico. El potencial puede escribirse finalmente como:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha,i} \sum_{n',\alpha',i'} \Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'} u_{n,\alpha,i} u_{n',\alpha',i'} \quad . \quad (3.27)$$

La suma se extiende a todos los nodos de la red cristalina ($n = 1, \dots, N$), los iones de la celda unidad ($\alpha = 1, \dots, r$) y las distintas componentes del vector posición ($i = x, y, z$).

Las derivadas segundas del potencial:

$$\Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{n,\alpha,i} \partial u_{n',\alpha',i'}} \quad , \quad (3.28)$$

son constantes que caracterizan las fuerzas interiónicas. El Hamiltoniano iónico se obtiene incluyendo la energía cinética del sistema:

$$H_{ion} = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha,i} \sum_{n',\alpha',i'} \left\{ M_\alpha \dot{u}_{n,\alpha,i}^2 + \Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'} u_{n,\alpha,i} u_{n',\alpha',i'} \right\} , \quad (3.29)$$

donde M_α es la masa del ion en la posición α . La solución de la ecuación de movimiento del ion (n, α) :

$$M_\alpha \ddot{u}_{n,\alpha,i} = - \frac{\partial \Phi}{\partial u_{n,\alpha,i}} = - \sum_{n',\alpha',i'} \Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'} u_{n',\alpha',i'} , \quad (3.30)$$

puede escribirse en forma de ondas planas:

$$u_{n,\alpha,i}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} c_{\alpha,i}(\vec{q}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R}_n - \omega t)} . \quad (3.31)$$

Introduciendo esta solución de nuevo en la ecuación de movimiento y resolviendo la ecuación de autovalores resultante:

$$\omega^2(\vec{q}) \vec{c}_\alpha(\vec{q}) = \sum_{\alpha'} \vec{D}_\alpha^{\alpha'} \cdot \vec{c}_{\alpha'}(\vec{q}) , \quad (3.32)$$

podremos determinar las constantes $c_{\alpha,i}$ y la frecuencia de los modos normales de vibración ω . Por comodidad hemos utilizado la notación vectorial para las constantes $c_{\alpha,i}$. La matriz $\vec{D}_\alpha^{\alpha'}$ es una matriz hermitica de orden 3×3 definida como:

$$D_{\alpha,i}^{\alpha',i'}(\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_{n'} \Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} , \quad (3.33)$$

que se denomina matriz de fuerza. Para llegar a esta expresión hemos tenido en cuenta que, debido a la simetría de traslación del potencial, sus derivadas $\Phi_{n,\alpha,i}^{n',\alpha',i'}$ no dependen de la posición absoluta n y n' de los átomos en el cristal, sino únicamente de la diferencia $n - n'$. Las soluciones no triviales de la Ecuación (3.32) determinan $3r$ frecuencias de vibración $\omega_j(\vec{q})$, donde r es el número de átomos por celda unidad. Cada una de estas frecuencias define una rama. En tres de ellas, ω_j tiende a cero cuando el vector de ondas $\vec{q} \rightarrow 0$ y se conocen con el nombre de ramas acústicas. Las $3(r - 1)$ ramas restantes reciben el nombre de ramas ópticas. A cada rama $j = 1, \dots, 3r$ y a cada átomo α le corresponde un autovector $\vec{e}_{\alpha,j}$ que cumple las propiedades:

$$\sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha,j}(\vec{q}) \cdot \vec{e}_{\alpha,j'}(\vec{q}) = \sum_{\alpha=1}^r \sum_{i=1}^3 e_{\alpha,i,j} \cdot e_{\alpha,i,j'} = \delta_{j,j'} , \quad (3.34)$$

$$\vec{e}_{\alpha,j}(\vec{q}) = \vec{e}_{\alpha,j}^*(-\vec{q}) \quad . \quad (3.35)$$

La primera es la condición de ortonormalidad de los vectores y la segunda se obtiene de la hermiticidad de la matriz D_{α}^{\prime} . Utilizando este conjunto de vectores, el desplazamiento de los modos de vibración de frecuencia ω_j puede expresarse como:

$$u_{n,\alpha}(\vec{q}, j, t) = \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha}}} \vec{e}_{j,\alpha}(\vec{q}) e^{i[\vec{q} \cdot \vec{R}_n - \omega_j(\vec{q})t]} \quad . \quad (3.36)$$

Una oscilación arbitraria de los átomos del cristal puede escribirse como combinación lineal de todos los modos normales de vibración del sistema:

$$\vec{u}_{n,\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{N M_{\alpha}}} \sum_{j,\vec{q}} Q_{j,\vec{q}}(t) \vec{e}_{j,\alpha}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \quad . \quad (3.37)$$

Los coeficientes del desarrollo, $Q_{j,\vec{q}}(t)$ reciben el nombre coordenadas normales y cumplen la relación:

$$Q_{j,\vec{q}}(t) = Q_{j,-\vec{q}}^*(t) \quad . \quad (3.38)$$

Introduciendo la Ecuación (3.36) en el Hamiltoniano del sistema y tras una serie de transformaciones, obtenemos:

$$H_{ion} = \frac{1}{2} \sum_{j,\vec{q}} \left\{ \dot{Q}_{j,\vec{q}}^*(t) \dot{Q}_{j,\vec{q}}(t) + \omega_j^2(\vec{q}) Q_{j,\vec{q}}^*(t) Q_{j,\vec{q}}(t) \right\} \quad . \quad (3.39)$$

De esta forma llegamos a la conclusión de que, en la aproximación armónica, es posible describir las vibraciones de un átomo en una celdilla como combinación lineal de oscilaciones colectivas desacopladas, de frecuencia $\omega_j(\vec{q})$, caracterizadas por las coordenadas normales $Q_{j,\vec{q}}(t)$. La cuantización de los modos de vibración se consigue siguiendo un procedimiento semejante al utilizado para la cuantización del campo electromagnético: transformando las coordenadas generalizadas en operadores $\hat{Q}_{j,\vec{q}}(t)$, introduciendo el operador impulso

$$\hat{P}_{j,\vec{q}}(t) = \hat{Q}_{j,-\vec{q}}(t) \quad , \quad (3.40)$$

e imponiendo las reglas usuales de conmutación. Definiremos los operadores de creación y destrucción mediante las relaciones:

$$\begin{aligned} \hat{d}_{j,\vec{q}}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j(\vec{q})}} \left\{ \omega_j(\vec{q}) \hat{Q}_{j,\vec{q}}^{\dagger} - i\hat{P}_{j,\vec{q}} \right\} \quad , \\ \hat{d}_{j,\vec{q}} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_j(\vec{q})}} \left\{ \omega_j(\vec{q}) \hat{Q}_{j,\vec{q}} + i\hat{P}_{j,\vec{q}}^{\dagger} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (3.41)$$

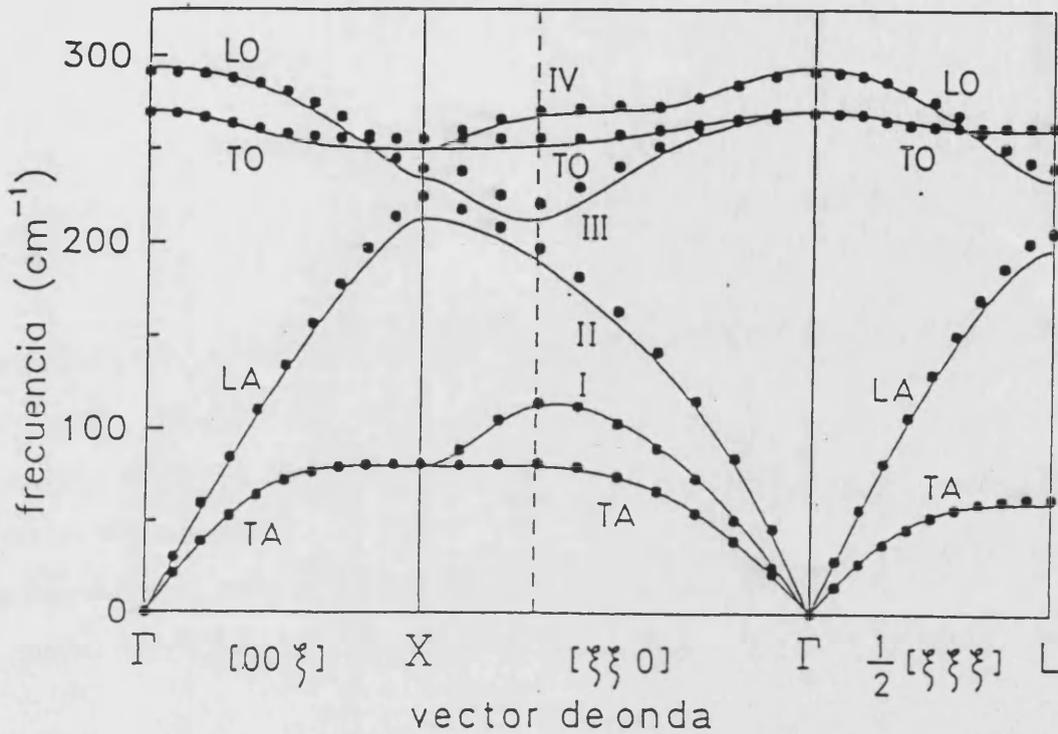


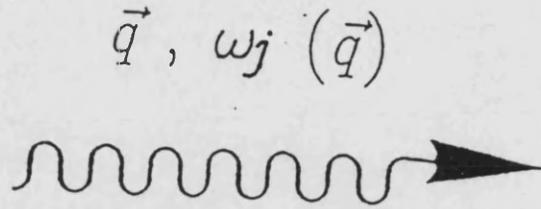
Figura 3.2: Curvas de dispersión de los modos vibracionales del GaAs en las direcciones de mayor simetría, obtenidas mediante dispersión de neutrones. ⁵⁴

Estos operadores permiten escribir el Hamiltoniano del sistema como superposición de osciladores armónicos que vibran a las frecuencias propias del sistema:

$$H_{ion} = \sum_{j, \vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q}) \left\{ \hat{a}_{j, \vec{q}}^\dagger \hat{a}_{j, \vec{q}} + \frac{1}{2} \right\} \quad (3.42)$$

Los modos colectivos de vibración son excitaciones elementales de la red de iones y se designan con el nombre de fonones. Cada fonón queda caracterizado por su frecuencia de vibración ω_j , momento \vec{q} y polarización $\vec{e}_{\alpha, j}$. En un diagrama de Feynman se representan

con el símbolo:



En los semiconductores con la estructura de la cinc-blenda hay dos átomos por celda unidad ($\alpha = 2$), que dan lugar a seis ramas diferentes: tres acústicas y tres ópticas. En las ramas acústicas los dos átomos vibran en fase, mientras que en las ópticas vibran en oposición de fase. En el punto Γ de los semiconductores polares, las ramas ópticas se dividen en una longitudinal y dos transversales degeneradas. La relación entre las frecuencias de estas ramas viene dada por la ecuación de Lyddane-Sachs-Teller:

$$\omega_{LO}^2 = \frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} \omega_{TO}^2 \quad , \quad (3.43)$$

donde $\epsilon(0)$ y $\epsilon(\infty)$ son las constantes dieléctricas estática y dinámica respectivamente.

Estamos interesados en estudiar el efecto Raman mediado por fonones ópticos longitudinales (LO) en materiales III-V, por lo que es conveniente tratarlos con mayor profundidad. Designemos con la letra A las cantidades que caracterizan al catión y con la letra B las que caracterizan al anión en una estructura tipo zinc-blenda (Figura 3.3). El desplazamiento relativo del átomo A respecto al B en la celda unidad n -ésima puede obtenerse en el formalismo de segunda cuantización combinando las ecuaciones (3.37) y (3.41):

$$\vec{u}_{rel}(n) = \vec{u}_{n,B} - \vec{u}_{n,A} = \sqrt{\frac{\hbar}{2N}} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\omega_{LO,\vec{q}}}} \{ \hat{d}_{LO,-\vec{q}}^\dagger + \hat{d}_{LO,\vec{q}} \} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n} \left[\frac{\vec{e}_{LO,B}(\vec{q})}{\sqrt{M_B}} - \frac{\vec{e}_{LO,A}(\vec{q})}{\sqrt{M_A}} \right] \quad . \quad (3.44)$$

Esta expresión adquiere una forma más adecuada haciendo uso de dos relaciones entre los vectores $\vec{e}_{LO,A}$ y $\vec{e}_{LO,B}$. La primera se obtiene teniendo en cuenta que, en una vibración óptica, el centro de masas del sistema anión-catión permanece en reposo. Utilizando la

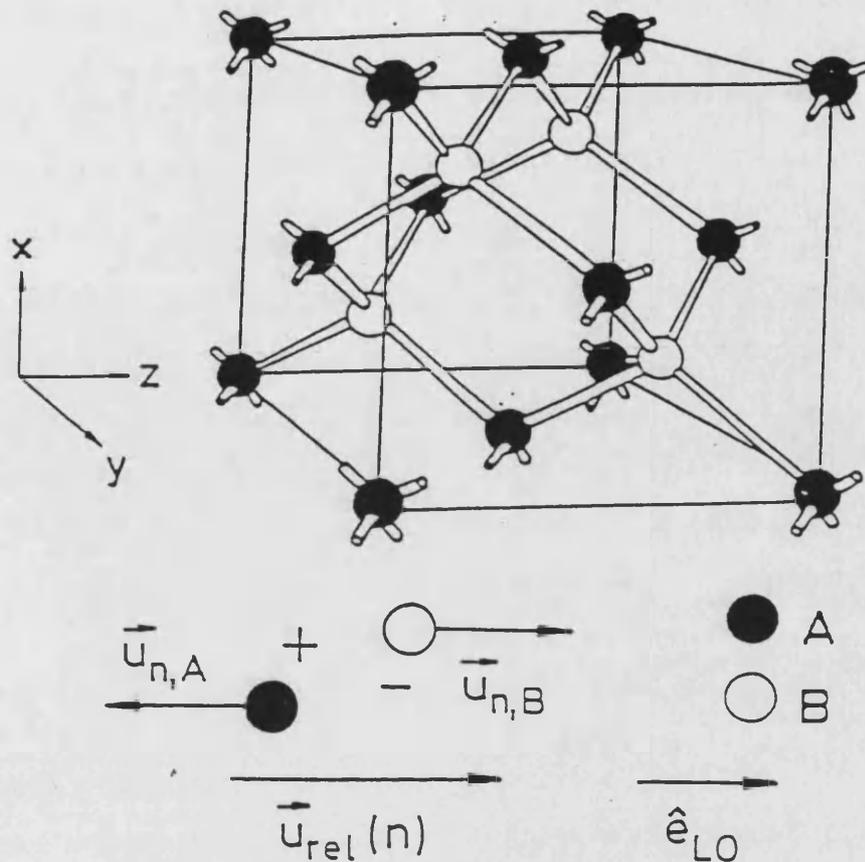


Figura 3.3: Movimiento de los átomos de la red para fonones ópticos longitudinales (LO).

ecuación (3.36) tendremos:

$$\sqrt{M_A} \vec{e}_{LO,A}(\vec{q}) = -\sqrt{M_B} \vec{e}_{LO,B}(\vec{q}) \quad . \quad (3.45)$$

La segunda proviene de la condición de ortonormalidad (Ecuación (3.34)):

$$|\vec{e}_{LO,A}|^2 + |\vec{e}_{LO,B}|^2 = 1 \quad . \quad (3.46)$$

Estas propiedades nos permiten definir un vector unitario que caracteriza el estado de polarización de los fonones LO:

$$\vec{e}_{LO}^*(\vec{q}) = \sqrt{1 + \frac{M_A}{M_B}} \vec{e}_{LO,B}(\vec{q}) \quad . \quad (3.47)$$

Introduciendo la definición de masa reducida de la celda unidad:

$$M^* = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \quad , \quad (3.48)$$

el desplazamiento relativo de los átomos A y B para un fonón LO toma la forma:

$$\boxed{\vec{u}_{rel}(n) = \sum_{\vec{q}} u_0(\vec{q}) \vec{e}_{LO}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \{ \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_{-\vec{q}} \}} \quad (3.49)$$

donde

$$u_0(\vec{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM^*\omega_{LO}(\vec{q})}}$$

Para estudiar la interacción electrón-fonón es necesario ir más allá de la aproximación adiabática. La vibración de los átomos en la red cristalina produce un cambio $\delta V(\vec{r})$ en el potencial electrónico efectivo, que afecta el movimiento de los electrones en el cristal. Con ayuda de un desarrollo de Fourier es posible separar la perturbación $\delta V(\vec{r})$ en suma de dos contribuciones:

$$\delta V(\vec{r}) = \delta V^{ca}(\vec{r}) + \delta V^{la}(\vec{r}) \quad (3.50)$$

Con los superíndices ca y la denotamos las contribuciones de corto y largo alcance respectivamente. La interacción de corto alcance fue introducida por Bardeen y Shockley⁴⁵ para estudiar la movilidad electrónica en el silicio. Debido a que la deformación intrínseca de la celdilla unidad produce un cambio en el potencial cristalino, recibe el nombre de potencial de deformación. El término de largo alcance sólo es diferente de cero en semiconductores polares, es de tipo coulombiano y fue estudiado en profundidad por Fröhlich.⁴⁶ A continuación analizaremos con detalle el efecto de cada una de estas contribuciones sobre el movimiento electrónico.

3.2.1 Interacción vía Potencial de Deformación

Como hemos visto, en los fonones ópticos el centro de gravedad de la celda elemental permanece en reposo mientras los dos átomos de cada celda vibran en oposición de fase. En el rango de longitud de onda larga, el movimiento de los átomos es similar en celdas vecinas, por lo que el efecto global sobre la red es equivalente a la vibración en oposición de fase de las dos subredes cristalinas fcc que determinan la posición de cationes y aniones. La deformación de la celdilla unidad da lugar a un cambio $\delta V^{ca}(\vec{r})$ en el potencial cristalino proporcional al desplazamiento relativo de las dos subredes, \vec{u}_{rel} , calculado en

la Ecuación (3.49). Las constantes de proporcionalidad reciben el nombre de potenciales de deformación^{49,50}:

$$\delta V^{ca}(\vec{r}) = \vec{V}_{DP} \cdot \vec{u}_{rel}(\vec{r}) \quad \text{donde} \quad \vec{V}_{DP} = \frac{\partial V}{\partial \vec{u}_{rel}} \quad (3.51)$$

El Hamiltoniano correspondiente a la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación se obtiene sumando la perturbación $\delta V^{ca}(\vec{r})$ para cada uno de los electrones del cristal. Si consideramos los procesos de creación o destrucción de un fonón con vector de onda fijo \vec{q} , el Hamiltoniano de interacción viene dado por:

$$\begin{aligned} H_{DP} &= \sum_l \delta V^{ca}(\vec{r}_l) \\ &= u_0 \sum_l \vec{V}_{DP}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{e}_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger + \vec{e}_{\vec{q}}^* e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{d}_{\vec{q}} \right] \end{aligned} \quad (3.52)$$

Utilizando para los electrones el formalismo de segunda cuantización (Ecuación (3.2)), obtenemos finalmente para los procesos con creación (H_{DP}^+) y destrucción (H_{DP}^-) de un fonón:

$$\begin{aligned} H_{DP}^+ &= u_0 \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} \vec{e}_{\vec{q}} \cdot \langle \lambda', j | \vec{V}_{DP}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \lambda, i \rangle \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger, \\ H_{DP}^- &= u_0 \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} \vec{e}_{\vec{q}}^* \cdot \langle \lambda', j | \vec{V}_{DP}(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \lambda, i \rangle \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}} \end{aligned} \quad (3.53)$$

donde $\vec{e}_{\vec{q}}$ es el vector de polarización del fonón. Dado que en un proceso Raman de primer orden \vec{q} es pequeño y que la interacción es de corto alcance, podemos desarrollar la exponencial en serie de Taylor, quedándonos con el término de orden cero en \vec{q} . Esta simplificación nos permitirá estudiar el valor de los elementos de matriz de la interacción en la aproximación dipolar. El operador \vec{V}_{DP} se transforma como un vector bajo las operaciones de simetría del cristal. Por lo tanto, los elementos de matriz $\vec{e}_{\vec{q}} \cdot \langle \lambda', j | \vec{V}_{DP}(\vec{r}) | \lambda, i \rangle$ son proporcionales a:

$$\vec{e}_{\vec{q}} \cdot \langle \lambda', j | \vec{r} | \lambda, i \rangle \quad (3.54)$$

En las proximidades del punto Γ podemos representar los estados electrónicos mediante las funciones de Bloch en $\vec{k} \approx 0$ (Tabla 2.1). Las transiciones intrabanda para la banda

de conducción se anulan por razones de simetría:

$$\langle S|\vec{r}|S\rangle = \langle S|\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}|S\rangle = 0 \quad , \quad (3.55)$$

mientras que el acoplamiento entre la banda de valencia y la de conducción es proporcional a $\hbar\omega(\vec{q})/E_0$,⁶⁹ por lo que puede despreciarse en los semiconductores III-V. En la banda de valencia, algunos de estos elementos de matriz no se anulan. Su valor se recoge en la Tabla 3.3 para estados de las bandas hh y lh .

$\langle \lambda' \vec{r} \lambda\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} $	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} iD_x \\ D_y \\ 0 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ iD_z \end{pmatrix}$	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} $	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -iD_x \\ D_y \\ 0 \end{pmatrix}$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ iD_z \end{pmatrix}$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} $	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ iD_z \end{pmatrix}$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} iD_x \\ D_y \\ 0 \end{pmatrix}$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} $	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ iD_z \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} iD_x \\ -D_y \\ 0 \end{pmatrix}$	0

Tabla 3.3: Reglas de selección para la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación.

En esta tabla se han utilizado las abreviaturas:

$$\begin{aligned}
 D_x &= d_0 \langle Z|x|Y \rangle = d_0 \langle Y|x|Z \rangle , \\
 D_y &= d_0 \langle X|y|Z \rangle = d_0 \langle Z|y|X \rangle , \\
 D_z &= d_0 \langle Y|z|X \rangle = d_0 \langle X|z|Y \rangle ,
 \end{aligned} \tag{3.56}$$

y d_0 es una constante llamada potencial de deformación del fonón óptico.

A partir de esta tabla se deduce fácilmente que la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación, con fonones LO polarizados a lo largo de la dirección $[001]$, sólo acopla los estados $v_{\vec{h}h}^{\pm}$ con estados de la banda $v_{\vec{h}h}^{\mp}$. Este resultado puede resumirse mediante la matriz $D_{\vec{h}}^z$ expresada en la base X, Y, Z :

$$D_{\vec{h}}^z = d_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{3.57}$$

Utilizando estos resultados, las Ecuaciones (3.53) pueden reescribirse como:

$$\begin{aligned}
 H_{DP}^+ &= \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j}(\vec{q}) \hat{c}_{\lambda', j}^{\dagger} \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}}^{\dagger} \\
 H_{DP}^- &= \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j}(-\vec{q}) \hat{c}_{\lambda', j}^{\dagger} \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}}
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

donde $S_{\lambda, i}^{\lambda', j}$ es la constante de acoplamiento electrón-fonón. Supongamos que el estado $|\lambda, i\rangle$ representa un estado electrónico excitado i , con un electrón en la banda de conducción c y un hueco en la banda de valencia v (par electrón-hueco), mientras que el estado final $|\lambda', j\rangle$ corresponde a un estado j , con un electrón en la banda c' y un hueco en la banda v' . En ese caso, la constante de acoplamiento para la interacción vía potencial de deformación toma la forma:

$$S_{\lambda, i}^{\lambda', j}(\vec{q}) = \frac{u_0 \sqrt{3}}{2a_0} \langle \lambda', j | D_c(\vec{r}_c) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_c} \delta_{v, v'} - D_h(\vec{r}_h) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_h} \delta_{c, c'} | \lambda, i \rangle \tag{3.59}$$

donde $D_c = 0$ para transiciones intrabanda en la banda de conducción y D_h viene dada por la expresión (3.57).

3.2.2 Interacción vía Fröhlich

En los cristales polares, las dos subredes cristalinas que los forman tienen carga eléctrica de signo opuesto. El movimiento relativo de una subred respecto a la otra origina un campo eléctrico macroscópico que se acopla fuertemente a los electrones del cristal. En el caso de fonones LO, asociada a este campo aparece una polarización longitudinal proporcional al desplazamiento relativo de los átomos²³:

$$\vec{P}(\vec{r}) = -\epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}) = -\sqrt{\frac{\epsilon_0^2 N M^* \Omega_{LO}^2}{V} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right)} \vec{u}_{rel}(\vec{r}) \quad , \quad (3.60)$$

que crea en el punto \vec{r} el potencial:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\vec{P}(\vec{r}') \cdot (\vec{r}' - \vec{r})}{|\vec{r}' - \vec{r}|^3} d^3\vec{r}' \quad . \quad (3.61)$$

Utilizando la definición de $\vec{u}_{rel}(\vec{r})$ (Ecuación (3.49)) y teniendo en cuenta la relación:

$$\int \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} (\vec{r}' - \vec{r})}{|\vec{r}' - \vec{r}|^3} d^3\vec{r}' = 4\pi i \frac{\vec{q}}{q^2} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad , \quad (3.62)$$

podemos escribir el potencial como:

$$\Phi(\vec{r}) = -\sqrt{\frac{N M^* \omega_{LO}^2}{V} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right)} u_0 i \sum_{\vec{q}} \vec{e}_{LO}(\vec{q}) \cdot \frac{\vec{q}}{q^2} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} [\hat{d}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{d}_{-\vec{q}}] \quad . \quad (3.63)$$

La energía que un electrón adquiere por interacción con el potencial Φ será sencillamente:

$$\begin{aligned} \delta V^{la} &= -e \Phi(\vec{r}) \\ &= \frac{C_F^*}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} \frac{\vec{e}_{LO}(\vec{q}) \cdot \vec{q}}{q^2} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} [\hat{d}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{d}_{-\vec{q}}] \quad , \end{aligned} \quad (3.64)$$

con la constante de Fröhlich definida como:

$$C_F = -i \sqrt{\frac{\hbar \omega_{LO} e^2}{2} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right)} \quad . \quad (3.65)$$

El Hamiltoniano de interacción Fröhlich se obtiene sumando la contribución de cada uno de los electrones del cristal al potencial δV^{la} . Finalmente obtenemos:

$$\begin{aligned} H_F &= \sum_l \delta V^{la}(\vec{r}_l) \\ &= \sum_l \frac{C_F^*}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} \frac{\vec{q}}{q^2} \cdot \left[\vec{e}_{LO}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_l} \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger - \vec{e}_{LO}^*(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_l} \hat{d}_{\vec{q}} \right] \quad . \end{aligned} \quad (3.66)$$

Consideremos separadamente los procesos de creación (H_F^+) y destrucción (H_F^-) de un fonón de momento \vec{q} , expresado mediante el formalismo de segunda cuantización. De forma similar a como se hizo para el potencial de deformación (Ecuación (3.58)), puede definirse una constante de acoplamiento electrón fonón en función de la cual el Hamiltoniano de la interacción Fröhlich toma la forma:

$$\begin{aligned} H_F^+ &= \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j}(\vec{q}) \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger \\ H_F^- &= \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j}(-\vec{q}) \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_{\vec{q}} \end{aligned} \quad (3.67)$$

con la constante de acoplamiento:

$$S_{\lambda, i}^{\lambda', j} = \frac{C_F^* \vec{e}_{LO} \cdot \vec{q}}{q^2 \sqrt{V}} \langle \lambda, i | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_a} \delta_{u, v'} - e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_b} \delta_{c, c'} | \lambda', j \rangle \quad (3.68)$$

A diferencia del carácter tensorial de la interacción vía potencial de deformación, la constante de acoplamiento Fröhlich es un escalar.

En el caso en que $\vec{q} \rightarrow 0$, las contribuciones del electrón y el hueco se cancelan entre sí, por lo que la interacción Fröhlich se conoce también como interacción dipolar prohibida.

3.3 Fonones en pozos cuánticos y superredes

Las propiedades vibracionales de pozos cuánticos y superredes presentan características nuevas que han sido estudiadas con gran detalle durante los últimos años.^{52,53} La teoría que describe las vibraciones de tipo acústico a través de capas de distintos materiales fue desarrollada por Rytov en 1955 dentro del marco de una teoría elástica y continua, con la intención de analizar la propagación de ondas sísmicas a través de medios estratificados. Muchos de los modelos utilizados con posterioridad para estudiar fonones en superredes semiconductoras se basan en sus conclusiones.

Las relaciones de dispersión de los fonones en un cristal dependen de las características del material que se considere, y en una superred semiconductoras están relacionadas con

las propiedades vibracionales de los materiales que la forman. La reducción de la simetría traslacional en la superred permite la observación, mediante técnicas ópticas, de modos que en los materiales masivos estaban prohibidos. A modo de ejemplo, estudiaremos las características de los modos de vibración en un sistema particular, como puede ser una superred de GaAs/AlAs, con un pozo de GaAs de anchura d_1 y barrera de AlAs de anchura d_2 . Los parámetros dinámicos de red de estos materiales (constante de red, constante de fuerza) son semejantes, pero la diferencia entre la masa del átomo de Galio y la del Aluminio es significativamente grande: el Al tiene una masa de 27 uma frente a las 70 uma del Ga.

Consideremos en primer lugar la propagación de fonones acústicos en la superred. Su frecuencia es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la densidad del cristal, por lo que en su cálculo interviene únicamente el promedio de las masas del Al, Ga y As, ésta última con un valor de 75 uma. Como la diferencia de densidades de los materiales del pozo y la barrera no es muy grande, las frecuencias de vibración de los fonones correspondientes se diferencian únicamente en un 15%. Esta diferencia modifica la dispersión de los fonones en la superred respecto a sus constituyentes, pero el cambio es pequeño y puede estudiarse mediante teoría de perturbaciones. De esta forma, los modos de vibración acústicos se comportan como si se propagaran en un cristal con las características de ambos constituyentes promediadas. Podremos entonces aprovechar la periodicidad de la superred para representar su dispersión en la zona reducida de Brillouin, de longitud $2\pi/(d_1 + d_2)$. En esta representación obtenemos los llamados fonones replegados (folded phonons). La perturbación debida a la diferencia de masas da lugar a la aparición de zonas prohibidas (minigaps) para un valor del vector de ondas dado por la relación:

$$q = \frac{\pi}{d_1 + d_2} m \quad \text{con } m = 1, 2, \dots, \quad (3.69)$$

correspondientes al centro y borde de la minozona de Brillouin. Partes de la rama acústica original se convierten así en ramas "ópticas" de la superred, en el sentido de que su frecuencia de vibración no tiende a cero cuando $q \rightarrow 0$. Esta característica permite la observación, mediante distintas técnicas espectroscópicas, de regiones de la rama inaccesibles en materiales masivos. En condiciones de retrodispersión, las nuevas reglas de

selección permiten observar los modos replegados con vector de ondas próximo al centro de la minizona de Brillouin de la superred, es decir,

$$q = \frac{2\pi}{d_1 + d_2} m \quad \text{con } m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.70)$$

El caso de las ramas ópticas es diferente. La frecuencia de sus modos de vibración es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de las masas de Galio y Aluminio. La diferencia entre estas masas da lugar a una variación tan grande en la frecuencia de los modos ópticos en uno y otro material, que no es posible tratarla mediante teoría de perturbaciones. En este caso, los modos de vibración no pueden propagarse a lo largo de la superred, sino que se encuentran localizados en cada material (confined phonons).

La clave principal para estudiar correctamente los modos de vibración confinados en un pozo cuántico o superred está determinada por el tratamiento de las condiciones de contorno en las interfases. En los últimos años, el problema se ha abordado mediante distintos modelos. El modelo electrostático, por ejemplo, impone la continuidad del potencial electrostático a través de la interfase. Sin embargo, en lo que respecta al patrón de vibraciones y el potencial electrostático mismo, los resultados que se obtienen están en completa contradicción con las conclusiones experimentales⁵⁹⁻⁶² y con cálculos microscópicos.⁵⁵⁻⁵⁸ Este primer modelo obtiene la continuidad electrostática a expensas de la continuidad mecánica.

De forma alternativa, puede comenzarse con un modelo que parte de una ecuación de movimiento mecánica para la amplitud de las vibraciones,⁶³ e imponer la continuidad de las tensiones en la interfase. Este procedimiento conduce a un patrón de vibraciones correcto, pero introduce discontinuidades en el potencial electrostático. Ambos modelos son claramente incompatibles. Sin embargo, las condiciones de continuidad electrostática y mecánica pueden satisfacerse simultáneamente combinando ambas aproximaciones.⁶⁵ Para ello es necesario tener en cuenta el acoplamiento entre los campos mecánicos y eléctricos de forma que, en un caso general, los modos longitudinales y transversales quedan también acoplados. En el caso particular de un pozo cuántico o superred crecida en la dirección [001] y para vibraciones longitudinales con $\vec{q}_{xy} = (q_x, q_y, 0) = 0$, es posible obtener una expresión analítica para el potencial eléctrico y el desplazamiento, tanto



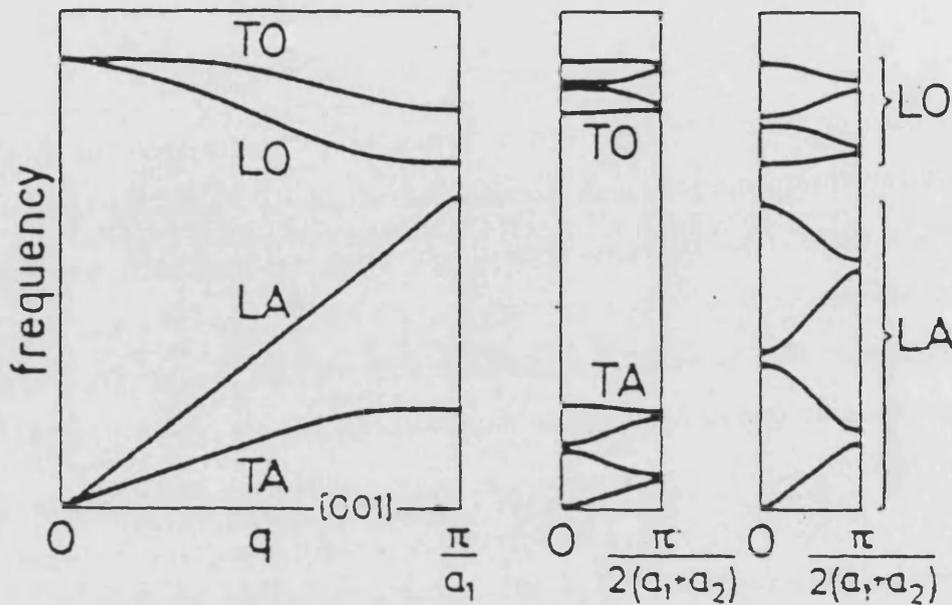


Figura 3.4: Representación esquemática del replegamiento de la dispersión de un material masivo en la zona de Brillouin reducida, para una superred de período $d = 2a_1 + 2a_2$. a_1 y a_2 son los parámetros de red de los materiales que la forman. Hay que destacar que para que los fonones ópticos sean de tipo "replegado", deben propagarse a través de los dos materiales que forman la superred, por lo que la diferencia de masas de los cationes de ambos materiales debe ser mucho menor que las del Aluminio y el Galio de las estructuras GaAs/AlAs, en donde serían de tipo confinado.

en el caso de modos pares como en el de impares. A continuación desarrollaremos los argumentos básicos que conducen a esta expresión.^{61,65}

En ausencia de cargas libres y despreciando efectos de retardo, el campo y el desplazamiento eléctricos deben satisfacer las ecuaciones:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0; \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0; \quad \vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad , \quad (3.71)$$

donde ϵ es la constante dieléctrica del material, que incluye contribuciones electrónicas y vibracionales. Estas ecuaciones indican que el campo eléctrico deriva de un potencial

escalar Φ y el campo \vec{D} de un potencial vectorial \vec{V} , que satisfacen las ecuaciones:

$$\epsilon \nabla^2 \Phi = 0 \quad \text{y} \quad \epsilon^{-1} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{V} = 0 \quad . \quad (3.72)$$

La condición $\epsilon(\omega) = 0$ permite obtener las relaciones de dispersión para fonones longitudinales confinados, mientras que $\epsilon^{-1} = 0$ nos da los fonones confinados de tipo transversal.

Analicemos las características asociadas a los modos longitudinales confinados en una capa de anchura d con mayor detalle. Tomando el centro de la capa como origen, podemos desarrollar el potencial Φ en serie de Fourier:

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{q_x, \vec{q}_{xy}} \Phi_+(\vec{q}, \vec{r}) + \Phi_-(\vec{q}, \vec{r}) \quad , \quad (3.73)$$

con:

$$\begin{aligned} \Phi_+(\vec{q}, \vec{r}) &= \Phi_+ e^{i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}} \cos q_x z \quad , \\ \Phi_-(\vec{q}, \vec{r}) &= \Phi_- e^{i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}} \text{sen } q_x z \quad . \end{aligned} \quad (3.74)$$

El vector $\vec{\rho}$ representa la posición en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento, definida como eje z . Teniendo en cuenta que la polarización \vec{P} y, como consecuencia, el campo electrostático \vec{E} , son proporcionales al desplazamiento relativo de los átomos, \vec{u}_{rel} , y que $\vec{E} = -\vec{\nabla} \Phi$, el desplazamiento será proporcional al gradiente del potencial. Suponiendo que los modos vibracionales están completamente confinados, el desplazamiento se anula en la interfase de los materiales que forman la superred. A partir de las componentes pares del potencial (Φ_+) obtenemos las condiciones:

$$\begin{aligned} i\vec{q}_{xy} \Phi_+ e^{i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}} \cos \frac{q_x d}{2} &= 0 \quad , \\ q_x \Phi_+ e^{i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}} \text{sen } \frac{q_x d}{2} &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.75)$$

Estas ecuaciones no pueden satisfacerse simultáneamente salvo en el caso $\vec{q}_{xy} = 0$, para el que obtenemos los valores posibles de q_x :

$$q_x = \frac{\pi}{d} m; \quad \text{con } m = 2, 4, 6, \dots \quad (3.76)$$

Si consideramos fonones excitados por interacción con la luz, aún cuando q_{xy} sea distinto de cero, su valor será mucho menor que π/d en las superredes más usuales ($d \approx 100$

Å). Por lo tanto, de las condiciones de contorno que acabamos de deducir, la segunda es más fuerte que la primera, que deberá satisfacerse mediante la mezcla de otros modos alrededor de la interfase. Aplicando los mismos argumentos sobre los coeficientes impares del desarrollo de Fourier obtenemos:

$$q_z = \frac{\pi}{d} m; \quad \text{con } m = 1, 3, 5, \dots \quad (3.77)$$

En la Figura 3.5 se representan de forma esquemática el potencial y el desplazamiento

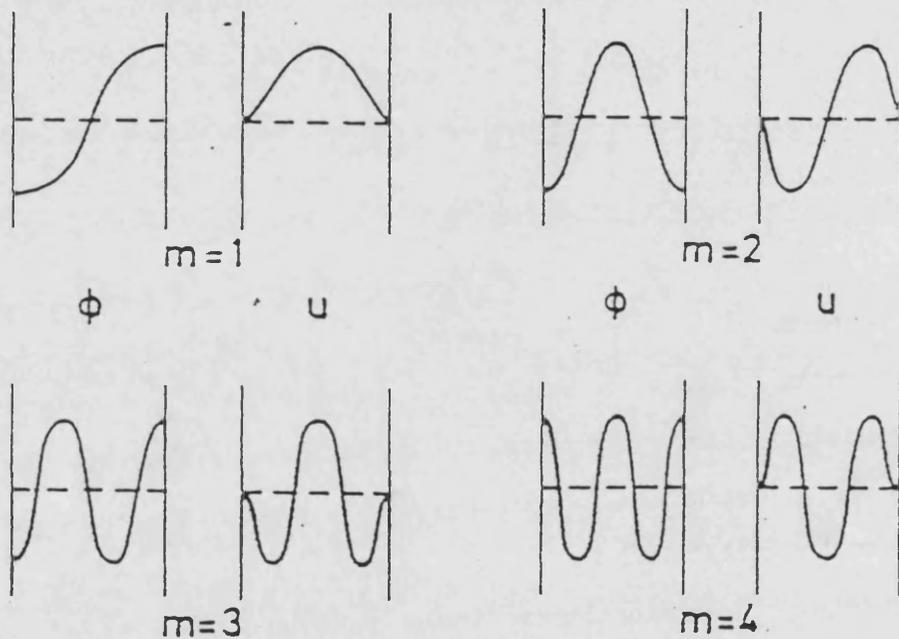


Figura 3.5: Representación esquemática del potencial electrostático Φ y del desplazamiento mecánico u_{rel} para distintos modos ópticos confinados. ⁶¹

relativo para distintos valores de m . En las gráficas puede observarse claramente que en las interfases las condiciones de contorno satisfechas corresponden a $\vec{u}_{rel} = 0$, y que el potencial debe ser máximo en esos puntos.

Un desarrollo detallado de la teoría que acabamos de esbozar⁶⁵ permite obtener, en el caso $\vec{q}_{xy} = 0$, una expresión analítica para el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón que cumple las condiciones de contorno electrostáticas y mecánicas. Cuando $\vec{q}_{xy} \ll \pi/d$,

aunque la expresión exacta no es analítica, puede sustituirse por una función que satisfice las condiciones de contorno de forma aproximada.

El resultado final para el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón en el formalismo de segunda cuantización toma la misma forma que antes:

$$H_{EP} = \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j} \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \{ \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{d}_{-\vec{q}} \} \quad , \quad (3.78)$$

pero la constante de acoplamiento tiene un nuevo valor.^{64,65} Para la interacción vía potencial de deformación se obtiene:

$$S_{\lambda, i}^{\lambda', j} = \frac{u_0 \sqrt{3}}{2a_0} \langle \lambda', j | D_e(\vec{r}_e) u_z(z_e) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_e} \delta_{v, v'} - D_h(\vec{r}_h) u_z(z_h) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_h} \delta_{c, c'} | \lambda, i \rangle \quad (3.79)$$

mientras que para Fröhlich tendremos:

$$S_{\lambda, i}^{\lambda', j} = \frac{C_q^*}{\sqrt{V}} \frac{\vec{e}_{LO} \cdot \vec{q}}{q^2} \langle \lambda', j | \Phi_{\vec{q}}(z_e) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_e} \delta_{v, v'} - \Phi_{\vec{q}}(z_h) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_h} \delta_{c, c'} | \lambda, i \rangle \quad (3.80)$$

Como hemos visto antes, la componente q_z del vector de ondas está cuantizada y toma los valores $\pi m/d$. La constante C_q se define como:

$$C_q = \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} C_F \quad (3.81)$$

y la dispersión de los fonones se obtiene a partir de la relación:

$$\omega_q^2 = \omega_{LO}^2 - \beta^2 q^2 \quad , \quad (3.82)$$

donde β es una constante con unidades de velocidad ($\beta \approx 10^3 - 10^4$ m/s). A partir de este Hamiltoniano y haciendo tender la anchura d de la capa semiconductor a infinito, obtenemos correctamente el caso límite correspondiente a materiales masivos.⁶⁴

El potencial $\Phi_{\vec{q}}(z)$ y el desplazamiento u_z de las Ecuaciones (3.79) y (3.80) vienen dados por:

$$\Phi_+(\frac{\pi}{d} m) = \begin{cases} e^{q_{xy} z} \sinh q_{xy} \frac{d}{2} & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m}{d}} \cos \frac{m\pi}{d} z - e^{-q_{xy} \frac{d}{2}} \cosh q_{xy} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ e^{-q_{xy} z} \sinh q_{xy} \frac{d}{2} & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (3.83)$$

donde $m = 2, 4, 6, \dots$ (modos pares). A los modos impares les corresponden las componentes impares del potencial:

$$\Phi_{-\left(\frac{\pi}{d} m\right)} = \begin{cases} e^{q_{xy} z} \cosh q_{xy} \frac{d}{2} & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m+1}{2}} \sin \frac{m\pi}{d} z + e^{-q_{xy} \frac{d}{2}} \sinh q_{xy} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ -e^{q_{xy} z} \cosh q_{xy} \frac{d}{2} & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (3.84)$$

y derivando esta expresión se obtiene la componente z del desplazamiento que, por simplicidad, escribimos para $q_{xy} = 0$:

$$u_z(z) = \begin{cases} 0 & |z| > \frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m+1}{2}} \sin \frac{m\pi}{d} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \end{cases} \quad (3.85)$$

para $m = 2, 4, 6, \dots$ y

$$u_z(z) = \begin{cases} 0 & |z| > \frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m+1}{2}} \cos \frac{m\pi}{d} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \end{cases} \quad (3.86)$$

si $m = 1, 3, 5, \dots$

Este resultado está de acuerdo con distintos cálculos microscópicos⁵⁵⁻⁵⁸ y la simetría de los modos de vibración obtenidos coincide con los resultados experimentales.^{23,62}

Capítulo 4

Dispersión Raman por fonones

La dispersión Raman consiste en la dispersión inelástica de la luz debida a la creación (Stokes) o destrucción (anti-Stokes) de una excitación en el sistema. Las excitaciones del material que pueden intervenir en este proceso son, entre otras, fonones, plasmones, magnones, fluctuaciones de carga o de spin, etc. Sin embargo, por razones históricas, es frecuente en la literatura referirse con el nombre de efecto Raman a la interacción inelástica de la luz con los fonones ópticos, mientras que el proceso mediado por fonones acústicos recibe tradicionalmente el nombre de dispersión Brillouin. En este trabajo nos limitaremos al estudio de la dispersión Raman por fonones ópticos.

En la Figura 4.1 se muestra un espectro típico de radiación recogido en un experimento Raman. La luz incide con energía $\hbar\omega_L$ y polarización \vec{e}_L y en la radiación de salida se observa que, además de la resonancia correspondiente a la dispersión elástica (dispersión Rayleigh), aparecen otras dos líneas cuya distancia a la línea central coincide con la energía de un fonón de frecuencia Ω . El fotón dispersado de energía $\hbar\omega_S = \hbar\omega_L - \hbar\Omega$ corresponde a un proceso Stokes (creación de un fonón en el cristal), mientras que la línea de menor intensidad, de energía $\hbar\omega_S = \hbar\omega_L + \hbar\Omega$, corresponde a un proceso anti-Stokes (destrucción de un fonón). Los procesos anti-Stokes sólo son importantes a temperaturas relativamente altas, para las que el número de fonones excitados en el cristal es considerable. A partir de un estudio de la forma, intensidad y posición de la línea Raman, así como de la polarización de la luz incidente y dispersada, es posible obtener información sobre las excitaciones que

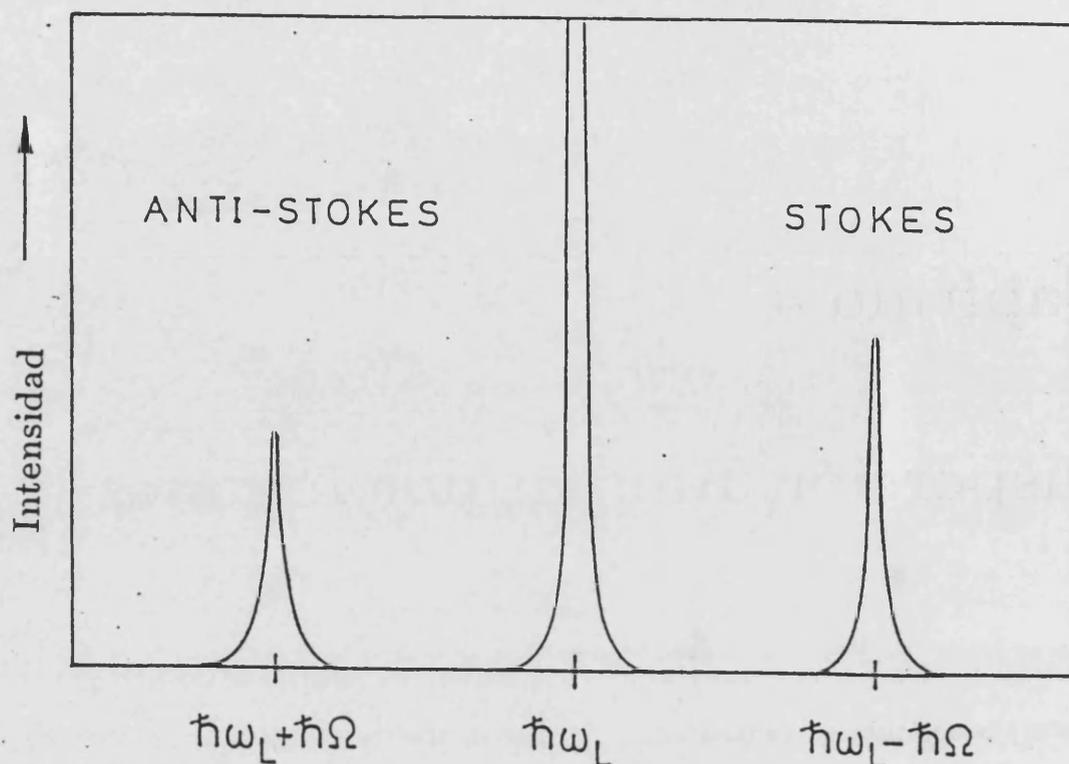


Figura 4.1: Representación esquemática de un espectro Raman Stokes y anti-Stokes. La resonancia centrada en $\hbar\omega_L$ se debe a la dispersión elástica de la luz incidente (dispersión Rayleigh).

intervienen en el proceso y sobre los distintos mecanismos de dispersión. En este trabajo nos ocuparemos de la dispersión Raman mediante fonones ópticos longitudinales (LO), cuya energía se encuentra en el rango de unas decenas de meV.

La intensidad de la línea Raman es una función de la energía de la radiación incidente. Cuando la energía del fotón, $\hbar\omega_L$, se aproxima a un punto crítico en la primera zona de Brillouin, se produce un aumento resonante de la intensidad de la línea Raman. En este capítulo estudiaremos con detalle el proceso de dispersión Raman resonante, definiendo la eficiencia de la dispersión como una medida de la intensidad de la línea Raman. Veremos que durante el proceso de dispersión se produce la excitación de estados electrónicos virtuales que se dispersan por su interacción con los fonones del cristal. Nos concentraremos en los procesos Stokes de primer y segundo orden.

4.1 Eficiencia de la dispersión Raman

Si en el proceso de dispersión interviene únicamente un fonón, hablaremos de dispersión Raman de primer orden, y en el caso de que haya dos o más fonones dispersados tendremos procesos de orden superior (multi-fonón). Centrémonos primero en un proceso de primer orden tipo Stokes. Durante la dispersión debe conservarse la energía:

$$\hbar\omega_L = \hbar\omega_S + \hbar\omega_j \quad . \quad (4.1)$$

Los índices L y S hacen referencia a la radiación incidente y dispersada respectivamente, mientras que j se refiere al fonón dispersado.

Al mismo tiempo, debido a la invariancia de traslación característica de la estructura cristalina, el vector de ondas también se conserva. En general:

$$\vec{\kappa}_L = \vec{\kappa}_S + \vec{q}_j + \vec{G} \quad , \quad (4.2)$$

donde \vec{G} es un vector de la red recíproca. En un semiconductor a baja temperatura los procesos con $\vec{G} = 0$ son los más probables. ³¹

En un experimento de dispersión Raman, la energía de la luz incidente se encuentra comprendida típicamente entre 1 y 3 eV. La energía de los fonones, de unos pocas decenas de milielectronvoltio en el caso de fonones ópticos, es despreciable frente a la energía de los fotones que intervienen en el proceso. Para este rango de energía, el momento de la luz:

$$\kappa_i = \frac{\omega_i \eta_i}{c} \quad ; \quad i = L, S \quad , \quad (4.3)$$

es del orden de 10^6 cm^{-1} , una cantidad asimismo despreciable frente a la extensión de la zona de Brillouin, $2\pi/a_0 \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$. Por esta razón, en general es posible hacer la aproximación dipolar, tomando $\vec{\kappa}_L \approx \vec{\kappa}_S \approx 0$. En la geometría de retrodispersión (Figura 4.2), en la que $\vec{\kappa}_L \approx -\vec{\kappa}_S$, el vector de ondas del fonón cumple la relación:

$$\vec{q} \approx 2\vec{\kappa}_L \approx 0 \quad , \quad (4.4)$$

lo que significa que mediante dispersión Raman de primer orden sólo es posible excitar fonones cercanos al punto Γ de la zona de Brillouin.

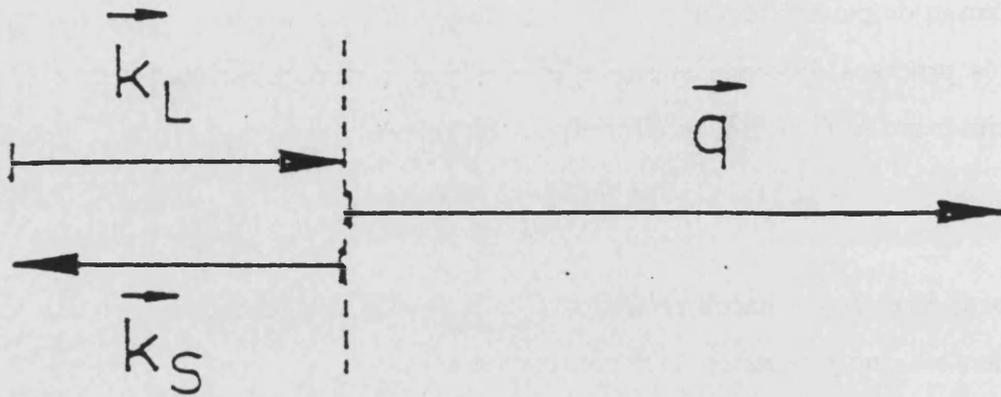


Figura 4.2: Radiación incidente y dispersada en el sólido en un experimento realizado en configuración de retrodispersión.

Consideremos ahora un proceso de orden superior (multi-fonón) en el que intervienen dos o más fonones. Las ecuaciones de conservación de la energía y momento son ahora:

$$\begin{aligned}\hbar\omega_L &= \hbar\omega_S + \sum_j \hbar\omega_j, \\ \vec{\kappa}_L &= \vec{\kappa}_S + \sum_j \vec{q}_j,\end{aligned}\quad (4.5)$$

con lo que la ecuación (4.4) se transforma en:

$$\sum_j \vec{q}_j \approx 0. \quad (4.6)$$

Por lo tanto, en un proceso multi-fonón los vectores de onda de cada uno de los fonones pueden abarcar toda la zona de Brillouin, con el único requisito de que su suma sea aproximadamente cero.

El mecanismo de dispersión de la luz por medio de fonones puede comprenderse de forma sencilla considerando las características macroscópicas del medio dispersivo.⁵¹ Los semiconductores tienen una susceptibilidad $\vec{\chi}$ elevada, por lo que el campo eléctrico de la radiación incidente:

$$\vec{E} = \vec{e}_L E_0 e^{i(\vec{\kappa}_L \cdot \vec{r} - \omega_L t)}, \quad (4.7)$$

induce una fuerte polarización en el medio:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \vec{\chi} \vec{E} \quad . \quad (4.8)$$

Al vibrar, los fonones alteran periódicamente la posición de equilibrio de los átomos, modulando la susceptibilidad a través de las fluctuaciones espaciales y temporales de la posición:

$$u_j = u_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_j t)} \quad . \quad (4.9)$$

Hay casos en los que la simetría de los fonones es tal que no modifican el valor de la susceptibilidad, al menos a primer orden. Entonces se dice que los modos de vibración no son activos Raman. Sin embargo, en general será posible desarrollar la susceptibilidad en serie de Taylor de potencias de u_j quedándonos con el primer orden del desarrollo:

$$\vec{\chi} = \vec{\chi}_0 + \frac{\partial \vec{\chi}}{\partial u_j} u_j \quad . \quad (4.10)$$

El primer sumando del desarrollo da lugar a una polarización que oscila con la misma frecuencia que la radiación incidente (ver Ecuación (4.8)) y contribuye a la dispersión elástica de la luz (dispersión Rayleigh). En el siguiente término, las vibraciones de los átomos se reflejan en la polarización a través de la modulación de la susceptibilidad a la frecuencia de vibración del fonón, ω_{ph} :

$$\vec{P} = u_0 \epsilon_0 E_0 \frac{\partial \vec{\chi}}{\partial u_j} \vec{e}_L e^{i(\vec{\kappa}_L \pm \vec{q}) \cdot \vec{r} - (\omega_L \pm \omega_k) t} \quad . \quad (4.11)$$

El momento dipolar resultante conduce a la emisión de luz de frecuencia $\omega_L \pm \omega_j$ y vector de ondas $\vec{\kappa}_L \pm \vec{q}$ dependiendo de que se trate de un proceso Stokes (-) o anti-Stokes (+). De esta forma recuperamos la conservación del momento y de la energía que comentábamos al iniciar el capítulo.

La magnitud que se utiliza usualmente para caracterizar los procesos de dispersión Raman es la **eficiencia de dispersión**, que desde un punto de vista macroscópico tiene el significado de potencia dispersada por unidad de longitud, dirigida hacia un ángulo sólido $d\Omega_S$ y con frecuencia comprendida entre ω_S y $\omega_S + d\omega_S$, normalizada a la potencia incidente P_L (Figura 4.3):

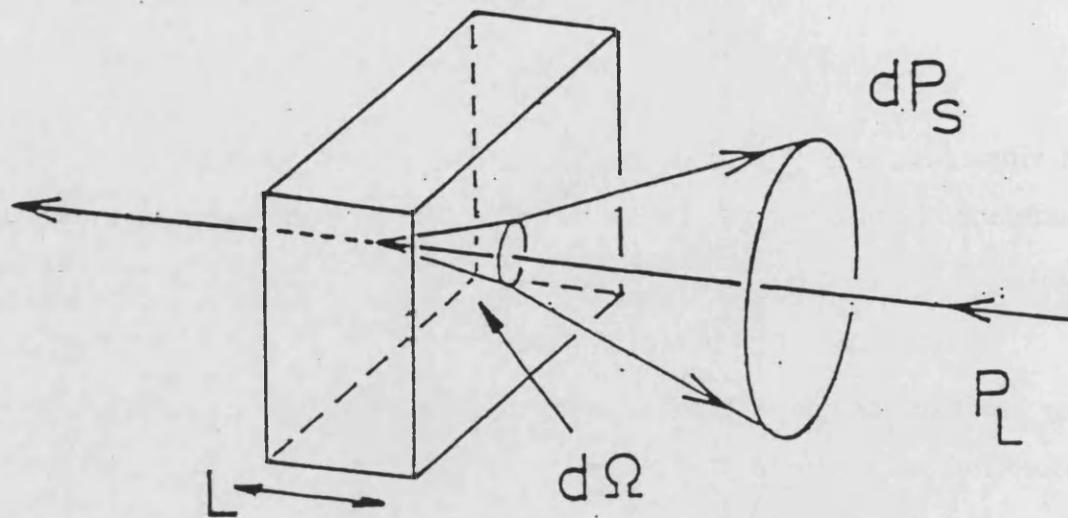


Figura 4.3: Magnitudes macroscópicas que intervienen en la eficiencia de dispersión Raman.

$$\frac{d^2 S}{d\omega_S d\Omega_S} = \frac{dP}{P_L} \frac{1}{L} \frac{1}{d\omega_S d\Omega_S} \quad , \quad (4.12)$$

siendo L una longitud típica del volumen en el que se produce la dispersión.

Por otra parte, desde el punto de vista microscópico un proceso de dispersión Raman puede interpretarse como una transición desde un estado inicial $|I\rangle$, en el que el sistema electrónico del cristal está en su estado fundamental y existe un fotón de momento $\vec{\kappa}_L$ y polarización \vec{e}_L , a un estado final $|F\rangle$, en el que el sistema electrónico vuelve a estar en su estado fundamental, pero se ha modificado el estado vibracional del cristal, a la vez que el fotón incidente se sustituye por un fotón dispersado de momento $\vec{\kappa}_S$ y polarización \vec{e}_S . Si llamamos \mathcal{P}_{FI} a la probabilidad por unidad de tiempo de que se produzca la transición $|I\rangle \rightarrow |F\rangle$, el número de fotones dispersados con vector de ondas comprendido entre $\vec{\kappa}_S$ y $\vec{\kappa}_S + d^3\vec{\kappa}_S$ por cada fotón incidente y por unidad de longitud recorrida en el cristal será:

$$dN_S = \frac{1}{u_L} \sum_{F_I} \mathcal{P}_{FI} \frac{V}{(2\pi)^3} d^3\vec{\kappa}_S \quad , \quad (4.13)$$

donde $u_L = c/\eta_L$ es la velocidad del fotón incidente en el cristal con índice de refracción

η_L . Teniendo en cuenta que $\kappa_S = \eta_S \omega_S / c$ podremos escribir el elemento diferencial como:

$$d^3 \kappa_S = \left(\frac{\eta_S}{c} \right)^3 \omega_S^2 d\Omega_S d\omega_S \quad , \quad (4.14)$$

En un experimento Raman se analiza únicamente el número de fotones recogidos en el ángulo sólido $d\Omega_S$ en un determinado intervalo de frecuencia de la radiación dispersada ω_S , por lo que en la ecuación (4.13) la suma debe extenderse al resto de números cuánticos que determinan el estado final del sistema, es decir, a todas las configuraciones vibracionales de la red que no pueden discriminarse experimentalmente (F_f).

De forma equivalente, podemos expresar la ecuación (4.13) en términos de energía de los fotones dispersados por energía del fotón incidente:

$$dS = \frac{\hbar \omega_S}{\hbar \omega_L} dN_S \quad . \quad (4.15)$$

Desde el punto de vista microscópico el proceso queda caracterizado por medio de la eficiencia de dispersión por unidad de ángulo sólido, energía dispersada y longitud:

$$\frac{d^2 S}{d\omega_S d\Omega_S} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega_S^3}{\omega_L} \frac{\eta_L \eta_S^3}{c^4} \sum_{F_f} \mathcal{P}_{FI} \quad . \quad (4.16)$$

Los resultados experimentales se expresan representando la eficiencia de dispersión para una determinada configuración en función de la radiación incidente o de otras variables continuas del sistema (perfil de resonancia).

La probabilidad por unidad de tiempo para un proceso de dispersión Raman puede obtenerse utilizando la regla de oro de Fermi. ⁶⁷ En general tendremos:

$$\mathcal{P}_{FI} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{FI}|^2 \delta(\hbar \omega_L - \hbar \omega_S - \sum_i \hbar \omega_i) \quad , \quad (4.17)$$

donde aparece de forma explícita la conservación de la energía en el proceso de dispersión. W_{FI} es la amplitud de probabilidad para la transición del estado inicial $|I\rangle$ al estado final $|F\rangle$, que obtendremos mediante teoría de perturbaciones. Para comparar los resultados teóricos con las medidas experimentales usuales para la eficiencia de dispersión Raman es necesario integrar la expresión (4.16) al rango de frecuencias de la radiación dispersada estudiado en el experimento. Llevando a cabo esta integral y utilizando la Ecuación (4.17),

obtenemos la eficiencia de dispersión por unidad de ángulo sólido y unidad de longitud, que será la cantidad que utilizaremos para caracterizar el proceso de dispersión Raman:

$$\boxed{\frac{dS}{d\Omega_S} = \frac{\omega_L \omega_S^3 \eta_L \eta_S^3}{(2\pi)^2 c^4} \frac{V}{(\hbar\omega_L)^2} \sum_{F_I} |W_{FI}|^2} \quad (4.18)$$

4.2 Dispersión Raman de primer orden. Amplitud de probabilidad

Consideremos conjuntamente el sistema formado por fotones, fonones y electrones. El Hamiltoniano de este sistema será:

$$H = H_0 + H_I \quad , \quad (4.19)$$

donde $H_0 = H_R + H_F + H_E$ es el Hamiltoniano que describe la evolución libre de fotones, fonones y electrones y $H_I = H_{ER} + H_{EP}$ representa las interacciones electrón-radiación y electrón-fonón.

Desde el punto de vista de la teoría de perturbaciones, la dispersión Raman por un fonón LO es un proceso de tercer orden. La amplitud de probabilidad correspondiente puede escribirse como:

$$W_{FI} = \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle F | H_I | \beta \rangle \langle \beta | H_I | \alpha \rangle \langle \alpha | H_I | I \rangle}{(E_\beta - E_I)(E_\alpha - E_I)} \quad , \quad (4.20)$$

donde la suma recorre todos los autoestados de H_0 . En el estado inicial tendremos un fotón $(\omega_L, \vec{\kappa}_L, \vec{\epsilon}_L)$, el sistema electrónico se encuentra en su estado fundamental y habrá $n(\omega_{LO})$ fonones de frecuencia ω_{LO} , siendo $n(\omega_{LO})$ el número de ocupación de los fonones LO . En el estado final tendremos un fotón $(\omega_S, \vec{\kappa}_S, \vec{\epsilon}_S)$, $n(\omega_{LO}) + 1$ fonones de frecuencia ω_{LO} y el sistema electrónico vuelve a su estado fundamental. Estos estados inicial y final pueden representarse de forma simbólica como:

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |1_L, 0_S; n(\omega_{LO}); 0\rangle \quad , \\ |F\rangle &= |0_L, 1_S; n(\omega_{LO}) + 1; 0\rangle \quad . \end{aligned} \quad (4.21)$$

Introduciendo el valor de H_I en la Ecuación (4.20), se obtienen seis contribuciones diferentes. No obstante, en condiciones de resonancia (E_I próximo a $E_{\alpha,\beta}$) todos los términos menos uno pueden despreciarse, y la amplitud de probabilidad se simplifica:

$$\begin{aligned}
 W_{FI} = & \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle 0_L, 1_S; n+1; 0 | H_{ER}^+ | 0_L, 0_S, n+1, \beta \rangle}{(\hbar\omega_S - E_\beta + i\Gamma_\beta)} \\
 & \times \frac{\langle 0_L, 0_S; n+1; 0 | H_{EP} | 0_L, 0_S, n, \alpha \rangle}{(\hbar\omega_L - E_\alpha + i\Gamma_\alpha)} \\
 & \times \langle 0_L, 0_S; n; 0 | H_{ER}^- | 1_L, 0_S, n, \alpha \rangle .
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

Si hacemos actuar al Hamiltoniano H_{EP} sobre el estado del fonón, obtendremos el factor $\sqrt{n(\omega_{LO}) + 1}$. Manteniendo en la notación únicamente los estados que caracterizan al sistema electrónico, el resultado puede escribirse de forma más compacta como:

$$\boxed{W_{FI} = \sqrt{n(\omega_{LO}) + 1} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle 0 | H_{ER}^+ | \beta \rangle \langle \beta | H_{EP} | \alpha \rangle \langle \alpha | H_{ER}^- | 0 \rangle}{(\hbar\omega_S - E_\beta + i\Gamma_\beta)(\hbar\omega_L - E_\alpha + i\Gamma_\alpha)}} \tag{4.23}$$

Por lo tanto, el proceso de dispersión Raman de primer orden puede representarse mediante tres pasos sucesivos:

1. El fotón incidente se absorbe, creando un par electrón-hueco en el estado intermedio $|\alpha\rangle$.
2. Debido a la interacción electrón-fonón, bien el electrón o bien el hueco se dispersan, emitiendo un fonón y pasando al estado $|\beta\rangle$.
3. El par electrón-hueco se recombina, emitiendo un fotón dispersado.

En cada una de las interacciones se conserva la cantidad de movimiento, pero la energía se conserva únicamente en el proceso global de dispersión. Estos tres pasos pueden resumirse en los diagramas de Feynman de la Figura 4.4.

En general, el par electrón hueco, excitado tras la absorción de un fotón de energía $\hbar\omega_L$, corresponde a un estado virtual del cristal, es decir $\hbar\omega_L \neq E_\alpha$. No obstante, puede darse el caso de que estas dos energías coincidan, con lo que el par electrón-hueco será real. En estas condiciones se produce un aumento resonante en la eficiencia de dispersión Raman, que puede comprenderse de forma cualitativa con ayuda de la relación de incertidumbre

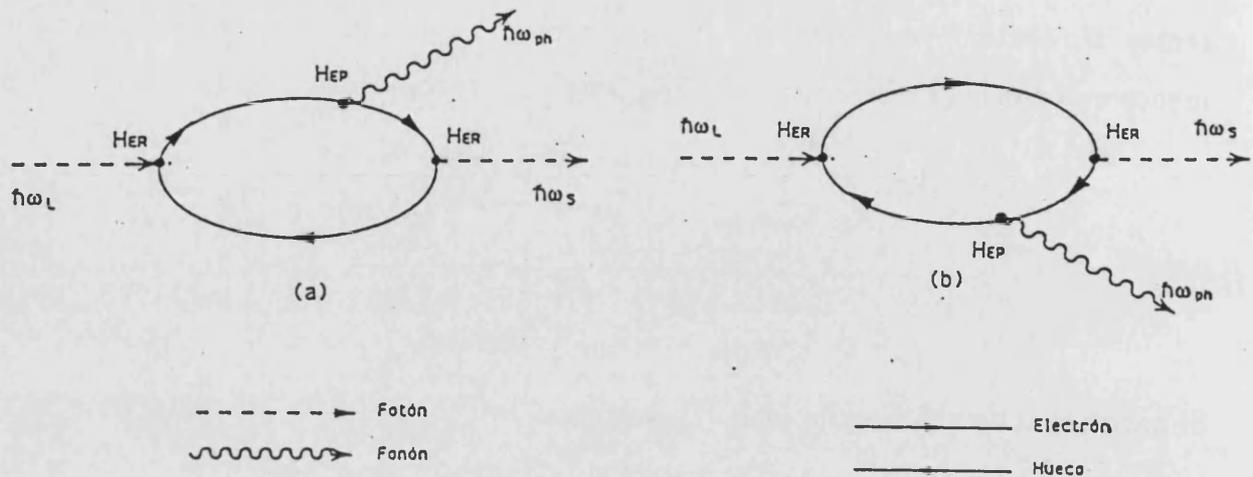


Figura 4.4: Diagramas de Feynman de un proceso Raman de primer orden con emisión de un fonón. (a) Se dispersa el electrón. (b) Se dispersa el hueco.

de Heisenberg.⁶⁹ Según esta relación, el tiempo de vida media de un par electrón-hueco virtual en el cristal será tanto mayor cuanto menor sea la diferencia $\hbar\omega_L - E_\alpha$. Por otra parte, cuanto mayor sea el tiempo de vida media del par, mayor será la probabilidad de que interactúe con un fonón, dispersándose a otro estado. Esto explica el aumento resonante de la eficiencia Raman en las proximidades de las transiciones interbanda. La situación que acabamos de describir corresponde a una resonancia de entrada, puesto que es el fotón incidente el que coincide con una transición interbanda permitida en el cristal. Analizando la Ecuación (4.23) vemos que en estas condiciones el segundo factor del denominador adquiere su valor mínimo. Otra forma de alcanzar las condiciones de resonancia se consigue cuando el par electrón-hueco dispersado es real, es decir $\hbar\omega_S = E_\beta$. En ese caso obtendremos una resonancia de salida. Finalmente, existe la posibilidad de que en un determinado proceso las resonancias de entrada y de salida se produzcan simultáneamente (doble resonancia). Los dos estados intermedios $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ serán reales, lo que dará lugar a un incremento de la eficiencia Raman mucho mayor que en el caso de resonancia simple. Por supuesto, para que estos procesos sean observables la

transición tiene que ser permitida, es decir, los tres elementos de matriz que aparecen en el numerador de la Ecuación (4.23) deben ser distintos de cero. En la Figura 4.5 se

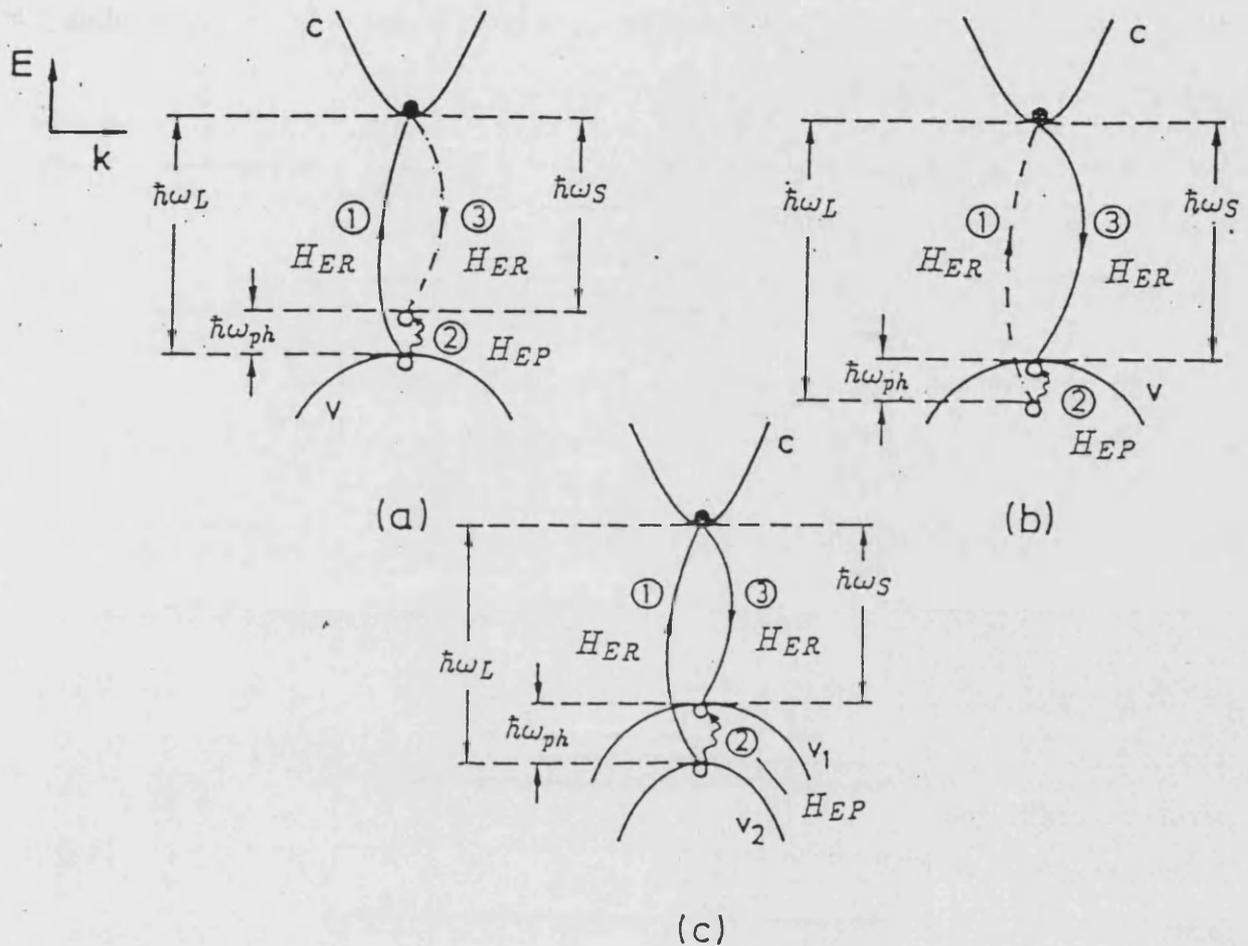


Figura 4.5: Representación esquemática de distintos procesos Raman de primer orden en condiciones de resonancia. (a) Resonancia de entrada. (b) Resonancia de salida. (c) Doble resonancia. Las transiciones resonantes se han representado mediante una línea continua.

representan esquemáticamente tres procesos resonantes diferentes en la dispersión Raman de primer orden. Las dobles resonancias en este tipo de procesos (DRRS) fueron observadas hacia mediados de los años 80 en una muestra constituida por pozos cuánticos de $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.⁷²⁻⁷⁴

Para que la dispersión Raman doble resonante vía Fröhlich tenga lugar, es necesario elegir la concentración de aluminio y la anchura del pozo de forma que la separación

entre los estados confinados $hh1$ y $hh3$ coincide con la energía de un fonón. En la Figura 4.6 se representa esquemáticamente este proceso para un pozo cuántico de GaAs/AlAs. Cuando un fotón de energía $\hbar\omega_L = E_g + E_{3hh} + E_{1e}$ incide sobre la muestra, crea un par electrón-hueco real. A continuación, el hueco interactúa con un fonón vía Fröhlich y es

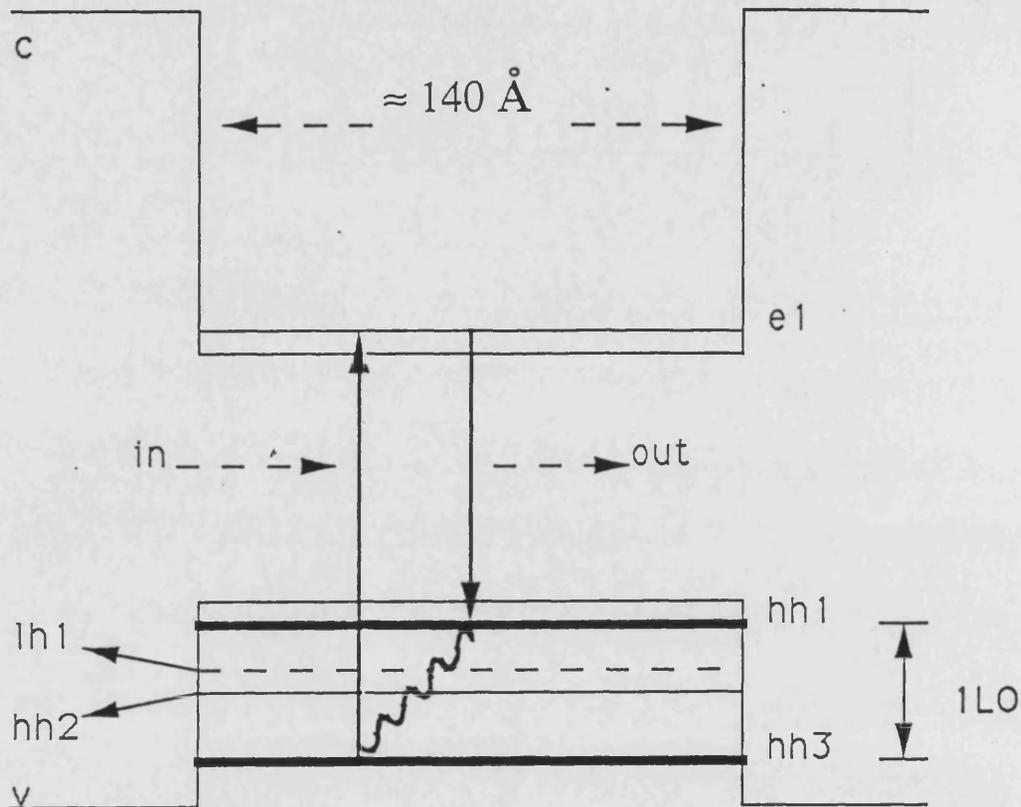


Figura 4.6: Representación esquemática de un proceso de dispersión Raman doble resonante inducido vía Fröhlich en un pozo de GaAs/AlAs. La transición doble resonante tiene lugar entre los estados $hh1$ y $hh3$ de la banda de valencia, resaltados en trazo grueso. En la figura se incluyen únicamente los estados confinados más significativos.

dispersado a la subbanda $1hh$. Finalmente, el par electrón-hueco se recombina, emitiendo un fotón de energía $\hbar\omega_S = E_g + E_{1hh} + E_{1e}$. Como la diferencia de energía entre los estados $hh1$ y $hh3$ coincide con la energía de un fonón, el segundo estado intermedio es también un estado real, y la doble resonancia tiene lugar.

En la Figura 4.7 se ha representado un proceso similar, mediado esta vez por la

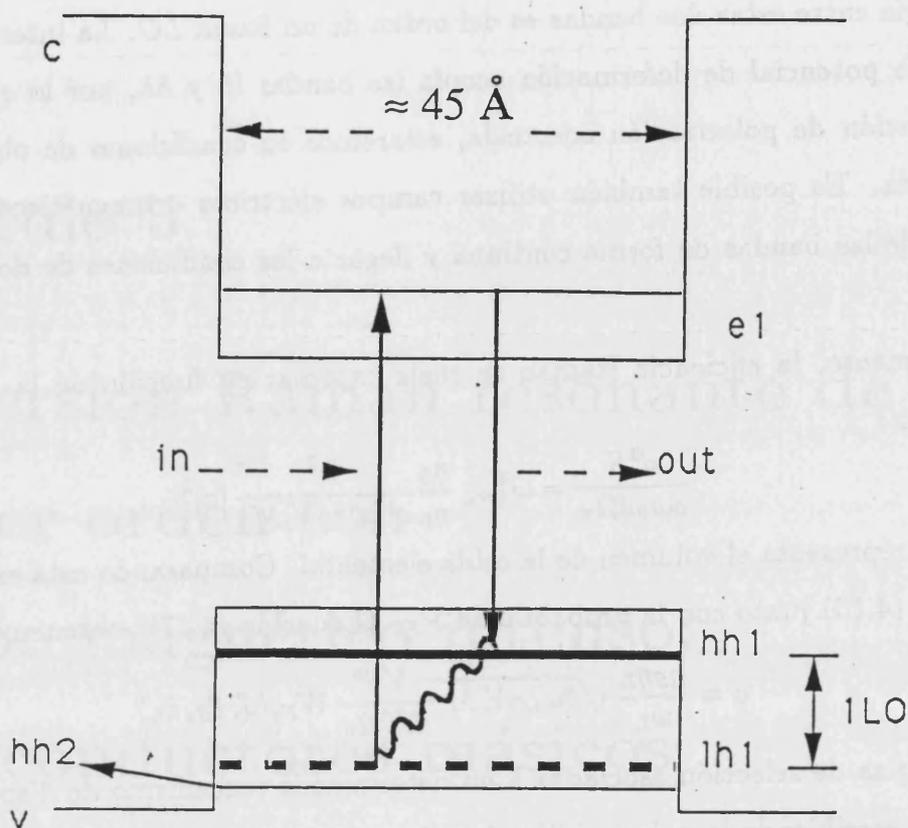


Figura 4.7: Representación esquemática de un proceso de dispersión Raman doble resonante vía potencial de deformación en un pozo de GaAs/AlAs. La transición doble resonante tiene lugar entre los estados $hh1$ y $lh1$ de la banda de valencia. En la figura se han incluido únicamente los estados confinados más significativos.

interacción electrón-fonón por potencial de deformación. En este caso, la muestra debe diseñarse de tal forma que la diferencia de energía entre las subbandas $hh1$ y $lh1$ de la banda de valencia coincida con la energía de un fonón. El fotón incidente crea un par electrón-hueco de energía $E_g + E_{1lh} + E_{1e}$. A continuación el hueco emite un fonón de frecuencia $\hbar\omega_{LO} = E_{1hh} - E_{1lh}$ y se dispersa a la subbanda $1hh$, emitiendo finalmente un fotón de energía $\hbar\omega_S = E_g + E_{1hh} + E_{1e}$.

También han sido observadas dobles resonancias en un proceso Raman de primer orden utilizando presión uniaxial.⁷⁶ Al aplicar presión uniaxial en la dirección $[001]$ sobre un semiconductor como el GaAs, se consigue romper la degeneración de las bandas hh y lh en

el punto Γ de la zona de Brillouin, y para un valor determinado de la presión la diferencia de energía entre estas dos bandas es del orden de un fonón LO . La interacción electrón-fonón vía potencial de deformación acopla las bandas lh y hh , por lo que, eligiendo la configuración de polarización adecuada, estaremos en condiciones de observar la doble resonancia. Es posible también utilizar campos eléctricos o magnéticos para variar la energía de las bandas de forma continua y llegar a las condiciones de doble resonancia.

7,8,91

Finalmente, la eficiencia Raman se suele expresar en función de la polarizabilidad Raman a :

$$\frac{d^2 S}{d\omega_S d\Omega_S} = \omega_S^3 \omega_L \frac{\eta_S}{\eta_L} \frac{\hbar^2}{c^4 2\omega_{LO} V_c M^*} |a|^2, \quad (4.24)$$

donde V_c representa el volumen de la celda elemental. Comparando esta expresión con la Ecuación (4.16) junto con la probabilidad \mathcal{P}_{FI} (Ecuación (4.17)) obtenemos:

$$a = \frac{\eta_S \eta_L}{\omega_L} \sqrt{2\omega_{LO} V_c M^*} \frac{V^{1/2}}{\hbar^{3/2} 2\pi} W_{FI}(\vec{q}, \vec{e}_S, \vec{e}_L). \quad (4.25)$$

Las reglas de selección asociadas a un determinado mecanismo de dispersión pueden estudiarse escribiendo la polarizabilidad en función del tensor Raman:

$$a = \vec{e}_S^* \cdot \vec{R} \cdot \vec{e}_L. \quad (4.26)$$

En un proceso de dispersión de un fonón LO en condiciones de retrodispersión sobre la superficie (001) de un semiconductor III-V, la componente z del tensor Raman toma la forma:

$$\vec{R}_{LO,DP} = \begin{pmatrix} 0 & a_{DP} & 0 \\ a_{DP} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

para la interacción vía potencial de deformación, y:

$$\vec{R}_{LO,F} = \begin{pmatrix} a_F & 0 & 0 \\ 0 & a_F & 0 \\ 0 & 0 & a_F \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

si la interacción es vía Fröhlich, donde a_{DP} y a_F son las polarizabilidades correspondientes a dichos procesos.

Capítulo 5

Dispersión Raman resonante de primer orden con campo magnético intenso: Semiconductores másicos

En muchos experimentos de espectroscopía Raman, a la hora de interpretar un espectro y obtener información sobre la muestra no es suficiente comprender cualitativamente los mecanismos de dispersión. En un sistema complejo, como puede ser un semiconductor sometido a la acción de un campo magnético, se obtienen un gran número de resonancias de distinta intensidad para cuyo análisis es necesario desarrollar un modelo teórico que tenga en cuenta los diferentes mecanismos de interacción electrón-fonón.⁹

En este capítulo, calcularemos la eficiencia de dispersión Raman en el caso de un semiconductor sometido a la acción de un campo magnético intenso en la dirección [001]. Para ello nos basaremos en el modelo propuesto por Trallero-Giner et al.,⁹ y procederemos al cálculo en dos pasos sucesivo. En primer lugar, aproximaremos la estructura de bandas del semiconductor mediante un modelo de tres bandas parabólicas. La simplificación que supone considerar las bandas en el contexto de un modelo parabólico, permite comprender con mayor facilidad las reglas de selección implicadas en el proceso de dispersión y

la posibilidad de dobles resonancias inducidas por la acción del campo magnético. En el cálculo tendremos en cuenta una posible anisotropía de las bandas de valencia, hecho que no se consideró en el modelo parabólico desarrollado en la Ref. 9 y que es característico de los semiconductores III-V. Posteriormente, generalizaremos los resultados incluyendo la complejidad de las bandas de energía mediante el Hamiltoniano de Luttinger y compararemos los resultados obtenidos en ambas aproximaciones. Describiremos los estados electrónicos intermedios mediante pares electrón-hueco sin correlacionar, introduciendo posteriormente una corrección excitónica a la energía. Los resultados se utilizarán finalmente para analizar la dispersión Raman en semiconductores III-V, particularizando al caso del GaAs en las proximidades del punto E_0 .

Este modelo se desarrolla con la intención de comparar el resultado con los espectros de magneto-Raman de materiales másicos y al mismo tiempo nos servirá de base para la comprensión del modelo bidimensional que estudiaremos más adelante.

5.1 Modelo parabólico

Como vimos en el Capítulo 4, el Hamiltoniano total del sistema formado por el sólido y el campo de radiación puede escribirse como suma de tres contribuciones:

$$H = H_0 + H_{ER} + H_{EP} \quad , \quad (5.1)$$

donde H_{ER} y H_{EP} son los Hamiltonianos de interacción electrón-radiación y electrón-fonón respectivamente. H_0 es el Hamiltoniano sin perturbar que engloba la energía de los electrones en el cristal bajo la acción del campo magnético, junto con la energía de fonones y fotones. Utilizando los resultados obtenidos en los Capítulos 2 y 3, podemos escribir este Hamiltoniano en función de los operadores de creación y destrucción de las distintas partículas:

$$H_0 = \sum_{\vec{\kappa}, \vec{\varepsilon}} \hbar\omega(\vec{\kappa}) (\hat{a}_{\vec{\kappa}, \vec{\varepsilon}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\kappa}, \vec{\varepsilon}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\vec{q}, j} \hbar\omega_j(\vec{q}) (\hat{d}_{j, \vec{q}}^\dagger \hat{d}_{j, \vec{q}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda, i} E_{\alpha, i} (\hat{c}_{\alpha, i}^\dagger \hat{c}_{\alpha, i} + \frac{1}{2}) \quad , \quad (5.2)$$

donde $\hat{a}_{\vec{\kappa}, \vec{\varepsilon}}^\dagger$ y $\hat{d}_{j, \vec{q}}^\dagger$ son los operadores de creación de fotones y fonones respectivamente, con la misma notación utilizada en el capítulo anterior. $\hat{c}_{\alpha, i}^\dagger$ es el operador de creación de un

electrón en la banda i con número cuántico α y energía $E_{\alpha,i}$.

En el contexto de la aproximación de la función envolvente y considerando bandas parabólicas, las energías $E_{\alpha,i}$ se obtienen como autovalores del Hamiltoniano (2.48) del electrón en un campo magnético. En el gauge de Landau se tiene:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{xyi}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{xyi}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{zi}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - i \frac{\hbar e B}{m_{xyi}} x \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2m_{xyi}} x^2 + \frac{e}{m_0} g_i^* S_z B \right) \Phi_{\alpha,i} = E_{\alpha,i} \Phi_{\alpha,i} \quad , \quad (5.3)$$

donde hemos sustituido la masa del electrón libre por la masa efectiva del electrón en la banda i , teniendo en cuenta una posible anisotropía en la dirección z respecto al plano xy . g_i^* es el factor de Landé efectivo del electrón en la banda i . El número cuántico α incluye el número cuántico de Landau N_i del estado de la banda correspondiente, las componentes del vector de onda $k_y = p_y/\hbar$ y $k_z = p_z/\hbar$ así como la tercera componente del spin $\hbar m_s = \pm \hbar/2$.

Como solución de la Ecuación (5.3) obtenemos la energía y la función envolvente de cada estado (Ecuaciones (2.49), (2.50), (2.51) y (2.52)):

$$\begin{aligned} E_{N_i, k_{y_i}, k_{z_i}, m_{s_i}} &= \frac{\hbar^2 k_{z_i}^2}{2m_{z_i}} + \hbar \omega_{c_i} \left(N_i + \frac{1}{2} \right) + \mu_B g_i^* m_{s_i} B \quad , \\ \Phi_{N_i, k_{y_i}, k_{z_i}, m_{s_i}} &= \frac{1}{V^{1/3}} e^{i(k_{y_i} y + k_{z_i} z)} u_{N_i}(x - x_{0i}) \chi(m_{s_i}) \quad , \end{aligned} \quad (5.4)$$

donde $x_{0i} = \mp \lambda^2 k_{y_i}$, dependiendo de que se trate de electrones (-) o huecos (+). $\omega_{c_i} = eB/m_{xyi}$ es la frecuencia ciclotrónica del electrón en la banda i y $\lambda = \sqrt{\hbar/eB}$ el radio de su órbita.

Para calcular la eficiencia de dispersión Raman en presencia de un campo magnético utilizaremos un modelo de tres bandas: una banda de conducción, c y dos bandas de valencia que se corresponden con las bandas de huecos pesados (v_{hh}) y huecos ligeros (v_{lh}). Partiremos de la ecuación (4.23) que nos da la amplitud de probabilidad de la

transición del estado inicial $|I\rangle$ al estado final $|F\rangle$:

$$W_{FI} = \sqrt{n(\omega_{LO}) + 1} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle 0|H_{ER}|\beta\rangle \langle \beta|H_{EP}|\alpha\rangle \langle \alpha|H_{ER}|0\rangle}{(\hbar\omega_S - E_\beta + i\Gamma_\beta)(\hbar\omega_L - E_\alpha + i\Gamma_\alpha)} \quad (5.5)$$

La suma se extiende a todos los estados electrónicos intermedios $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, que consideraremos como pares electrón-hueco. En el estado inicial, los electrones ocupan completamente la banda de valencia. Por interacción con el campo de radiación se produce la absorción de un fotón de frecuencia $\hbar\omega_L$, vector de onda $\vec{\kappa}_L$ y polarización \vec{e}_L , creándose un par electrón-hueco virtual (estado $|\alpha\rangle$). La función de onda del par electrón-hueco se obtiene como producto de las funciones de onda del electrón (e) y del hueco (h) en la banda correspondiente, y la energía del par será la suma de sus energías individuales:

$$E_\alpha = E_g + \frac{\hbar^2 k_{ze}^2}{2m_{ze}} + \frac{\hbar^2 k_{zh}^2}{2m_{zh}} + \hbar\omega_{ce}(N_e + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_{ch}(N_h + \frac{1}{2}) + \mu_B B(g_e^* m_{se} + g_h^* m_{sh}) \quad , \quad (5.6)$$

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{V^{2/3}} e^{i(k_{ye}x + k_{ze}z)} e^{i(k_{yh}y + k_{zh}z)} u_{N_e}(x - x_{0e}) u_{N_h}(x - x_{0h}) \chi(m_{se}) \chi(m_{sh}) |c, v\rangle \quad , \quad (5.7)$$

siendo E_g la energía prohibida entre la banda de valencia y la de conducción. Las funciones $|c\rangle$ y $|v\rangle$ representan la parte periódica de las funciones Bloch (Tabla 2.1). Utilizando la Ecuación (3.14) en la aproximación dipolar ($\kappa \approx 0$) y la función de onda definida en la Ecuación (5.7), obtenemos los elementos de matriz de la interacción electrón-radiación. Para la absorción del fotón incidente se tiene:

$$\langle \alpha|H_{ER}^-|0\rangle = \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \langle c|\vec{e}_L \cdot \hat{p}|v\rangle \delta_{k_{yh}, k_{ye} - \kappa_{yL}} \delta_{k_{zh}, k_{ze} - \kappa_{zL}} \delta_{N_e, N_h} \quad , \quad (5.8)$$

y para la emisión del fotón dispersado:

$$\langle 0|H_{ER}^+|\beta\rangle = \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_S^2 \omega_S V}} \langle v'|\vec{e}_S^* \cdot \hat{p}|c'\rangle \delta_{k'_{ye}, k'_{yh} + \kappa_{yS}} \delta_{k'_{ze}, k'_{zh} + \kappa_{zS}} \delta_{N'_e, N'_h} \quad , \quad (5.9)$$

donde hemos tenido en cuenta la ortogonalidad de las funciones de onda del oscilador armónico en la aproximación dipolar.

El elemento de matriz de la interacción electrón-fonón correspondiente a la emisión de un fonón se obtiene a partir del Hamiltoniano

$$H_{EP}^+ = \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ i, j}} S_{\lambda, i}^{\lambda', j} \hat{c}_{\lambda', j}^\dagger \hat{c}_{\lambda, i} \hat{d}_q^\dagger \quad (5.10)$$

deducido en el Capítulo 3 (Ecuaciones (3.58) y (3.67)). El conjunto de números cuánticos de nuestro problema es ahora $|i\rangle = |N_e, N_h, k_{ye}, k_{yh}, k_{ze}, k_{zh}, m_{se}, m_{sh}\rangle$ con un electrón y un hueco en las bandas c y v respectivamente ($|\lambda\rangle = |c, v\rangle$). La constante de acoplamiento $S_{\lambda,i}^{\lambda',j}$ depende del tipo de interacción que consideremos (potencial de deformación o Fröhlich). Estudiaremos el espectro Raman que se deriva de cada uno de estos procesos por separado.

5.1.1 Interacción vía potencial de deformación

Para calcular el elemento de matriz de la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación, partiremos de la expresión (3.59) para la constante de acoplamiento del par electrón-hueco con el fonón:

$$S_{\lambda,i}^{\lambda',j}(\vec{q}) = \frac{u_0\sqrt{3}}{2a_0} \langle \lambda', j | D_e(\vec{r}_e) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \delta_{v,v'} - D_h(\vec{r}_h) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_h} \delta_{c,c'} | \lambda, i \rangle \quad (5.11)$$

Según vimos en el Capítulo 3 (Tabla 3.3), la interacción vía potencial de deformación sólo acopla bandas de valencia diferentes ($hh^\pm \leftrightarrow lh^\mp$) y el elemento de matriz de la interacción para un estado de la banda de conducción, $\langle c | D_e(\vec{r}_e) | c \rangle$, se anula por razones de simetría. Por lo tanto, el proceso de dispersión tiene lugar exclusivamente en la banda de valencia. Utilizando la función de onda (5.4), sus elementos de matriz vienen dados por:

$$\begin{aligned} \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, i \rangle &= -\frac{u_0\sqrt{3}}{2a_0} \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{ye}, k'_{ye}} \delta_{k_{ze}, k'_{ze}} \delta_{k'_{yh}, k_{yh} - q_y} \delta_{k'_{zh}, k_{zh} - q_z} D_{v'}^v \\ &\times \int u_{N'_h}(x - x'_{0h}) e^{-iq_x x} u_{N_h}(x - x_{0h}) dx \quad , \end{aligned} \quad (5.12)$$

donde $D_{v'}^v = \langle v | D_h | v' \rangle$ y la integral tiene solución analítica:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_{N'_h}(x - x'_{0h}) e^{-iq_x x} u_{N_h}(x - x_{0h}) dx = e^{-i\lambda^2 q_x (k_{yh} - \frac{q_y}{2})} K_{N_h, N'_h}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \quad (5.13)$$

cuyo valor depende de la función $K_{n,m}(\vec{p})$ definida como¹⁰⁰:

$$K_{n,m}(\vec{p}) = \sqrt{\frac{\min(n!, m!)}{\max(n!, m!)}} i^{|n-m|} e^{-\frac{p^2}{4}} \left(\frac{p}{\sqrt{2}} \right)^{|n-m|} e^{i(\phi - \frac{\pi}{2})(n-m)} L_{\min(n,m)}^{|n-m|} \left(\frac{p^2}{2} \right) \quad , \quad (5.14)$$

con $\vec{p} = (p_x, p_y)$ y $\phi = \arctan(\frac{p_y}{p_x})$. Las funciones $L_n^m(x)$ son los polinomios de Laguerre.

¹⁰¹ Introduciendo el valor de los elementos de matriz (5.8), (5.9) y (5.12) en la Ecuación (5.5), obtenemos la expresión final de la amplitud de dispersión:

$$W_{FI} = -\sqrt{n(\omega_{LO}) + 1} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\pi\hbar}{m_0^2} \sum_{ij} \frac{\langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle u_0 \sqrt{3}}{V \eta_S \eta_L \sqrt{\omega_S \omega_L}} \frac{1}{2a_0} \times \quad (5.15)$$

$$\times \sum_{\substack{k_y, k_z \\ N}} \frac{e^{-i\lambda^2 q_x (k_y - \frac{q_y}{2})} K_{N,N}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \delta_{q_x,0} \delta_{q_y,0}}{(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_{z_i}} + \hbar \bar{\omega}_{c_i} (N + \frac{1}{2} - \beta_{L_i})) (\frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_{z_j}} + \hbar \bar{\omega}_{c_j} (N + \frac{1}{2} - \beta_{S_j}))},$$

donde los índices i, j recorren las bandas de valencia y hemos utilizado las abreviaturas:

$$\beta_{L(S)k} = \frac{\hbar \omega_{L(S)} - E_{gk} - \mu_B B (g_e^* + g_{h_k}^*) m_{s_e} + i\Gamma_k}{\hbar \bar{\omega}_{c_k}}, \quad k = i, j \quad (5.16)$$

μ_{z_k} es la masa reducida del par electrón-hueco en la banda k correspondiente a la dirección z y $\bar{\omega}_{c_k} = eB/\mu_{xyk}$.

Para obtener la expresión (5.15) se ha tenido en cuenta la conservación del spin y la aproximación dipolar, tomando $\vec{\kappa}_L \approx \vec{\kappa}_S \approx 0$. Como indican los índices de la función K en la Ecuación (5.15), el nivel de Landau se conserva durante la transición. Esto es debido a que, tanto en el proceso de absorción como en el de emisión de un fotón (Ecuaciones (5.8) y (5.9)), el nivel de Landau de la banda de valencia y de conducción deben coincidir. El hecho de que el electrón se mantenga en el mismo estado durante la dispersión determina que el nivel de Landau de la banda de valencia también se conserve, como queda reflejado en el diagrama de Feynman representado en la Figura 5.1.

A bajas temperaturas, el número de fonones en el cristal será pequeño, y podremos simplificar la expresión (4.23) de la amplitud de probabilidad del proceso Raman tomando $n(\omega_{LO}) \approx 0$. Realizando las sumas en las componentes k_y y k_z del vector de ondas de forma explícita, es posible obtener una expresión compacta de la eficiencia de dispersión. Los valores de k_y están limitados por la condición de que el centro de la órbita ciclotrón debe encontrarse en el interior del cristal. Mediante la Ecuación (2.53) evaluamos en el Capítulo 2 el número de estados con k_y diferente, y la suma sobre k_y vendrá dada por:

$$\sum_{k_y} e^{-i\lambda^2 q_x k_y} = \frac{V^{2/3}}{2\pi\lambda^2} \delta_{q_x,0} \quad (5.17)$$

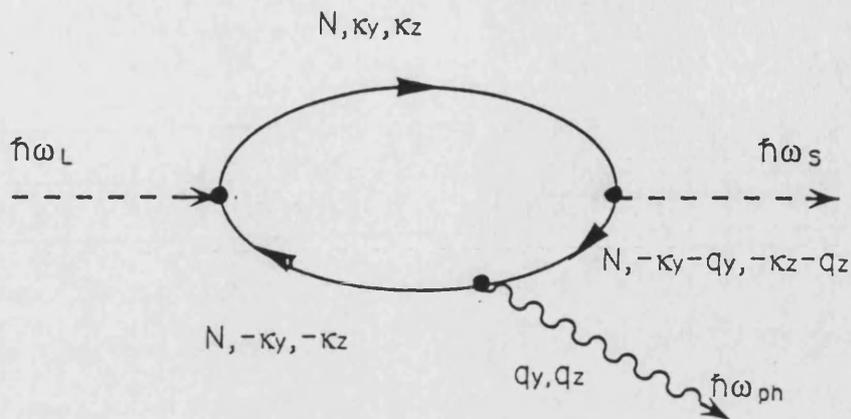


Figura 5.1: Diagrama de Feynman de un proceso de dispersión Raman resonante de primer orden en presencia de un campo magnético. Para la interacción electrón fonón por potencial de deformación, la dispersión del fonón se produce únicamente en la banda de valencia.

Debido a la conservación del vector de ondas, durante el proceso de dispersión se crean únicamente fonones muy próximos al centro de la zona de Brillouin. Haciendo la aproximación $\vec{q} \approx 0$, debido a la ortogonalidad de las funciones del oscilador armónico, la integral (5.13) toma simplemente el valor δ_{N_h, N'_h} . Este resultado es exacto para un proceso en la configuración de retrodispersión: si la luz incide a lo largo de la dirección z y es dispersada en la misma dirección, tanto el momento del fotón como el del fonón tendrán únicamente componente a lo largo de este eje, por lo que $q_x = q_y = 0$ y la integral toma el valor δ_{N_h, N'_h} .

La suma en k_z puede transformarse en una integral:

$$\sum_{k_z} \rightarrow \frac{V^{1/3}}{2\pi} \int dk_z$$

y evaluarse de forma explícita. Desarrollando el integrando hasta segundo orden en q_z ,⁹ la amplitud de probabilidad toma la forma:

$$W_{FI} = \sum_{i,j} I_0(i,j) R_{DP}(\beta_{Li}, \beta_{Sj}) \quad (5.18)$$

donde se han definido las funciones⁹:

$$I_0(i, j) = -\frac{i\sqrt{2} \langle c|\vec{e}_L \cdot \vec{p}|v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j|\vec{e}_S^* \cdot \vec{p}|c\rangle \frac{u_0\sqrt{3}}{m_0a_0}}{\eta_S\eta_L (\hbar\omega_L\hbar\omega_S)^{1/2}} \quad (5.19)$$

y

$$R_{DP}(\beta_{Li}, \beta_{Lj}) = \frac{\mu_B B R_y}{\hbar\bar{\omega}_i \hbar\bar{\omega}_j} \frac{a_B}{\lambda} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(\alpha_i\beta_{Li} - N - \frac{1}{2})^{-1/2} - (\alpha_j\beta_{Sj} - N - \frac{1}{2})^{-1/2}}{(\alpha_j^{-1} - \alpha_i^{-1})(N + \frac{1}{2}) + (\alpha_j^{-1}\beta_{Si} - \alpha_i^{-1}\beta_{Lj})} \quad (5.20)$$

La dependencia de la amplitud de probabilidad con el campo magnético aparece de forma explícita. $a_B = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_0e^2$ y $R_y = \hbar^2/2m_0a_B^2$ son el radio de Bohr y el Rydberg del átomo de hidrógeno respectivamente. La relación entre la masa reducida en las direcciones z y xy interviene en la expresión final a través del factor de anisotropía α_k , definido como:

$$\alpha_k = \frac{\mu_{zk}}{\mu_{xyk}}, \quad k = i, j \quad .$$

La amplitud de probabilidad es proporcional al campo magnético B , por lo que la eficiencia de dispersión aumentará cuadráticamente con el campo. Esta dependencia puede ser atribuida a la cuantización del movimiento en el plano xy . La eficiencia de dispersión Raman se obtiene a partir de la amplitud de probabilidad mediante la Ecuación (4.18):

$$\frac{dS}{d\Omega} = \left(\frac{\omega_S}{\omega_L}\right)^2 \frac{\eta_S}{\eta_L} \frac{3Vu_0^2}{2\pi^2a_0^2c^4\hbar^4m_0^2} |\langle c|\vec{e}_L \cdot \vec{p}|v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j|\vec{e}_S^* \cdot \vec{p}|c\rangle|^2 |R_{DP}(\beta_{Li}, \beta_{Sj})|^2 \quad (5.21)$$

Las reglas de selección del proceso Raman de primer orden se obtienen del análisis del elemento de matriz:

$$\langle c|\vec{e}_L \cdot \vec{p}|v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j|\vec{e}_S^* \cdot \vec{p}|c\rangle \quad . \quad (5.22)$$

Consideremos un experimento realizado en condiciones de retrodispersión, en el que la luz es dispersada por la superficie (001) de un semiconductor III-V. Supongamos además que se aplica un campo magnético en la configuración de Faraday: $\vec{B} \parallel +\hat{z}$, $\vec{k}_L \parallel -\vec{B}$. En ese caso, como hemos visto en el capítulo anterior, la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación sólo acopla estados de la banda de huecos pesados con huecos ligeros, de acuerdo con los resultados de la Tabla 3.3: $|3/2, \pm 3/2\rangle \leftrightarrow |3/2, \mp 1/2\rangle$. Las reglas de

$\vec{e}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)$		$\vec{e}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - i\vec{e}_y)$	
Transición	$\langle c \vec{e}_+ \cdot \hat{p} v\rangle$	Transición	$\langle c \vec{e}_- \cdot \hat{p} v\rangle$
$v_{hh}^- \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} P$	$v_{hh}^+ \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} P$
$v_{lh}^- \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \frac{P}{\sqrt{3}}$	$v_{lh}^+ \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \frac{P}{\sqrt{3}}$
$v_{so}^- \rightarrow c \uparrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{3}} P$	$v_{so}^+ \rightarrow c \downarrow$	$i \frac{m_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{3}} P$

Tabla 5.1: Reglas de selección para un proceso de absorción en la aproximación dipolar (bandas parabólicas). Se ha considerado luz circularmente polarizada.

selección correspondientes a la interacción electrón-fotón se recogieron en la Tabla 3.1, que repetimos aquí para mayor claridad (Tabla 5.1). Teniendo esto en cuenta, podemos determinar con facilidad las transiciones para las que el elemento de matriz (5.22) es distinto de cero. Las transiciones permitidas en el caso de polarización circular aparecen en la Tabla 5.2. Hay que destacar que no es posible separar los procesos correspondientes a spin diferente: para cada polarización son posibles transiciones en las que intervienen estados de la banda de conducción tanto con spin hacia arriba como hacia abajo.

Las reglas de selección de la transición $v_i \rightarrow v_j$ vía potencial de deformación pueden resumirse en las siguientes condiciones sobre los números cuánticos que caracterizan los distintos estados:

$$\begin{aligned}
\Delta j &= j_i - j_j = 0, \pm 1 \quad , \\
\Delta m_s &= m_{s_e} - m_{s_h} = 0 \quad , \\
\Delta N &= 0 \quad , \\
\Delta m_j &= m_{j_i} - m_{j_j} = \begin{cases} 2 & \text{para } \bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z \\ -2 & \text{para } \bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z \end{cases} \quad ,
\end{aligned} \tag{5.23}$$

donde hemos utilizado la notación usual $\bar{z}(\sigma^\pm, \sigma^\mp)z$ para indicar la configuración de re-

$\langle c \bar{e}_+ \cdot \bar{p} v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j \bar{e}_-^* \cdot \bar{p} c\rangle$		$\langle c \bar{e}_- \cdot \bar{p} v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j \bar{e}_+^* \cdot \bar{p} c\rangle$	
$v_i \rightarrow v_j$	$\bar{z}(+, -)z$	$v_i \rightarrow v_j$	$\bar{z}(-, +)z$
$v_{hh}^- \rightarrow v_{lh}^+$	$-i \frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\downarrow)$	$v_{hh}^+ \rightarrow v_{lh}^-$	$i \frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\uparrow)$
$v_{lh}^- \rightarrow v_{hh}^+$	$-i \frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\uparrow)$	$v_{lh}^+ \rightarrow v_{hh}^-$	$i \frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\downarrow)$
$v_{so}^- \rightarrow v_{hh}^+$	$-i \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\uparrow)$	$v_{so}^+ \rightarrow v_{hh}^-$	$i \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\downarrow)$
$v_{hh}^- \rightarrow v_{so}^+$	$-i \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\downarrow)$	$v_{hh}^+ \rightarrow v_{so}^-$	$i \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} d_0 (\uparrow)$

Tabla 5.2: Valor del elemento de matriz $\langle c|\bar{e}_L \cdot \bar{p}|v_i\rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j|\bar{e}_S^* \cdot \bar{p}|c\rangle$ para las distintas transiciones permitidas en un proceso Raman de primer orden mediado por la interacción vía potencial de deformación. Las flechas indican el spin de la función de onda del electrón en la banda de conducción.

trodispersión con luz incidente en la dirección $-z$ y polarización circular cruzada. Las configuraciones de spin paralelo ($\bar{z}(\sigma^\pm, \sigma^\pm)z$) están prohibidas.

A continuación consideraremos la posibilidad de obtener dobles resonancias en este tipo de procesos. Como vimos en el Capítulo 4, las condiciones de doble resonancia se obtienen en el caso en que la energía de la radiación incidente y dispersada coincidan con dos transiciones electrónicas interbanda. En esta situación, la diferencia de energía entre los estados intermedios α y β involucrados en el proceso Raman debe coincidir con la energía de un fonón:

$$E_\alpha - E_\beta = \hbar\omega_{LO} \quad ,$$

y los denominadores de la Ecuación (5.5) se anulan salvo en su parte imaginaria, con lo que la contribución de la doble resonancia al proceso de dispersión es enormemente grande. La condición de doble resonancia puede alcanzarse aplicando un campo magnético lo suficientemente intenso: por acción del campo, la degeneración de las bandas de valencia en el punto Γ se rompe y las bandas de huecos pesados y ligeros se separan. Debido a

que cada una de estas bandas tiene una masa efectiva diferente, es posible encontrar un campo magnético de intensidad adecuada para que su separación coincida con la energía de un fonón. ⁸ El valor de este campo se obtiene utilizando las Ecuaciones (5.5) y (5.16):

$$B_N^{\text{DR}} = \frac{\hbar\omega_{LO} + E_{g_j} - E_{g_i} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2} \left(\frac{1}{m_{x_j}} - \frac{1}{m_{x_i}} \right)}{\mu_B(2N+1) \left(\frac{m_0}{m_{xy_i}} - \frac{m_0}{m_{xy_j}} \right) + \mu_B(g_{h_i}^* - g_{h_j}^*)} , \quad (5.24)$$

donde se ha tenido en cuenta la posibilidad de que a los estados i y j de la banda de valencia les corresponda una energía prohibida diferente. Debido a que la densidad de estados del sistema es divergente en $k_z = 0$, la mayor contribución a la eficiencia de dispersión corresponde a estados con $k_z \approx 0$. Teniendo esto en cuenta, la frecuencia de la radiación incidente a la que ocurre la doble resonancia puede escribirse en función del campo magnético como:

$$\hbar\omega_L^{\text{DR}} = E_g + \frac{\hbar e B_N^{\text{DR}}}{\mu_{xy_i}} \left(N + \frac{1}{2} \right) + \mu_B B_N^{\text{DR}} (g_e^* + g_{h_i}^*) m_s . \quad (5.25)$$

El último sumando suele ser despreciable frente a los demás, por lo que la frecuencia de resonancia es prácticamente independiente del nivel de Landau (Ecuación (5.24)).

5.1.2 Interacción vía Fröhlich

En este caso, la interacción electrón-fonón está caracterizada por la constante de acoplamiento que obtuvimos en el Capítulo 3 (Ecuación (3.68)):

$$S_{\lambda,i}^{\lambda',j} = \frac{C_F^*}{q} \frac{1}{\sqrt{V}} \langle \lambda, i | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \delta_{v,v'} - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_h} \delta_{c,c'} | \lambda', j \rangle , \quad (5.26)$$

donde C_F es la constante de Fröhlich. En este tipo de interacción, tanto la banda de conducción como la de valencia intervienen en el proceso de dispersión. Utilizando las funciones de onda de los estados intermedios (Ecuación (5.7)), el elemento de matriz de

la interacción Fröhlich para la emisión de un fonón viene dado por:

$$\begin{aligned}
 \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, j \rangle = & \\
 & \left(\delta_{N_h, N'_h} \delta_{k_{y_h}, k'_{y_h}} \delta_{k_{x_h}, k'_{x_h}} \delta_{k'_{y_e}, k_{y_e} - q_y} \delta_{k'_{z_e}, k_{z_e} - q_z} e^{i\lambda^2 q_x (k_{y_e} - \frac{q_y}{2})} K_{N_e, N'_e}(\lambda q_y, -\lambda q_x) \right. \\
 & - \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{y_e}, k'_{y_e}} \delta_{k_{z_e}, k'_{z_e}} \delta_{k'_{y_h}, k_{y_h} - q_y} \delta_{k'_{z_h}, k_{z_h} - q_z} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{y_h} - \frac{q_y}{2})} K_{N_h, N'_h}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \left. \right) \\
 & \times \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} .
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

Por lo tanto, si alguna de las componentes q_x o q_y del momento del fonón es distinta de cero, la función $K_{N, N'}$ tomará un valor diferente de cero, y la interacción Fröhlich permitirá acoplar estados con distinto número cuántico de Landau N .

La interacción del electrón con los fonones del cristal da lugar a un nuevo estado excitado que recibe el nombre de polarón.³¹ La importancia de este efecto depende del carácter polar del material y se refleja en un cambio en la autoenergía de los estados electrónicos. Este cambio puede tenerse en cuenta como un aumento en la masa efectiva del electrón,³² que en presencia de un campo magnético da lugar a una disminución de la pendiente de los niveles de Landau. La interacción electrón-fonón adquiere especial relevancia cuando es de tipo resonante, es decir, en el caso en que la energía que separa dos niveles de Landau coincida con la de un fonón LO. En estas circunstancias puede producirse la transición del electrón desde el estado de energía superior al de menor energía, con emisión de un fonón LO. La excitación elemental resultante de esta interacción se conoce como magnetopolarón y da lugar a un cambio brusco en la pendiente de los niveles de Landau en función del campo magnético (anticruces). En lo que sigue, despreciaremos el efecto del magnetopolarón en los niveles de energía.

Dado que la interacción electrón-fotón conserva el nivel de Landau y que la emisión de un fonón se realiza de forma alternativa en la banda de conducción y de valencia, el nivel de Landau permanece constante durante el proceso de dispersión Raman, incluso en el caso en que q_x ó q_y sean distintos de cero (ver Figura 5.2). Por otra parte, en la configuración de retrodispersión las componentes q_x y q_y del momento del fonón serán cero, por lo que $K_{N', N} = \delta_{N', N}$ y las expresiones finales de la amplitud de probabilidad se

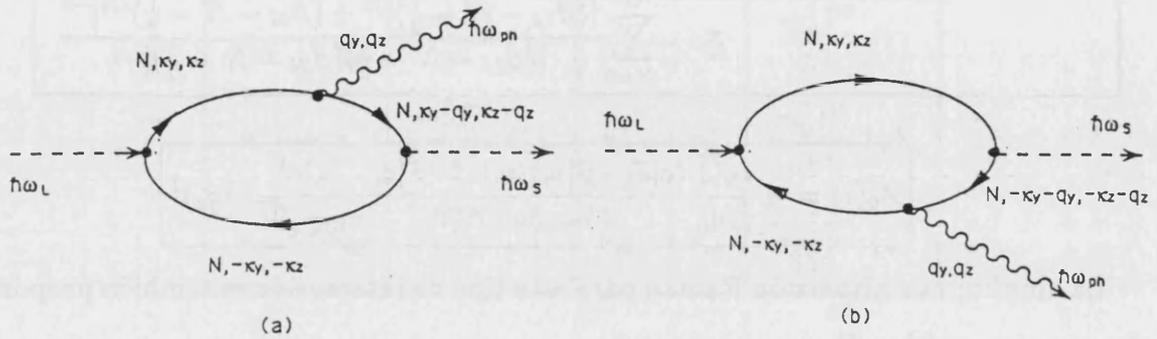


Figura 5.2: Diagramas de Feynman que contribuyen a la eficiencia de dispersión Raman resonante de primer orden en un proceso tipo Fröhlich. El fonón puede ser dispersado bien en la banda de conducción (a) o bien en la de valencia (b).

simplican significativamente.

Recogiendo estos resultados, obtenemos la amplitud de probabilidad del proceso:

$$\begin{aligned}
 W_{FI} = & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\pi\hbar}{m_0^2} \sum_i \frac{\langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle \langle v_i | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle}{V\eta_S\eta_L\sqrt{\omega_S\omega_L}} \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \frac{V^{2/3}}{2\pi\lambda^2} \times \\
 & \times \sum_{k_z}^N \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu_{xi}} + \hbar\bar{\omega}_{ci} \left(N + \frac{1}{2} - \beta_{Li} \right) \right)} \left\{ \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu_{xi}} + \frac{\hbar^2 (q_z^2 - 2k_z q_z)}{2m_{xe}} + \hbar\bar{\omega}_{ci} \left(N + \frac{1}{2} - \beta_{Si} \right) \right)} \right. \\
 & \left. - \frac{1}{\left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu_{xi}} + \frac{\hbar^2 (q_z^2 - 2k_z q_z)}{2m_{xi}} + \hbar\bar{\omega}_{ci} \left(N + \frac{1}{2} - \beta_{Si} \right) \right)} \right\}, \quad (5.28)
 \end{aligned}$$

donde el índice i recorre las distintas bandas de valencia. La suma en k_y se ha hecho explícitamente utilizando la Ecuación (5.17). Transformando la suma en k_z en una integral e integrando, podemos escribir la amplitud de probabilidad como:

$$\boxed{W_{FI} = \sum_i A_0(i) R_F(\beta_{Li}, \beta_{Si})} \quad (5.29)$$

donde:

$$R_F(\beta_{Li}, \beta_{Sj}) = \frac{\mu_B B R_y}{(\hbar \bar{\omega}_{ci})^2} \frac{1}{\sqrt{\alpha_i}} \left(\frac{m_{zi} - m_{ze}}{m_{zi} + m_{ze}} \right) \frac{a_B}{\lambda} \times \sum_{N=0}^{\infty} \frac{[(\beta_{Li} - N - \frac{1}{2})^{1/2} + (\beta_{Sj} - N - \frac{1}{2})^{1/2}]^{-3}}{[(\beta_{Li} - N - \frac{1}{2})(\beta_{Sj} - N - \frac{1}{2})]^{1/2}} \quad (5.30)$$

$$A_0(i) = - \frac{i\sqrt{2}}{\eta_S \eta_L} \frac{\langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle \langle v_i | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle}{(\hbar \omega_L \hbar \omega_S)^{1/2}} \frac{|C_F|}{m_0 q \sqrt{V}} (\lambda q_z)^2 \quad (5.31)$$

La amplitud de dispersión Raman para este tipo de interacción es también proporcional al campo magnético B .

Es interesante resaltar dos características fundamentales del proceso Raman vía Fröhlich en materiales másicos. Por una parte, la eficiencia de dispersión es proporcional a q_z^2 por lo que, como ya habíamos adelantado en el Capítulo 3, es un proceso prohibido en la aproximación dipolar. Por otra parte, la amplitud de probabilidad es proporcional a la diferencia de masas efectivas del electrón en las bandas de valencia y de conducción. Las contribuciones del electrón y el hueco al proceso Fröhlich se cancelan parcialmente, y las resonancias serán muy débiles en aquellos semiconductores en los que la curvatura de las bandas de conducción y de valencia sea similar.

Puesto que la interacción Fröhlich es diagonal, las reglas de selección del proceso Raman quedan determinadas por las transiciones permitidas durante la interacción electrón-fotón y pueden resumirse en las siguientes relaciones entre los números cuánticos que caracterizan a cada estado:

$$\begin{aligned} \Delta j &= 0 \quad , \\ \Delta m_s &= 0 \quad , \\ \Delta N &= 0 \quad , \\ \Delta m_j &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (5.32)$$

En la Tabla 5.3 se resumen las transiciones posibles para luz circularmente polarizada en la configuración paralela, mientras que la configuración cruzada queda prohibida. Mediante la interacción Fröhlich no es posible acoplar bandas diferentes, por lo que con las aproximaciones que hemos realizado, los procesos doblemente resonantes están prohibidos.

$\langle c \bar{e}_+ \cdot \bar{p} v_i\rangle\langle v_j \bar{e}_+^* \cdot \bar{p} c\rangle$		$\langle c \bar{e}_- \cdot \bar{p} v_i\rangle\langle v_j \bar{e}_-^* \cdot \bar{p} c\rangle$	
$v_i \rightarrow v_j$	$\bar{z}(+,+)z$	$v_i \rightarrow v_j$	$\bar{z}(-,-)z$
$v_{hh}^- \rightarrow v_{hh}^-$	$\frac{m_0^2 P^2}{\hbar^2} (\downarrow)$	$v_{hh}^+ \rightarrow v_{hh}^+$	$\frac{m_0^2 P^2}{\hbar^2} (\uparrow)$
$v_{lh}^- \rightarrow v_{lh}^-$	$\frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} (\uparrow)$	$v_{lh}^+ \rightarrow v_{lh}^+$	$\frac{m_0^2 P^2}{3\hbar^2} (\downarrow)$
$v_{so}^- \rightarrow v_{so}^-$	$\frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} (\uparrow)$	$v_{so}^+ \rightarrow v_{so}^+$	$\frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} (\downarrow)$

Tabla 5.3: Valor del elemento de matriz $\langle c|\bar{e}_L \cdot \bar{p}|v_i\rangle\langle v_j|\bar{e}_S^* \cdot \bar{p}|c\rangle$ para las distintas transiciones permitidas en un proceso Raman de primer orden mediado por la interacción Fröhlich. Las flechas indican el spin de la función de onda del electrón en la banda de conducción.

5.2 Modelo no parabólico. Hamiltoniano de Luttinger

Si queremos elaborar un modelo realista para la dispersión Raman, tendremos que renunciar a describir las bandas de energía del semiconductor de forma sencilla mediante la aproximación parabólica. Debido fundamentalmente a la degeneración de las bandas de hueco pesado y hueco ligero en el punto Γ , los estados electrónicos no pueden aproximarse simplemente por el producto de funciones Bloch puras por la función envolvente correspondiente. Al alejarnos del centro de la zona de Brillouin el carácter de las bandas se mezcla, dando como resultado una combinación lineal de las funciones base de partida. La aplicación de un campo magnético rompe parte de la degeneración de las bandas de energía, cuantizándolas en niveles de Landau que a su vez se mezclan entre sí. Como vimos en el Capítulo 2, las bandas de energía pueden describirse adecuadamente mediante un modelo más general que tenga en cuenta este acoplamiento. Utilizando un Hamiltoniano $\bar{k} \cdot \bar{p}$ para los estados de la banda de valencia, vemos cómo el número cuántico de Landau N deja de ser un buen número cuántico y la dependencia de los niveles de energía con el

campo magnético se modifica. El acoplamiento entre las bandas se refleja en un espaciado no uniforme de las resonancias observadas a campo magnético constante.

A pesar de la complejidad de las bandas de energía, es posible extender los resultados obtenidos en este capítulo utilizando un Hamiltoniano más realista. Para estudiar los efectos de la no parabolicidad en el espectro Raman consideraremos el acoplamiento entre las bandas de huecos pesados y ligeros mediante el Hamiltoniano de Luttinger 4×4 de la Ecuación (A.3) del Apéndice A. Supondremos que la banda de energía prohibida del semiconductor es ancha, lo que nos permite representar la banda de conducción mediante un modelo parabólico. La influencia de la banda de split-off sobre los niveles de energía suele ser pequeña y no la tendremos en cuenta en los cálculos. Finalmente, describiremos el sistema en la aproximación axial, lo que equivale a desprestigiar el acoplamiento entre niveles de Landau cuyo índice difiere en cuatro unidades.⁴⁷ Con estas aproximaciones, los estados de la banda de valencia pueden representarse en la base de momento angular $3/2$ mediante la matriz (2.62), donde el potencial $V(z)$ es cero en el caso del semiconductor másico que estamos considerando. En el contexto de este modelo, las funciones de onda del sistema vienen dadas por una combinación lineal de las funciones $\Phi_{N_i, k_{y_i}, k_{z_i}}$ (Ecuación (5.4)):

$$\begin{aligned} \Phi_{n, k_{y_h}, k_{z_h}}^\alpha &= \frac{1}{V^{1/3}} e^{ik_{y_h} y} e^{ik_{z_h} z} \cdot \left(C_{3/2}^{\alpha, n, k_{z_h}} u_{n-3} v_{3/2} + C_{1/2}^{\alpha, n, k_{z_h}} u_{n-2} v_{1/2} \right. \\ &\quad \left. + C_{-1/2}^{\alpha, n, k_{z_h}} u_{n-1} v_{-1/2} + C_{-3/2}^{\alpha, n, k_{z_h}} u_n v_{-3/2} \right) \\ &= \frac{1}{V^{1/3}} e^{ik_{y_h} y} e^{ik_{z_h} z} \cdot \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} C_m^{\alpha, n, k_{z_h}} u_{n-(m+3/2)} v_m \quad , \end{aligned} \quad (5.33)$$

donde, como es habitual, hemos tomado $v_m = |3/2, m\rangle$ y n es el número cuántico orbital de Landau. La magnitud de los coeficientes del desarrollo, $C_m^{\alpha, n, k_{z_h}}$, determinará la importancia relativa de cada banda en la mezcla. A cada uno de estos estados le corresponde una energía que denominaremos E_{α, n, k_z} .

Los estados de la banda de conducción vendrán dados por:

$$\Phi_{n, k_{y_e}, k_{z_e}, m}^c = \frac{1}{V^{1/3}} e^{ik_{y_e} y} e^{ik_{z_e} z} u_{n-(m+3/2)} c_m = \frac{1}{V^{1/3}} e^{ik_{y_e} y} e^{ik_{z_e} z} u_N c_m \quad , \quad (5.34)$$

con $m = \pm 1/2$, $c_m = |1/2, m\rangle$ y $N = n - m - 3/2$.

Al calcular los elementos de matriz de las interacciones electrón-fotón y electrón-fonón, obtendremos como resultado combinaciones lineales de los elementos de matriz correspondientes al caso parabólico. Para la interacción electrón-fotón tendremos, en el caso de absorción:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H_{ER}^- | 0 \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \delta_{k_{yh}, k_{ye} - \kappa_{yL}} \delta_{k_{zh}, k_{ze} - \kappa_{zL}} \times \\ &\times \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} C_m^{\alpha, n_h, k_{zh}} \delta_{N_e, n_h - (m+3/2)} \langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v_m \rangle, \end{aligned} \quad (5.35)$$

y para la emisión de un fotón:

$$\begin{aligned} \langle 0 | H_{ER}^+ | \beta \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_S^2 \omega_S V}} \delta_{k'_{ye}, k'_{yh} + \kappa_{yS}} \delta_{k'_{ze}, k'_{zh} + \kappa_{zS}} \times \\ &\times \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} C_m^{*\alpha', n'_h, k'_{zh}} \delta_{N'_e, n'_h - (m+3/2)} \langle v'_m | \vec{e}_S \cdot \hat{p} | c' \rangle. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Consideraremos la interacción electrón-fonón de nuevo separadamente para procesos vía potencial de deformación y vía Fröhlich.

5.2.1 Interacción vía potencial de deformación

Utilizando la definición de la constante de acoplamiento para la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación y teniendo en cuenta las funciones de onda (5.33) y (5.34), el elemento de matriz de la interacción para un proceso con creación de un fonón viene dado por:

$$\begin{aligned} \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, i \rangle &= -\frac{u_0 \sqrt{3}}{2a_0} \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{ye}, k'_{ye}} \delta_{k_{ze}, k'_{ze}} \delta_{k'_{yh}, k_{yh} - q_y} \delta_{k'_{zh}, k_{zh} - q_z} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{yh} - \frac{q_y}{2})} \times \\ &\times \sum_{m, m'=\pm 3/2, \pm 1/2} C_m^{*\alpha, n_h, k_{zh}} C_{m'}^{\alpha', n'_h, k'_{zh}} D_{v_m}^{v_m} K_{N_m, N'_{m'}}(-\lambda q_y, -\lambda q_x), \end{aligned} \quad (5.37)$$

con $N_m = n_h - (m + 3/2)$ y $N'_{m'} = n'_h - (m' + 3/2)$.

Sustituyendo los elementos de matriz de cada interacción en la expresión (5.5), obtenemos la amplitud de probabilidad del proceso. Para simplificar las expresiones finales

realizaremos explícitamente la suma en k_y y consideraremos la configuración de retrodispersión, con lo que $q_x = q_y = 0$ y $K_{N,N'} = \delta_{N,N'}$. Dado que la interacción vía potencial de deformación está permitida en la aproximación dipolar y teniendo en cuenta que el vector de ondas del fonón es muy pequeño, tomaremos $q_z \approx 0$. La integral en k_z no puede llevarse a cabo analíticamente, puesto que tanto la energía como los coeficientes C_m^{α,n,k_z} dependen de esta variable y no tienen una expresión analítica sencilla. La amplitud de probabilidad puede escribirse como:

$$W_{FI} = K_{LS}^{DP} \cdot \sum_{\substack{\alpha,\alpha' \\ n,n'}} \sum_{N,m_s} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{G_{\alpha,N}^{n,k_z}(\vec{e}_L) \cdot F_{\alpha',\alpha}^{n',n,k_z} \cdot G_{\alpha',N}^{*n',k_z}(\vec{e}_S)}{(\hbar\omega_L - E_{N,k_z,m_s}^{\alpha,n} + i\Gamma_\alpha)(\hbar\omega_S - E_{N,k_z,m_s}^{\alpha',n'} + i\Gamma_{\alpha'})} \quad (5.38)$$

Con el fin de simplificar la expresión final se han definido las funciones:

$$G_{\alpha,N}^{n,k_z}(\vec{e}_L) = \sum_{m=\pm 1/2, \pm 3/2} \langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v_m \rangle C_m^{\alpha,n,k_z} \delta_{N,n-(m+3/2)} \quad , \quad (5.39)$$

$$G_{\alpha',N}^{*n',k_z}(\vec{e}_S) = \sum_{m=\pm 1/2, \pm 3/2} \langle v_m | \vec{e}_S^* \cdot \hat{p} | c \rangle C_m^{*\alpha',n',k_z} \delta_{N,n'-(m+3/2)} \quad , \quad (5.40)$$

$$F_{\alpha',\alpha}^{n',n,k_z} = \sum_{m,m'=\pm 1/2, \pm 3/2} C_m^{*\alpha,n,k_z} C_2^{\alpha',n',k_z} D_{v_m}^{v_{m'}} \delta_{n-m,n'-m'} \quad . \quad (5.41)$$

K_{LS}^{DP} es una constante que depende de las características de la radiación incidente y dispersada en el cristal y es proporcional al campo magnético aplicado. Viene dada por:

$$K_{LS}^{DP} = \frac{1}{\eta_L \eta_S} \frac{1}{(\hbar\omega_L \hbar\omega_S)^{1/2}} \frac{u_0 \sqrt{3}}{\pi m_0 a_0} \mu_B B R_y a_B \quad (5.42)$$

La energía $E_{N,k_z,m_s}^{\alpha,n}$ es la energía del par electrón hueco y se obtiene como suma de la energía del electrón y del hueco correspondiente:

$$E_{N,k_z,m_s}^{\alpha,n} = E_g + E_{\alpha,n,k_z} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + \hbar\omega_{c_e} \left(N + \frac{1}{2}\right) + \mu_B g_e^* m_s B \quad . \quad (5.43)$$

Con el índice de Landau N nos referiremos siempre a la banda de conducción, mientras que el número cuántico orbital de Landau n caracteriza el estado de la banda de valencia.

De la misma manera que en el modelo parabólico, las transiciones mediadas por la interacción potencial de deformación tienen lugar únicamente en la configuración de polarización cruzada, con $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$. En la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ es posible

acoplar niveles de la banda de valencia con $\Delta n = n - n' = 2$, mientras que $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ acopla aquellos con $\Delta n = -2$, de forma que el nivel de Landau de las componentes implicadas en la transición se conserve: $\Delta N = 0$. Puesto que N no es un buen número cuántico para los estados de la banda de valencia, el nivel de Landau de la banda de conducción puede diferir en 0, 1, 2 ó 3 unidades del valor del número orbital de Landau. Para comprender las reglas de selección del proceso con mayor claridad, analicemos con detalle la dispersión en una configuración particular. Si el fotón incidente está polarizado a derechas ($\vec{e}_L = \vec{e}_+$), la interacción electrón-fotón puede crear un par electrón-hueco, con el hueco perteneciente a la banda $v_{-3/2}$ o bien $v_{-1/2}$ (Tabla 5.1). Supongamos que el electrón es excitado a un estado de la banda de conducción con número cuántico de Landau N . En ese caso, puesto que la interacción electrón-fotón es proporcional a $\delta_{N, n-(m+3/2)}$, el número cuántico orbital de Landau que caracteriza al hueco, n , puede tomar los valores N ó $N + 1$, para spin (\downarrow) y (\uparrow) respectivamente. Analicemos ahora el fotón dispersado. Dado que $\vec{e}_S = \vec{e}_-$, el hueco puede pertenecer a las bandas $v_{1/2}$ ó $v_{3/2}$. Como el electrón permanece en el mismo estado a lo largo del proceso de dispersión, n' podrá tomar los valores $N + 2$ ó $N + 3$ para spin (\downarrow) y (\uparrow) respectivamente. El spin del electrón se conserva durante el proceso, por lo que las transiciones permitidas en esta configuración de polarización serán aquellas con $\Delta n = -2$, siempre que la interacción electrón-fonón vía potencial de deformación permita el acoplamiento de los estados implicados. Estudiando la expresión (5.41) vemos que éste es precisamente el caso, y la transición es posible. Mediante un análisis similar se obtiene el resultado $\Delta n = 2$ para la configuración de polarización $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$. Hay que resaltar que las reglas de selección del proceso vía potencial de deformación seguirían siendo las mismas aún en el caso en que q_x ó q_y fueran no nulos, puesto que los valores de N_m y $N_{m'}$ en la expresión (5.37) quedan determinados por las reglas de selección de la interacción electrón-fotón y el elemento de matriz $D_{v_m}^{v_{m'}}$, de forma que el proceso Raman es permitido únicamente cuando $N_m = N_{m'}$.

5.2.2 Interacción vía Fröhlich

Para la interacción Fröhlich con emisión de un fonón obtenemos el elemento de matriz:

$$\begin{aligned}
 \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, j \rangle = & \left(\delta_{n_h, n'_h} \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{k_{y_h}, k'_{y_h}} \delta_{k_{z_h}, k'_{z_h}} \delta_{k'_{y_e}, k_{y_e} - q_y} \delta_{k'_{z_e}, k_{z_e} - q_z} e^{i\lambda^2 q_x (k_{y_e} - \frac{q_y}{2})} K_{N_e, N'_e}(\lambda q_y, -\lambda q_x) \right. \\
 & - \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{y_e}, k'_{y_e}} \delta_{k_{z_e}, k'_{z_e}} \delta_{k'_{y_h}, k_{y_h} - q_y} \delta_{k'_{z_h}, k_{z_h} - q_z} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{y_h} - \frac{q_y}{2})} \times \\
 & \left. \times \sum_{\substack{m=\pm 3/2 \\ \pm 1/2}} C_m^{*\alpha, n_h, k_{z_h}} C_m^{\alpha', n'_h, k'_{z_h}} K_{N_m, N'_m}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \right) \cdot \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \quad , \quad (5.44)
 \end{aligned}$$

con $N'_m = n'_h - (m + 3/2)$. De la misma forma que en el caso anterior, los valores de n'_h y n_h quedan determinados por la interacción electrón-fotón, que conserva el nivel de Landau. Por lo tanto tendremos $n'_n = n_h$ y $N' = N$. Como venimos haciendo hasta ahora, obtendremos la amplitud de probabilidad para un proceso en configuración de retrodispersión, es decir, con $(q_x = q_y = 0)$. Utilizando las funciones $G_{\alpha, N}^{n, k_z}$ y $G_{\alpha, N}^{*\alpha, n, k_z}$ definidas por las Ecuaciones (5.39) y (5.40), la amplitud de probabilidad puede escribirse como:

$$\begin{aligned}
 W_{FI} = & K_{LS}^F \sum_{\alpha, n} \sum_{N, m_s} \int dk_z \frac{G_{\alpha, N}^{n, k_z}(\vec{e}_L)}{\hbar\omega_L - E_{N, k_z, m_s}^{\alpha, n} + i\Gamma_\alpha} \times \\
 & \times \left[\frac{G_{\alpha, N}^{*\alpha, n, k_z}(\vec{e}_S)}{\hbar\omega_S - E_{\alpha, n, k_z} - \frac{\hbar^2(k_z - q_z)^2}{2m_{z_e}} - \hbar\omega_{c_e}(N + \frac{1}{2}) + \mu_B B g_e^* m_s + i\Gamma_\alpha} \right. \\
 & \left. - \frac{G_{\alpha', N}^{*\alpha, n, k_z - q_z}(\vec{e}_S) \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} C_m^{*\alpha, n, k_z} C_m^{\alpha', n, k_z - q_z}}{\hbar\omega_S - E_{\alpha', n, k_z - q_z} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{z_e}} - \hbar\omega_{c_e}(N + \frac{1}{2}) + \mu_B B g_e^* m_s + i\Gamma_{\alpha'}} \right] \quad (5.45)
 \end{aligned}$$

donde la constante K_{LS}^F viene dada por:

$$K_{LS}^F = \frac{1}{\eta_S \eta_L} \frac{1}{(\hbar\omega_S \hbar\omega_L)^{1/2}} \frac{2C_F^*}{\pi q m_0 \sqrt{V}} \mu_B B R_y a_B \quad (5.46)$$

Nuevamente obtenemos como resultado que, incluso teniendo en cuenta la interacción entre las bandas de energía, un proceso de dispersión Raman vía Fröhlich sólo es posible en la configuración de polarización paralela, $\bar{z}(\sigma^\pm, \sigma^\pm)z$. A diferencia de la interacción

vía potencial de deformación, el número cuántico orbital de Landau se conserva a lo largo del proceso ($\Delta n = 0$), debido a que la interacción Fröhlich sólo permite transiciones intrabanda.

Estudiamos la posibilidad de obtener dobles resonancias. En la Sección 5.1.2 vimos que, por su carácter escalar, la interacción Fröhlich no puede inducir dobles resonancias, al menos en el seno de un modelo de bandas parabólicas. Si tenemos en cuenta la mezcla entre bandas la situación es diferente. Consideremos el elemento de matriz de interacción electrón-fonón vía Fröhlich calculado en la Ecuación (5.44). En la configuración de retrodispersión la interacción conserva el nivel de Landau, puesto que la función $K_{N,N'}$ se convierte en una función delta. A pesar de esto, es posible obtener transiciones entre estados con α y α' diferente. Esta posibilidad surge debido a que la interacción electrón-fonón cambia el momento del electrón o del hueco en la cantidad q_z . Dado que la mezcla entre las distintas bandas depende de k_z , la suma

$$\sum_{m=\pm 1/2, \pm 3/2} C_m^{\alpha, n, k_z} C_m^{\alpha', n, k_z - q_z} ,$$

es distinta de cero.⁴³ Sin embargo, debido a la conservación del momento, el valor de q_z es muy pequeño comparado con la extensión de la primera zona de Brillouin, por lo que los estados α y α' son prácticamente ortogonales, y la contribución de la doble resonancia al espectro Raman será pequeña.

Otra posibilidad que permite conectar estados con α diferente e incluso entre distintos niveles de Landau es la existencia de un valor finito del momento del fonón en el plano xy . Este valor puede provenir de distintas contribuciones: pérdida de la configuración de retrodispersión, interacción con las impurezas del cristal, etc.^{6,8}

Como resultado del modelo, se representa en la Figura 5.3 la eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético para una muestra de GaAs. Se ha considerado la configuración de polarización $\bar{x}(\sigma^-, \sigma^-)z$. En el cálculo se han utilizado los parámetros de la Tabla 5.4. En las distintas resonancias se indica la componente lh o hh implicada en la transición, así como el número cuántico orbital de Landau correspondiente. En la figura aparecen únicamente picos hh , debido a dos razones diferentes. Si nos fijamos en la Tabla 3.1 del Capítulo 3, vemos que las transiciones ópticas para estados de la banda

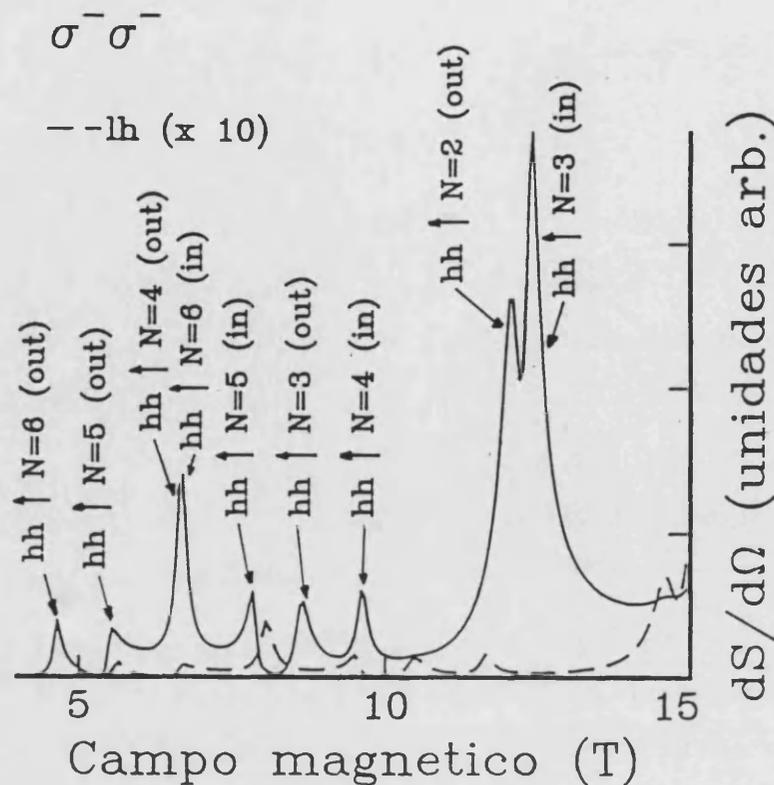


Figura 5.3: Eficiencia de dispersión Raman resonante de primer orden en función del campo magnético para una muestra de GaAs. La energía de la radiación incidente se ha mantenido fija a un valor de 1640 meV.

hh son $\sqrt{3}$ veces más intensas que las de la banda lh . En un proceso Raman vía Fröhlich, la luz interacciona dos veces con estados de la misma banda. Esto produce una diferencia en la amplitud de probabilidad en uno y otro caso de un factor 3. Puesto que la eficiencia de dispersión es proporcional a la amplitud de probabilidad al cuadrado, finalmente se obtiene una diferencia de un factor 9 en la intensidad de las resonancias hh respecto a los picos lh . Por otra parte, la amplitud de probabilidad del proceso Raman vía Fröhlich es proporcional al factor $(m_{z_i} - m_{z_e}) / (m_{z_i} + m_{z_e})$, donde $i = hh, lh$ (Ecuación (5.30)). Utilizando los parámetros de Luttinger de la Tabla 5.4 podemos calcular las masas efectivas $m_{z_{lh}}$ y $m_{z_{hh}}$:

$$\begin{aligned}
 m_{z_{lh}} &= \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2} = 0.109 \quad , \\
 m_{z_{hh}} &= \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2} = 0.200 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{5.47}$$

Por lo tanto, el factor de proporcionalidad dependiente de la masa es unas dos veces mayor

Parámetros de Luttinger	Banda de conducción	
$\gamma_1=7.1^{38}$	$m_e = 0.0665$	$E_g=1519$ meV
$\gamma_2=2.1^{38}$	$g_c^*=-0.44$	$\Gamma=1$ meV
$\gamma_3=2.9^{38}$		
$\kappa = 1.2$		

Tabla 5.4: Parámetros del GaAs utilizados en el cálculo del perfil de resonancia de la Figura 5.3.

para las transiciones $e \rightarrow hh$ que para las resonancias $e \rightarrow lh$, lo que elevado al cuadrado hace que la eficiencia de dispersión sea cuatro veces menor para las resonancias lh .

El efecto combinado de estas dos contribuciones hace que las resonancias lh tengan una intensidad casi veinte veces inferior a los picos hh y no se observen en el espectro. En la Figura 5.3 se incluye con trazo discontinuo la contribución de la banda lh , multiplicada por un factor 10.

5.3 Corrección excitónica a la energía

Hasta ahora hemos descrito los estados intermedios que intervienen en el proceso Raman como pares electrón-hueco no correlacionados. Sin embargo, la atracción Coulombiana entre el electrón y el hueco del par juega un papel importante tanto en la determinación de la energía de los estados intermedios como en su función de onda. Estos efectos se interpretan introduciendo una nueva cuasipartícula, el excitón, y su importancia relativa disminuye a medida que aumenta el campo magnético y el nivel de Landau del estado considerado. Desafortunadamente, no es posible encontrar una solución analítica exacta del Hamiltoniano del sistema con campo magnético que incluya la atracción Coulombiana entre el par electrón-hueco. Existen distintas aproximaciones válidas en los límites de campo magnético débil e intenso (energía de ligadura del excitón mucho mayor o mucho menor que la energía ciclotrón respectivamente),^{110,104,105} en las que la interacción menos relevante en cada caso es tratada como una perturbación. Nosotros nos centraremos en

el límite de campos altos, ($B \geq 5$ T, para la mayoría de los semiconductores de interés⁵). En este límite podemos suponer que la interacción de Coulomb afecta únicamente el movimiento del electrón en la dirección del campo magnético. En base a esta aproximación, la energía del nivel fundamental del excitón puede obtenerse como una corrección a los niveles de Landau resolviendo la ecuación de Schrödinger⁵:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) f(z) = E f(z) \quad , \quad (5.48)$$

donde $V(z)$ es un potencial de Coulomb efectivo, que depende únicamente de la coordenada z y viene dado por:

$$V(z) = -\frac{e^2}{\epsilon(a_B^* a_N + |z|)} \quad . \quad (5.49)$$

La constante a_B^* es el radio de Bohr efectivo, $a_B^* = \epsilon a_B / \mu$, donde μ es la masa reducida del par electrón-hueco. a_N depende del número cuántico de Landau y del campo magnético, y viene dado por:

$$a_N = \sqrt{\frac{2n+1}{\pi} \frac{\hbar \omega_c}{R_y^*}} \quad , \quad (5.50)$$

donde $R_y^* = \mu / \epsilon^2 R_y$ es el Rydberg efectivo del excitón. La ecuación (5.48) puede resolverse utilizando un método variacional, con la función de prueba:

$$f(z) = \sqrt{\beta} e^{-\beta|z|} \quad . \quad (5.51)$$

Minimizando la energía obtenemos la condición

$$-\frac{x}{4a_N} = 1 + (1+x) e^x \text{Ei}(-x) \quad , \quad x = 2\beta a_0^* a_N \quad (5.52)$$

para el parámetro variacional β . La función $\text{Ei}(x)$ es la función exponencial integral.

¹⁰¹ La energía de ligadura del estado fundamental del excitón correspondiente al número cuántico de Landau N viene dada en función de x como:

$$E(x) = \left[\left(\frac{x}{2a_N} \right)^2 \frac{x}{2a_N} \frac{4a_N + x}{a_N(1+x)} \right] R_y^* \quad . \quad (5.53)$$

La corrección excitónica obtenida por este método disminuye al aumentar N y es del orden de unos pocos meV. ⁵

Capítulo 6

Dispersión Raman resonante de primer orden con campo magnético intenso: Pozos cuánticos

Desde los trabajos de Esaki y Tsu^{17,18} las propiedades físicas de pozos cuánticos y superredes han sido estudiadas en profundidad. Tanto las investigaciones centradas en sus propiedades de transporte^{77,78} como las que se han realizado sobre sus propiedades ópticas⁷⁹⁻⁸¹ han aumentado el interés tecnológico de estas estructuras. Los pozos cuánticos de tipo I, en los que electrones y huecos quedan confinados en el mismo material, han sido estudiados de forma exhaustiva. La investigación es especialmente intensa en heteroestructuras de GaAs/Al_xGa_{1-x}As, materiales que presentan la ventaja adicional de que la similaridad de su parámetro de red garantiza la calidad cristalina del sistema durante el proceso de crecimiento. La acción de un campo magnético sobre estas estructuras ha sido abordada experimentalmente utilizando sobre todo técnicas de fotoluminiscencia,^{82,83} y analizada a través de diversos trabajos teóricos.⁸⁴⁻⁸⁶ Asimismo se han realizado estudios de su estructura electrónica y modos vibracionales mediante dispersión Raman,^{60,87} tanto aplicando campos eléctricos⁸⁸ como magnéticos.⁸⁹

Hemos visto en el Capítulo 2 que en un pozo cuántico la reducción de las dimensiones efectivas del sistema destruye la degeneración de las bandas de huecos pesados y ligeros en el punto Γ , por lo que cada banda da lugar a resonancias diferentes. Esta característica permite estudiar sus estados electrónicos separadamente. Por otra parte, al aplicar un campo magnético en la dirección de crecimiento del pozo cuántico, los estados electrónicos quedan completamente cuantizados, lo que aumenta considerablemente la eficiencia Raman y la información contenida en el espectro. El efecto del campo magnético es en cierta medida equivalente a cambiar el valor del vector de ondas del electrón y del hueco,⁹⁰ y constituye una forma de recorrer las bandas de energía alejándonos del punto Γ . Sin embargo, la complejidad de los estados electrónicos, cuantizados en subbandas que interaccionan entre sí, aumenta la dificultad para interpretar los datos experimentales. Esta situación conduce a la necesidad de elaborar un modelo teórico lo suficientemente detallado, que permita analizar la estructura relevante del experimento y relacionar las características de las resonancias obtenidas con las propiedades básicas de los materiales que forman el pozo y la barrera, sus estados electrónicos y las distintas interacciones que intervienen en el proceso de dispersión.

A continuación estudiaremos la dispersión Raman resonante de primer orden en pozos cuánticos en presencia de un campo magnético paralelo a la dirección de crecimiento. Desarrollaremos la teoría en dos grados diferentes de aproximación, según el esquema seguido en el capítulo anterior. En base a esta estructura, describiremos en primer lugar las bandas de energía del semiconductor mediante un modelo parabólico; posteriormente investigaremos los cambios que es necesario introducir si se tiene en cuenta la interacción entre las bandas. Cada sección consta de dos partes, la primera dedicada al estudio de la dispersión Raman vía potencial de deformación y la segunda centrada en la dispersión vía Fröhlich.

6.1 Modelo parabólico

Para describir los estados electrónicos del pozo cuántico, debemos incluir el potencial de confinamiento de las barreras en la dirección de crecimiento, que tomaremos como

dirección z . Los estados electrónicos de este sistema se han obtenido en el Capítulo 2 (Sección 2.4) utilizando la aproximación de la masa efectiva y el modelo de Kane para tener en cuenta la interacción entre las bandas de energía. Aunque en esta sección desarrollaremos un modelo parabólico de la dispersión Raman en pozos cuánticos, es conveniente tener en cuenta la complejidad de la estructura de bandas en el cálculo de las subbandas del pozo para $k_x = k_y = 0$, tal y como se hizo en el Capítulo 2. Esta consideración nos acerca más a la situación existente en un pozo cuántico real y no constituye un aumento significativo de la complejidad del desarrollo teórico. Para simplificar las expresiones obtenidas recurriremos, cuando sea necesario, a un modelo de pozo cuántico con barreras infinitas, que permite obtener la energía y funciones de onda de los estados confinados mediante una expresión analítica sencilla. Esta aproximación es adecuada para describir las subbandas de menor energía en pozos cuánticos anchos y profundos, y en todo caso nos permitirá obtener una imagen sencilla de la física esencial del problema, así como la energía de cada subbanda de forma aproximada. Siguiendo la notación introducida en el Capítulo 2, denotaremos la función de onda de los estados electrónicos confinados en el pozo como $\varphi_{\nu i}$, donde el índice $\nu = 1, 2, \dots$ se refiere a la subbanda del pozo e $i = e, h$ hace referencia a la banda de conducción (e) o de valencia (h), con $h = hh, lh$ para las bandas de hueco pesado y ligero. Las funciones de onda correspondientes se recogen en el Apéndice B.

La energía del par electrón hueco en el estado α se obtiene como suma de las energías del electrón y el hueco correspondiente (Ecuación (2.61)):

$$E_{\alpha} = E_{N_h, \nu_h, m_{s_h}} + E_{N_e, \nu_e, m_{s_e}} = E_g + E_{\nu_h} + E_{\nu_e} + \hbar\omega_{c_h}(N_h + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_{c_e}(N_e + \frac{1}{2}) + \mu_B B(g_e^* m_{s_e} + g_h^* m_{s_h}) \quad , \quad (6.1)$$

y la función de onda del par será el producto de sus respectivas funciones de onda:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha} &= \Phi_{N_h, k_{y_h}, \nu_h, m_{s_h}} \Phi_{N_e, k_{y_e}, \nu_e, m_{s_e}} = \\ &= \frac{1}{L_y} e^{ik_{y_h} y} e^{ik_{y_e} y} \varphi_{\nu_h}(z) \varphi_{\nu_e}(z) u_{N_h}(x - x_{0h}) u_{N_e}(x - x_{0e}) \chi(m_{s_h}) \chi(m_{s_e}) \quad . \end{aligned} \quad (6.2)$$

Siguiendo la misma línea que en el capítulo anterior, calcularemos en primer lugar la amplitud de probabilidad W_{FI} del proceso Raman (Ecuación (4.23)) para la transición

del estado inicial $|I\rangle$ al estado final $|F\rangle$, considerando como estados intermedios pares electrón-hueco. A partir de la Ecuación (3.14) y utilizando las funciones de onda (6.2), obtenemos los siguientes elementos de matriz para los procesos de absorción y emisión de un fotón respectivamente:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H_{ER}^- | 0 \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v \rangle \delta_{k_{y_h}, k_{y_e} - \kappa_{y_L}} \delta_{N_e, N_h} G_{\nu_e, \nu_h} \quad , \\ \langle 0 | H_{ER}^+ | \beta \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_S^2 \omega_S V}} \langle v' | \vec{e}_S^* \cdot \hat{p} | c' \rangle \delta_{k'_{y_e}, k'_{y_h} + \kappa_{y_S}} \delta_{N'_e, N'_h} \delta_{\nu'_e, \nu'_h} G_{\nu'_e, \nu'_h}^* \quad , \end{aligned} \quad (6.3)$$

donde la función G_{ν_e, ν_h} es la integral de solapamiento de las funciones del pozo para el electrón y el hueco:

$$G_{\nu_e, \nu_h} = \int \varphi_{\nu_e}^* \varphi_{\nu_h} dz \quad . \quad (6.4)$$

Consideremos por un momento la función G_{ν_e, ν_h} para un pozo cuántico con barreras infinitas. En ese caso, la probabilidad de encontrar el electrón o el hueco en la barrera es cero y su función de onda es independiente de la masa, por lo que G_{ν_e, ν_h} toma el valor δ_{ν_e, ν_h} . Este no es el caso de un pozo cuántico real, en el que hay una cierta probabilidad de que el electrón y el hueco penetren en la barrera, probabilidad que dependerá de su altura, la anchura del pozo y la masa efectiva de los portadores de carga. Puesto que tanto electrones como huecos pesados y ligeros tienen una masa efectiva diferente y se encuentran confinados en pozos de distinta altura, su función de onda se repartirá de forma diferente entre el pozo y la barrera. Como consecuencia, la integral de solapamiento G_{ν_e, ν_h} será distinta de cero aún en el caso de que las dos funciones correspondan a distintas subbandas ($\nu_e \neq \nu_h$). Adicionalmente, debemos tener en cuenta la simetría del pozo cuántico. Las funciones φ_ν tienen paridad definida, $\pi_\nu = (-1)^{1+\nu}$, por lo que su solapamiento será nulo cuando ν_e y ν_h tengan distinta paridad. Por otra parte, el valor de G_{ν_e, ν_h} será tanto mayor cuanto más parecidas sean las funciones φ_{ν_e} y φ_{ν_h} , lo que se refleja en que su penetración en la barrera debe ser similar. Para analizar el solapamiento del electrón con las bandas de hueco pesado y ligero consideremos un caso particular, pero representativo, consistente en un pozo cuántico de GaAs/AlAs, cuyos parámetros característicos aparecen en la Tabla 6.1.

La masa del lh en la dirección z es similar a la del electrón, por lo que, en principio, cabe esperar que sus funciones de onda sean parecidas. Sin embargo, también es necesario tener en cuenta que el confinamiento en la banda de conducción es mayor que en la de valencia ($V_c > V_{lh,(hh)}$). Esto provoca que, aún teniendo masas similares, el hueco ligero penetre en la barrera con mayor facilidad que el electrón, por lo que sus funciones de onda diferirán tanto más cuanto menor sea la anchura del pozo.

parámetros	GaAs	AlAs
E_g	1519 meV	3100 meV
m_{zhh}	$0.34 m_0$	$0.4 m_0$
m_{zlh}	$0.092 m_0^{(a)}$	$0.194 m_0^{(a)}$
m_{ze}	$0.066 m_0^{(a)}$	$0.133 m_0^{(a)}$
Δ_0	341 meV	275 meV
$(2m_0/\hbar^2)P^2$	24.8 eV	24.8
γ_1	7.1^{38}	3.45
γ_2	2.1^{38}	0.68
γ_3	2.9^{38}	1.29
g_e^*	-0.44	
g_{hh}^*	7.2	
g_{lh}^*	2.4	
V_{hh}	474 meV	
V_{lh}	474 meV	
V_c	1107 meV	

^aCálculo $\vec{k} \cdot \vec{p}$. ⁴⁰

Tabla 6.1: Parámetros relevantes en el cálculo de las subbandas del pozo cuántico GaAs/AlAs con campo magnético. ¹⁰²

En el caso del hueco pesado estos dos efectos se compensan. Por una parte, la masa del

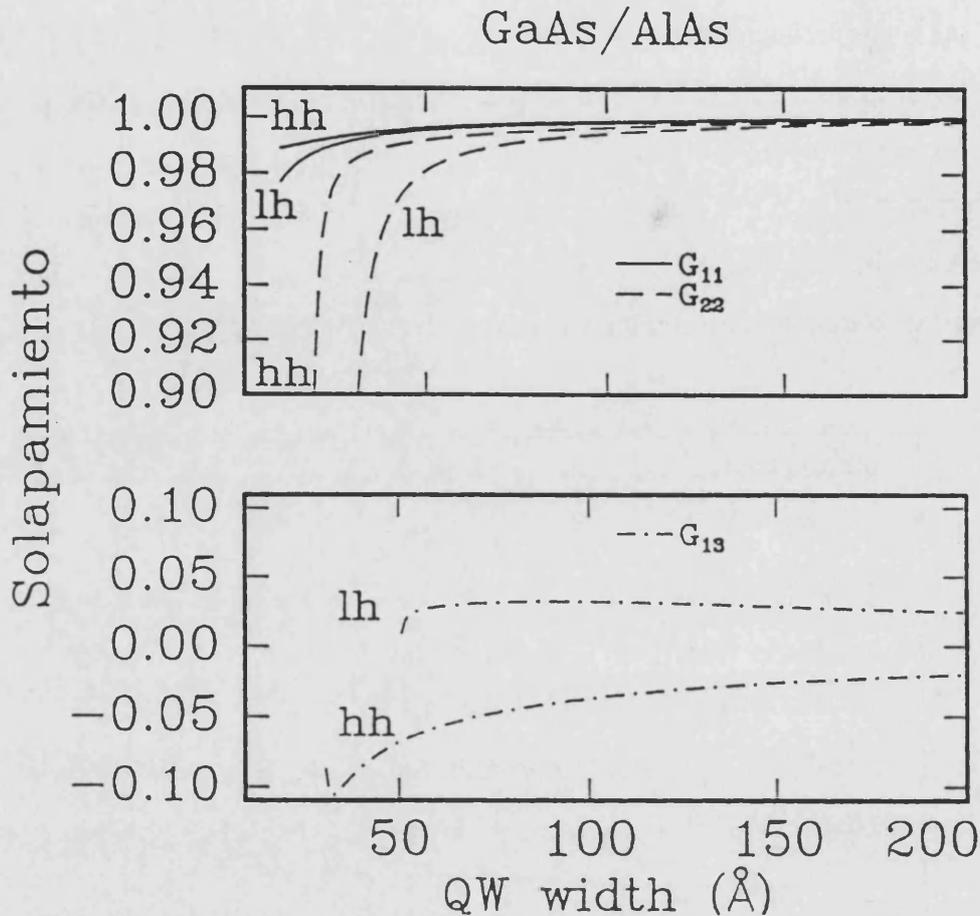


Figura 6.1: Integral de solapamiento G_{ν_e, ν_h} para las bandas de hueco pesado y ligero en función de la anchura del pozo. Se ha tomado $\nu_e = 1, 2$ y $\nu_h = 1, 2, 3$.

hueco pesado en la dirección z es mucho mayor que la del electrón, lo que disminuye su penetración en la barrera. Al mismo tiempo, el potencial de confinamiento es menor, lo que aumenta la penetración. El efecto combinado de estas dos contribuciones hace que finalmente la integral G_{ν_e, ν_h} sea ligeramente mayor para huecos pesados que para huecos ligeros, como puede observarse en la Figura 6.1. La diferencia no es significativa para pozos anchos, pero comienza a ser de consideración si la anchura es menor de 25 Å. Como vemos en la Figura 6.1, el valor de la integral disminuye drásticamente entre niveles del pozo con distinto índice. A pesar de esto, su contribución a la eficiencia Raman puede ser muy grande si nos encontramos en condiciones de doble resonancia.⁷²⁻⁷⁴

El Hamiltoniano de la interacción electrón-fonón dependerá del tipo de interacción

que consideremos. Como ya hemos dicho, analizaremos las interacciones vía potencial de deformación y vía Fröhlich separadamente.

6.1.1 Interacción vía potencial de deformación

Partiremos de la expresión (3.58) para la interacción electrón-fonón, considerando la constante de acoplamiento adecuada a un pozo cuántico que obtuvimos en el Capítulo 3 (Ecuación (3.79)):

$$S_{\lambda,i}^{\lambda',j} = \frac{u_0\sqrt{3}}{2a_0} \langle \lambda', j | D_e(\vec{\rho}_e) u_z(z_e) e^{-i\vec{q}_{zy}\cdot\vec{\rho}_e} \delta_{\nu,\nu'} - D_h(\vec{\rho}_h) u_z(z_h) e^{-i\vec{q}_{zy}\cdot\vec{\rho}_h} \delta_{c,c'} | \lambda, i \rangle, \quad (6.5)$$

donde el desplazamiento u_z viene dado por la Ecuación (3.85). Utilizando las funciones (6.2) y considerando un proceso de emisión de un fonón obtenemos la siguiente expresión para el elemento de matriz de la interacción:

$$\begin{aligned} \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, i \rangle &= -\frac{u_0\sqrt{3}}{2a_0} \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{ye}, k'_{ye}} \delta_{k'_{yh}, k_{yh}-q_y} D_{\nu'}^{\nu} \times \\ &\times e^{-i\lambda^2 q_x (k_{yh} - \frac{q_y}{2})} K_{N_h, N'_h}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) F_{\nu_i, \nu'_j}(\vec{q}), \end{aligned} \quad (6.6)$$

donde se ha tenido en cuenta que $\langle c | D_h | c \rangle = 0$ y los índices i, j se refieren a las bandas de valencia. F_{ν_i, ν'_j} es la integral de solapamiento de las funciones del pozo de la banda de valencia moduladas por u_z , y depende del vector de ondas del fonón a través de u_z :

$$F_{\nu_i, \nu'_j}(\vec{q}) = \int \varphi_{\nu_i}^* u_z(z) \varphi_{\nu'_j} dz. \quad (6.7)$$

Su expresión analítica se recoge en el Apéndice C. La función u_z es par para modos impares e impar para modos pares. Teniendo esto en cuenta, la integral $F_{\nu_i, \nu'_j}(\vec{q})$ será distinta de cero para funciones del pozo con la misma paridad si el modo del fonón es impar, y para modos pares será no nula si las funciones del pozo tienen paridad diferente. En la Figura 6.2 se representa la integral F_{ν_i, ν'_j} en función de la anchura del pozo para $i = hh$ y $j = lh$. Se han considerado tres estados del pozo cuántico diferentes ($\nu = 1, 2$ y 3) y el primer fonón confinado. Puede observarse que la contribución de la integral a la amplitud de dispersión disminuye rápidamente al aumentar el índice ν y es mucho menor si la transición se produce entre estados de diferentes subbandas.



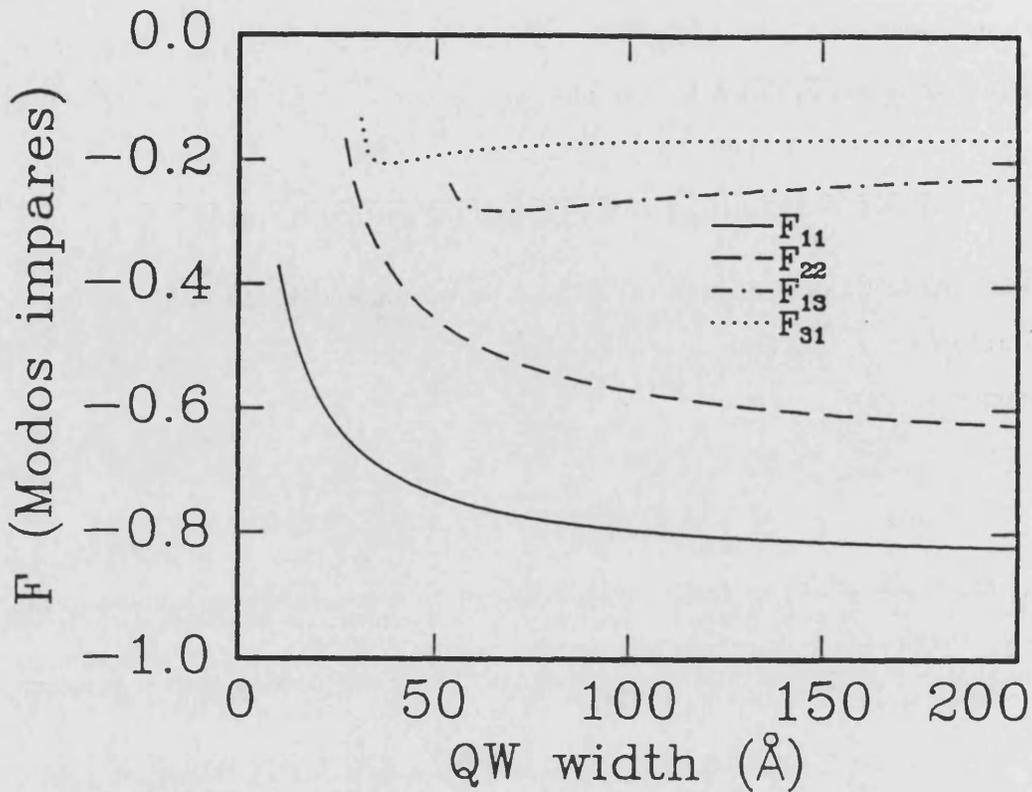


Figura 6.2: Representación de la integral $F_{\nu_i, \nu_j'}$ en función de la anchura del pozo para estados de la banda de valencia de huecos pesados (i) y ligeros (j). En el cálculo se ha considerado $\nu = 1, 2$ y 3 y el primer fonón confinado.

Para obtener la amplitud de probabilidad del proceso Raman resonante utilizaremos la Ecuación (6.6) junto con los elementos de matriz (6.3). Procediendo de igual forma que en el capítulo anterior, podemos realizar la suma en k_y explícitamente (Ecuación (5.17)). Si además consideramos la configuración de retrodispersión, $q_x = q_y = 0$, finalmente tendremos:

$$\begin{aligned}
 W_{FI} = & - \sum_{i,j} K_{LS}^{DP}(i,j) \times \\
 & \times \sum_{k_y, V} \sum_{\substack{\nu_e, \\ \nu_i, \nu_j'}} \frac{G_{\nu_e, \nu_j'}^* e^{-i\lambda^2 q_x (k_y - \frac{q_y}{2})} F_{\nu_i, \nu_j'}(\bar{q}) G_{\nu_e, \nu_i} \delta_{q_y, 0}}{(E_{\nu_e} + E_{\nu_i} + \hbar\bar{\omega}_{c_i}(N + \frac{1}{2} - \beta_{Li}))(E_{\nu_e} + E_{\nu_j'} + \hbar\bar{\omega}_{c_j}(N + \frac{1}{2} - \beta_{Sj}))}
 \end{aligned}
 \tag{6.8}$$

donde los índices i y j recorren las bandas de valencia y la constante $K_{LS}^{DP}(i, j)$ viene dada

por:

$$K_{LS}^{DP}(i, j) = \frac{2}{\eta_S \eta_L} \frac{\langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle D_{v_j}^{v_i} \langle v_j | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle}{(\hbar \omega_L \hbar \omega_S)^{1/2}} \frac{u_0 \sqrt{3}}{m_0 a_0} R_y a_B \frac{\mu_B B}{d} \quad (6.9)$$

d es la anchura del pozo cuántico y tanto $\beta_{L(S)k}$ como $\bar{\omega}_{c_k}$ han sido definidas en el Capítulo 5 (Ecuación (5.16)).

Consideremos un proceso que se lleva a cabo en la configuración de Faraday ($\vec{B} \parallel \vec{\kappa}_L$) y en el que la luz incide con polarización circular. Si ignoramos por un momento el confinamiento de los electrones en la dirección z , las reglas de selección del proceso Raman serán las mismas que las obtenidas para los materiales másicos, puesto que los elementos de matriz que las determinan coinciden en ambos casos. Tendremos por lo tanto:

$$\begin{aligned} \Delta j &= 0, \pm 1 \quad , \\ \Delta m_s &= m_{s_e} - m_{s_h} = 0 \quad , \\ \Delta N &= 0 \quad , \\ \Delta m_j &= m_{j_i} - m_{j_f} = \begin{cases} 2 & \text{para } \bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z \\ -2 & \text{para } \bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z \end{cases} \end{aligned} \quad (6.10)$$

y las configuraciones de spin paralelo ($\bar{z}(\sigma^\pm, \sigma^\pm)z$) están prohibidas. La dispersión Raman vía potencial de deformación es interbanda, es decir, acopla la banda de huecos pesados con la de huecos ligeros.

La diferencia que introduce el confinamiento en la dirección z viene dada por el producto de los elementos de matriz de las funciones del pozo:

$$G_{\nu_e, \nu'_j}^* F_{\nu_i, \nu'_j}(q_z) G_{\nu_e, \nu_i} \quad (6.11)$$

Por una parte, la función G_{ν_e, ν_i} obliga a que los estados confinados en la banda de conducción y de valencia tengan la misma paridad. Dado que el electrón permanece en el mismo estado durante el proceso de dispersión, las funciones φ_{ν_i} y $\varphi_{\nu'_j}$ deben tener también la misma paridad. Por lo tanto, para que la integral F_{ν_i, ν'_j} sea distinta de cero, el modo del fonón excitado en un proceso vía potencial de deformación debe ser impar:

$$\pi_{\nu_{hh}} = \pi_{\nu'_{hh}} \quad , \quad (6.12)$$

modo confinado del fonón impar.

En este capítulo designaremos el modo confinado del fonón con la letra p .

Las reglas de selección se simplifican si tomamos como estados intermedios las funciones de onda de un pozo cuántico con barreras infinitas. En ese caso, la probabilidad de encontrar el electrón en la barrera es nula y su función de onda viene dada por:

$$\varphi_\nu = \sqrt{\frac{2}{d}} \times \begin{cases} \text{sen } \frac{\pi\nu}{d}z & \text{para } \nu = 2, 4, 6 \dots \\ \text{cos } \frac{\pi\nu}{d}z & \text{para } \nu = 1, 3, 5 \dots \end{cases} \quad (6.13)$$

con energía:

$$E_\nu = \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2m_{z_i} d^2}, \quad (6.14)$$

donde m_{z_i} es la masa efectiva del electrón en la banda i a lo largo de la dirección z . El solapamiento de las funciones del pozo en la banda de valencia y de conducción se convierte en una función delta: $G_{\nu_e, \nu_h} = \delta_{\nu_e, \nu_h}$. Como el electrón permanece siempre en el mismo estado, esto implica que $\nu_{hh} = \nu'_{ih}$, y la transición conserva el nivel del pozo. Si además consideramos un pozo lo suficientemente ancho como para despreciar el confinamiento de los fonones y tomamos $u_z = 1$, la función $F_{\nu, \nu}$ toma el valor 1 y la suma en el índice ν puede llevarse a cabo de forma explícita. El resultado final para la amplitud de probabilidad teniendo en cuenta estas aproximaciones es:

$$W_{FI} = - \sum_{i,j} K_{LS}^{DP}(i,j) \frac{1}{4E_{0i}E_{0j}} \sum_N \frac{1}{A_{Li}^2 - A_{Sj}^2} \times \left[\frac{1}{2A_{Sj}} \left(\pi \coth(\pi A_{Sj}) - \frac{1}{A_{Sj}} \right) - \frac{1}{2A_{Li}} \left(\pi \coth(\pi A_{Li}) - \frac{1}{A_{Li}} \right) \right], \quad (6.15)$$

donde

$$A_{L(S)k} = \frac{\hbar\omega_{L(S)} - E_{gk} + \hbar\bar{\omega}_{ck}(N + \frac{1}{2}) + \mu_B B(g_e^* + g_k^*)m_{sk} + i\Gamma_k}{E_{0k}} \quad (6.16)$$

y $E_{0k} = \hbar^2 \pi^2 / 2m_{z_k} d^2$.

La ecuación (6.9) da la misma dependencia de la amplitud de probabilidad con el campo magnético que en el caso de semiconductores másicos. Dado que la eficiencia de dispersión es proporcional a $|W_{FI}|^2$, aumentará cuadráticamente con B . En el caso de pozos cuánticos, la eficiencia de dispersión también depende de la anchura del pozo ($dS/d\Omega \propto d^{-2}$), dependencia que puede atribuirse al confinamiento espacial de electrones

y huecos en la dirección de crecimiento. Por una parte, la amplitud de probabilidad de un proceso Raman de primer orden es proporcional al volumen ocupado por electrones y huecos, es decir, L^2d , mientras que la densidad de estados es proporcional al producto L^2B (Ecuación (5.17)), de donde se obtiene finalmente la dependencia $W_{FI} = B/d$.

De las Ecuaciones (6.8) y (6.1) puede calcularse la frecuencia a la que aparecen los picos resonantes:

$$\hbar\omega_{L(S)} = E_{g_k} + E_{\nu_c} + E_{\nu_k} + \hbar\bar{\omega}_{c_k}(N + \frac{1}{2}) + \mu_B(g_e^* + g_h^*)m_s B \quad , \quad (6.17)$$

con $k = hh, lh$ y $m_s = \pm 1/2$. Debido al gran número de parámetros que determinan la energía, es posible obtener en la misma posición resonancias correspondientes a transiciones entre estados diferentes (degeneración accidental), situación que experimentalmente puede confundirse con dobles resonancias. Una degeneración accidental puede eliminarse cambiando el campo magnético, la configuración de polarización o estudiando una muestra con un pozo de anchura o barrera ligeramente diferente. El modelo que acabamos de desarrollar se ha aplicado al sistema particular de un pozo cuántico de GaAs/AlAs, cuyos parámetros característicos se han dado ya en la Tabla 6.1 (página 123). La intensidad relativa de las resonancias Raman correspondientes a transiciones diferentes está gobernada, en cierta medida, por la dependencia del tiempo de vida con el campo magnético, el nivel de Landau y la anchura del pozo. En este trabajo hemos asumido una dependencia parabólica de Γ con el nivel de Landau, según la relación:

$$\Gamma(N) = 1.2 - 0.47(N + 1) + 0.26(N + 1)^2 \quad , \quad (6.18)$$

independientemente de el carácter pesado o ligero de la banda involucrada en la transición. Esta relación se obtuvo a partir del trabajo experimental de Calle et al.,⁹¹ ajustando la anchura de las resonancias correspondientes a distintos niveles de Landau mediante una parábola. El resultado de este ajuste aparece en la Figura 6.3. Sin embargo, en otros experimentos se ha encontrado más adecuado considerar una dependencia lineal de Γ con el nivel de Landau, diferente para huecos pesados y ligeros.⁹²

La cuantización del spin se ha tenido en cuenta a través de los factores g^* . Si se conoce su valor experimental, puede utilizarse directamente para determinar los niveles

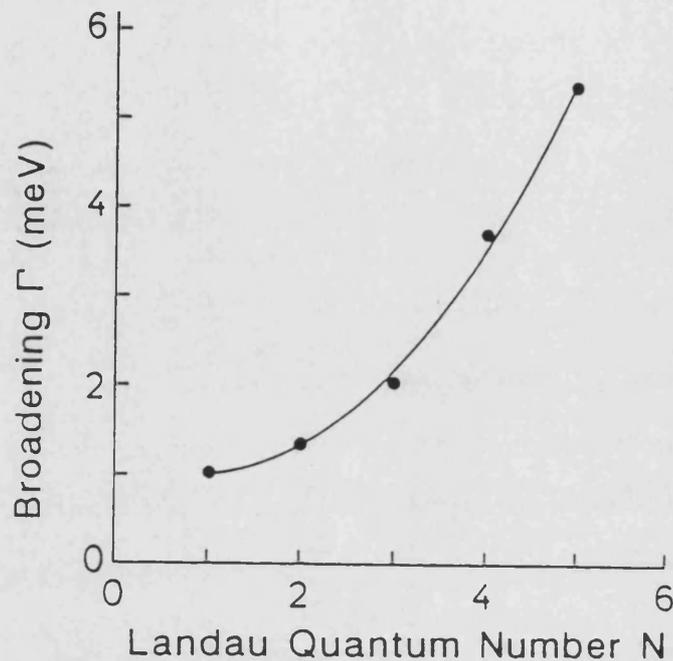


Figura 6.3: Anchura de las resonancias en función del número cuántico de Landau para una muestra de GaAs/AlAs de 100 Å. La línea continua corresponde a la parábola definida en la Ecuación (6.18).

de energía en función del campo magnético aplicado. Como factores g hemos considerado la diferencia entre las dos componentes de spin de las subbandas de huecos pesados y ligeros en el límite $B \rightarrow 0$ para N fijo, es decir, $g_{3/2} = 6\kappa$ y $g_{1/2} = 2\kappa$, donde $\kappa = 1.2$ para el GaAs. Estos valores son excesivamente grandes si se aplican al primer nivel de Landau ($N = 0$) debido a las contribuciones excitónicas,⁹³ aunque la estimación es razonable para niveles de Landau de índice mayor.¹⁰⁷

En la Figura 6.4 se representa la eficiencia de dispersión Raman en unidades arbitrarias para la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ en función del campo magnético. Los cálculos se han llevado a cabo para pozos cuánticos de cuatro anchuras diferentes y fijando la energía de la radiación incidente dos fonones por encima de la banda prohibida del GaAs ($\hbar\omega_L = E_g + 2\hbar\omega_{LO}$), energía a la que, para los sistemas considerados, se observan únicamente resonancias de entrada. Las transiciones correspondientes a la banda de huecos pesados

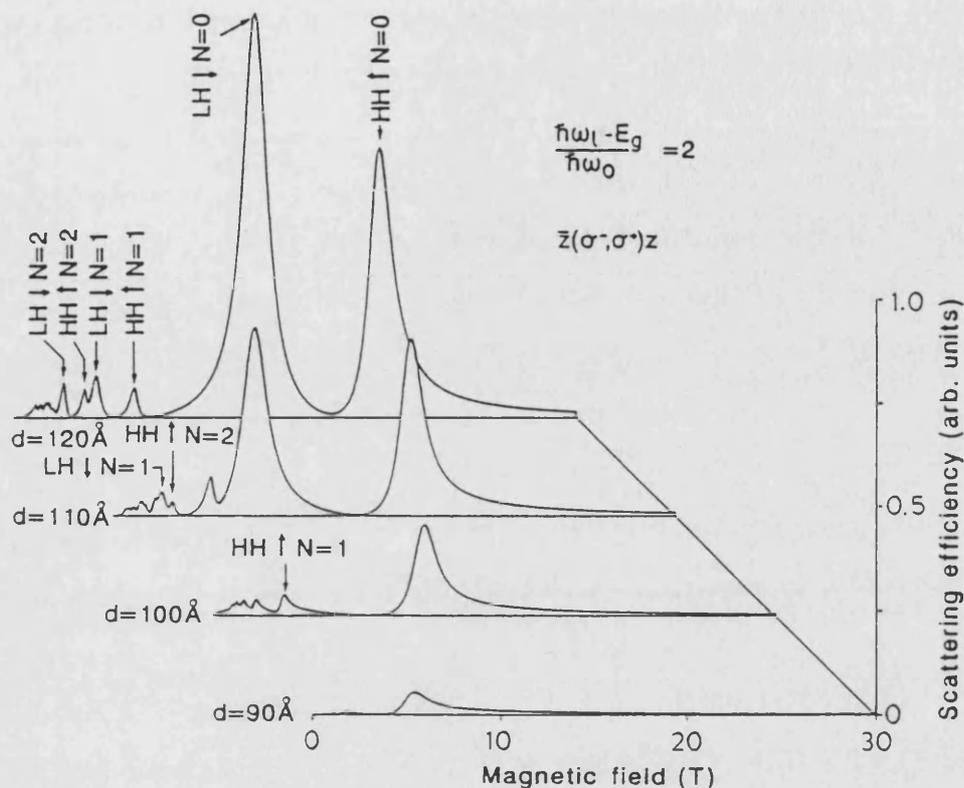


Figura 6.4: Eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético calculada mediante la Ecuación 6.8. Se ha considerado la configuración de dispersión $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ para cuatro anchuras de pozo diferentes.

se han señalado como hh y las de huecos ligeros como lh , indicando el nivel de Landau y el spin del estado. La fluctuación de la intensidad de las resonancias en función del campo magnético en el pozo cuántico contrasta con el comportamiento monótono observado en los semiconductores másicos.^{8,9} De acuerdo con las reglas de selección del proceso (Tabla 3.1), en esta configuración de polarización las resonancias de entrada tienen lugar con estados de las bandas hh^- y lh^- , cada una correspondiente a un spin diferente del electrón. En cuanto a la banda de conducción, hemos considerado únicamente la contribución a la eficiencia de dispersión del primer nivel del pozo. El segundo nivel se encuentra a una energía mucho mayor y no interviene en las resonancias estudiadas. En la figura aparecen

únicamente resonancias correspondientes a la primera subbanda de hueco pesado y ligero. La segunda es impar y su solapamiento con el electrón es cero, mientras que las bandas superiores aparecen a una energía que queda fuera de la región analizada. En los dos primeros perfiles de magneto-Raman, para pozos de anchura $d = 90, 100 \text{ \AA}$, se observan las resonancias de entrada de los niveles $N = 0, 1, 2 \dots$ de la banda de hueco pesado. La banda de huecos ligeros se encuentra a mayor energía y no tiene un comportamiento resonante, por lo que no aparece en el espectro. A medida que aumentamos la anchura del pozo, las resonancias se desplazan a un valor mayor del campo magnético, lo que significa que la energía de las subbandas del pozo es cada vez menor a campo cero. Debido a la dependencia de la eficiencia de dispersión con $1/d^2$, la intensidad de las resonancias debe disminuir al aumentar d ; sin embargo, en la figura se observa el efecto contrario. La razón de este comportamiento contradictorio tiene su origen en el desplazamiento de las resonancias a un valor mayor del campo, con lo que la dependencia con d queda enmascarada por un aumento de la intensidad proporcional a B^2 . Estudiemos ahora con detalle el comportamiento de la resonancia $N = 0$ de la banda de huecos ligeros, que aparece en los pozos con $d = 110, 120 \text{ \AA}$. Como hemos visto, al disminuir d las resonancias se desplazan a un valor del campo más intenso, y en la figura puede observarse que el pico lh se desplaza con mayor rapidez que la resonancia hh . Esto es debido a que la pendiente de los niveles de Landau de la banda de huecos ligeros en función del campo es menor que la de los hh , es decir, su masa efectiva en la dirección xy es mayor. Como consecuencia, una pequeña variación en la escala de energías (debida a un cambio en el valor de d) produce un corrimiento mayor para el lh en la escala de campo magnético. Las resonancias de la banda de huecos ligeros presentan una segunda característica que es necesario destacar. A pesar de que aparecen a campo magnético menor que las resonancias hh con el mismo índice de Landau, su intensidad es mayor. Este es un resultado general relacionado con las reglas de selección en un pozo cuántico. Las resonancias de entrada correspondientes a estados de la banda de huecos pesados tienen sus resonancias de salida a través de estados de la banda de huecos ligeros, que se encuentran a mayor energía. Esta disposición de las bandas hace que el denominador de la Ecuación (6.8) adquiera un

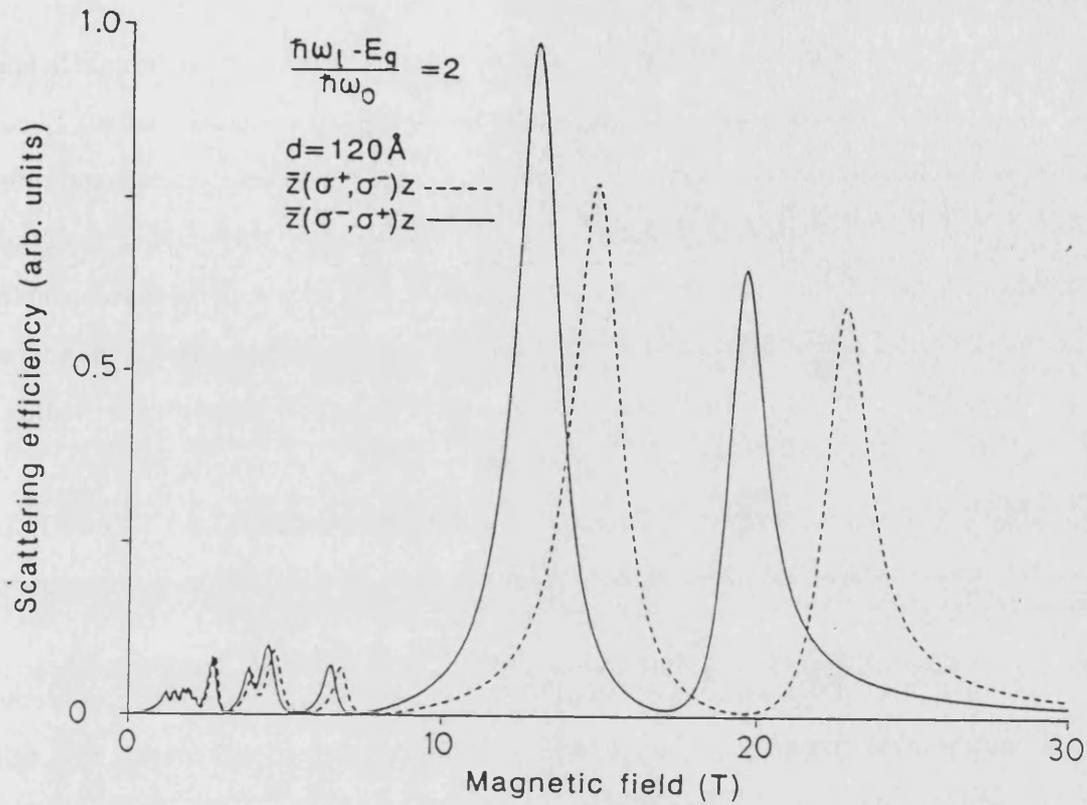


Figura 6.5: Eficiencia de dispersión Raman resonante en función del campo magnético para las configuraciones $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$. Se ha considerado un pozo de GaAs/AlAs de 120 Å.

valor relativamente grande. Por otra parte, si la resonancia de entrada corresponde a un estado lh , la de salida se realizará a través de un estado hh , que se encuentra a menor energía. La transición está por tanto más próxima a la configuración de doble resonancia, por lo que su contribución a la eficiencia de dispersión Raman aumenta.

En la Figura 6.5 se compara la eficiencia de dispersión para las dos configuraciones con polarización circular cruzada, en un pozo de GaAs/AlAs de 120 Å. Debido a la cuantización del spin, las resonancias correspondientes a la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ aparecen a campo mayor. A pesar de esto, son menos intensas que en la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$. Esta discrepancia se explica teniendo en cuenta que la contribución del spin a la energía cambia la separación de los estados que intervienen en las resonancias de salida, de forma

que para la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ el valor del denominador en la expresión (6.8) disminuye y la eficiencia de dispersión aumenta.

En la Figura 6.6 se representa la eficiencia de dispersión Raman en función de la energía de la radiación incidente para las dos configuraciones de polarización relevantes. El campo magnético se ha fijado a un valor de 10 T y se comparan los perfiles de resonancia de tres pozos de 80, 100 y 120 Å. La disminución de la intensidad de las resonancias al aumentar d se aprecia ahora con claridad, puesto que el campo magnético permanece constante. En la región de energías representada aparecen en un mismo espectro resonancias de entrada y de salida, cuya posición se desplaza hacia energías más pequeñas a medida que d aumenta. Por lo tanto, aumentar d equivale a reducir la escala de energías. En la Figura 6.6(a) aparece una degeneración accidental de las resonancias $hh \uparrow N = 1$ (in) y $hh \downarrow N = 0$ (out) para el pozo de 80 Å, que desaparece al cambiar la configuración de polarización (Figura 6.6(b)).

Estudiemos ahora las condiciones en las que es posible obtener un proceso doblemente resonante. Cuando las resonancias de entrada y de salida correspondientes a una misma transición tienen lugar a la misma energía, la eficiencia de dispersión Raman aumenta rápidamente. Como vimos en el Capítulo 4, esta situación de doble resonancia puede alcanzarse si la diferencia de energía entre dos transiciones electrónicas permitidas coincide con la energía de un fonón ($\hbar\omega_{LO}$), lo que en la práctica se logra cambiando el campo magnético y eligiendo adecuadamente la anchura del pozo cuántico. La condición de doble resonancia se obtiene a partir de la Ecuación (6.17). El campo magnético necesario para obtener una doble resonancia es:

$$B_N(d) = \frac{\hbar\omega_{LO} + E_{\nu_i} - E_{\nu_j}}{\mu_B (2N + 1) \left(\frac{m_0}{m_{xy_i}} - \frac{m_0}{m_{xy_j}} \right) - \mu_B (g_i^* - g_j^*) m_{s_e}} \quad , \quad (6.19)$$

donde $i, j = hh, lh$, $i \neq j$, y la energía de la radiación incidente correspondiente a la doble resonancia será:

$$\hbar\omega_L = E_g + E_{\nu_e} + E_{\nu_i} + \frac{\hbar e B_N}{\mu_{xy_i}} \left(N + \frac{1}{2} \right) + \mu_B (g_e^* + g_i^*) m_{s_e} B_N \quad , \quad (6.20)$$

ecuaciones semejantes a las obtenidas en materiales másicos (Ecuaciones (5.24) y (5.25)).

La Ecuación (6.19) permite calcular la anchura (d_c) del pozo necesaria para obtener una

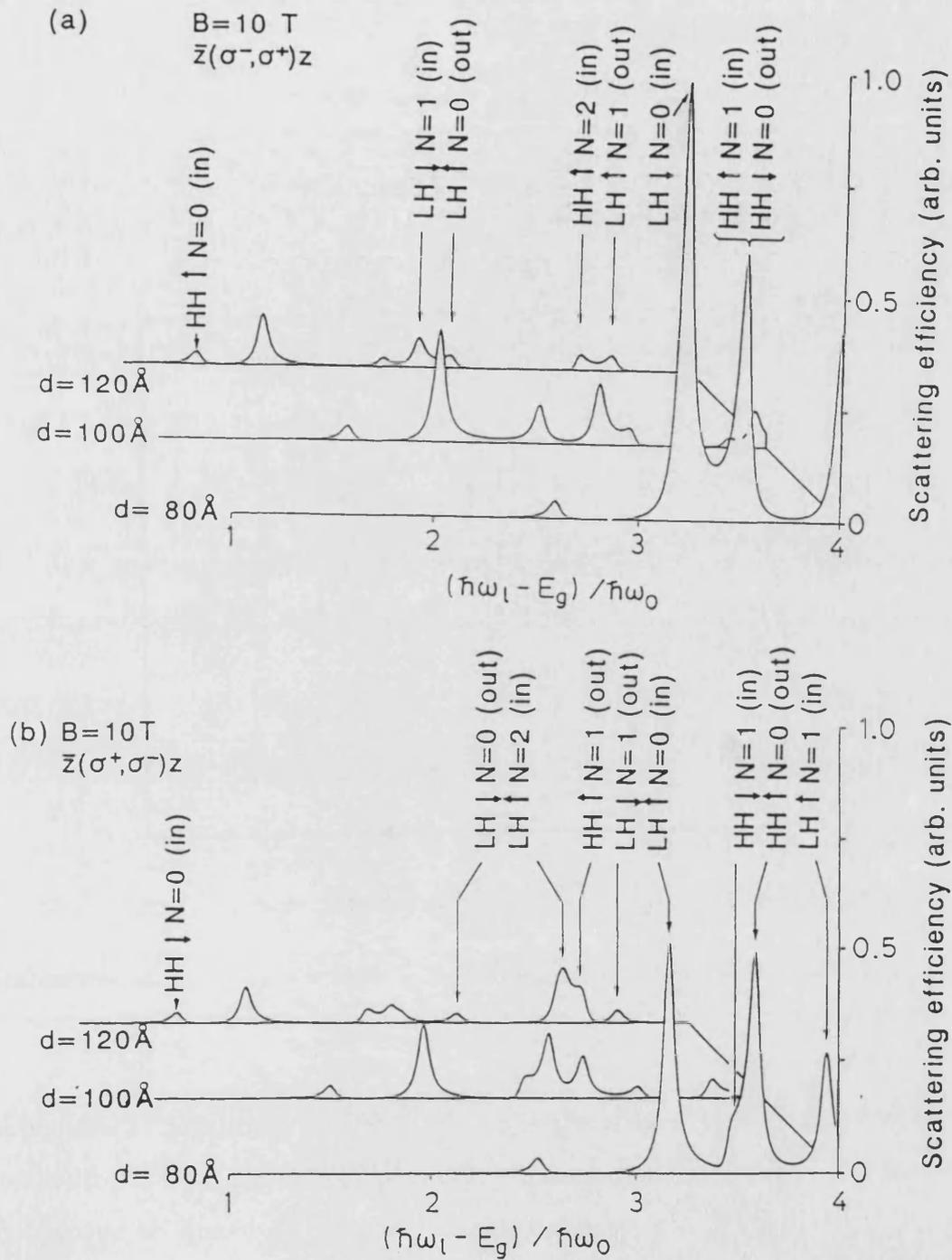


Figura 6.6: Eficiencia de dispersión Raman (en unidades arbitrarias) en función de la energía de la radiación incidente $(\hbar\omega_L - E_g)/\hbar\omega_{L0}$ para tres anchuras del pozo diferentes en la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ (Figura (a)) y $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ (Figura (b)).

doble resonancia a un campo magnético dado. En el caso de un pozo de barreras infinitas, existe una expresión analítica para este valor de d :

$$d_c(B) = \left(\frac{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2} \left(\frac{1}{m_{x_i}} - \frac{1}{m_{x_j}} \right) \nu^2}{\hbar \omega_{LO} - \mu_B B (g_i^* - g_j^*) m_{s_e} - \hbar e B \left(\frac{1}{m_{xy_i}} - \frac{1}{m_{xy_j}} \right) \left(N + \frac{1}{2} \right)} \right)^{1/2} \quad (6.21)$$

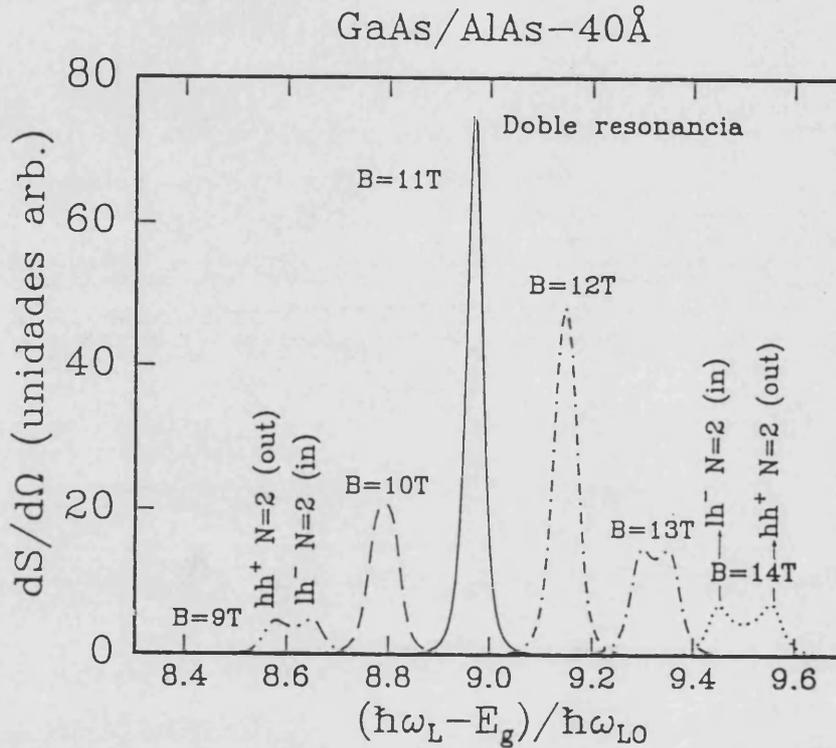


Figura 6.7: Eficiencia de dispersión Raman en la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ en las proximidades de una doble resonancia.

En la Figura 6.7 se representa la eficiencia de dispersión Raman en la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ en las proximidades de una doble resonancia ($B \approx B_N = 11$ T). Si el campo magnético es menor que B_N , la resonancia de entrada con la banda de huecos ligeros (lh^-) tiene lugar después que la resonancia de salida con el hueco pesado (hh^+). En cambio, para $B > B_N$ la diferencia de energía entre los dos niveles es menor que la energía de un fonón, por lo que la resonancia de salida con el hueco pesado aparece después que la resonancia de entrada con el hueco ligero. Este comportamiento es debido a que ambas bandas tienen una masa efectiva diferente en el plano xy , lo que se refleja

en una pendiente diferente de los niveles de Landau en función del campo magnético. En la Figura 6.8(a) se representa la energía de las transiciones ópticas en un pozo cuántico de GaAs/AlAs de 40 Å que intervienen en la doble resonancia mostrada en la Figura 6.7. Las líneas continuas corresponden a transiciones de la primera banda de huecos pesados a la banda de conducción ($hh^+ \rightarrow e$, línea continua), para estados con número cuántico de Landau desde 0 hasta 3. Las transiciones asociadas a la primera subbanda de huecos ligeros ($lh^- \rightarrow e$, línea discontinua) aparecen alrededor de 1790 meV a campo cero. Estas energías determinan la posición de las resonancias de entrada en el espectro Raman de la Figura 6.7. Con una línea discontinua con puntos se ha superpuesto la energía de las transiciones $hh^+ \rightarrow e$ más la energía de un fonón LO ($hh^+ + 1LO$), que indica la posición de las resonancias de salida. La doble resonancia se produce cuando las resonancias de entrada lh concuerdan con las de salida hh . Los puntos de corte se señalan en la figura con un círculo. A campos magnéticos bajos, la separación en energía de los estados hh y lh del mismo nivel de Landau es mayor que la energía de un fonón. Sin embargo, la energía de la banda de huecos ligeros aumenta más lentamente con el campo que la de huecos pesados, por lo que las bandas tienden a juntarse hasta igualar su diferencia a la de un fonón, produciéndose la doble resonancia. En la configuración de polarización complementaria (Figura 6.8(b)) el valor del factor g contrarresta en cierta medida la diferente masa efectiva entre las dos bandas, y los estados hh y lh discurren prácticamente paralelos en función del campo. La condición de doble resonancia se alcanza en esta configuración a un valor mayor del campo.

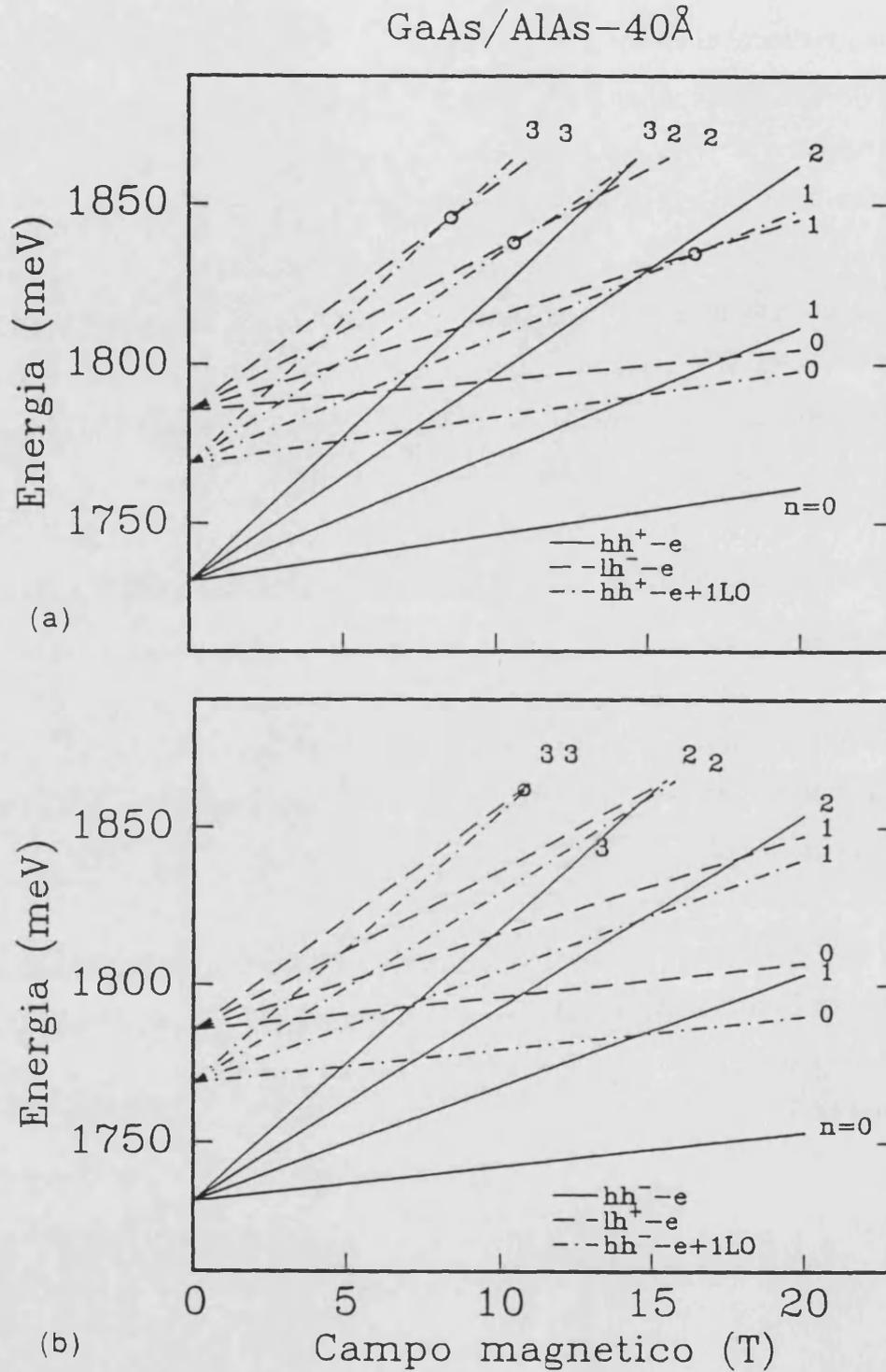


Figura 6.8: Energía de las transiciones ópticas que intervienen en el proceso doblemente resonante de la Figura 6.7. (a) configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$, (b) configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$.

6.1.2 Interacción vía Fröhlich

Para determinar el elemento de matriz de la interacción electrón-fonón vía Fröhlich, partiremos de la expresión (3.67) y utilizaremos la constante de acoplamiento (3.80) apropiada para los modos confinados en un pozo cuántico:

$$S_{\lambda,i}^{\lambda',j} = \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} \langle \lambda', j | \Phi_{\vec{q}}(z_e) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_e} \delta_{v,v'} - \Phi_{\vec{q}}(z_h) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_h} \delta_{c,c'} | \lambda, i \rangle \quad , \quad (6.22)$$

donde $\vec{\rho} = (x, y)$ y q_z está cuantizado ($q_z = \pi p/d$). La expresión del potencial $\Phi_{\vec{q}}$ viene dada por las Ecuaciones (3.83) y (3.84) para los modos pares e impares. Utilizando las funciones (6.2) obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle \lambda', j | H_{EP} | \lambda, j \rangle = & \left(\delta_{N_h, N'_h} \delta_{k_{yh}, k'_{yh}} \delta_{k'_{ye}, k_{ye} - q_y} \delta_{\nu_h, \nu'_h} e^{i\lambda^2 q_x (k_{ye} - \frac{q_y}{2})} \times \right. \\ & \times K_{N_e, N'_e}(\lambda q_y, -\lambda q_x) F_{\nu_e, \nu'_e}(\vec{q}) - \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{ye}, k'_{ye}} \delta_{k'_{yh}, k_{yh}} \delta_{\nu_e, \nu'_e} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{yh} - \frac{q_y}{2})} \times \\ & \left. \times K_{N_h, N'_h}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) F_{\nu_h, \nu'_h}(\vec{q}) \right) \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} \quad . \end{aligned} \quad (6.23)$$

La función $F_{\nu_i, \nu'_i}(\vec{q})$ es la integral de solapamiento de las funciones del pozo de la banda de valencia ($i = lh, hh$) o de conducción ($i = e$) moduladas por el potencial $\Phi_{\vec{q}}$:

$$F_{\nu_i, \nu'_i}(\vec{q}) = \int \varphi_{\nu_i}^* \Phi_{\vec{q}}(z) \varphi_{\nu'_i} dz \quad . \quad (6.24)$$

El resultado de la integral se recoge en el Apéndice C.

La paridad de la función $\Phi_{\vec{q}}$ depende del modo confinado que consideremos. Para modos pares ($p = 2, 4, 6 \dots$) es par y para modos impares ($p = 1, 3, 5 \dots$) impar. Por lo tanto, la integral F_{ν_i, ν'_i} será distinta de cero para funciones del pozo de la misma paridad si el modo es par y de paridad diferente si el modo es impar. Es necesario destacar una característica importante de la interacción Fröhlich en pozos cuánticos. Dado que la componente q_z del momento del fonón está cuantizada y toma siempre un valor no nulo, la interacción es permitida en la aproximación dipolar ($q_x = q_y = 0$), a diferencia de lo que ocurría en materiales másicos. Sin embargo, la interacción sigue siendo intrabanda, aunque ahora puede tener lugar entre subbandas diferentes del pozo cuántico.

En la Figura 6.9 se representa el valor de F_{ν_i, ν_i} en función de la anchura del pozo para estados de la banda de conducción, huecos pesados y huecos ligeros. Se ha considerado

el primer fonón confinado par ($p = 2$) con $q_x = q_y = 0$. La contribución a la eficiencia Raman es máxima para estados de la banda hh , y aumenta al aumentar la anchura del pozo. Su valor absoluto disminuye drásticamente cuando consideramos dos estados de subbandas diferentes (1 y 3 en la figura).

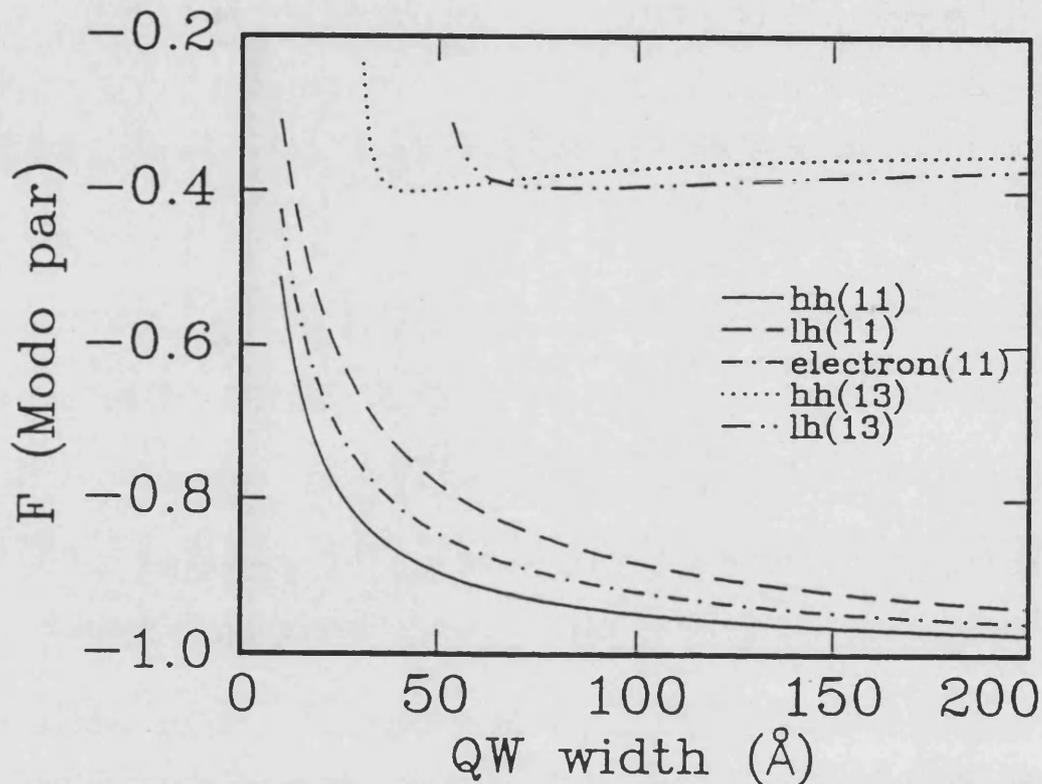


Figura 6.9: Integral F_{ν_i, ν'_i} en función de la anchura del pozo para estados de la banda de conducción, huecos pesados y huecos ligeros con $\nu = 1, 3$, $m = 2$ y $q_x = q_y = 0$.

Este resultado, junto con los elementos de matriz de la interacción electrón-fotón, nos permiten obtener la amplitud de probabilidad del proceso Raman. Realizando explícitamente la suma en k_y y haciendo la aproximación dipolar obtenemos:

$$\begin{aligned}
 W_{FI} = & \sum_i K_{LS}^F(i) \sum_{\substack{\nu_e, \nu_i \\ N}} G_{\nu_e, \nu_i} G_{\nu'_e, \nu'_i}^* \times \\
 & \times \frac{\delta_{\nu_i, \nu'_i} F_{\nu_e, \nu'_e} - \delta_{\nu_e, \nu'_e} F_{\nu_i, \nu'_i}}{(E_{\nu_i} + E_{\nu_e} + \hbar\bar{\omega}_{c_i}(N + \frac{1}{2} - \beta_{L_i})) (E_{\nu'_i} + E_{\nu'_e} + \hbar\bar{\omega}_{c_i}(N + \frac{1}{2} - \beta_{S_i}))}
 \end{aligned} \tag{6.25}$$

donde i recorre las bandas de valencia y la constante $K_{LS}^F(i)$ se define como:

$$K_{LS}^F(i) = \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} \frac{\langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle \langle v_i | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle}{m_0 \eta_S \eta_L \sqrt{\hbar \omega_S \hbar \omega_L}} 4R_y a_B \mu_B \frac{B}{d} \quad (6.26)$$

La dependencia de la amplitud de probabilidad con el campo ($W_{FI} \propto B$) se mantiene, pero su variación con la anchura del pozo desaparece, ya que la dependencia $\propto 1/d$ se cancela con el valor del fonón confinado $q_z \propto 1/d$.

Consideremos, como en la sección anterior, un pozo cuántico crecido en la dirección (001) de un cristal cúbico en la configuración de Faraday ($\vec{B} \parallel -\vec{\kappa}_L \parallel +\hat{z}$), y estudiemos las reglas de selección del proceso en la geometría de retrodispersión. Los cambios introducidos en la amplitud de probabilidad por el confinamiento en la dirección z vienen dados por las integrales de solapamiento G_{ν_e, ν_i} y $F_{\nu_i, \nu_j'}$, cuyas expresiones se encuentran en el Apéndice C. Los demás índices están sometidos a las mismas reglas de selección que en los materiales másicos:

$$\begin{aligned} \Delta j &= 0 \\ \Delta m_s &= 0 \\ \Delta N &= 0 \\ \Delta m_j &= 0 \end{aligned} \quad (6.27)$$

es decir, la interacción conserva el nivel de Landau, el spin y el momento angular, así como su tercera componente, por lo que el proceso de dispersión es intrabanda. Por otra parte, para que el producto

$$G_{\nu_e, \nu_i} G_{\nu_e', \nu_i'} F_{\nu_j, \nu_j'} \delta_{\nu_j, \nu_j'} \quad , \quad j = e, lh, hh$$

sea distinto de cero, todas las funciones del pozo implicadas en la transición deben tener la misma paridad. Como consecuencia, la integral $F_{\nu_j, \nu_j'}$ se realiza siempre entre funciones de la misma paridad y su contribución será distinta de cero para modos pares del fonón confinado. Por lo tanto, en la interacción Fröhlich sólo se excitan modos confinados pares. Para estudiar la intensidad relativa de las distintas resonancias, es necesario tener en cuenta que en el numerador de (6.25) aparece una diferencia de dos contribuciones: la integral de solapamiento de las funciones de la banda de conducción menos las de la banda de valencia. Esta diferencia puede dar como resultado una resonancia muy débil si ambas

contribuciones son semejantes. En la Figura 6.10 hemos representado la diferencia entre los elementos de matriz de los estados de la banda de valencia respecto a los de la banda de conducción. La mayor contribución corresponde a transiciones entre las subbandas 1 y 3, puesto que su diferencia respecto al elemento de matriz del electrón es mayor y sus valores no se cancelan. Además, la intensidad final de la resonancia correspondiente disminuye debido a la integral de solapamiento G_{ν_e, ν_h} , que toma un valor pequeño si la transición se realiza entre subbandas diferentes.

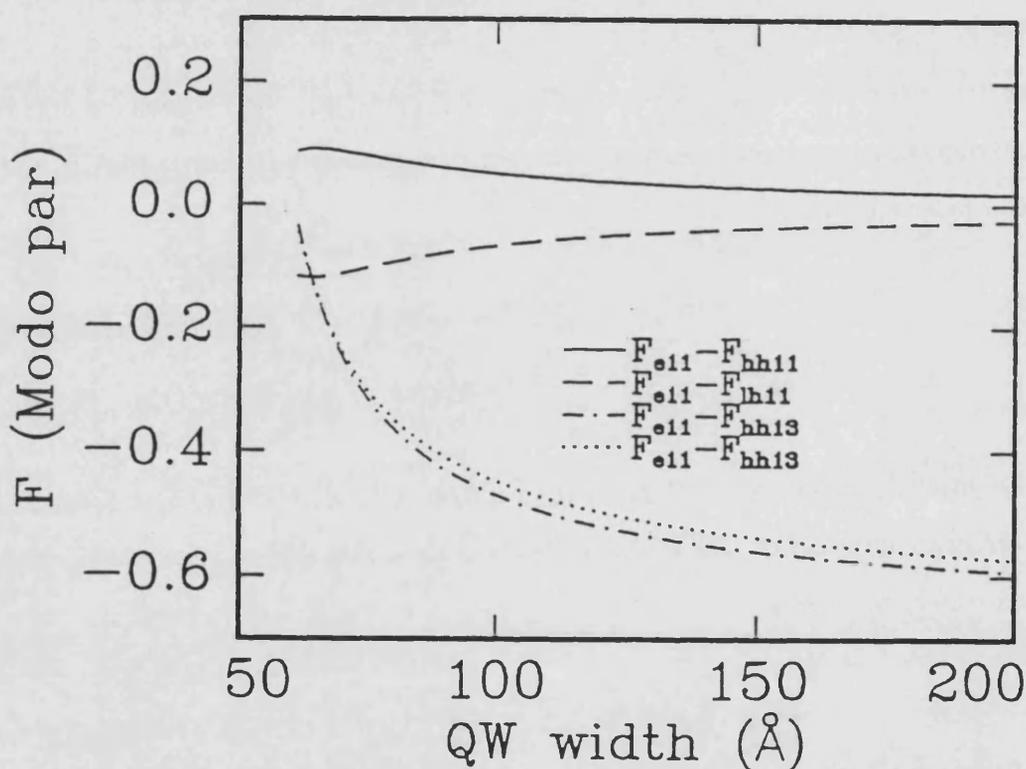


Figura 6.10: Diferencia $F_{\nu_i, \nu_i} - F_{\nu_e, \nu_e}$ para $i = hh, lh$ y el primer fonón par confinado en función de la anchura del pozo. Se han utilizado los elementos de matriz de la Figura 6.9

Para calcular la eficiencia de dispersión del proceso, es necesario sumar la contribución de todos los estados vibracionales finales que no pueden resolverse experimentalmente. La suma queda restringida a los fonones confinados con $\omega_j^2 > 0$ y la expresión resultante viene

dada por:

$$\frac{dS}{d\Omega} = \sum_{p \text{ par}} \frac{1}{p^2 \omega_q} \left| \sum_i S_{LS}^F(i) \sum_{\substack{\nu_e, \nu_i \\ N}} G_{\nu_e, \nu_i}(\vec{e}_L) G_{\nu_e', \nu_i'}^*(\vec{e}_S) \times \right. \\ \left. \times \frac{\delta_{\nu_i, \nu_i'} F_{\nu_e, \nu_e'} - \delta_{\nu_e, \nu_e'} F_{\nu_i, \nu_i'}}{(E_{\nu_i} + E_{\nu_e} + \hbar \bar{\omega}_{c_i} (N + \frac{1}{2} - \beta_{L_i})) (E_{\nu_i'} + E_{\nu_e'} + \hbar \bar{\omega}_{c_i} (N + \frac{1}{2} - \beta_{S_i}))} \right|^2 \quad (6.28)$$

donde se ha tenido en cuenta que $q_z = \pi p/d$ y la suma en p se extiende a todos los modos confinados pares. S_{LS}^F toma el valor:

$$S_{LS}^F(i) = \frac{C_F^*}{m_0 \pi^2 c^2 \hbar^2} \frac{\omega_S}{\omega_L} \sqrt{\frac{\eta_S}{\eta_L}} \langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v_i \rangle \langle v_i | \vec{e}_S^* \cdot \vec{p} | c \rangle 4R_y a_B \mu_B B \quad (6.29)$$

En pozos cuánticos estrechos ($d \leq 50 \text{ \AA}$), los distintos modos confinados pueden resolverse con claridad. Debido a la dispersión de los fonones en el semiconductor, a cada uno le corresponderá una frecuencia propia bien definida. En ese caso, la eficiencia de dispersión debe calcularse para un modo del fonón determinado (p fijo). Pero si el pozo es lo suficientemente ancho, de forma que la separación entre modos sea inferior a la anchura de sus respectivas resonancias, puede realizarse la aproximación no dispersiva, tomando $\omega_q = \omega_{LO}$ y sumando las contribuciones provenientes de los distintos modos para obtener la contribución total al valor de $dS/d\Omega$.

El hecho de que la interacción Fröhlich sea permitida entre subbandas del pozo diferentes, abre paso a la posibilidad de obtener un proceso Raman doblemente resonante. Para que las condiciones de doble resonancia se satisfagan, el pozo cuántico debe ser lo suficientemente ancho como para que la diferencia de energía entre la primera y la tercera subbanda coincida con la energía de un fonón. Esta condición se cumplirá con mayor facilidad para las subbandas hh , puesto que su mayor masa efectiva hace que se encuentren más próximas unas de otras.

En la Figura 6.11 se representó la eficiencia de dispersión en función de la energía de la radiación incidente para pozos cuánticos de 135, 145 y 150 \AA de anchura, manteniendo el valor del campo magnético constante a 8 T. Se ha considerado la configuración de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$. Debido a las reglas de selección del proceso Raman vía Fröhlich, el acoplamiento se produce entre estados de la misma banda de valencia o de conducción,

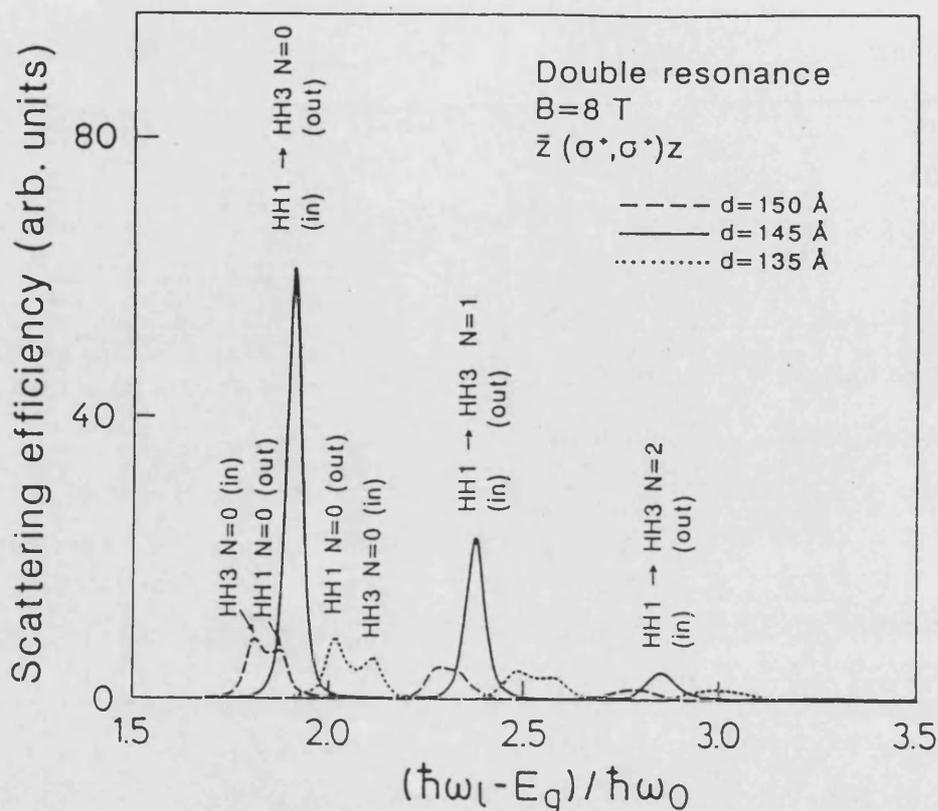


Figura 6.11: Eficiencia de dispersión calculada en la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ en las proximidades de una doble resonancia en función de la energía de la radiación incidente. El campo magnético se ha mantenido constante a un valor de 8T.

con conservación de la paridad. Las resonancias del espectro corresponden por tanto a transiciones intrabanda. En la muestra de 145 Å la diferencia de energía entre el primer y tercer nivel del pozo de la banda de huecos pesados coincide aproximadamente con la energía de un fonón. En estas condiciones, se obtiene una doble resonancia para la transición $hh3 \rightarrow hh1$, que a un campo de 8 T aparece a una energía del láser $E_g + 1.94\hbar\omega_{LO}$. En el modelo parabólico que acabamos de desarrollar, los niveles de Landau dependen linealmente del campo magnético. Puesto que a estados de la misma banda les corresponde la misma masa efectiva, tendrán la misma pendiente en función del campo, de forma que la condición de doble resonancia se cumple simultáneamente para los distintos niveles de Landau, independientemente del valor del campo magnético. En la Figura 6.11 pueden observarse picos doblemente resonantes correspondientes a los niveles de Landau $N = 0, 1$ y 2 (señalados como (in) (out), puesto que las resonancias

de entrada y salida ocurren a la misma energía). La diferencia en la intensidad de los picos es debida a la dependencia de la anchura de línea con el nivel de Landau, que se ha tomado cuadrática (Ecuación (6.18)). Si consideramos un pozo cuántico con una anchura ligeramente diferente, la separación entre los estados $hh1$ y $hh3$ cambia y la condición de doble resonancia se pierde. En la figura se observa cómo se separan las resonancias de entrada y de salida en las muestras de 135 y 150 Å. La energía de la radiación incidente a la que se obtienen dobles resonancias varía linealmente con el campo magnético aplicado y viene dada por:

$$\hbar\omega_L = E_g + E_{\nu_e} + E_{\nu_{hh}} + \frac{\hbar e B}{\mu_{xyhh}} \left(N + \frac{1}{2}\right) + \mu_B (g_e^* + g_h^*) m_{s_e} B \quad , \quad (6.30)$$

donde, en nuestro caso, $\nu_e = \nu_{hh} = 3$.

6.2 Modelo no parabólico

Para comparar los resultados teóricos con estructuras semiconductoras reales es necesario tener en cuenta la complejidad de sus bandas de energía. En esta sección generalizaremos los resultados del modelo parabólico representado las bandas de valencia mediante el Hamiltoniano de Luttinger.

En un pozo cuántico, la interacción entre las bandas no sólo mezcla los distintos niveles de Landau, sino también las distintas subbandas del pozo, tal y como vimos en el Capítulo 2. La función de onda es ahora una combinación lineal de las funciones Φ_{N,k_y,ν,m_s} (Ecuación (6.2)). Representando las funciones Bloch en la base de momento angular $3/2$ se tiene:

$$\begin{aligned} \Phi_{n,k_y}^{\alpha,b} &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \cdot \left(\phi_{3/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-3} v_{3/2} + \phi_{1/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-2} v_{1/2} \right. \\ &\quad \left. + \phi_{-1/2}^{\alpha,b,n}(z) u_{n-1} v_{-1/2} + \phi_{-3/2}^{\alpha,b,n}(z) u_n v_{-3/2} \right) \quad (6.31) \\ &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} \phi_m^{\alpha,b,n} u_{n-(m+3/2)} v_m \quad , \end{aligned}$$

donde se ha utilizado una notación similar a la desarrollada en el Capítulo 5 (Ecuación (5.33)). Denotaremos la energía correspondiente a este estado como $E_{\alpha,b,n}$. Las funciones

$\phi_i^{\alpha,b,n}$ son combinaciones lineales de las funciones del pozo para la banda de huecos pesados ($m = \pm 3/2$) y la de huecos ligeros ($m = \pm 1/2$):

$$\phi_m^{\alpha,b,n}(z) = \sum_{\nu_m} C_{\nu_m}^{\alpha,b,n} \varphi_{\nu_m}(z), \text{ con } m = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}. \quad (6.32)$$

El índice $b = 1, 2$ indica el bloque al que pertenecen según la paridad de las funciones $\phi_m^{\alpha,b,n}$ (Capítulo 2), que se obtiene mediante la relación:

$$\pi_{b,m} = (-1)^{b+m+\frac{3}{2}}, \quad (6.33)$$

donde m es la tercera componente del momento angular.

Los estados de la banda de conducción vendrán dados por:

$$\Phi_{n,k_{ye},m}^c = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_{ye}y} \varphi_{\nu_e}(z) u_{n-(m+3/2)} c_m = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_{ye}y} \varphi_{\nu_e} u_N c_m, \quad (6.34)$$

con $m = \pm 1/2$, $c_m = |1/2, m_j\rangle$ y $N = n - m - 3/2$. A cada uno de estos estados le corresponde la energía $E_{N,\nu_e,m}$ y la paridad de la función φ_{ν_e} se obtiene mediante la relación $\pi_{\nu_e} = (-1)^{\nu_e+1}$.

Con estos estados, el elemento de matriz de la interacción electrón-fotón para procesos de absorción y emisión viene dado por:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H_{ER}^- | 0 \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \delta_{k_{yh}, k_{ye} - \kappa_{yL}} \times \\ &\times \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} \delta_{N_e, n_h - (m+3/2)} \langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v_m \rangle \int \varphi_{\nu_e}^* \phi_m^{\alpha,b,n} dz, \end{aligned} \quad (6.35)$$

y

$$\begin{aligned} \langle 0 | H_{ER}^+ | \beta \rangle &= \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_S^2 \omega_S V}} \delta_{k'_{ye}, k'_{yh} + \kappa_S} \times \\ &\times \sum_{m=\pm 3/2, \pm 1/2} \delta_{N'_e, n'_h - (m+3/2)} \langle v'_m | \vec{e}_S^* \cdot \hat{p} | c' \rangle \int \varphi_{\nu'_e} \phi_m^{*\alpha',b',n'} dz. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Para que la integral de solapamiento de las funciones del pozo del electrón y el hueco sea distinta de cero, su paridad debe coincidir, por lo que ν_e debe tener la misma paridad que $b + m + 3/2$.

A continuación estudiaremos por separado la interacción electrón-fotón vía potencial de deformación y vía Fröhlich.

6.2.1 Interacción vía potencial de deformación.

Teniendo en cuenta las funciones de onda (6.32) y (6.34) y la definición de la constante de acoplamiento de la interacción vía potencial de deformación, obtenemos el elemento de matriz:

$$\begin{aligned} \langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, i \rangle &= -\frac{u_0 \sqrt{3}}{2a_0} \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{ye}, k_{y'e}} \delta_{k_{yh}, k_{y'h} - q_y} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{yh} - \frac{q_y}{2})} \times \\ &\times \sum_{m, m' = \pm 3/2}^{\pm 1/2} D_{\nu_{m'}}^{v_m} K_{N_m, N'_m}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \int \phi_m^{*\alpha, b, n_h} u_z \phi_{m'}^{\alpha', b', n'_h} dz, \end{aligned} \quad (6.37)$$

para un proceso con emisión de un fonón. Con el fin de abreviar la expresión final del elemento de matriz se han utilizado las definiciones $N_m = n_h - (m + 3/2)$ y $N'_m = n'_h - (m' + 3/2)$.

Para obtener la expresión final de la amplitud de probabilidad del proceso, podemos realizar la suma en k_y y tener en cuenta la configuración de retrodispersión, sustituyendo $K_{n, m}$ por $\delta_{n, m}$. Para simplificar el resultado definiremos las funciones:

$$\begin{aligned} G_{\alpha, b, N}^{m, \nu_e}(\vec{e}_L) &= \sum_{m = \pm 1/2 \pm 3/2} \langle c | \vec{e}_L \cdot \hat{p} | v_m \rangle \delta_{N, n - (m + 3/2)} \int \varphi_{\nu_e}^* \phi_m^{\alpha, b, n} dz, \\ G_{\alpha', b', N}^{*n', \nu_e}(\vec{e}_S) &= \sum_{m = \pm 1/2 \pm 3/2} \langle v_m | \vec{e}_S^* \cdot \hat{p} | c \rangle \delta_{N, n' - (m + 3/2)} \int \varphi_{\nu_e} \phi_m^{*\alpha', b', n'} dz, \\ F_{\alpha', b', \alpha, b}^{n', n} &= \sum_{m, m' = \pm 1/2}^{\pm 3/2} D_{\nu_{m'}}^{v_m} \delta_{n - m, n' - m'} \int \phi_m^{*\alpha, b, n} u_z \phi_{m'}^{\alpha', b', n'} dz. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Con estas definiciones se obtiene la siguiente expresión para la amplitud de probabilidad:

$$W_{FI} = K_{LS}^{DP} \cdot \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ n, n'}} \sum_{\substack{N, m_s \\ b, b'}} \sum_{\nu_e} \frac{G_{\alpha, b, N}^{m, \nu_e}(\vec{e}_L) \cdot F_{\alpha', b', \alpha, b}^{n', n} \cdot G_{\alpha', b', N}^{*n', \nu_e}(\vec{e}_S)}{(\hbar\omega_L - E_{N, \nu_e, m_s}^{\alpha, b, n} + i\Gamma_\alpha)(\hbar\omega_S - E_{N, \nu_e, m_s}^{\alpha', b', n'} + i\Gamma_{\alpha'})} \quad (6.39)$$

La constante K_{LS}^{DP} viene dada en este caso por:

$$K_{LS}^{DP} = \frac{2}{\eta_S \eta_L} \frac{1}{(\hbar\omega_L \hbar\omega_S)^{1/2}} \frac{u_0 \sqrt{3}}{m_0 a_0} R_y a_B \frac{\mu_B B}{d} \quad (6.40)$$

La energía $E_{N,\nu_e,m_s}^{\alpha,b,n}$ es la energía del par electrón-hueco:

$$E_{N,\nu_e,m_s}^{\alpha,b,n} = E_g + E_{\alpha,b,n} + E_{\nu_e} + \hbar\omega_{c_e}(N + \frac{1}{2}) + \mu_B g_e^* m_s B \quad . \quad (6.41)$$

A pesar de la mezcla entre bandas, las reglas de selección del proceso de dispersión se mantienen en cierta medida. Como en el modelo parabólico, las transiciones son posibles únicamente en la configuración cruzada, es decir, $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$, mientras que las configuraciones paralelas están prohibidas. La primera configuración acopla estados con $\Delta n = 2$ y la segunda aquellos con $\Delta n = -2$, de forma que en cada interacción se conserve el nivel de Landau de la componente involucrada: $\Delta N = 0$. Debido a la mezcla entre las bandas de valencia, el número cuántico de Landau de la banda de conducción puede diferir de n en 0,1,2 ó 3 unidades. En el modelo parabólico obtuvimos una regla de selección adicional, basada en la conservación de la paridad de los estados del pozo cuántico. Ahora esta regla de selección se relaja, y su importancia depende de la mezcla de las distintas subbandas a un campo magnético dado. Atendiendo a la simetría de los estados es posible obtener una condición similar, aunque menos restrictiva. Para que la interacción electrón-fotón tenga lugar, las funciones $G_{\alpha,b,N}^{n,\nu_e}$ deben ser distintas de cero, por lo que la paridad del estado φ_{ν_e} debe coincidir con la del estado $\phi_m^{\alpha,b,n}$ para la componente de momento angular m que interviene en la transición, es decir, $(-1)^{\nu_e} = (-1)^{b+m+\frac{3}{2}}$. Ahora bien, debido a las reglas de selección del potencial de deformación, la tercera componente del momento angular cambia en dos unidades durante la transición, es decir, $\Delta m = \pm 2$ para $\bar{z}(\sigma^\mp, \sigma^\pm)z$. El electrón permanece siempre en el mismo estado, por lo que las componentes inicial y final del estado de la banda de valencia implicadas en la transición deben tener la misma paridad. De aquí se deduce que $\Delta b = 0$. Para cada configuración de polarización la transición tiene lugar entre estados de la banda de valencia pertenecientes al mismo bloque b .

Al considerar el acoplamiento entre las bandas, la clasificación de los estados de la banda de valencia en cuanto a su carácter de hueco pesado o ligero deja de tener sentido. Esta clasificación solamente tiene validez en la región de campo magnético bajo ($B \rightarrow 0$), donde la mezcla entre bandas es lo suficientemente pequeña como para identificar el carácter de cada estado. Nos referiremos por tanto a los estados a campo magnético arbi-

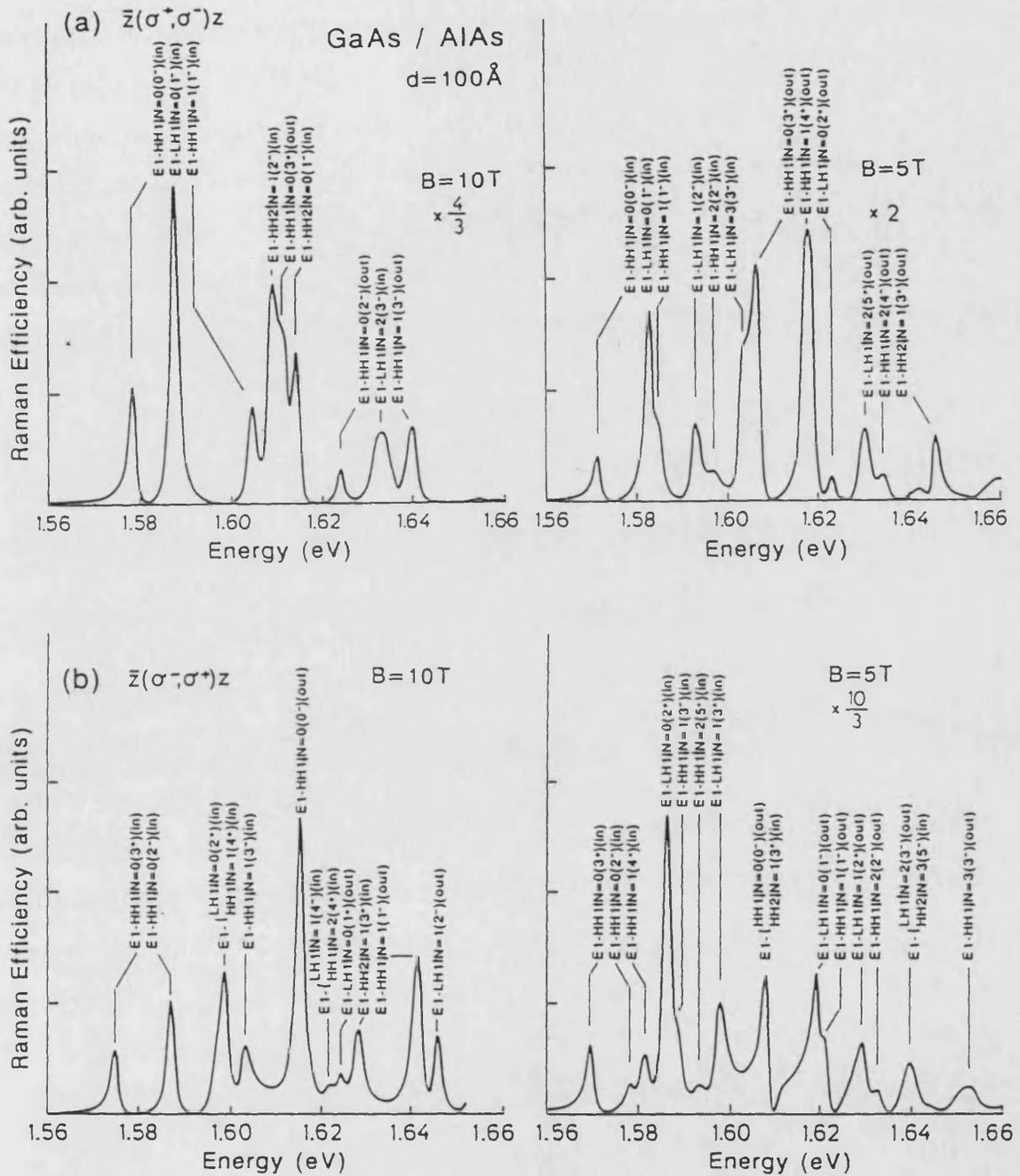


Figura 6.12: Eficiencia de dispersión Raman en función de la energía de la radiación incidente para una muestra de GaAs/AlAs con $d = 100 \text{ \AA}$ en distintas configuraciones de polarización (a) $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^-)z$ y (b) $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^+)z$ con un campo magnético aplicado de 5 y 10 T. Las flechas señalan las distintas transiciones electrón-hueco.

trario según su carácter a campo magnético bajo, indicando la banda (hh , lh) y la subbanda del pozo ($\nu = 1, 2, 3 \dots$) correspondiente. A cada estado se le asocia entre paréntesis el número cuántico orbital de Landau, n , que corresponde al nivel de Landau de su componente hh^- . Para clasificar las resonancias de un espectro Raman sin ambigüedad es necesario incluir más información sobre los estados. Indicaremos con una flecha el spin del estado de la banda de conducción y el nivel de Landau N correspondiente, añadiendo sobre el número cuántico orbital n un superíndice $+$ ó $-$ para indicar el signo de la tercera componente del momento angular involucrada en la transición. Finalmente indicaremos entre paréntesis la naturaleza de entrada o de salida de la resonancia como (in) o (out) respectivamente. En la Figura 6.12 aparecen cuatro espectros en función de la energía de la radiación incidente calculados para una muestra de GaAs/AlAs de 100 Å. Se han considerado las configuraciones de polarización cruzada y los picos se han clasificado según la notación que acabamos de explicar. El factor próximo a las curvas indica que el espectro ha sido multiplicado por ese valor para mayor claridad. En comparación con los espectros obtenidos mediante la aproximación parabólica, se observa un claro aumento del número de resonancias permitidas. Esto es debido a la relajación de las reglas de selección por causa de la mezcla entre bandas. Cada cada banda puede intervenir ahora en dos transiciones diferentes para cada configuración de polarización. Los efectos de no parabolicidad se observan asimismo comparando los espectros correspondientes a distinta configuración de polarización. Su diferencia no consiste ya en un simple corrimiento de las resonancias debido a la cuantización del spin, sino que no hay una correspondencia clara entre las resonancias de ambos espectros, apareciendo incluso nuevos picos.

6.2.2 Interacción vía Fröhlich

Con las funciones de onda (6.32) y (6.34) para estados de la banda de valencia y conducción y teniendo en cuenta la constante de acoplamiento de la interacción Fröhlich

para un pozo cuántico, obtenemos el siguiente elemento de matriz:

$$\begin{aligned}
\langle \lambda', j | H_{EP}^+ | \lambda, j \rangle = & \left(\delta_{n_h, n'_h} \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{b, b'} \delta_{k_{y_h}, k_{y'_h}} \delta_{k'_{y_e}, k_{y_e} - q_y} e^{i\lambda^2 q_x (k_{y_e} - \frac{q_y}{2})} \right. \\
& \times K_{N_e, N'_e}(\lambda q_y, -\lambda q_x) \int \varphi_{\nu_e}^* \Phi_{\vec{q}} \varphi_{\nu'_e} dz \\
& - \delta_{N_e, N'_e} \delta_{k_{y_e}, k_{y'_e}} \delta_{k'_{y_h}, k_{y_h} - q_y} e^{-i\lambda^2 q_x (k_{y_h} - \frac{q_y}{2})} \times \\
& \times \sum_{\substack{m=\pm 3/2 \\ \pm 1/2}} C_m^* \alpha, n_h C_m^{\alpha', n'_h} K_{N_m, N'_m}(-\lambda q_y, -\lambda q_x) \int \phi_m^* \alpha, b, n_h u_z \phi_m^{\alpha', b', n'_h} dz \Big) \times \\
& \times \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} ,
\end{aligned} \tag{6.42}$$

correspondiente a un proceso con emisión de un fonón. Se han utilizado las abreviaturas $N_m = n_n - (m + 3/2)$ y $N'_m = n'_n - (m + 3/2)$, de forma análoga a como se hizo para el elemento de matriz de la interacción vía potencial de deformación.

Esta expresión se simplifica en la configuración de retrodispersión, en la que $q_x = q_y = 0$, lo que nos permite sustituir $K_{n,m}$ por $\delta_{n,m}$. Expresaremos el resultado utilizando la función $G_{\alpha, b, N}^{n, \nu_e}$ definida en la Ecuación (6.38) y sustituiremos la función F por una definición adecuada a la interacción Fröhlich:

$$F_{\alpha', b', \alpha, b}^{n, n}(\vec{q}) = \sum_{m=\pm 1/2, \pm 3/2} \int \phi_m^* \alpha, b, n \Phi_{\vec{q}} \phi_m^{\alpha', b', n} dz . \tag{6.43}$$

Con estas definiciones es posible obtener una expresión compacta para la amplitud de probabilidad:

$$\begin{aligned}
W_{FI} = K_{LS}^F \cdot \sum_{\substack{N, n \\ m_s}} \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ \nu_e, \nu'_e}} \sum_{b, b'} G_{\alpha, b, N}^n(\vec{e}_L) G_{\alpha', b', N}^{*, n}(\vec{e}_S) \times \\
\times \frac{\delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{b, b'} F_{\nu'_e, \nu_e} - \delta_{\nu_e, \nu'_e} F_{\alpha', b', \alpha, b}^{n, n}}{(\hbar\omega_L - E_{N, \nu_e, m_s}^{\alpha, b, n} + i\Gamma_\alpha)(\hbar\omega_S - E_{N, \nu'_e, m_s}^{\alpha', b', n} + i\Gamma_{\alpha'})}
\end{aligned} \tag{6.44}$$

donde la constante K_{LS}^F se define como:

$$K_{LS}^F = \frac{C_F^*}{q\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_q}} \frac{4R_y a_B \mu_B}{m_0 \sqrt{\hbar\omega_S \hbar\omega_L}} \frac{B}{d} \tag{6.45}$$

Las transiciones mediadas por la interacción Fröhlich son posibles en las polarizaciones $\bar{z}(\sigma^\pm, \sigma^\pm)z$ y están prohibidas en la configuración cruzada. Durante el proceso de

dispersión se conservan tanto el número cuántico orbital de Landau del estado, n como el número de Landau de las componentes implicadas N :

$$\Delta n = \Delta N = 0 \quad .$$

Por otra parte, el acoplamiento se produce únicamente entre estados de la banda de valencia pertenecientes al mismo bloque b , de forma que la paridad de las funciones del pozo se conserve durante la interacción. Debido al confinamiento de los fonones en el pozo cuántico, la integral de solapamiento F entre las funciones del pozo de la banda de valencia está modulada por la función $\Phi_{\vec{q}}$. Esto permite acoplar subbandas con α y α' diferentes. Estas transiciones serán mucho más intensas que en los semiconductores másicos, puesto que ahora no están prohibidas en la aproximación dipolar. La posibilidad de transición intersubbanda favorece la aparición de dobles resonancias en el espectro de magneto-Raman.

En la Figura 6.13 aparece la eficiencia Raman en función de la energía de la radiación incidente para $B = 0$ y una muestra de GaAs/AlAs de 100 Å. Se ha considerado únicamente la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$, puesto que a campo cero los estados con distinto spin están degenerados. Las distintas resonancias se han clasificado utilizando la misma notación desarrollada en la sección anterior para la interacción vía potencial de deformación. De forma similar a lo que ocurría en materiales másicos, en la figura se observa que las resonancias con subbandas tipo lh tienen una intensidad mucho menor que aquellas en las que intervienen subbandas hh . Sin embargo, ambos tipos de resonancia son ahora lo suficientemente intensas como para ser observadas. La disminución en la eficiencia de dispersión de las resonancias lh es debida de nuevo a la menor intensidad de sus transiciones ópticas (Tabla 3.1, lo que provoca una diferencia de un factor 9 entre las resonancias lh y hh). Su intensidad queda también determinada por la contribución a la eficiencia de dispersión F (Ecuación (6.43)) que aparecen en el numerador de la Ecuación (6.44). Debido a la mezcla entre estados, es difícil determinar hasta que punto se cancelan las contribuciones de la banda de conducción y la de valencia. En cualquier caso, como vimos en la Figura 6.10, la función F toma un valor similar para estados lh y hh . Por lo tanto, a diferencia de lo que ocurría en materiales másicos, la similitud entre las masas

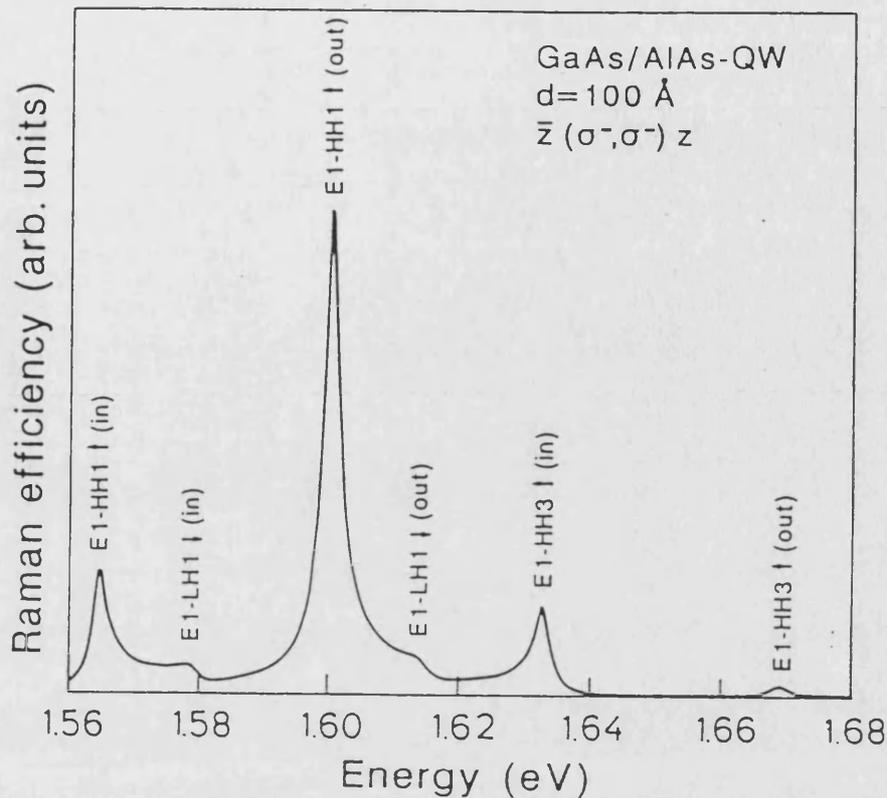


Figura 6.13: Eficiencia de dispersión Raman en función de la energía de la radiación incidente calculada de acuerdo con la ecuación (6.44) para una muestra de GaAs/AlAs de 100 Å. Se ha tomado $B = 0$ y la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$ de polarización.

efectivas del electrón y del hueco ligero no introduce un factor de cancelación adicional, lo que permite la observación de las resonancias lh en el espectro de magneto-Raman.

En la Figura 6.13 se observa también que la resonancia de salida $e1 \rightarrow hh1$ es significativamente más intensa que la resonancia de entrada correspondiente. Esto es debido a que se encuentra próxima a la configuración de doble resonancia: cuando la luz dispersada resuena con la transición electrónica $e1 \rightarrow hh1$, la energía de la radiación incidente es del orden de la energía de la transición $e1 \rightarrow hh3$, y su contribución a la eficiencia de dispersión es mucho mayor. Una situación similar explica la intensidad de la resonancia de entrada $e1 \rightarrow hh3$ respecto a la de salida. La transición $e1 \rightarrow hh2$ está prohibida por paridad.

En la Figura 6.14 se representa la eficiencia Raman en función de la energía del láser para un campo magnético de 10 T. En la Figura 6.14(a) aparece la configuración de polari-

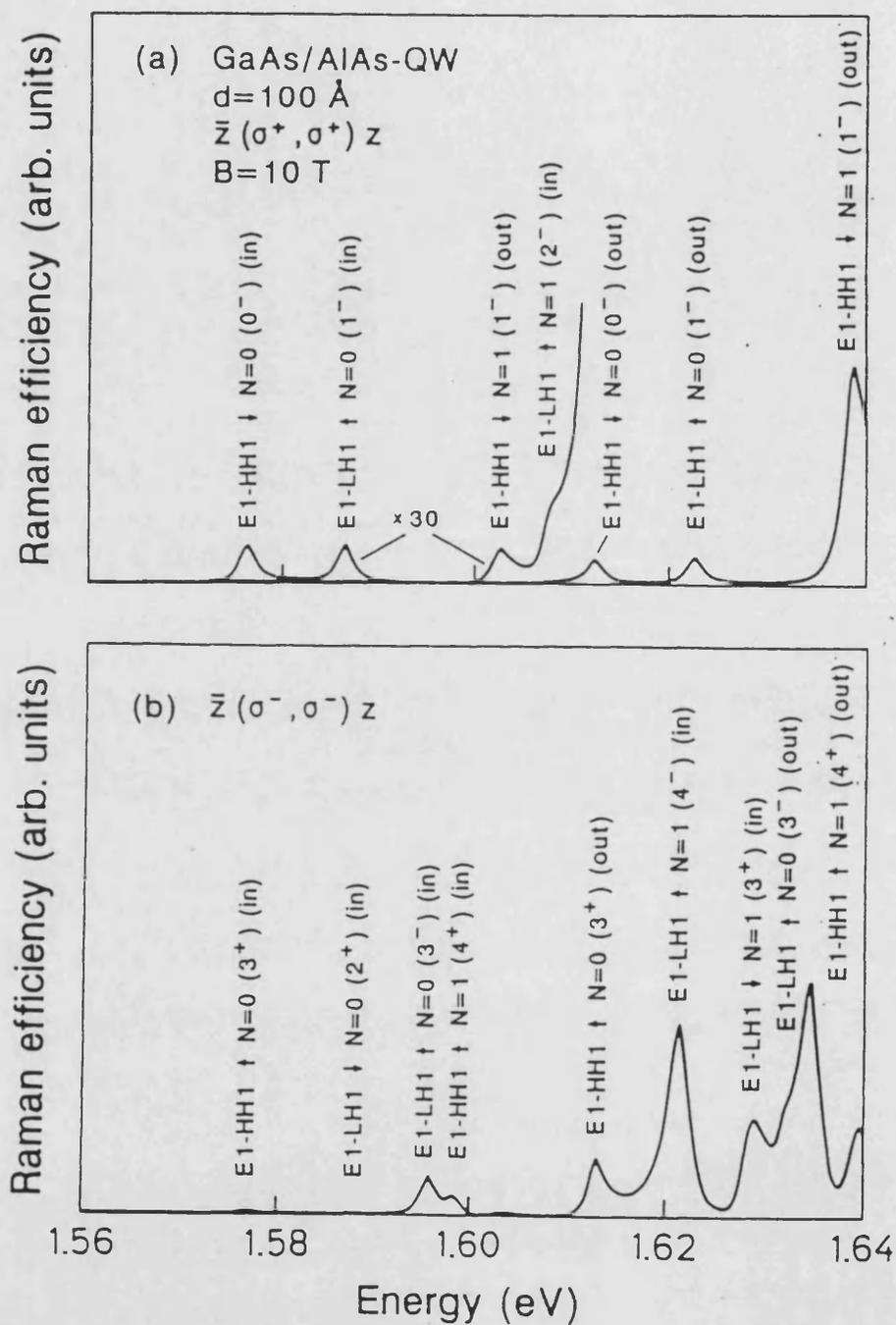


Figura 6.14: Eficiencia de dispersión Raman calculada para una muestra de GaAs/AlAs de 100 Å en las dos configuraciones de retrodispersión con luz circularmente polarizada permitidas en la interacción Fröhlich. El campo magnético se ha mantenido constante a 10 T. (a) $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y (b) $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$.

zación $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y en la 6.14(b) la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$. En la región de energías representada aparecen tanto resonancias de entrada como de salida. Las resonancias de salida son más intensas que las de entrada debido, como en el caso $B = 0$, a una disminución en el valor de los denominadores de la Ecuación (6.44). Las componentes ligera y pesada de los distintos estados favorecen la aparición de resonancias nuevas en comparación con el resultado obtenido en el modelo parabólico, lo que enriquece la información contenida en el espectro. Un ejemplo de este tipo de transiciones aparece en la Figura 6.14(b) señalada como $e1 \rightarrow lh1 \uparrow N = 0$ (3^-) (in) y (out), transición en la que no interviene la componente ligera del estado, sino su componente hh^+ con spin hacia arriba. La mezcla entre bandas permite que algunas transiciones asociadas a bandas que hemos clasificado como ligeras (a campo 0), presenten una resonancia de intensidad similar o incluso mayor a la de las bandas hh . A pesar de esta posibilidad, las reglas de selección del proceso limitan notablemente el número de transiciones posibles.

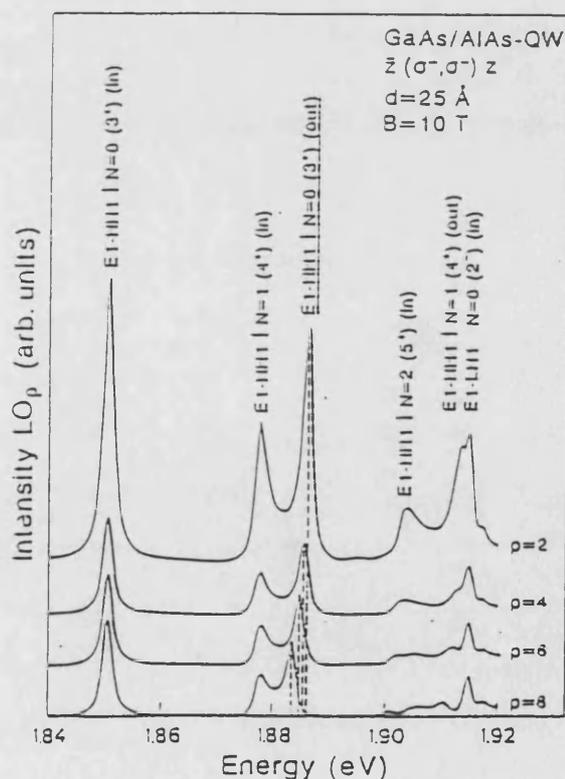


Figura 6.15: Eficiencia Raman para cuatro modos del fonón diferentes: $p = 2, 4, 6$ y 8 . La línea a trazos representa el corrimiento de las resonancias de salida debido a la dispersión de fonón.

En la Figura 6.15 se representa la eficiencia de dispersión en función de la energía de la radiación incidente para una muestra de GaAs/AlAs de 25 Å. En una muestra con un pozo tan estrecho, es posible resolver con claridad en el espectro Raman la posición de los distintos modos confinados. El espectro se ha calculado para los primeros cuatro modos pares ($p = 2, 4, 6, 8$). El pequeño corrimiento de los picos al pasar de un espectro a otro es debido a la dispersión de los modos del fonón. Como puede verse, sólo se excitan fonones pares. Esto es debido al hecho de que, en el modelo desarrollado, se han descrito los estados de un semiconductor con la estructura del sulfuro de cinc mediante el Hamiltoniano característico de materiales con la estructura del diamante. Esto supone despreciar los términos lineales, impares bajo inversión, que caracterizan los materiales con la estructura de la cinc-blenda. De esta forma los autoestados del Hamiltoniano tienen paridad definida en el contexto de la aproximación de la función envolvente, y los modos impares están prohibidos.

6.3 Corrección excitónica a la energía

Hasta ahora hemos descrito los estados excitados del cristal como pares electrón hueco sin correlacionar, cuya función de onda se obtiene como producto de las funciones de cada una de las partículas que componen el par, mientras que su energía es la suma del electrón y el hueco. Es bien sabido que a través de la interacción de Coulomb, el par electrón hueco puede formar un estado ligado, el excitón. En un sistema estrictamente bidimensional, la energía de ligadura del estado fundamental del excitón es cuatro veces mayor que la correspondiente a materiales másicos,⁷⁰ y por tanto, es de esperar que los efectos excitónicos tengan cierta importancia en la determinación de los estados electrónicos de un pozo cuántico. El problema general del movimiento de un excitón en un campo magnético lo abordaremos en el Capítulo 8, en donde veremos la necesidad de tener en cuenta los efectos excitónicos para explicar un experimento concreto. En este punto consideraremos suficiente aplicar la expresión deducida por Akimoto y Hasegawa⁷¹ para la energía de

ligadura del excitón en el límite de campos magnéticos elevados.

$$E_{exc} \approx -3D \left(\frac{\hbar e B}{4\mu_{xy} R_y^* (N + \frac{1}{2})} \right)^{1/2} R_y^* , \quad (6.46)$$

donde $R_y^* = \mu_{xy} R_y / \epsilon^2$ es el Rydberg efectivo del excitón. La constante D se introduce para tener en cuenta que el sistema considerado no es estrictamente bidimensional, sino que el excitón está parcialmente confinado a lo largo de la dirección de crecimiento. D toma valores comprendidos entre 1/4, para un sistema bidimensional, y 1 si el sistema es tridimensional. La corrección es válida para campos magnéticos superiores a 5 T en los semiconductores más usuales. En la Figura 6.16 se representa la energía de las transiciones

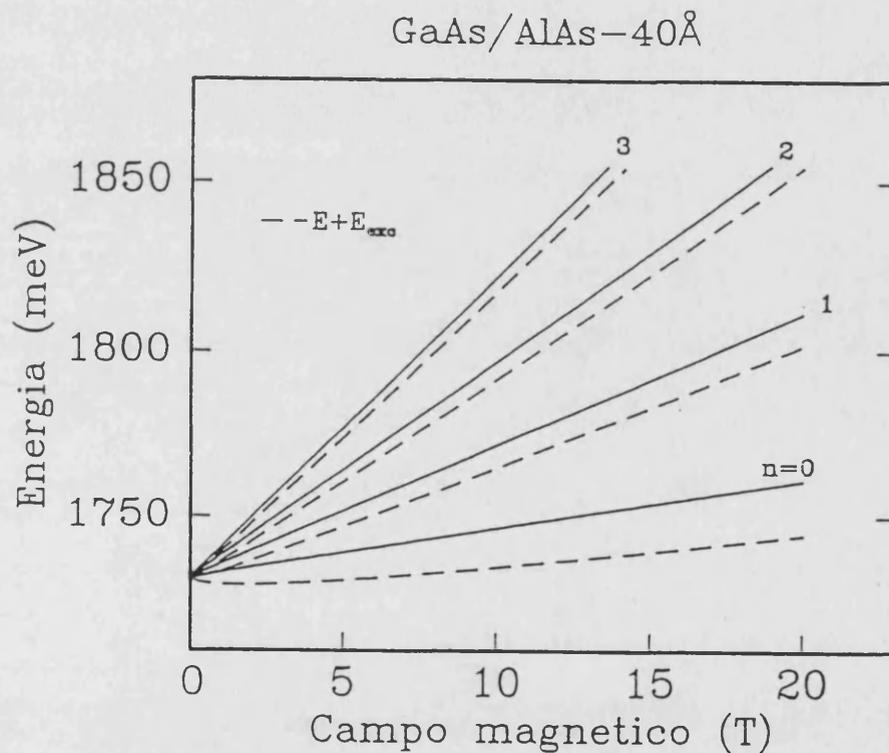


Figura 6.16: Energía de las transiciones electrónicas de la subbanda $hh1$ en función del campo magnético. En trazo discontinuo aparece el resultado de aplicar la corrección excitónica E_{exc} a los primeros cuatro niveles de Landau, tomando $D = 0.6$.

electrónicas de una muestra de GaAs/AlAs de 40 \AA en función del campo magnético. En trazo discontinuo aparece el resultado de aplicar la corrección excitónica de la Ecuación (6.46) tomando $D = 0.6$. Para mayor claridad se han dibujado únicamente los primeros

cuatro niveles de Landau de la subbanda $hh1$. La influencia del excitón sobre los niveles de energía disminuye rápidamente al aumentar el número cuántico de Landau.

Capítulo 7

Resultados Experimentales

A lo largo de este capítulo se estudiarán con detalle los espectros de magneto-Raman correspondientes a dos muestras consistentes en pozos cuánticos múltiples de GaAs/AlAs.

7.1 Descripción de las muestras

La primera muestra, a la que nos referiremos como muestra A, consta de 80 períodos, cada uno consistente en 44 Å de GaAs y 44 Å de AlAs. La segunda o muestra B está formada por 100 períodos con pozo y barrera de 99 Å cada uno. Ambas fueron crecidas mediante la técnica de epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de GaAs sin dopar, orientados en la dirección (001). Mediante este método es posible obtener muestras muy puras y de gran movilidad, controlando la anchura de las interfases con precisión de una monocapa, requisito necesario para observar los efectos cuánticos debidos al confinamiento de los electrones, característicos de los pozos cuánticos. Por otra parte, los sistemas de GaAs/AlAs presentan la ventaja de que la similaridad de su parámetro de red garantiza la calidad cristalina del sistema, que crece sin tensionar.

Debido a las características particulares de su estructura de bandas, tanto los electrones como los huecos quedan confinados en el GaAs. Un parámetro determinante en el cálculo de la estructura de bandas del pozo cuántico es la forma en que la diferencia de energía de la banda prohibida de uno y otro material se reparte entre las bandas de

conducción y de valencia (band offset). A pesar de su importancia, no existe todavía consenso en el valor de este parámetro, que en pozos de GaAs/AlAs se encuentra entre el 65 y el 70%^{96,40} de la discontinuidad para la banda de conducción. La disposición de las bandas se representa esquemáticamente en la Figura 7.1.

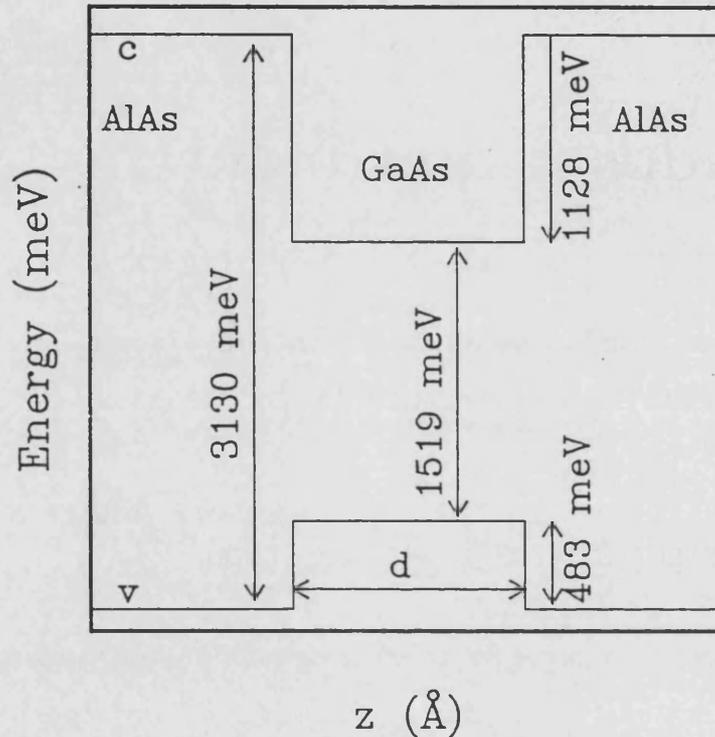


Figura 7.1: Representación esquemática de la discontinuidad de las bandas de valencia y conducción en una muestra de GaAs/AlAs, con los datos más característicos.

7.2 Descripción del sistema experimental

Sobre las muestras A y B se han llevado a cabo medidas de magneto-Raman utilizando la geometría de Faraday, con el campo magnético paralelo a la dirección de crecimiento. Las medidas se tomaron en configuración de retrodispersión, con la luz dispersada en el sentido del campo. Las muestras se mantuvieron a una temperatura de unos 10 K en un criostato óptico de flujo constante de Helio líquido, situado en el interior de la bobina de un imán superconductor. Como fuente de luz monocromática se utilizó un láser de

Titanio-Zafiro bombeado de forma continua por un láser de argon (Ar^+).

La luz dispersada por la muestra se analizó utilizando un monocromador doble (Spex 1404) a modo de filtro espectral, y la posición del espectrómetro se fijó a la frecuencia del primer modo del fonón LO del GaAs observado en cada muestra (corrimiento Stokes de unos 294 cm^{-1}). La anchura de la línea detectada puede controlarse mediante las rendijas de entrada y de salida del espectrómetro. Una vez fijada la energía de la radiación incidente, se midió la intensidad de la radiación dispersada en función del campo magnético, variando su intensidad de forma continua desde 0 a 14 T.

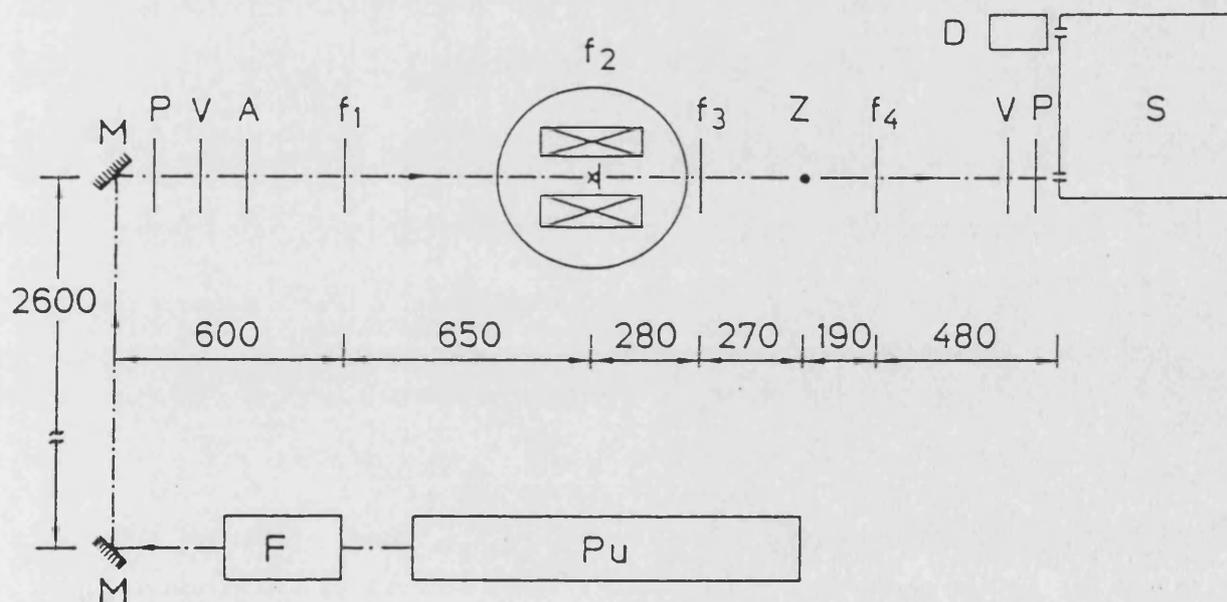


Figura 7.2: Montaje experimental para la medida de la eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético. Pu representa el láser de Argon y F el de Titanio-Zafiro. M = espejo; P = polarizador, girador de polarización; V = lámina de $\lambda/4$; A = filtro atenuador; Z = imagen intermedia real de la muestra; S = espectrómetro; D = detector.

En la Figura 7.2 se muestra un esquema del montaje experimental. El láser se encuentra montado sobre una mesa a una cierta distancia del imán con el fin de protegerlo de la acción del campo magnético. La luz emitida por el láser de Titanio-Zafiro, polarizada

linealmente según el eje horizontal, se lleva mediante dos espejos sobre un banco óptico y se hace pasar a través de un polarizador circular (P,V). A continuación se sitúa un filtro neutro (A) para atenuar convenientemente la intensidad de la luz que incide sobre la muestra, que se focaliza sobre ésta mediante la lente f_1 . La muestra se encuentra en el interior del imán (señalada con una x en el esquema). La luz dispersada por la muestra se recoge con un espejo f_2 , creando un haz paralelo. Mediante la lente f_3 se forma una imagen intermedia que es llevada finalmente a la ventana de entrada del espectrómetro mediante la lente f_4 . Antes de entrar en el monocromador, un segundo polarizador permite seleccio-

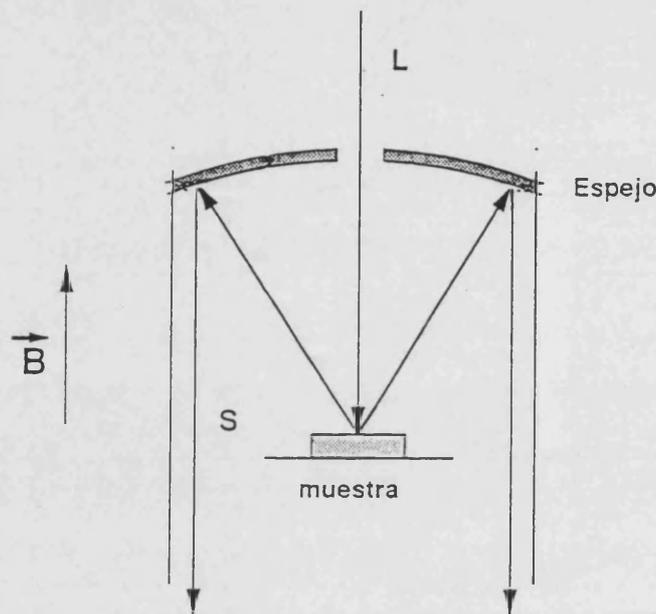


Figura 7.3: Detalle del montaje de la muestra en el interior del imán. La luz atraviesa el agujero perforado en el espejo f_2 e incide sobre la muestra con incidencia normal. La radiación dispersada se recoge mediante el espejo formando un haz paralelo que se dirige al monocromador. (configuración de retrodispersión).

nar la luz circularmente polarizada. En la Figura 7.3 se representa con detalle el montaje de la muestra en el interior del imán. La luz del láser atraviesa el agujero perforado en el espejo f_4 e incide sobre la muestra con incidencia normal. La radiación dispersada se recoge mediante el espejo, formando un haz paralelo que se dirige hacia el monocromador. De esta forma se consigue la configuración de retrodispersión con un alto grado de aproximación, puesto que, a pesar de que se recoge luz dispersada que forma un pequeño

ángulo (de unos 35°), el cristal presenta un índice de refracción alto, por lo que el ángulo de la luz en su interior es mucho menor.

Para que la utilización de luz polarizada no conduzca a error, la polarización de la luz se referirá a un eje fijo, el que va del espectrómetro al imán (eje z), cuyo sentido coincide con el del campo magnético aplicado. La luz polarizada a derechas a lo largo de este eje se denotará como σ^+ , mientras que σ^- denota luz polarizada a la izquierda.

7.3 Energía de las resonancias en función del campo magnético

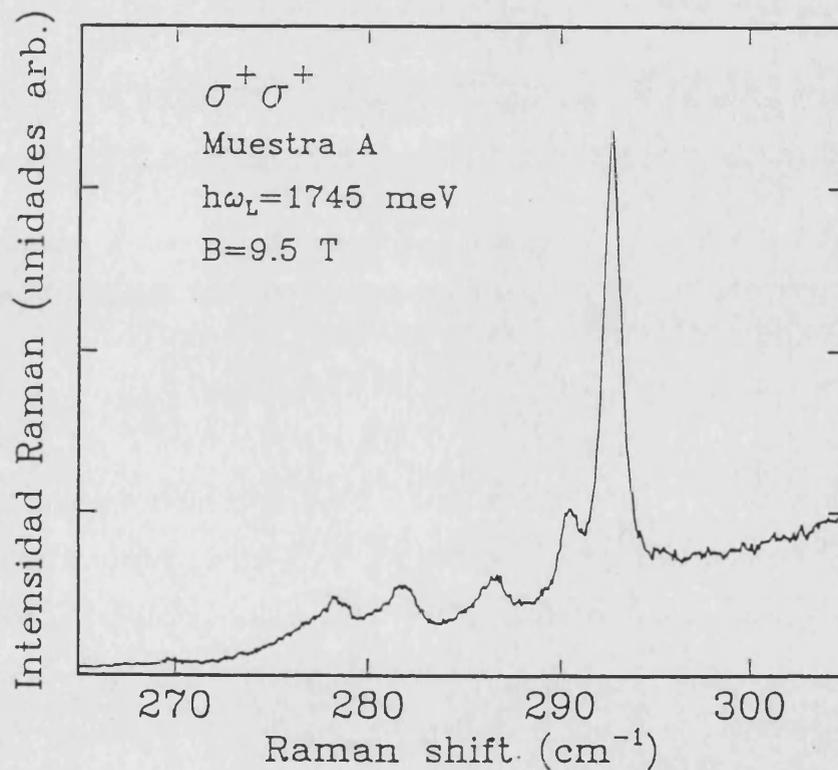


Figura 7.4: Intensidad Raman en función del corrimiento Raman para la muestra A en la configuración de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$. La posición de los distintos fonones confinados pares se observa de forma bien diferenciada.

Antes de comenzar las medidas de magneto-Raman propiamente dichas, es necesario determinar con precisión la frecuencia de los fonones del sistema, con el fin de situar

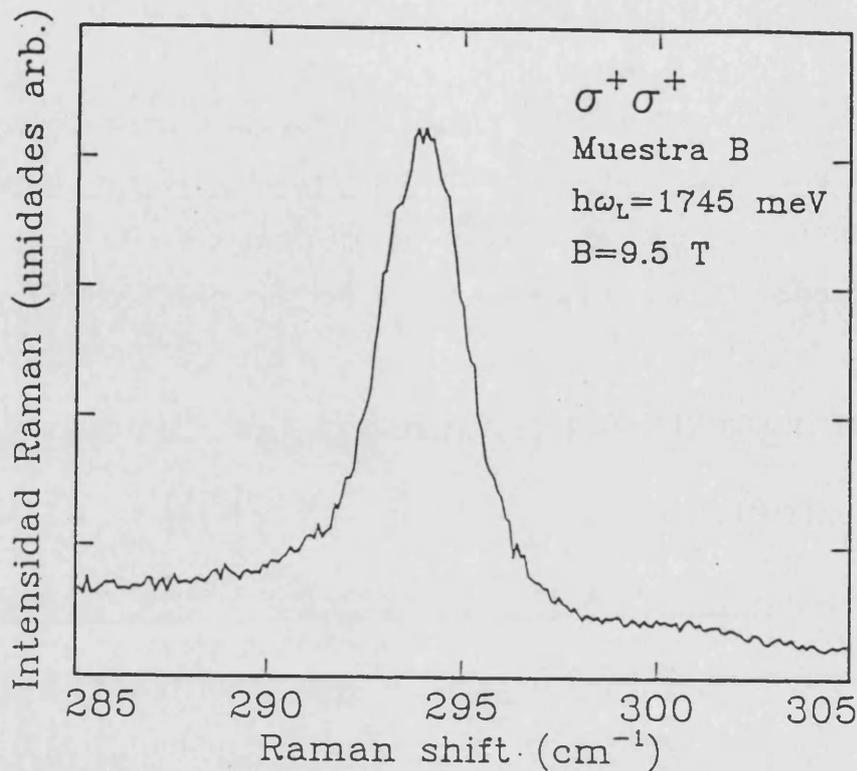


Figura 7.5: Intensidad Raman en función del corrimiento Raman para la muestra B en la configuración de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$. No es posible resolver con claridad la posición de los distintos fonones confinados.

el monocromador en la posición adecuada. En las Figuras 7.4 y 7.5 se representa la intensidad Raman en función del corrimiento Stokes de la línea de emisión respecto a la energía del láser (Raman shift) para las muestras A y B en la configuración de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$. En la muestra más estrecha (muestra A) se observa de forma bien diferenciada la posición de cada uno de los modos confinados pares, como corresponde a las reglas de selección del proceso en la configuración de polarización paralela. Por lo tanto, en las medidas de magneto-Raman analizaremos únicamente los cambios en la intensidad de la línea de emisión correspondiente al primer fonón observado. En cambio, en la muestra B no es posible resolver los distintos modos, por lo que será necesario considerar la contribución conjunta de todos ellos a la eficiencia Raman. Una vez localizada la posición del fonón, estamos en condiciones de realizar espectros de magneto-Raman y analizar las resonancias observadas en función del campo magnético. Las Figuras 7.6 y

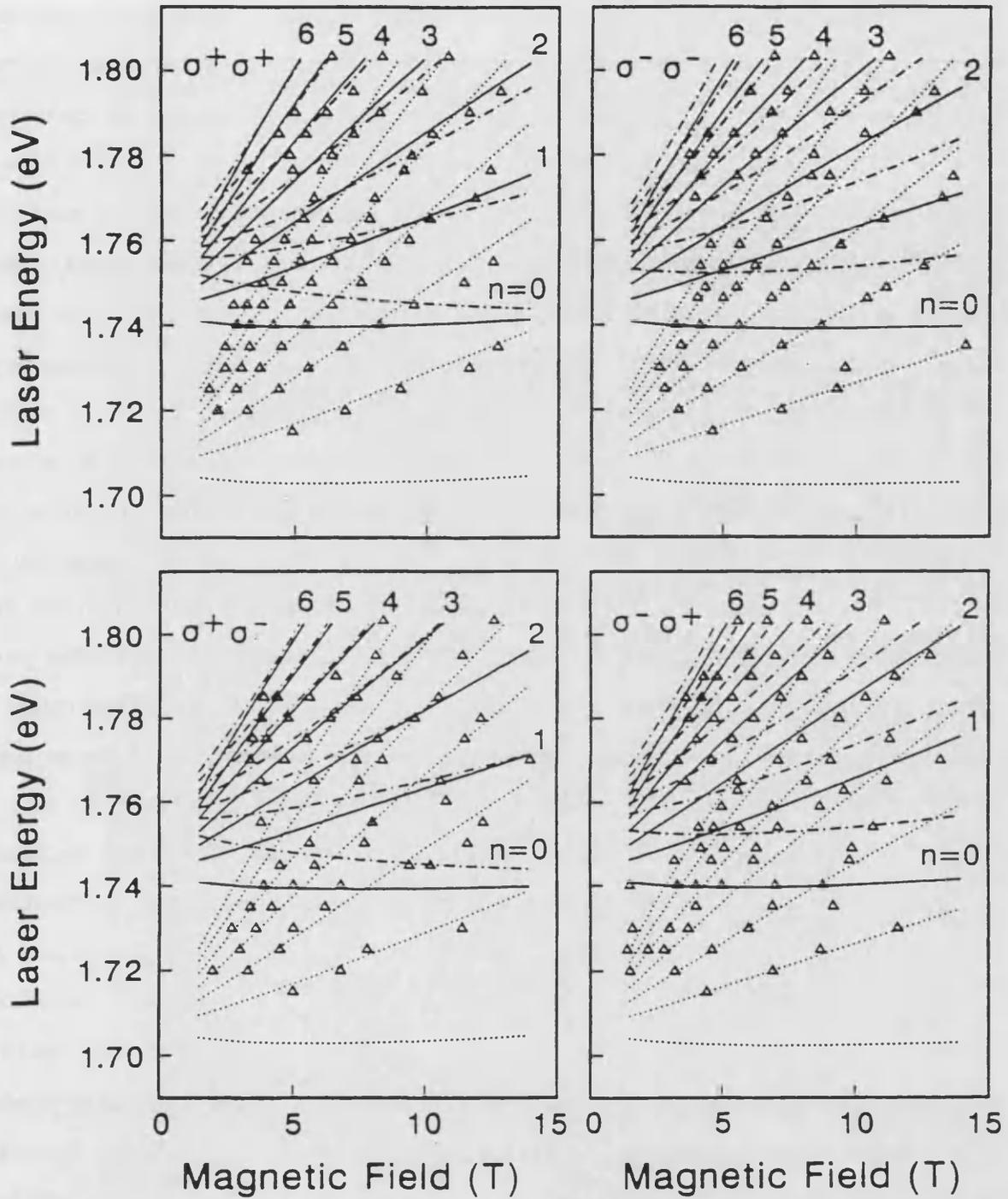


Figura 7.6: Energía de las resonancias de magneto-Raman en función del campo magnético aplicado. Los datos se corresponden con la muestra A (GaAs/AlAs-44 Å) para las cuatro configuraciones de polarización estudiadas. Los triángulos indican la posición de las resonancias experimentales y las líneas representan la energía de las transiciones obtenidas como resultado del cálculo teórico.

7.7 representan la energía del láser a la que aparecen las resonancias en función del campo magnético para los dos pozos cuánticos múltiples estudiados. Los triángulos indican la posición de las resonancias observadas experimentalmente. En el eje y se representa la energía de la radiación incidente a la que aparecen las resonancias y en el eje x el campo magnético correspondiente. Para la muestra A, los resultados se presentan para cuatro configuraciones de polarización $\bar{z}(\sigma^{\pm}, \sigma^{\pm})z$ y $\bar{z}(\sigma^{\pm}, \sigma^{\mp})z$, mientras que la muestra B aparecen únicamente la configuración paralela de polarización. Las curvas teóricas han sido calculadas utilizando el Hamiltoniano de Luttinger 4×4 para la banda de valencia y un modelo parabólico para la banda de conducción, según se ha explicado en los capítulos precedentes. Con el fin de ajustar los datos experimentales, se ha realizado la corrección excitónica desarrollada para sistemas cuasibidimensionales con campos magnéticos intensos (Ecuación (6.46)). Los parámetros utilizados en el cálculo de las curvas aparecen en la Tabla 7.1 y serán analizados más adelante. Concentremos ahora nuestra atención en los diagramas de energía en función del campo (Figuras 7.6, y 7.7). Las resonancias pueden clasificarse en dos grupos relacionadas con transiciones de la banda de conducción a la banda de huecos pesado o ligeros. Por otra parte, cada resonancia puede tener lugar a través del canal de entrada o de salida, es decir, bien la energía de la luz incidente o bien la de la dispersada pueden coincidir con una transición óptica. Para mayor claridad, en las figuras se indica el número cuántico de Landau que interviene en las resonancias de salida que tienen lugar con la banda hh . Las líneas teóricas correspondientes se han dibujado con trazo continuo; las que tienen lugar con la banda lh a través de la vía de salida aparecen con trazo discontinuo. Las resonancias de entrada pueden localizarse restando a estas curvas la energía de un fonón (36.7 meV). Aparecen en la gráfica con trazo punteado para la banda hh y discontinuo con puntos para la banda lh . En el límite $B \rightarrow 0$, las resonancias de entrada convergen a la energía de un punto crítico, mientras que las de salida se encuentran desplazadas un fonón a energías mayores.

Las resonancias del espectro de magneto-Raman que presenta la muestra A (Figura 7.6) corresponden en su mayor parte a resonancias de entrada en las que están implicadas transiciones $e1 \rightarrow hh1$. De todas formas, para energías superiores a 1760 meV es posible

parametros	GaAs	AlAs
E_g	1519 meV	3100 meV
m_{zhh}	0.34 m_0	0.4 m_0
m_{zlh}	0.092 $m_0^{(a)}$	0.194 $m_0^{(a)}$
m_{ze}	0.066 $m_0^{(a)}$	0.133 $m_0^{(a)}$
Δ_0	341 meV	275 meV
$(2m_0/\hbar^2)P^2$	24.8 eV	24.8
γ_1	7.1 ³⁸	3.45
γ_2	2.1 ³⁸	0.68
γ_3	2.9 ³⁸	1.29
g_e^-	-0.44	
κ	1.2	
V_{hh}		474 meV
V_{lh}		474 meV
V_c		1107 meV

^aCálculo $\vec{k} \cdot \vec{p}$. ⁴⁰

Tabla 7.1: Parámetros utilizados en el cálculo de la estructura de bandas y eficiencia de dispersión Raman de las muestras A y B.

observar resonancias relacionadas con transiciones de salida $el \rightarrow hh1$. La primera subbanda lh se encuentra a unos 50 meV de la subbanda $hh1$, una energía considerable, pero comparable con la energía del fonón LO del GaAs. Dado que la masa efectiva en el plano xy es mayor para la banda lh que para la hh , la separación entre los estados con mismo índice de Landau tiende a disminuir a medida que aumentamos el campo. Dependiendo de la configuración de polarización, las resonancias de entrada lh (líneas discontinuas con puntos) y las de salida hh (línea continua) de la Figura 7.6 discurren prácticamente paralelas o incluso pueden llegar a cortarse, aunque siempre bajo un ángulo muy pequeño

y para campos magnéticos por encima de 5 T. Según lo explicado en la Sección 6.1.1, cabría esperar un aumento adicional de la intensidad del espectro Raman relacionado con estas resonancias, debido a que nos encontramos en situación de doble resonancia entre

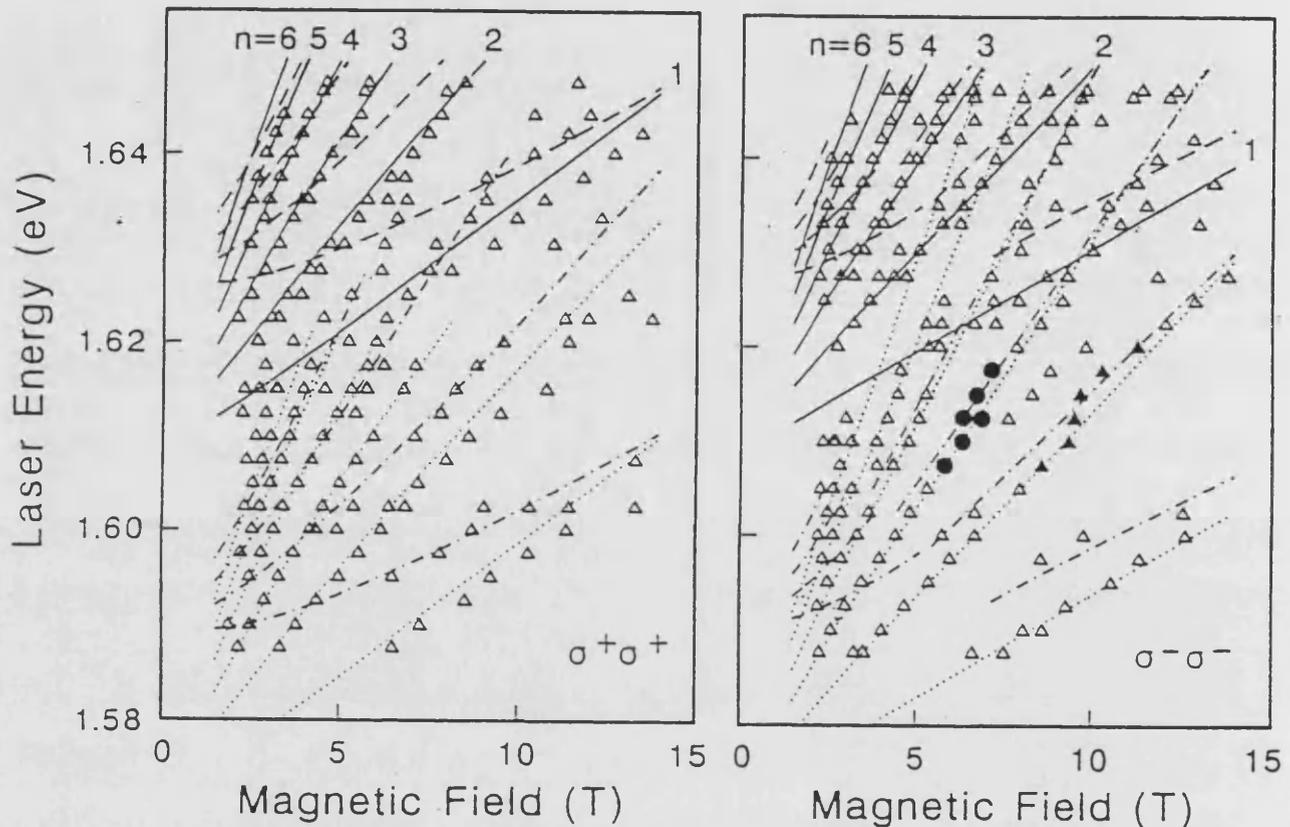


Figura 7.7: Energía de las resonancias de magneto-Raman en función del campo magnético aplicado para la muestra B (GaAs/AlAs-99Å). Los triángulos corresponden a las resonancias experimentales y las líneas muestran el resultado del cálculo teórico.

los estados lh (resonancia de salida) y estados hh (resonancia de entrada). En este caso, sin embargo, esta situación próxima a la doble resonancia favorece especialmente las transiciones relacionadas con la banda hh a lo largo de un rango de energías muy amplio. Este comportamiento se atribuye a que los niveles lh están caracterizados por una anchura de línea significativamente mayor que la de los hh , además del hecho de que las dos líneas discurren prácticamente paralelas a medida que aumentamos el campo. Por esta razón,

las resonancias hh a través de la vía de salida son más intensas que las correspondientes resonancias de entrada para energías de excitación por encima de 1760 meV. Únicamente en casos aislados hemos observado resonancias lh a través del canal de entrada. Otro efecto que apoya el hecho de que las resonancias de salida sean más intensas que las de entrada, es el aumento de la anchura de línea con el índice de Landau.¹⁰³ En la región en la que las resonancias hh (in) y (out) aparecen simultáneamente, los índices de Landau de las resonancias de salida son siempre menores que las de entrada, con una diferencia entre ambas de unas tres unidades. Esta diferencia provoca la supresión de las resonancias de entrada en favor de las de salida.

Como puede verse en la Figura 7.7, la dependencia de la energía de las resonancias con el campo magnético para la muestra B es mucho más compleja que la obtenida para la muestra A. Esto es debido a que las subbandas $hh1$ y $lh1$ se encuentran separadas escasamente 16 meV, una distancia cuatro veces menor que en la muestra A. La proximidad de estas subbandas aumenta considerablemente el carácter no parabólico de la banda de valencia, debido a la fuerte mezcla entre sus componentes lh y hh . Por otra parte, los estados electrónicos de esta muestra presentan una anchura mucho menor, lo que permite observar resonancias de entrada con un índice de Landau al menos de 8. De acuerdo con la discusión desarrollada en la Sección 6.2.2, debido a la diferencia en la fuerza de oscilador de las distintas transiciones interbanda, la intensidad de las resonancias que implican estados lh debe ser unas diez veces menor que las que provienen de estados hh . Es aquí donde la mezcla entre bandas desempeña un papel crucial, puesto que aumenta el número de canales resonantes de forma que es posible observar los estados lh gracias a sus componentes hh . Por otra parte, en la muestra B también se observa una mayor intensidad de las resonancias de salida respecto a las de entrada a la misma energía de la radiación incidente.

Los efectos de la mezcla entre bandas se observan claramente en la configuración $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)$ para la muestra B. Son la causa de resonancias y fenómenos de anticruce entre las bandas de energía observadas que no aparecerían en un modelo parabólico de bandas. Un ejemplo es la resonancia $e \uparrow \rightarrow hh^+ \quad n = 2$, señalada con los triángulos oscuros en la

Figura 7.7. Esta transición sufre un corrimiento abrupto a energías mayores para un valor del campo entre 9 y 10 T, manteniendo su pendiente prácticamente constante. En este comportamiento están implicados dos estados diferentes de la banda de valencia, así como los cambios que se producen en las componentes que intervienen en la transición a medida que aumenta el campo magnético. Las resonancias observadas a campo bajo corresponden a transiciones con la primera banda hh , y está dominada por la componente $|3/2, +3/2\rangle$. La contribución de esta componente al estado hh disminuye a medida que aumenta el campo. La resonancia observada a campo alto converge a la primera subbanda lh para $B \rightarrow 0$, donde domina su componente $|3/2, -1/2\rangle$. Para campos magnéticos mayores, la componente predominante es $|3/2, +3/3\rangle$, por lo que ambas resonancias compiten en intensidad, la primera decreciendo y la segunda aumentando con el campo, hasta que alrededor de 10 T, la segunda domina. Un comportamiento similar se produce en la transición $e \uparrow \rightarrow hh^+ \quad n = 3$ (círculos oscuros) alrededor de 6 T. Para comprender este tipo de discontinuidades es útil analizar la fuerza de oscilador de las transiciones implicadas y la intensidad relativa de los picos en el perfil de magneto-Raman. La fuerza de oscilador de una transición óptica es proporcional a $|G_{\alpha,b,N}^{m,\nu_e}|^2$, donde G es la función definida por la Ecuación (6.38). Su dependencia con el campo magnético aparece en la Figura 7.8 para las transiciones relevantes en el comportamiento de anticruce. En la región de campos magnéticos pequeños, la transición $e \uparrow \rightarrow hh^+ \quad n = 2$ (línea continua) domina, pero su fuerza decrece rápidamente para campos magnéticos mayores, acercándose a la mitad de su valor inicial alrededor de 6 T. Esto es debido al aumento de su componente $|3/2, -1/2\rangle$, que no contribuye a las resonancias en la polarización $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$. Por otra parte, a campos mayores de 5 T aparecen otras dos resonancias prácticamente a la misma energía y de intensidad comparable a ésta. Una de ellas corresponde a la transición $e \uparrow \rightarrow lh^- \quad n = 2$, que acopla con la banda de conducción a través de su componente $|3/2, +3/2\rangle$. La otra es la transición $e \downarrow \rightarrow hh^- \quad n = 3$, que acopla mediante su componente $|3/2, +1/2\rangle$. Ambas están prohibidas a campo cero, pero a campos mayores la aportación de componentes de otras bandas permite su observación. Su fuerza de oscilador en función del campo magnético aparece en la Figura 7.8 con trazo discontinuo, y se hace comparable a la línea

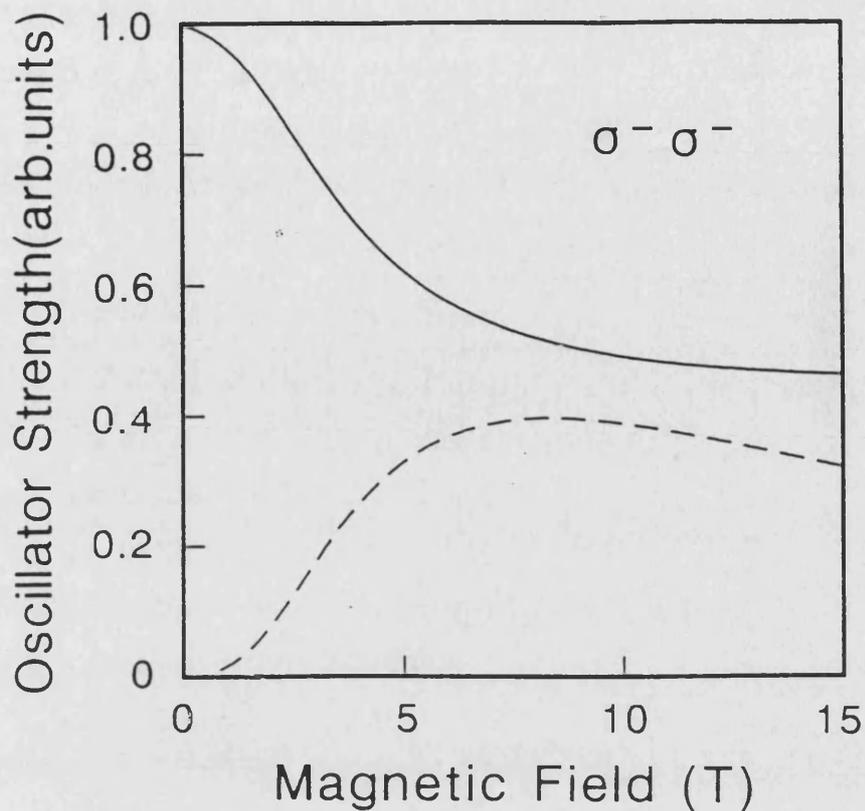


Figura 7.8: Fuerza de oscilador en función del campo magnético para las transiciones $e \uparrow \rightarrow hh^+ \quad n = 3$ (línea continua) y $[e \uparrow \rightarrow lh^- \quad n = 2] + [e \downarrow \rightarrow hh^- \quad n = 3]$ (línea a trazos) de la muestra B. Estas transiciones son responsables de la discontinuidad en la energía marcada con círculos oscuros alrededor de 6 T en la Figura 7.7.

sólida en la región de campos altos en la que se observa la discontinuidad en el diagrama de energías. La intensidad final está también influida por la cancelación parcial de las contribuciones del electrón y el hueco a la eficiencia de dispersión, así como por la diferente anchura de las resonancias.

7.4 Masas efectivas y dispersión de la banda de valencia

El cálculo de las subbandas del QW para las dos muestras estudiadas se ha llevado a cabo mediante el modelo desarrollado en el Capítulo 2, es decir, teniendo en cuenta la no parabolicidad de las bandas lh , so y de conducción. De las medidas realizadas se deduce

que no es posible despreciar el acoplamiento entre estas bandas si se desean reproducir adecuadamente los datos experimentales. Las masas efectivas $m_{x_{ih}}$ y m_{z_e} obtenidas de esta forma aparecen en la Tabla 7.2. Con el fin de ajustar las energías experimentales

parameters	Muestra A	Muestra B
Anchura del GaAs	43.6 Å	97 Å
m_{xy_e}	0.090 m_0	0.076 m_0
$m_{xy_e}^{(a)}$	0.086 m_0	0.072 m_0
m_{z_e}	0.073 m_0	0.069 m_0
$m_{z_e}^{(a)}$	0.073 m_0	0.068 m_0
D	0.75	0.7
Γ	(4.5 + 3 <i>N</i>) meV	(0.5 + .3 <i>N</i>) meV

^aRef..⁹⁶

Tabla 7.2: Parámetros obtenidos del ajuste del modelo teórico a los datos experimentales de las Figuras 7.6 y 7.7. Se han incluido asimismo las masas calculadas de acuerdo con la Ref..⁹⁶

representadas en las Figuras 7.6 y 7.7 se han utilizado dos parámetros libres, la constante de dimensionalidad D (Ecuación (6.46)), que da una medida del grado de confinamiento del excitón en el pozo, y la masa efectiva del electrón en el plano perpendicular al campo, m_{xy_e} . Los demás parámetros relevantes, bien se obtienen directamente del Hamiltoniano de Luttinger o bien se han tomado de la literatura (ver Tabla 7.1).

Las masas m_{z_e} y m_{xy_e} toman un valor significativamente distinto, anisotropía inducida por la no parabolicidad de la banda de conducción. Los valores obtenidos pueden compararse con el cálculo realizado por Ekenberg⁹⁶ para la masa efectiva del electrón en pozos cuánticos incluyendo la no parabolicidad de la banda de conducción y su anisotropía. En concordancia con estos cálculos, observamos un aumento considerable de la masa efectiva del electrón sobre su valor en materiales másicos, y confirmamos experimentalmente la necesidad de utilizar dos masas diferentes, m_{z_e} y m_{xy_e} , para describir correctamente tanto

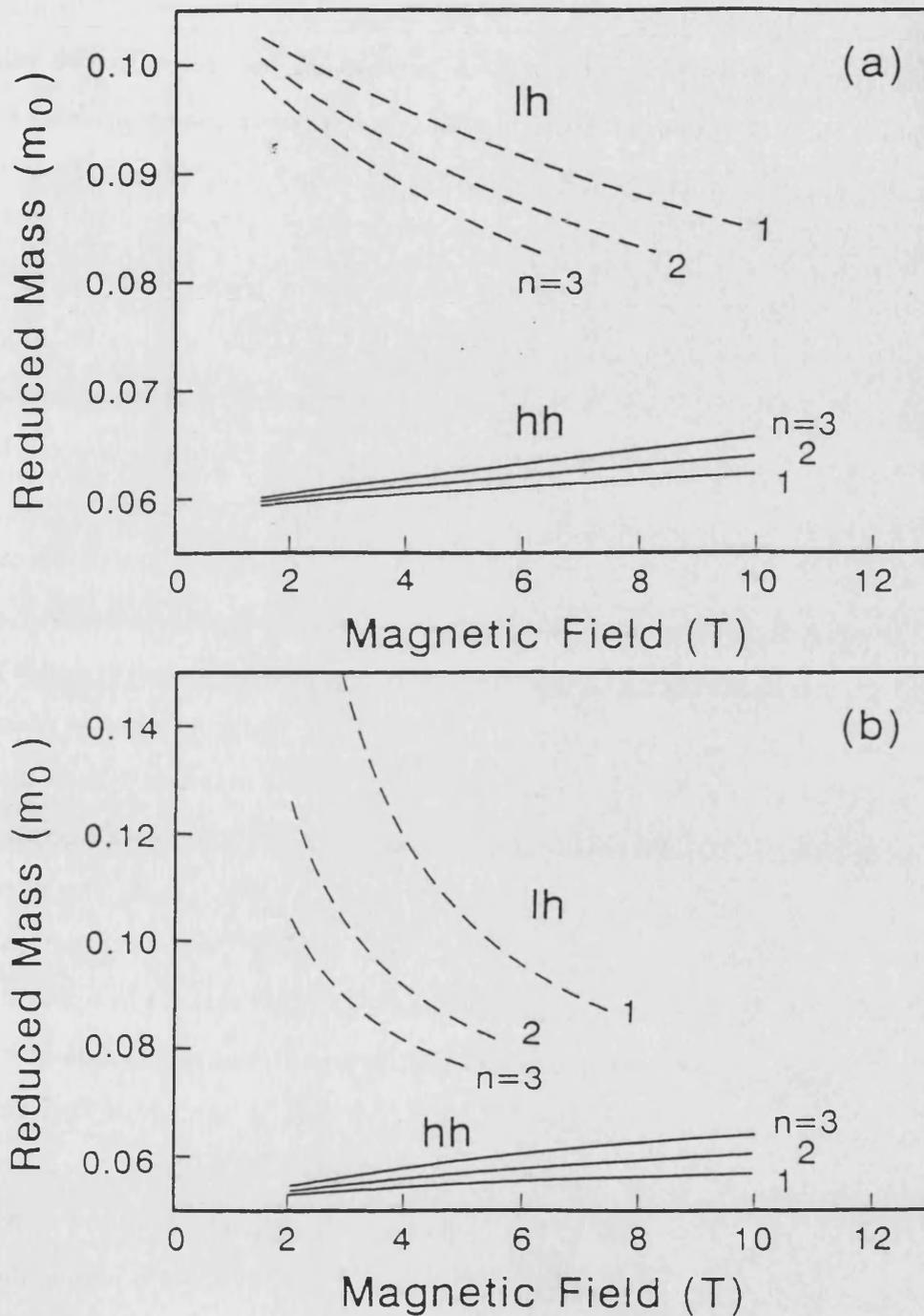


Figura 7.9: Dependencia de la masa reducida del par electrón-hueco con el campo magnético para los niveles de Landau $N = 1, 2$ y 3 . (a) Muestra A. (b) Muestra B. Curvas calculadas a partir de los ajustes de las resonancias de magneto-Raman, restando la contribución excitónica.

los estados confinados en el pozo como los efectos de la cuantización debida al campo magnético. De los datos recogidos en la Tabla 7.2 puede observarse que la masa m_{xy_e} sufre un aumento considerablemente mayor que la masa m_{z_e} con respecto a su valor en el material másico (Tabla 5.4). Por otra parte, el factor de anisotropía (m_{xy_e}/m_{z_e}) es mayor para la muestra A, como cabía esperar debido que la primera subbanda aparece a mayor energía.

Una vez bien caracterizada la banda de conducción a través de la masa efectiva, analizaremos el efecto de la no parabolicidad de la banda de valencia en función del campo magnético. Para ello, hemos calculado a partir de los datos experimentales una masa efectiva dependiente del campo que caracteriza al par electrón-hueco. La masa se ha obtenido a partir de la pendiente de las transiciones interbanda teóricas para los niveles de Landau $N = 1, 2$ y 3 , restando a cada estado al contribución excitónica. En las Figuras 7.9(a) y 7.9(b) se representa su valor para las dos muestras estudiadas. Con trazo continuo aparece la masa reducida del par electrón-hueco pesado, mientras que la masa del par electrón-hueco ligero aparece en trazo discontinuo. La variación de estas masas con el campo magnético es similar en ambas muestras, con valores mayores para la muestra A, como acabamos de explicar. La masa reducida del par $e - hh$ aumenta ligeramente con el campo, tanto más cuanto mayor es el nivel de Landau considerado. Por el contrario, la masa del par $e - lh$ disminuye rápidamente al aumentar el campo magnético. Esto es una consecuencia del comportamiento tipo anticruce entre los estados lh y hh de la banda de valencia. El valor de las masas de las dos bandas se aproxima a medida que aumenta el campo magnético. Debido a su acoplamiento, las bandas se curvan de forma que la masa $m_{xy_{lh}}$ se hace mayor que la masa $m_{xy_{hh}}$ para campos magnéticos superiores a 14 T. También es interesante destacar que el valor de la masa reducida del par $e - lh$ es mayor que la propia masa del electrón para campo pequeño (ver Tabla 7.2), aunque decrece por debajo de este valor para campos mayores de 4 T. Esto implica que la masa efectiva del lh es negativa a campo magnético pequeño, se hace infinita (banda plana) y cambia de signo para campos mayores. Un comportamiento similar se discutió en el Capítulo 2 al estudiar la curvatura de las bandas en función del vector de ondas.

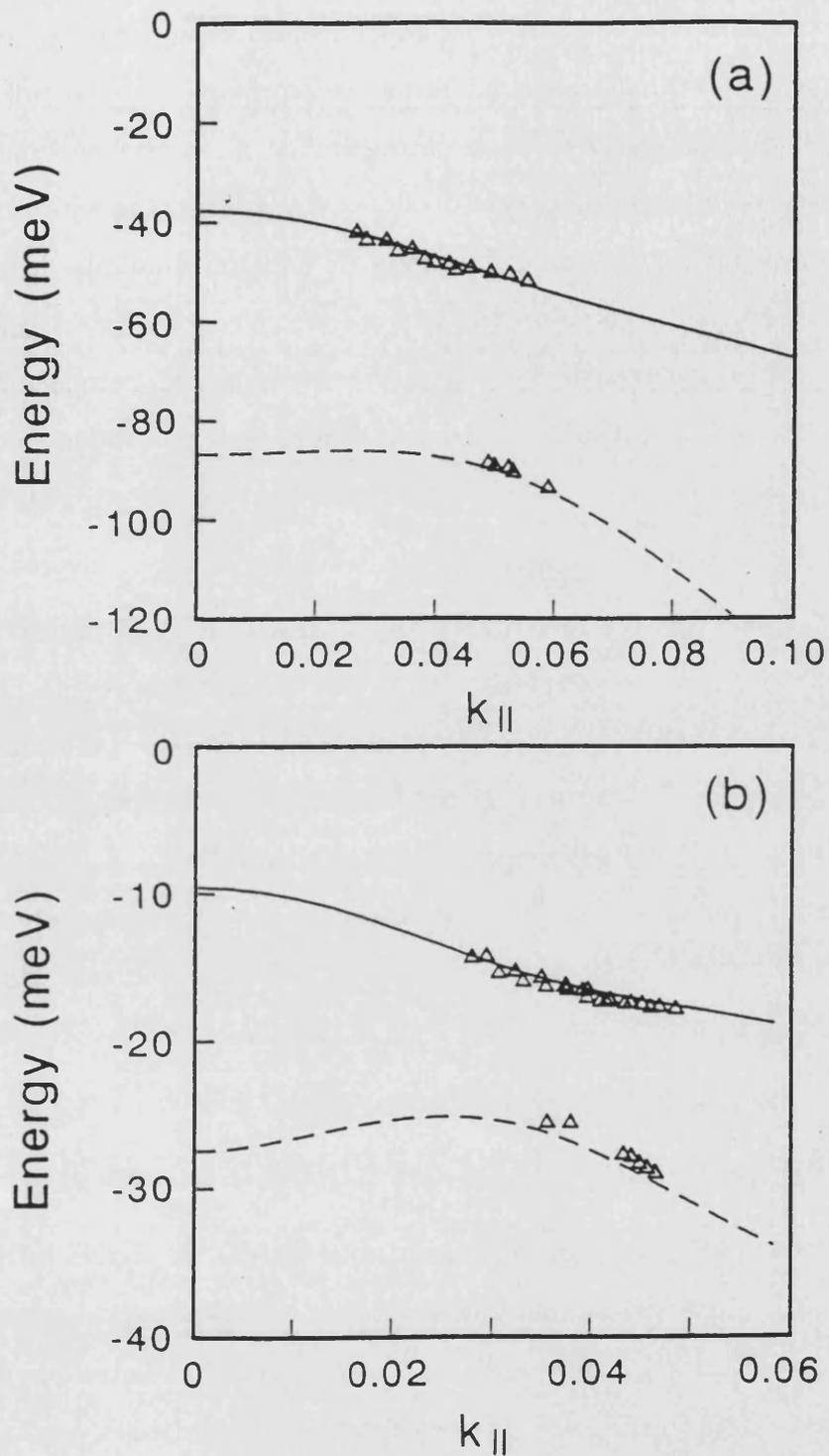


Figura 7.10: Relaciones de dispersión de los estados $hh1$ (línea continua) y $lh1$ (línea discontinua) en función de k_{xy} calculadas mediante el Hamiltoniano de Luttinger con los datos de la Tabla 7.1. Los triángulos representan los puntos experimentales obtenidos según el método explicado en el texto.



Analizando el Hamiltoniano que describe las bandas de energía, vemos que es posible hacer en cierta medida un paralelismo entre campo magnético y vector de ondas. De esta forma podemos convertir el comportamiento de la energía en función del campo en dispersión de las bandas en función de $k_{xy} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Con este propósito, hemos sustraído la banda de conducción y la banda de energía prohibida de las transiciones experimentales y corregido su valor debido a los efectos excitónicos. Las energías de la banda de valencia resultantes de esta operación dependen del campo magnético. Para convertir esta dependencia en una dependencia con el vector de ondas hemos utilizado la relación⁹⁰:

$$\frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} = \frac{\hbar e B}{m_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (7.1)$$

Los triángulos de la Figura 7.10 representan la dispersión de la banda de valencia en función de k_{xy} obtenida por este procedimiento para las muestras A y B. Se han utilizado las resonancias más pronunciadas de los datos experimentales que aparecen en las Figuras 7.6 y 7.7. En la Figura 7.10 se han representado también la energía de las subbandas $hh1$ (trazo continuo) y $lh1$ (línea discontinua) en función de k_{xy} obtenidas teóricamente mediante el Hamiltoniano de Luttinger en ausencia de campo magnético. El acuerdo entre los puntos experimentales y la curva teórica puede considerarse como una prueba de consistencia de los parámetros utilizados en el cálculo.

7.5 Perfiles de magneto-Raman

Una vez calculada la energía de las transiciones ópticas, es posible utilizar el modelo desarrollado en el capítulo precedente para obtener los espectros de magneto-Raman a cada energía. En la Figura 7.11 aparecen los perfiles correspondientes a la muestra A. En la columna de la izquierda se presentan los resultados experimentales y en la de la derecha el cálculo teórico correspondiente, utilizando los parámetros de la Tabla 7.1. El resultado se muestra para dos energías de excitación diferentes y las configuraciones de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$. Las curvas teóricas han sido calculadas para campos magnéticos superiores a 4 T, porque por debajo de este valor del campo el número

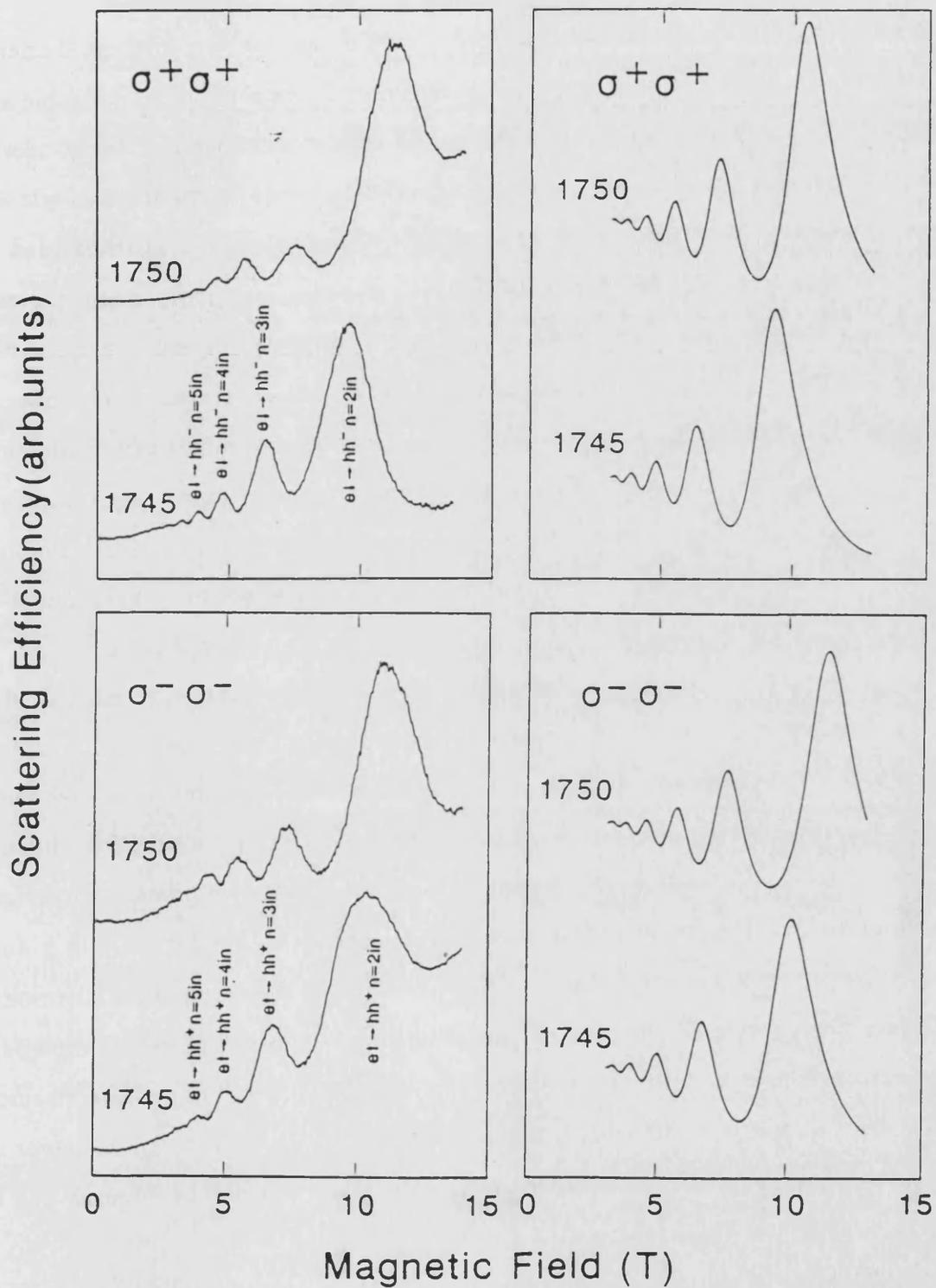


Figura 7.11: Perfiles de magneto-Raman correspondientes a la muestra A para cuatro energías de excitación diferentes. En la columna de la izquierda aparecen los datos experimentales y en la de la derecha los teóricos. Las configuraciones de polarización consideradas se indican en la figura.

de niveles de Landau que es necesario incluir en el cálculo aumenta rápidamente. Por otra parte, por debajo de este límite la corrección excitónica utilizada, aplicable a campos altos, deja de tener validez. En la Figura 7.11 se comparan los resultados teóricos con los experimentales para la muestra A. Se observa que todas las resonancias que aparecen pueden explicarse mediante el modelo teórico utilizado, incluida la intensidad relativa de las distintas transiciones. A esta energía, las resonancias corresponden a transiciones electrón- hh con distinto nivel de Landau y son resonancias de entrada. La diferencia principal entre las distintas polarizaciones viene dada por el spin de las distintas componentes hh involucradas. La no parabolicidad de las bandas se refleja principalmente en la dependencia del desdoblamiento debido al spin con el nivel de Landau, que impide definir un valor efectivo de g que describa el efecto del spin sobre las distintas transiciones. Las resonancias lh no se observan en el canal de entrada debido a que su vida media es muy pequeña.

En la Figura 7.12 se presentan los perfiles de resonancia para la muestra B, situando de nuevo a la izquierda los resultados experimentales y a la derecha los resultados teóricos. En contraste con la muestra A, la forma e intensidad de las resonancias dependen ahora fuertemente de la energía de la radiación incidente y del campo magnético, dificultando enormemente la identificación de las transiciones que intervienen en cada pico. La complejidad de los perfiles proviene de la fuerte mezcla entre las bandas hh y lh y aumenta para energías de excitación superiores a 1620 meV, región en la que tanto las resonancias de entrada como las de salida contribuyen al espectro. A pesar de esta complejidad, se obtiene un acuerdo cualitativo entre la teoría y el experimento que permite clasificar las distintas resonancias. La intensidad de los picos asociados a estados hh es mayor que la que proviene de estados lh , y las resonancias de entrada son menos intensas que las de salida.

Para que sea posible una comparación cuantitativa entre el experimento y la teoría sería necesario desarrollar un modelo que tuviera en cuenta la dependencia del tiempo de vida de los distintos estados con el nivel de Landau y el campo magnético. En el análisis de los perfiles de magneto-Raman hemos encontrado que la anchura de las resonancias

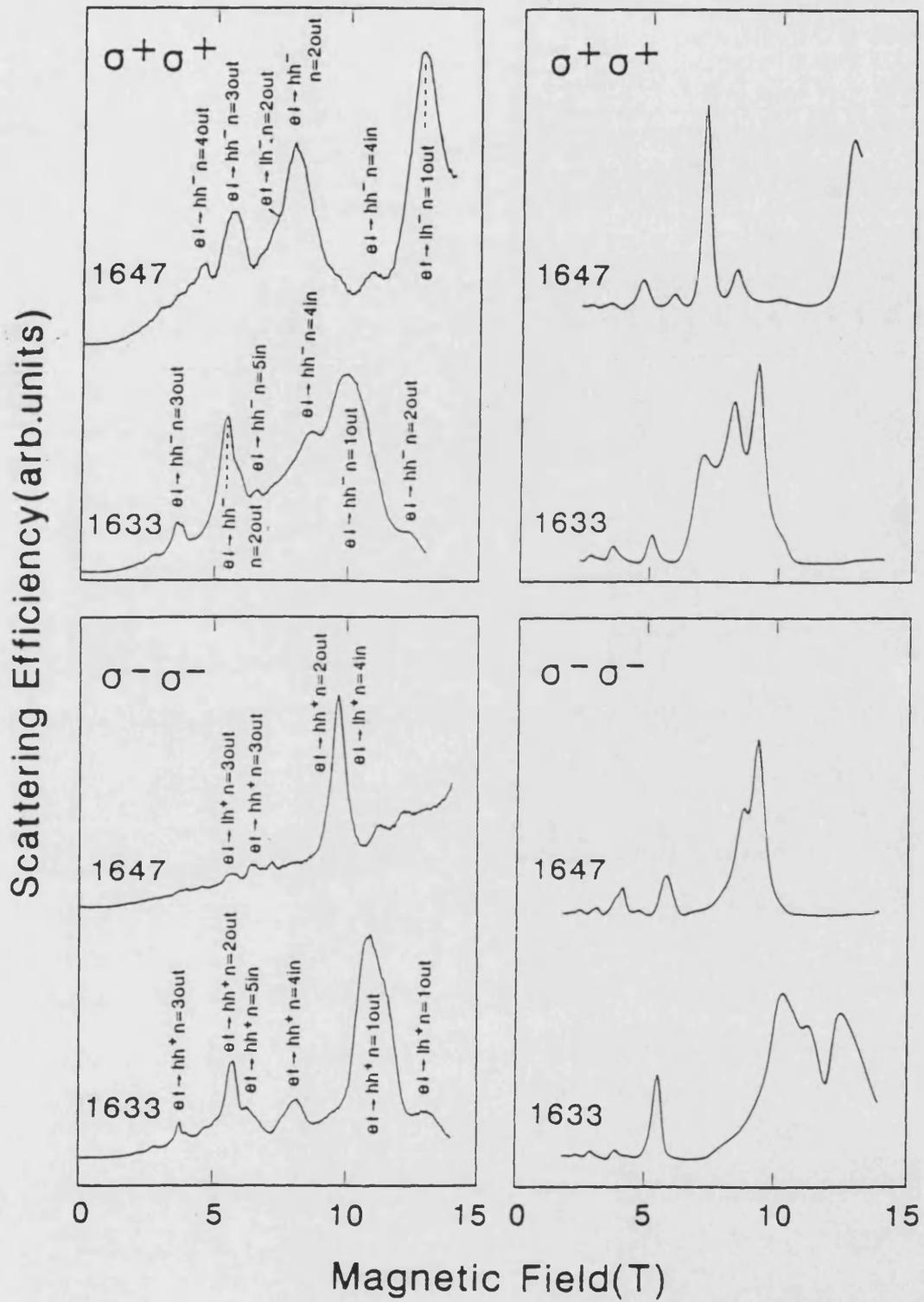


Figura 7.12: Perfiles de magneto-Raman correspondientes a la muestra B para cuatro energías de excitación diferentes. El resultado del cálculo teórico se presenta en la columna de la derecha con el fin de compararlo con el experimento. Se han considerado dos configuraciones de polarización diferentes, indicadas en la figura.

aumenta con la energía y el nivel de Landau. Sin embargo, queda fuera del propósito de este trabajo obtener una expresión analítica para esta dependencia. La forma de las resonancias observadas puede reproducirse adecuadamente utilizando una dependencia lineal de Γ con N , ¹⁰³ dependencia que aparece en la Tabla 7.2.

Capítulo 8

Efectos excitónicos

Hasta ahora hemos estudiado la dispersión Raman resonante en pozos cuánticos mediante una serie de experimentos en los que se ha abarcado un amplio rango de energías y campos magnéticos. En su realización y análisis posterior, hemos prestado mayor atención a la posición de los picos resonantes que a su intensidad relativa, despreciando la pequeña aportación de la luminiscencia al espectro Raman. Mediante la teoría elaborada ha sido posible obtener información sobre las reglas de selección del proceso Raman, interpretar los espectros de magneto-Raman en distintas configuraciones de polarización y analizar con detalle la estructura electrónica del pozo cuántico y su dependencia con el campo magnético, obteniendo como resultado unas masas efectivas que están en buen acuerdo con otros experimentos⁸¹ y cálculos teóricos.⁹⁶

En este capítulo analizaremos los espectros de magneto-Raman obtenidos en condiciones de doble resonancia.^{91,116} A diferencia de lo que hemos hecho en los capítulos precedentes, nos fijaremos en un rango de energías muy restringido, analizando con detalle los espectros Raman en función del corrimiento Raman a un campo magnético y energía dados. Con el fin de interpretar los resultados experimentales, veremos que es necesario considerar excitones como estados intermedios en el proceso de dispersión Raman.

Las propiedades de los excitones en sistemas bidimensionales fueron tratadas extensamente en 1966 por Shinada y Sugano,⁷⁰ al estudiar el espectro óptico de semiconductores altamente anisotrópicos, en los que la masa del excitón a lo largo del eje de anisotropía

puede considerarse infinita. La teoría, desarrollada en principio para explicar el espectro de absorción de semiconductores laminares, ha sido utilizada posteriormente para estudiar los efectos excitónicos en superredes⁸⁸ y pozos cuánticos.¹⁰⁶ Como es bien sabido, la influencia de la interacción coulombiana sobre los estados electrónicos del cristal aumenta considerablemente en materiales bidimensionales con respecto a los materiales másicos. Cuando el excitón tiene libertad de movimiento en las tres direcciones espaciales ($3D$), su energía de ligadura viene dada por,⁶⁶

$$E_n^{3D} = \frac{\mu R_y}{\epsilon^2 n^2} ,$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ es el número cuántico principal del excitón, μ su masa reducida y ϵ la constante dieléctrica del material. En sistemas estrictamente bidimensionales ($2D$), la energía de ligadura se obtiene mediante la expresión⁷⁰:

$$E_n^{2D} = \frac{\mu_{xy} R_y}{\epsilon^2 (n + \frac{1}{2})^2} ,$$

donde ahora $n = 0, 1, 2, \dots$ y μ_{xy} es la masa reducida del excitón en el plano xy . Comparando estas dos ecuaciones, vemos que la energía de ligadura del estado fundamental del excitón $2D$ es cuatro veces mayor que en los sistemas $3D$. Como consecuencia, cabe esperar que los efectos excitónicos cobren mayor relevancia en materiales en los que los electrones están confinados, aún cuando el confinamiento sea sólo parcial. La teoría elaborada por Shinada y Sugano ha sido ampliada por Akimoto y Hasegawa⁷¹ para incluir el efecto de un campo magnético de intensidad arbitraria. Desgraciadamente esta teoría, elaborada en el marco de la aproximación WKB, permite únicamente el tratamiento numérico de las funciones de onda y autoenergías del sistema excitónico, resultados de difícil manejo en una teoría Raman.

8.1 Descripción del experimento

Con el fin de estudiar los resultados experimentales de magneto-Raman, se ha analizado un multipozo cuántico de GaAs/AlAs crecido en la dirección $[001]$,⁹¹ con pozo y barrera de 92 \AA .

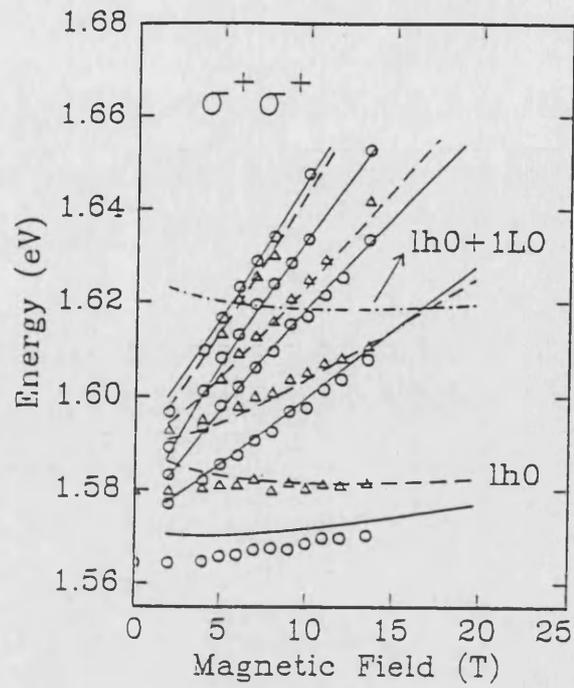


Figura 8.1: Posición de los picos de fotoluminiscencia en función del campo magnético para una muestra de GaAs/AlAs de 92 Å. Se ha utilizado luz circularmente polarizada a la derecha (σ^+).

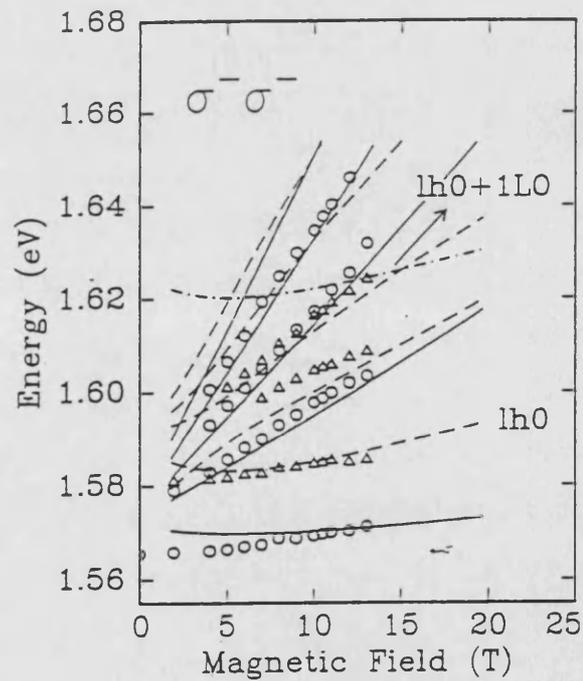


Figura 8.2: Posición de los picos de fotoluminiscencia en función del campo magnético para una muestra de GaAs/AlAs de 92 Å. Se ha utilizado luz circularmente polarizada a la izquierda (σ^-).

Las energías de las transiciones electrónicas se obtuvieron analizando la muestra mediante fotoluminiscencia de excitación (PLE) para distintos valores del campo magnético y utilizando luz circularmente polarizada. En las Figuras 8.1 y 8.2 se representa la energía de los picos de luminiscencia en función del campo magnético aplicado, con luz polarizada en las configuraciones σ^+ y σ^- respectivamente. Las líneas representan un ajuste teórico de las transiciones electrónicas siguiendo el método expuesto en los Capítulos 2 y 6. La línea continua indica la energía de las transiciones $e - hh$, mientras que la de trazo discontinuo corresponde a transiciones $e - lh$. En las figuras aparecen hasta cuatro estados excitados, cada uno relacionado con un número cuántico de Landau diferente.

Para estudiar las dobles resonancias en el espectro de magneto-Raman, se ha escogido el estado fundamental de la banda de huecos ligeros ($lh0$) como canal de salida. Puesto que estamos en resonancia de salida, las dobles resonancias en las que esté implicado el estado $lh0$ se obtendrán cuando la energía del láser coincida con una transición electrónica permitida. En las Figuras 8.1 y 8.2 hemos representado la energía del láser en función del campo magnético mediante una línea continua, señalada como $lh0+1LO$. A continuación se midió la intensidad Raman en función del corrimiento Raman para distintos valores del campo magnético y de la energía de la radiación incidente, restando el fondo de luminiscencia. El experimento se llevó a cabo en configuración de retrodispersión, utilizando la geometría de Faraday y polarización circular paralela para la radiación incidente y dispersada. En la Figura 8.3 se ha representado la intensidad Raman en función del corrimiento Raman para distintos valores del campo magnético aplicado, manteniendo constante la energía de la radiación incidente. El rápido aumento de la intensidad del pico es debida a que nos encontramos en las proximidades de una resonancia, a la que nos acercamos a medida que el campo aumenta. La Figura 8.4 representa la misma resonancia para distintos valores de la energía del láser, manteniendo esta vez constante el campo magnético.

Representando la intensidad del pico Raman en función del campo magnético aplicado obtendremos el espectro de magneto-Raman correspondiente. El resultado aparece en las Figuras 8.5 y 8.6 para las configuraciones de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$ respec-

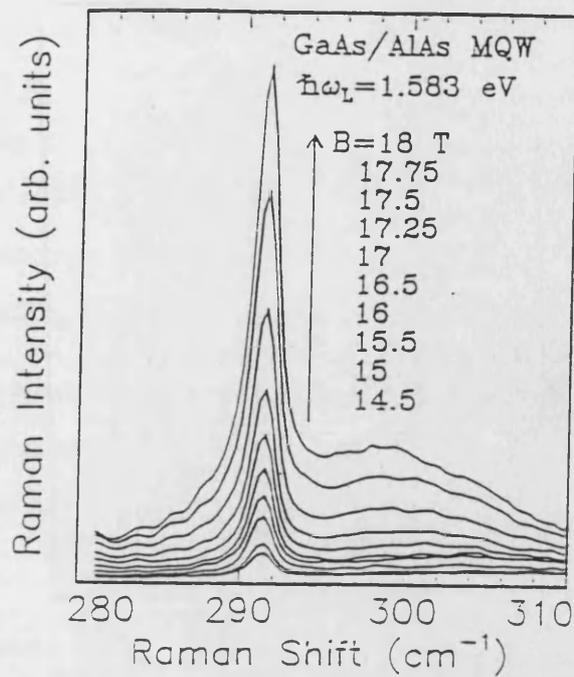


Figura 8.3: Intensidad Raman en función del corrimiento Raman para distintos campos magnéticos en las proximidades de una resonancia. Se ha considerado la configuración de polarización $\vec{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$.

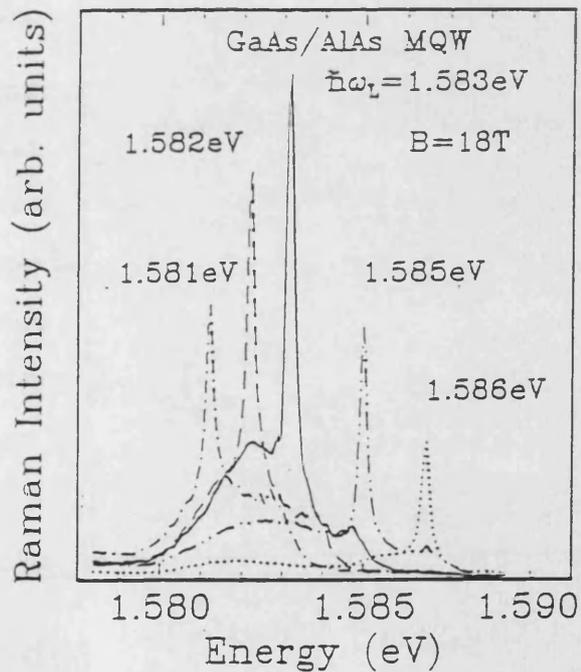


Figura 8.4: Intensidad Raman en función del corrimiento Raman para distintos valores de la energía de la radiación incidente en las proximidades de una resonancia. Se ha considerado la configuración de polarización $\vec{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$.

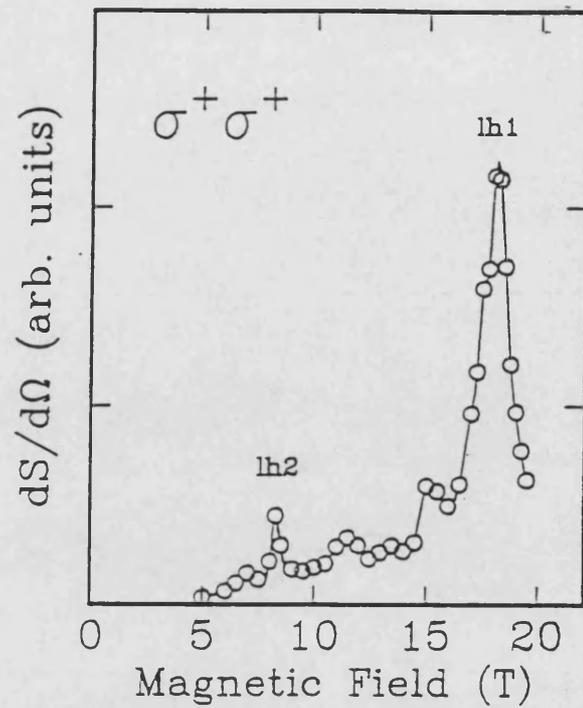


Figura 8.5: Eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético en unidades arbitrarias. Polarización $\vec{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$. En la figura se señalan los estados relacionados con cada uno de los picos resonantes.

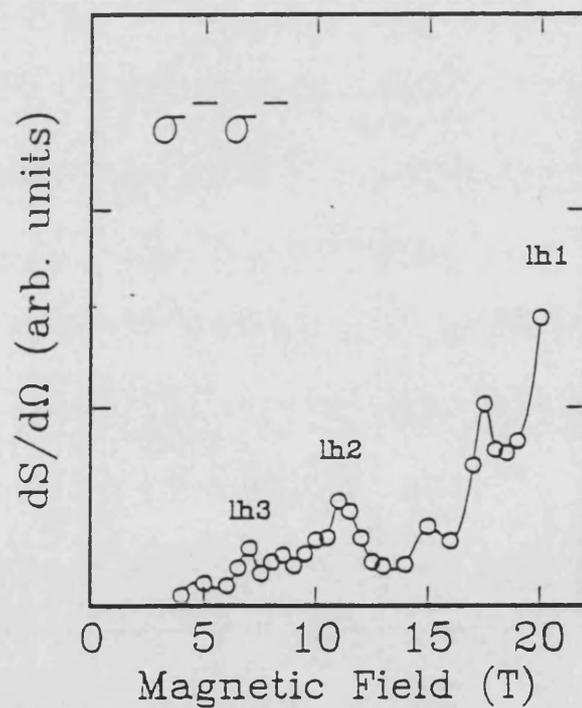


Figura 8.6: Eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético en unidades arbitrarias. Polarización $\vec{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$. En la figura se señalan los estados relacionados con cada uno de los picos resonantes.

tivamente. En ambas gráficas las resonancias aparecen siempre que la energía del láser coincide con uno de los estados excitados de la banda lh . Obtenemos picos relacionados con los estados $lh1$ y $lh2$ en la configuración $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y con los $lh1$, $lh2$ y $lh3$ para $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$. En cambio, ninguna de las resonancias observadas corresponde a un estado de la banda hh . El análisis de estos espectros nos lleva a las siguientes conclusiones:

- Las resonancias observadas no corresponden a resonancias de entrada simples, puesto que en ese caso aparecerían picos relacionados con la banda hh con intensidad similar o incluso mayor que los de la banda lh . Corresponden por tanto a dobles resonancias.
- El canal de entrada de las dobles resonancias observadas coincide con los distintos estados excitados de la banda lh , mientras que el estado fundamental $lh0$ es el canal de salida.
- El proceso de dispersión es intrabanda, con un cambio arbitrario en el número cuántico de Landau.

Con el fin de comprender estas conclusiones experimentales, hemos estudiado el proceso de dispersión Raman resonante mediante dos aproximaciones diferentes. En primer lugar, comenzaremos analizando detalladamente las características de las dobles resonancias obtenidas mediante el modelo desarrollado en los capítulos precedentes, en el que hemos considerado pares electrón-hueco como estados intermedios en el proceso de dispersión. Posteriormente veremos la necesidad de extender este modelo, teniendo en cuenta la influencia de los efectos excitónicos sobre el espectro de magneto-Raman.

8.2 Pares electrón-hueco libres como estados intermedios del proceso de dispersión

Podríamos comenzar el análisis de la dispersión Raman doblemente resonante basándonos en un modelo sencillo de bandas parabólicas. Sin embargo, como vimos en la Sección 6.1.2,

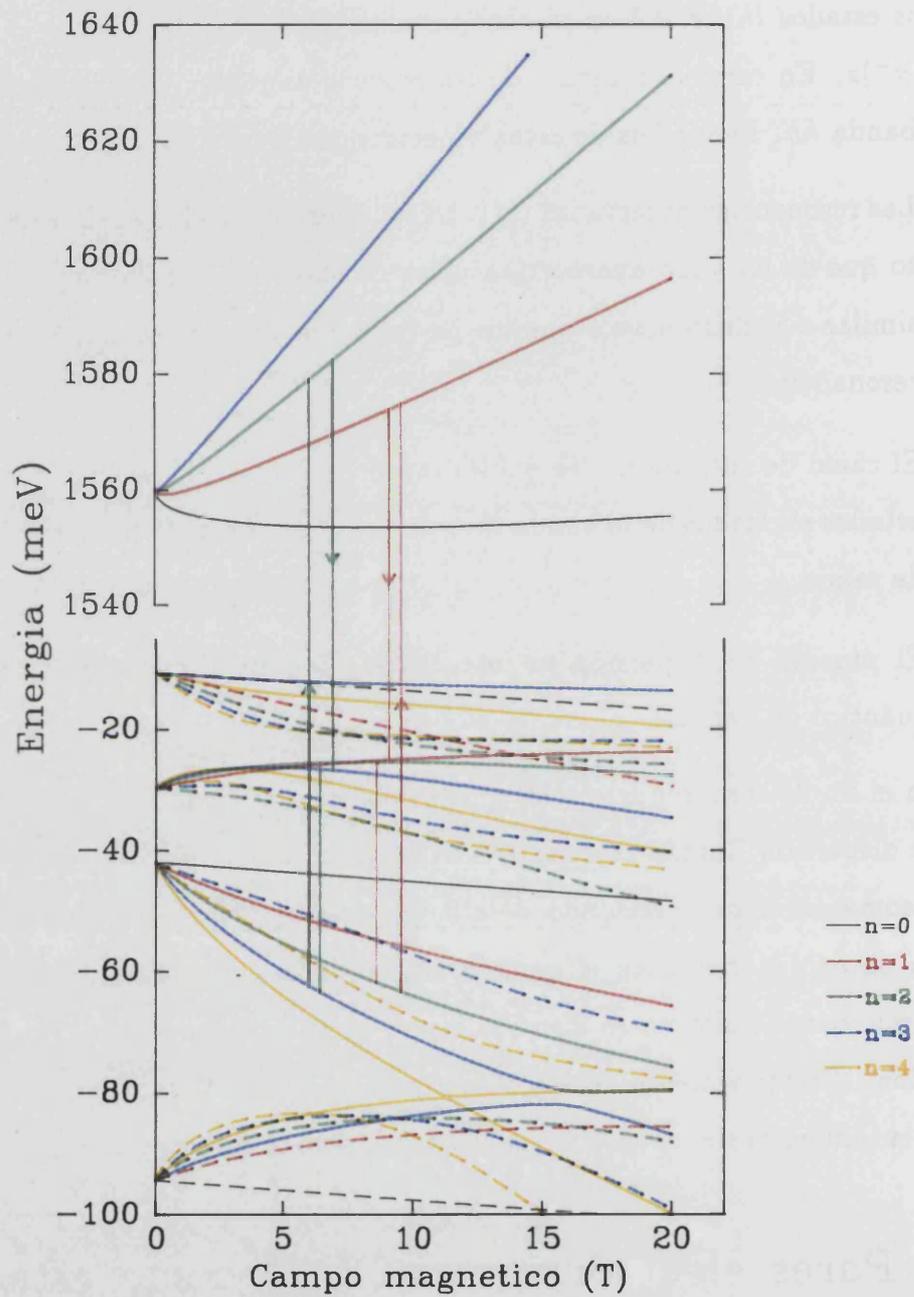


Figura 8.7: Dispersión de los niveles de energía de las bandas de valencia y conducción en función del campo magnético. Cada color representa un nivel de Landau en la banda de conducción y un nivel orbital de Landau en la de valencia. Se ha representado únicamente el primer estado confinado de la banda de conducción. Con trazo continuo se dibujan los estados de la banda de valencia que pertenecen al bloque $b = 1$ y con trazo continuo aquellos del bloque $b = 2$.

un modelo tan simplificado permite transiciones únicamente entre subbandas del pozo cuántico de la misma paridad, separadas la energía de un fonón. La observación de dobles resonancias en el espectro Raman queda así restringida a muestras con una estructura de bandas acorde con estas exigencias.⁷²⁻⁷⁴ Por otra parte, el número cuántico de Landau se conserva durante el proceso de dispersión, por lo que este modelo no permitiría reproducir los resultados experimentales. Es necesario, por tanto, describir las bandas de energía con mayor detalle, teniendo en cuenta la mezcla entre las distintas subbandas, como explicamos en la Sección 2.5. En la Figura 8.7 se representan los niveles de energía de la banda de valencia y de conducción de la muestra de GaAs/AlAs en función del campo magnético. Las transiciones electrónicas permitidas entre las distintas bandas, calculadas teniendo en cuenta las reglas de selección del proceso de absorción, se han representado ya en las Figuras 8.1 y 8.2. Consideremos la posibilidad de obtener una doble resonancia. Dado que el experimento se ha realizado con luz circularmente polarizada en la configuración paralela, el proceso de dispersión tiene lugar vía Fröhlich. Basándonos en las reglas de selección que dedujimos en el Capítulo 6, es posible conectar estados de distintas subbandas siempre que, según su paridad, pertenezcan al mismo bloque. La transición tiene lugar entre estados con el mismo número cuántico orbital de Landau. En la figura se señalan las bandas que intervienen en dos dobles resonancias posibles, que aparecen a un campo magnético de 6.4 y 8.5 T. Para mayor claridad, se han utilizado líneas de colores para los distintos niveles de Landau N de la banda de conducción y para las subbandas con distinto número cuántico orbital de Landau n en la de valencia. En esta banda, se ha asignado una línea de trazo continuo a los estados pertenecientes al bloque $b = 1$ y de trazo discontinuo a aquellos que provienen del bloque $b = 2$. En la banda de conducción se ha representado únicamente la primera subbanda del pozo cuántico, incluyendo la corrección excitónica desarrollada en la Sección 6.1.2. Debido a la mezcla entre bandas, a un campo magnético determinado es posible acoplar estados que a campo cero corresponderían a las bandas de hh y lh , transición prohibida en el modelo parabólico. Por lo tanto, en el seno de esta teoría es posible obtener procesos doblemente resonantes, que conectan subbandas del pozo diferentes. A pesar de que el número de transiciones

doblemente resonantes permitidas aumenta con respecto al modelo parabólico, la teoría no reproduce de forma sistemática las características del experimento. Por una parte, el nivel de Landau se conserva, y por otra, las transiciones son intersubbanda, en contra de las observaciones experimentales.

Para explicar la dispersión entre niveles de Landau diferentes es necesario considerar un proceso de orden superior, en el que, además de la dispersión electrón-fonón, intervenga una segunda interacción. Este nuevo proceso puede ser debido a la dispersión de los electrones con las impurezas del material o con la rugosidad de las interfases que separan los materiales de la barrera y del pozo. Diversos cálculos realizados en GaAs¹¹¹ indican que la dispersión por impurezas es importante únicamente cuando su concentración es lo suficientemente grande. Dado que el experimento se ha realizado sobre una muestra sin dopar, es más probable que la dispersión tenga lugar por interacción con la rugosidad del medio. A pesar de que este proceso es de orden superior al que hemos analizado hasta ahora (cuarto orden en teoría de perturbaciones), puede llegar a dominar si nos encontramos en las proximidades de una resonancia.⁸⁸ La amplitud de probabilidad de la dispersión vendría dada por:

$$W_{FI} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \frac{\langle F | H_I | \gamma \rangle \langle \gamma | H_I | \beta \rangle \langle \beta | H_I | \alpha \rangle \langle \alpha | H_I | I \rangle}{(E_\gamma - E_I)(E_\beta - E_I)(E_\alpha - E_I)}, \quad (8.1)$$

donde el Hamiltoniano de interacción H_I incluye ahora la interacción del electrón con la rugosidad de las interfases, H_r :

$$H_I = H_{ER} + H_{EP} + H_r \quad (8.2)$$

Esta interacción es de tipo elástico y puede tener lugar tanto en la banda de conducción como en la de valencia.

En la Figura 8.8 aparecen dos diagramas de Feynman característicos del proceso de cuarto orden que permitirían transiciones entre estados correspondientes a distintos niveles de Landau. La interacción H_r se representa mediante una cruz. En el diagrama se observa que la dispersión entre distintos niveles de Landau está permitida cuando las interacciones H_r y H_{EP} tienen lugar en bandas diferentes, una en la de conducción y la

otra en la de valencia. En el seno de este modelo, los procesos doblemente resonantes indicados en la Figura 8.7 simplemente pasan a ser ahora triples resonancias, y aparecerán en un espectro de magneto-Raman como picos de gran intensidad. Por lo tanto, a pesar de considerar un proceso de orden superior, la mayor contribución al espectro Raman proviene de transiciones entre estados con el mismo número cuántico de Landau. Los da-

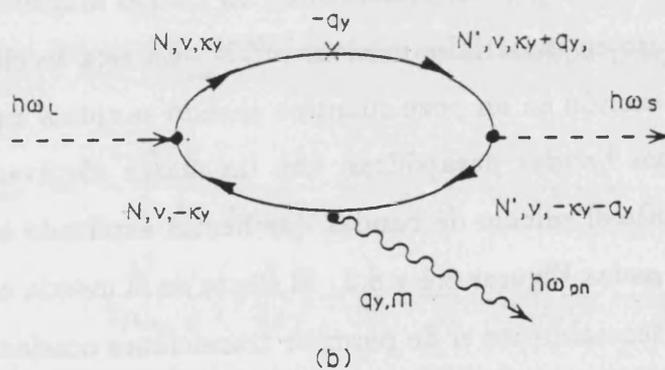
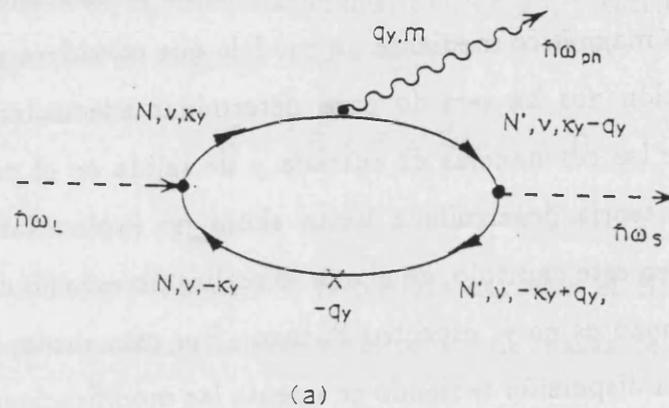


Figura 8.8: Dos diagramas de Feynman que contribuyen en un proceso de dispersión Raman por un fonón LO considerando la interacción del electrón (a) y del hueco (b) con la rugosidad de las interfases en el pozo cuántico. La interacción elástica se representa mediante una cruz. En estos dos diagramas las transiciones entre distintos niveles de Landau están permitidas.

tos experimentales sugieren que para asignar los picos de mayor intensidad a transiciones entre niveles de Landau diferentes, es necesario tener en cuenta los estados excitónicos como estados intermedios en el proceso de dispersión Raman.

8.3 Excitones como estados intermedios del proceso de dispersión

La interacción coulombiana entre el electrón y el hueco siempre está presente, y los excitones constituyen los verdaderos estados intermedios del proceso de dispersión. En los capítulos precedentes hemos visto que es posible describir la dispersión Raman resonante en función del campo magnético mediante un modelo que considera pares electrón-hueco libres. Esta descripción nos ha servido para determinar adecuadamente la posición e intensidad relativa de las resonancias de entrada y de salida en el proceso Raman. Desafortunadamente, la teoría desarrollada hasta ahora no explica las características del experimento descrito en este capítulo, en el que se realiza un estudio detallado de los procesos doblemente resonantes en el espectro Raman. Por esta razón, hemos considerado conveniente estudiar la dispersión teniendo en cuenta las modificaciones introducidas por los efectos excitónicos.

El tratamiento de los excitones en presencia de un campo magnético es un problema difícil de abordar, incluso en materiales másicos.^{104,105} En esta sección desarrollaremos un modelo sencillo del excitón en un pozo cuántico cuando se aplica un campo magnético intenso. Consideraremos bandas parabólicas, con las masas efectivas del electrón y el hueco obtenidas mediante el cálculo de bandas que hemos explicado con anterioridad, y cuyo resultado aparece en las Figuras 8.1 y 8.2. El efecto de la mezcla entre subbandas en el espectro Raman es esencialmente el de permitir transiciones ocasionales entre estados electrónicos excitados, a las que les corresponde una fuerza de oscilador pequeña. Dado que estas transiciones no han sido observadas en el experimento, despreciaremos el efecto de la mezcla entre bandas, concentrándonos en el cálculo de la energía y función de onda del excitón en la aproximación de la masa efectiva.

El efecto del pozo cuántico sobre el excitón es el de limitar su movimiento en la dirección de crecimiento (eje z). Puesto que en el caso del GaAs el valor medio del radio del excitón es de unos 150 Å, en un pozo cuántico de 92 Å su movimiento queda prácticamente limitado al plano xy . Teniendo esto en cuenta, despreciaremos la dependencia de la

interacción coulombiana con la coordenada z , tomándola estrictamente bidimensional. Tendremos entonces:

$$V_{coul} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\rho} \quad , \quad (8.3)$$

donde $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ es la coordenada relativa del par electrón-hueco en el plano xy . Con el fin de aprovechar la simetría cilíndrica del pozo cuántico, expresaremos la posición del electrón y el hueco en coordenadas cilíndricas, $(z, \vec{\rho})$, y escribiremos el potencial vector del campo magnético en el gauge simétrico:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0) \quad , \quad (8.4)$$

donde hemos tomado el campo en la dirección z . Mediante la transformación de gauge introducida por Yang y Sham,¹⁰⁶ es posible expresar el Hamiltoniano del excitón en función de las coordenadas relativas y del centro de masas del par electrón-hueco:

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= \vec{\rho}_h - \vec{\rho}_e \quad , \\ \vec{R}_{xy} &= \frac{m_{xye}\vec{\rho}_e + m_{xyh}\vec{\rho}_h}{m_{xye} + m_{xyh}} \end{aligned} \quad (8.5)$$

El Hamiltoniano del excitón bidimensional en un campo magnético puede escribirse entonces como:

$$\begin{aligned} H_{exc} &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_e} \frac{1}{m_{ze}} \frac{\partial}{\partial z_e} + V(z_e) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_h} \frac{1}{m_{zh}} \frac{\partial}{\partial z_h} + V(z_h) \\ &- \frac{\hbar^2}{2\mu_{xyh}} \frac{1}{\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{2i} \hbar \frac{\mu_{xyi}}{\mu_h} \omega_{ch} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\mu_{xyi} \omega_{ch}^2}{8} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\rho} \quad , \end{aligned} \quad (8.6)$$

donde μ_{xyh} es la masa reducida del par electrón-hueco en el plano xy , con $h = \hbar, lh$. La constante μ_h tiene dimensiones de masa, definida como $\mu_h = m_{xyh}m_{xye}/(m_{xyh} - m_{xye})$ y ω_{ch} es la frecuencia ciclotrónica del par. Los dos primeros términos determinan el movimiento a lo largo de la dirección de crecimiento del pozo cuántico, e incluyen el potencial de confinamiento en la banda de valencia y de conducción. A continuación aparecen una serie de términos que representan la interacción del par electrón-hueco con el campo magnético. El último sumando corresponde a la interacción coulombiana.

Con el fin de analizar si el modelo excitónico es capaz de describir las características del experimento realizado, simplificaremos los cálculos trantando la interacción coulombiana

como una perturbación al movimiento del par electrón-hueco. Esta aproximación está justificada para campos intensos, es decir, cuando el radio de la órbita ciclotrónica es menor que el radio del excitón (alrededor de 8 T). Las soluciones del Hamiltoniano sin perturbar serán de la forma:

$$\Phi_0(\rho, z_e, z_h) = \varphi_{\nu_e}(z_e)\varphi_{\nu_h}(z_h)\Psi_{N,l}^0(\rho, \phi) \quad , \quad (8.7)$$

donde las funciones $\varphi_{\nu}(z)$ son las funciones de onda del electrón en el pozo cuántico definidas en el Apéndice B (Ecuaciones (B.1) y (B.2)). $\Psi_{N,l}^0(\rho, \phi)$ es autofunción del operador de momento angular

$$\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

y del Hamiltoniano de interacción con el campo magnético:

$$H_{mag} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{xyh}} \frac{1}{\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{2i} \hbar \frac{\mu_{xyi}}{\mu_h} \omega_{ch} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\mu_{xyi}\omega_{ch}^2}{8} \quad . \quad (8.8)$$

En coordenadas polares, la función $\Psi_{N,l}^0(\rho, \phi)$ puede escribirse como¹⁰⁵:

$$\Psi_{N,l}^0 = \sqrt{(N+|l|)!} \frac{1}{|l|!} e^{il\phi} \rho^{|l|} e^{-\rho^2/4\lambda^2} M(-N, |l|+1; \frac{\rho^2}{2\lambda^2}) \quad (8.9)$$

donde $M(a, b; x)$ representa la función hipergeométrica confluyente, $N = 0, 1, 2, \dots$ es el número cuántico de Landau del par electrón-hueco y l su momento angular en unidades de \hbar , que puede tomar cualquier valor entero.

La energía del Hamiltoniano sin perturbar viene dada por⁷¹:

$$\begin{aligned} E_{\nu_{eh}, N, l}^0 &= E_{\nu_e} + E_{\nu_h} + E_g + E_{N, l}^0 \\ &= E_{\nu_e} + E_{\nu_h} + E_g + \hbar\omega_{ch} \left(N + \frac{|l|+1}{2} - \frac{\mu_{xyh}}{\mu_h} l \right) \end{aligned} \quad (8.10)$$

Calcularemos las autofunciones y autovectores del excitón utilizando teoría de perturbaciones hasta segundo orden para la interacción coulombiana:

$$E_{N, l} = E_{N, l}^0 + \langle \Psi_{N, l}^0 | V_{coul} | \Psi_{N, l}^0 \rangle + \sum_{N' \neq N} \frac{|\langle \Psi_{N', l}^0 | V_{coul} | \Psi_{N, l}^0 \rangle|^2}{E_{N, l}^0 - E_{N', l}^0} \quad , \quad (8.11)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{N, l} &= \Psi_{N, l}^0 + \sum_{N' \neq N} \frac{\langle \Psi_{N', l}^0 | V_{coul} | \Psi_{N, l}^0 \rangle}{E_{N, l}^0 - E_{N', l}^0} \Psi_{N', l}^0 + \\ &+ \sum_{N' \neq N, p \neq N} \frac{\langle \Psi_{N', l}^0 | V_{coul} | \Psi_{p, l}^0 \rangle \langle \Psi_{p, l}^0 | V_{coul} | \Psi_{N, l}^0 \rangle}{(E_{N, l}^0 - E_{N', l}^0)(E_{N, l}^0 - E_{p, l}^0)} \Psi_{N', l}^0 \quad . \end{aligned} \quad (8.12)$$

Para garantizar la ortogonalidad de las funciones de onda del excitón, hemos ortogonalizado la base obtenida utilizando el método de Gram y Schmidt.¹¹⁵ Los elementos de matriz que aparecen en las Ecuaciones 8.11 y 8.12 pueden calcularse de forma analítica y se recogen en el Apéndice D.

8.3.1 Cálculo de la amplitud de probabilidad

Analizaremos en primer lugar la amplitud de probabilidad correspondiente a un proceso Raman de primer orden (Ecuación (4.23)). En la aproximación dipolar, la interacción excitón-radiación viene dada por^{109,110}:

$$H_{ER} = \frac{1}{m_0} \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\eta_L^2 \omega_L V}} \sum_{\alpha, \vec{K}} \langle c | \vec{e}_L \cdot \vec{p} | v \rangle \delta_{\vec{K}, \vec{\kappa}_L} \langle \varphi_{\nu_e} | \varphi_{\nu_h} \rangle \Psi_{N,l}(0) \hat{c}_{\alpha, \vec{K}}^\dagger \hat{a}_{\vec{\kappa}_L, \vec{e}_L} + \text{h.c.} \quad (8.13)$$

donde $\hat{c}_{\alpha, \vec{K}}^\dagger$ es el operador de creación de un excitón con momento \vec{K} en el estado α . α representa los distintos números cuánticos que caracterizan a un excitón, con el electrón en la banda de conducción c y subbanda del pozo ν_e y el hueco en la banda de valencia v y subbanda del pozo ν_h , en el estado N, l .

La función de onda $\Psi_{N,l}^0$ sin perturbar evaluada en $\vec{\rho} = 0$ viene dada por:

$$\Psi_{N,l}^0(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \lambda} \delta_{l,0} \quad , \quad (8.14)$$

por lo que sólo serán excitados estados con momento angular 0.

Para la interacción excitón-fonón vía Fröhlich se obtiene una expresión similar a la que aparece en la Ecuación (3.67):

$$H_F = \sum_{\alpha, \alpha'} S_{\alpha, \vec{K}}^{\alpha', \vec{K}'}(\vec{q}) \hat{c}_{\alpha, \vec{K}}^\dagger \hat{c}_{\alpha', \vec{K}'} \hat{d}_{\vec{q}}^\dagger \quad , \quad (8.15)$$

donde la constante de acoplamiento $S_{\alpha, \vec{K}}^{\alpha', \vec{K}'}$ es:

$$S_{\alpha, \vec{K}}^{\alpha', \vec{K}'} = \frac{C_q^*}{\sqrt{V}} \frac{\vec{e}_{LO} \cdot \vec{q}}{q^2} \delta_{\vec{K}', \vec{K} - \vec{q}_{xy}} \langle \alpha', \vec{K}' | \Phi_{\vec{q}}(z_e) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_e} \delta_{\nu, \nu'} - \Phi_{\vec{q}}(z_h) e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_h} \delta_{c, c'} | \alpha, \vec{K} \rangle \quad . \quad (8.16)$$

En la configuración de retrodispersión, el vector de ondas del fonón en el plano xy es cero. En estas condiciones, la interacción excitón-fotón no es capaz de conectar distintos

estados excitados, puesto que son ortogonales entre sí. Por lo tanto, no será posible obtener transiciones entre estados correspondientes a distinto nivel de Landau. Para explicar las transiciones entre distintos estados excitados es necesario recurrir de nuevo a un proceso de orden superior, que supondremos ocasionado por interacción del excitón con la rugosidad de la interfase. La amplitud de probabilidad de este proceso viene dada por la Ecuación (8.1). Podemos expresar la interacción H_r como un desarrollo de Fourier de la forma³⁸:

$$H_r = \sum_{\vec{q}_{xy}} [A_{I_e} e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_e} + A_{I_h} e^{-i\vec{q}_{xy} \cdot \vec{\rho}_h}] \quad (8.17)$$

Esta ecuación representa el desarrollo de Fourier de una interacción general con el par electrón-hueco, que tiene lugar en el plano xy . Un desarrollo de este tipo ha sido utilizado previamente para explicar distintos resultados de dispersión Raman en materiales masivos,^{50,111} superredes de GaAs/AlAs,^{112,113} y GaAs con tensión uniaxial.¹¹⁴ Nuestra intención no es la de analizar esta interacción en detalle y nos centraremos en el cálculo de los procesos más intensos, es decir, los triplemente resonantes. La amplitud de probabilidad viene dada por:

$$W_{FI} = \sum_{h=hh,eh} K_{LS}^F(\hbar) \sum_{\substack{\nu_e, \nu_h, \nu'_e, \nu'_h \\ N, N', N''}} \frac{G_{\nu_e, \nu_h} G_{\nu'_e, \nu'_h}^* \Psi_{N'',0}(0)^* \Psi_{N,0}(0)}{(\hbar\omega_L - E_{\nu_e, \nu_h, N} + i\Gamma_N)(\hbar\omega_S - E_{\nu'_e, \nu'_h, N''} + i\Gamma_{N''})} \times \quad (8.18)$$

$$\times \left\{ \frac{\mathcal{F}_{N',N}^{\nu'_e, \nu'_h, \nu_e, \nu_h}(\vec{q}) \mathcal{G}_{N'',N}(\vec{q}_{xy})}{\hbar\omega_S - E_{\nu'_e, \nu'_h, N'} + i\Gamma_{N'}} + \frac{\mathcal{G}_{N',N}(\vec{q}_{xy}) \mathcal{F}_{N'',N'}^{\nu'_e, \nu'_h, \nu_e, \nu_h}(\vec{q})}{\hbar\omega_L - E_{\nu_e, \nu_h, N'} + i\Gamma_{N'}} \right\},$$

donde la constante $K_{LS}^F(\hbar)$ y la función $G_{\nu, \nu'}$ han sido definidas previamente en las Ecuaciones (6.26) y (6.4) respectivamente. Las funciones $\mathcal{F}_{N',N}^{\nu'_e, \nu'_h, \nu_e, \nu_h}(\vec{q})$ y $\mathcal{G}_{N',N}(\vec{q}_{xy})$ vienen dadas por:

$$\mathcal{F}_{N',N}^{\nu'_e, \nu'_h, \nu_e, \nu_h}(\vec{q}) = F_{\nu_e, \nu'_e}(\vec{q}) I_{N',N}(-\vec{Q}_{xyh}) - F_{\nu_h, \nu'_h}(\vec{q}) I_{N',N}(\vec{Q}_{xye}), \quad (8.19)$$

$$\mathcal{G}_{N',N}(\vec{q}_{xy}) = A_{I_e} I_{N',N}(-\vec{Q}_{xyh}) + A_{I_h} I_{N',N}(\vec{Q}_{xye}), \quad (8.20)$$

donde la función $F_{\nu, \nu'}(\vec{q})$ ha sido definida en la Ecuación (6.24) y

$$I_{N',N}(\vec{Q}_{xyi}) = \int \Psi_{N',0}^*(\rho) e^{i\vec{Q}_{xyi} \cdot \vec{\rho}} \Psi_{N,0} d^3\vec{r}, \quad (8.21)$$

para $i = e, h$ y $\vec{Q}_{xyi} = \vec{q}_{xy} m_{xyi} / (m_{xye} + m_{xyh})$.

Restringiendo el cálculo a los procesos triplemente resonantes tenemos:

$$W_{FI} = \sum_{h=hh, lh} K_{LS}^F(h) \sum_{\substack{\nu_e, \nu_h, \nu_e', \nu_h' \\ N, N'}} \frac{G_{\nu_e, \nu_h} G_{\nu_e', \nu_h'}^* \Psi_{N', 0}(0)^* \Psi_{N, 0}(0) \mathcal{F}_{N, N'}^{\nu_e, \nu_h}(\vec{q})}{(\hbar\omega_L - E_{\nu_e, \nu_h, N} + i\Gamma_N)(\hbar\omega_S - E_{\nu_e', \nu_h', N'} + i\Gamma_{N'})} \times \left\{ \frac{\mathcal{G}_{N', N'}(\vec{q}_{xy})}{\hbar\omega_S - E_{\nu_e', \nu_h', N'} + i\Gamma_{N'}} + \frac{\mathcal{G}_{N, N}(\vec{q}_{xy})}{\hbar\omega_L - E_{\nu_e, \nu_h, N} + i\Gamma_N} \right\} \quad (8.22)$$

8.3.2 Resultados del modelo

En las Figuras 8.9 y 8.10 se ha representado la eficiencia de dispersión Raman en función del campo magnético calculada sustituyendo la Ecuación (8.22) en la Ecuación (4.18) (línea continua). Se han considerado las configuraciones de polarización $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$ y $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$ respectivamente. Se han utilizado los datos de la Tabla 8.1. Con el fin de

parametros	Muestra GaAs/AlAs
Anchura efectiva de GaAs	92 Å
m_{xye}	0.075 m_0
m_{ze}	0.069 m_0
m_{xyhh}	0.28 m_0
m_{zhh}	0.34 m_0
m_{xylh}	-0.48 m_0
m_{zlh}	0.092 m_0
Γ	0.5 meV
ϵ	12.6 ^(a)

^aLandolt-Börnstein Tables. ¹⁰²

Tabla 8.1: Parámetros efectivos utilizados en el modelo parabólico de bandas para calcular los estados excitónicos de un multipozo de GaAs/AlAs de 92 Å.

facilitar la comparación, en la parte superior de las figuras se representa la eficiencia de dispersión obtenida experimentalmente.

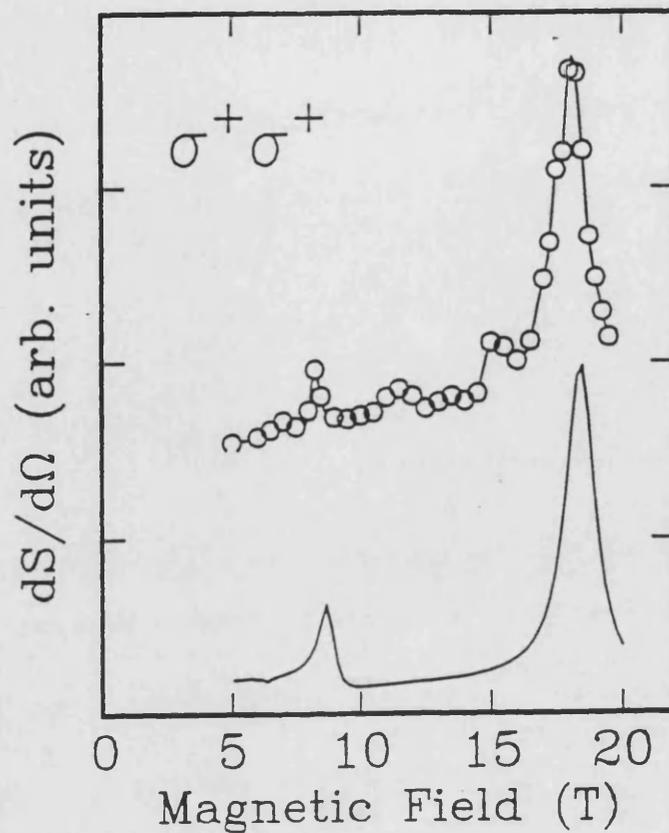


Figura 8.9: Eficiencia de dispersión Raman para un proceso triple resonante mediado por la interacción con un fonón LO e interacción con la rugosidad de las interfaces. Se ha tenido en cuenta la configuración de polarización paralela $\bar{z}(\sigma^+, \sigma^+)z$.

Los picos corresponden a transiciones triplemente resonantes entre los distintos estados excitados lh . Las resonancias asociadas con las subbandas hh , al no ser triples, son un orden de magnitud más pequeñas. La teoría no sólo reproduce correctamente la posición de las resonancias en función del campo magnético, sino también su intensidad relativa en ambas configuraciones de polarización.

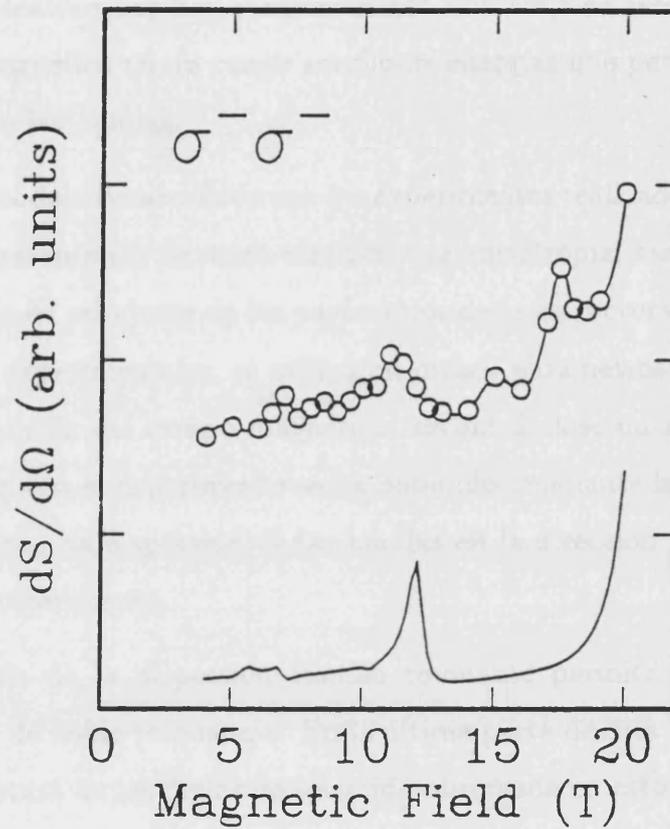


Figura 8.10: Eficiencia de dispersión Raman para un proceso triple resonante mediado por la interacción con un fonón LO e interacción con la rugosidad de las interfaces. Se ha tenido en cuenta la configuración de polarización paralela $\bar{z}(\sigma^-, \sigma^-)z$.

transiciones electrónicas como en el de los perfiles Raman en función del campo magnético.

Se llevó a cabo un estudio experimental sistemático en dos pozos cuánticos múltiples de GaAs/AlAs consistentes en 100 períodos de 99/99 Å y 80 períodos de 44/44 Å. Los datos experimentales obtenidos nos han proporcionado una serie de resonancias Raman en función del campo magnético en un rango amplio de energías que permiten el estudio de la no parabolicidad de las bandas.

Se ha comparado el modelo desarrollado con los experimentos realizados, obteniéndose un buen acuerdo en los parámetros de masa efectiva y su anisotropía, tanto en electrones como en huecos. Después de un ajuste de los parámetros de la estructura de bandas para obtener las transiciones experimentales, se utilizaron dichos parámetros en el cálculo de los perfiles Raman en función del campo magnético, encontrándose un acuerdo satisfactorio. De la comparación con el experimento se ha obtenido, mediante la transformación $\hbar\omega_c(N + 1/2) = \hbar^2 k_{xy}^2 / 2m_0$, la dispersión de las bandas en la dirección xy , coincidiendo prácticamente teoría y experimento.

Una medida detallada de la dispersión Raman resonante permite la obtención de espectros en condiciones de doble resonancia. En la última parte de esta Memoria, hemos intentado explicar la ruptura de las reglas de selección observada en estos espectros. Una primera aproximación en base a la teoría electrón-hueco libre desarrollada anteriormente, explica la posibilidad de obtener transiciones entre distintas subbandas, pero a pesar de la mezcla el número cuántico de Landau se conserva durante el proceso de dispersión. La inclusión de impurezas o de rugosidad en la interfase (o cualquier otro defecto que pueda producir ruptura en la conservación del vector de ondas del fonón) hace posible la aparición de dobles resonancias, pero desgraciadamente su posición no coincide con la observada en el experimento. Ello hace necesario incluir la interacción electrón-hueco. En este sentido, se desarrolla una teoría excitónica en campos magnéticos intensos, considerando la interacción coulombiana en teoría de perturbaciones. Para que la aproximación sea buena en el nivel fundamental del excitón a campos magnéticos moderados, es preciso desarrollar hasta segundo orden en teoría de perturbaciones tanto la energía como la función de onda, necesaria para el cálculo de la eficiencia Raman. El acuerdo alcanzado con el experimento

RESUMEN

La labor realizada en este trabajo ha consistido en el estudio de la dispersión Raman de primer orden en campos magnéticos intensos, fundamentalmente en heteroestructuras semiconductoras.

Después de desarrollar las herramientas básicas necesarias, hemos abordado el problema del cálculo de la eficiencia de dispersión y estructura electrónica en materiales másicos y pozos cuánticos.

La extensión del modelo de dispersión Raman en campos magnéticos existente para materiales másicos, incluyendo la anisotropía y la dependencia con la tercera componente del vector de ondas (k_z), nos muestra claramente la importancia de estos factores y su implicación en un espectro de dispersión Raman: la integración en k_z modifica sustancialmente el espectro.

Posteriormente hemos abordado el cálculo de la dispersión Raman en pozos cuánticos considerando el campo magnético en la dirección de crecimiento del pozo. La transformación trivial en comparación con un modelo tridimensional es la cuantización de k_z . Esto hace que la integración en k_z se convierta en una simple suma en los diferentes estados del pozo, pero al mismo tiempo, al romperse la degeneración existente entre huecos ligeros y pesados en el punto Γ de la zona de Brillouin, el nivel de mezcla aumenta extraordinariamente haciendo más importante aún la inclusión de la no parabolicidad debido a los efectos de mezcla.

En el marco de un modelo parabólico de tres bandas y teniendo en cuenta el confinamiento de los fonones ópticos, se ha estudiado la física elemental del problema, reglas de selección debido a las interacciones electrón-fotón y electrón-fonón, particularizando el cálculo a pozos cuánticos formados con heteroestructuras GaAs/AlAs. Los dos procesos de interacción electrón-fonón, es decir potencial de deformación y Fröhlich, han sido tratados separadamente, obteniéndose que en el primer caso sólo pueden observarse los modos confinados impares, y en el segundo los modos confinados pares.

A continuación se tuvieron en cuenta los efectos de mezcla, tanto en el cálculo de las

es excelente, tanto en la posición de las resonancias como en su intensidad relativa.

Como continuación del trabajo desarrollado en esta Memoria, estamos elaborando un modelo de dispersión Raman de segundo orden en pozos cuánticos y campos magnéticos intensos. Este modelo incluye los efectos de mezcla y no parabolicidad, con el ánimo de estudiar una región más amplia de la zona de Brillouin. Al mismo tiempo, pretendemos finalizar también el cálculo de la dispersión Raman en campos magnéticos paralelos.

Apéndice A

Elementos de matriz del Hamiltoniano de Kane 8×8

Las funciones de onda de la banda de valencia y conducción pueden representarse en la base de momento angular $j = 3/2, 1/2$. Tomando el eje de cuantización del spin en la dirección [001] estas funciones vienen dadas por la expresión que aparece en la Tabla A.1.

$$\begin{array}{l}
 \Gamma_6^c \left\{ \begin{array}{l}
 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : |S \downarrow\rangle \quad c_{-1/2} \\
 \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : |S \uparrow\rangle \quad c_{1/2}
 \end{array} \right. \\
 \\
 \Gamma_8^v \left\{ \begin{array}{l}
 \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \uparrow \right\rangle \quad v_{3/2}(hh^+) \\
 \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{6}}[(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right\rangle \quad v_{1/2}(lh^+) \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \right\rangle \quad v_{-1/2}(lh^-) \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY) \downarrow \right\rangle \quad v_{-3/2}(hh^-)
 \end{array} \right. \\
 \\
 \Gamma_7^v \left\{ \begin{array}{l}
 \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow] \right\rangle \quad s_{1/2}(so^+) \\
 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{001} : \left| \frac{1}{\sqrt{3}}[(X - iY) \uparrow - Z \downarrow] \right\rangle \quad s_{-1/2}(so^-)
 \end{array} \right.
 \end{array}$$

Tabla A.1: Representación de las funciones de onda $|j, m_j\rangle$ de las bandas de conducción y valencia en la base de momento angular $j = 1/2, 3/2$.

La matriz de Kane puede descomponerse en seis bloques:

$$\begin{pmatrix} H_{cc} & H_{cv} & H_{cs} \\ H_{cv}^\dagger & H_{vv} & H_{vs} \\ H_{cs}^\dagger & H_{vs}^\dagger & H_{ss} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Los bloques diagonales relacionan las bandas de conducción (c), las de huecos pesados y ligeros (v) y las de split-off (s) entre sí, mientras que los elementos no diagonales reflejan el acoplamiento entre bandas de distinta simetría. El símbolo \dagger indica el adjunto del bloque correspondiente. En la base de funciones de momento angular $j = 1/2, 3/2$ definidas en la Tabla A.1, los elementos de matriz de cada uno de estos bloques son:

$$H_{cc} = \begin{pmatrix} (A' + \frac{\hbar^2}{2m_0})k^2 + E_c & 0 \\ 0 & (A' + \frac{\hbar^2}{2m_0})k^2 + E_c \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

$$H_{vv} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}T + C & S & R & 0 \\ S^* & \frac{1}{6}T + \frac{2}{3}Q + C & 0 & R \\ R^* & 0 & \frac{1}{6}T + \frac{2}{3}Q + C & -S \\ 0 & R^* & -S^* & \frac{1}{2}T + C \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

$$H_{ss} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(T + Q) - \Delta_0 + C & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}(T + Q) - \Delta_0 + C \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$H_{cv} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(F_1 + F_2) & -G & F_1^* - F_2^* \\ F_1 + F_2 & G & \frac{1}{\sqrt{3}}(F_1^* - F_2^*) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

$$H_{cs} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}}(F_1^* - F_2^*) & \frac{1}{\sqrt{2}}G \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}G & \sqrt{\frac{2}{3}}(F_1^* - F_2^*) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

$$H_{vs} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ \frac{1}{3\sqrt{2}}(T-2Q) & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{1}{3\sqrt{2}}(T-2Q) \\ \sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S \end{pmatrix} . \quad (\text{A.7})$$

En estas expresiones hemos utilizado las abreviaturas:

$$\begin{aligned} T(k) &= (L' + M)(k_x^2 + k_y^2) + 2Mk_z^2 , \\ Q(k) &= M(k_x^2 + k_y^2) + L'k_z^2 , \\ C(k) &= E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} , \\ S(k) &= -\frac{1}{\sqrt{3}}N'(k_x - ik_y)k_z , \\ R(k) &= \frac{1}{3\sqrt{2}}(L' - M)(k_x^2 - k_y^2) - 2iN'k_x k_y] , \\ F_1(k) &= \frac{i}{\sqrt{3}}B(k_x - ik_y) , \\ F_2(k) &= \frac{i}{\sqrt{3}}P(k_x + ik_y) , \\ G(k) &= -\sqrt{\frac{2}{3}}(Bk_x k_y + iP k_z) , \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Las constantes A' , B , L' , M , N' y P se obtienen como suma de elementos de matriz del operador momento entre las distintas bandas. En muchas ocasiones y en especial cuando se estudia la banda de valencia bajo la acción de un campo magnético, la matriz H_{vv} se expresa en función de otro conjunto de parámetros, γ_1 , γ_2 y γ_3 , llamados parámetros de Luttinger, que se relacionan con los de Kane mediante las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{1}{3}(L' + 2M) , \\ \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 &= \frac{1}{6}(L' - M) , \\ \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 &= \frac{1}{6}N' . \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

La matriz H_{vv} así expresada recibe el nombre de Hamiltoniano de Luttinger.

Apéndice B

Funciones de onda de un pozo cuántico

Debido a la simetría de inversión que presenta el potencial de un pozo cuántico simétrico, es posible clasificar los autoestados del electrón en el pozo según su paridad:

1. Estados pares

$$\varphi_+(z) = A_+ \begin{cases} e^{K_B(z+d/2)} \cos K_P d/2 & z \leq -d/2 \\ \cos K_P z & -d/2 < z < d/2 \\ e^{-K_B(z-d/2)} \cos K_P d/2 & d/2 \leq z \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

2. Estados impares

$$\varphi_-(z) = A_- \begin{cases} e^{K_B(z+d/2)} \text{sen } K_P d/2 & z \leq -d/2 \\ \text{sen } K_P z & -d/2 < z < d/2 \\ -e^{-K_B(z-d/2)} \text{sen } K_P d/2 & d/2 \leq z \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Las constantes A_- y A_+ se determinan exigiendo que la función de onda satisfaga las condiciones de contorno (del tipo definido en la Ecuación (2.24)) junto con la condición de normalización y vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_+^2} &= \frac{1}{K_P} (K_P d/2 + \text{sen } K_P d/2 \cos K_P d/2) + \frac{1}{K_B} \cos^2 K_P d/2 \quad , \\ \frac{1}{A_-^2} &= \frac{1}{K_P} (K_P d/2 - \text{sen } K_P d/2 \cos K_P d/2) + \frac{1}{K_B} \text{sen}^2 K_P d/2 \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Teniendo en cuenta la definición de estas funciones de onda, podemos calcular los elementos de matriz que determinan el Hamiltoniano de Luttinger para el pozo (Ecuación (2.36)). Para los elementos diagonales tenemos:

$$\begin{aligned} E_{hh} &= E_{\nu_{hh}} + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2) \quad , \\ E_{lh} &= E_{\nu_{lh}} \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

y para los elementos no diagonales obtenemos:

$$\begin{aligned} S &= i\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} (k_x - ik_y) \gamma_3 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\nu_{hh}} \frac{d}{dz} \varphi_{\nu_{lh}} dz \quad , \\ R &= \left[\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} (k_x - ik_y)^2 \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} (k_x + ik_y)^2 \right] \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\nu_{hh}} \varphi_{\nu_{lh}} dz \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

donde E_{ν_i} son las energías de la subbanda del pozo correspondiente y las integrales vienen dadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i \frac{d}{dz} \varphi_j dz = -A_i A_j \times \begin{cases} \frac{2K_{B_j}}{K_{B_i} + K_{B_j}} \text{sen } K_{P_i} d/2 \cos K_{P_j} d/2 + \\ + \frac{K_{B_j} \text{sen } (K_{P_i} - K_{P_j}) d/2}{K_{P_i} - K_{P_j}} - \frac{K_{B_j} \text{sen } (K_{P_i} + K_{P_j}) d/2}{K_{P_i} + K_{P_j}} & i \text{ impar, } j \text{ par} \\ \frac{2K_{B_j}}{K_{B_i} + K_{B_j}} \cos K_{P_i} d/2 \text{sen } K_{P_j} d/2 - \\ - \frac{K_{B_j} \text{sen } (K_{P_i} - K_{P_j}) d/2}{K_{P_i} - K_{P_j}} - \frac{K_{B_j} \text{sen } (K_{P_i} + K_{P_j}) d/2}{K_{P_i} + K_{P_j}} & i \text{ par, } j \text{ impar} \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i \varphi_j dz = G_{i,j} \quad , \quad (\text{B.7})$$

donde la función $G_{i,j}$ se define en el Apéndice C (Ecuación (C.5)).

Apéndice C

Potencial del fonón confinado

Para los modos pares obtenemos:

$$\Phi_+\left(\frac{\pi}{d}m\right) = \begin{cases} e^{q_{xy}z} \sinh q_{xy} \frac{d}{2} & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m}{2}} \cos \frac{m\pi}{d} z - e^{-q_{xy} \frac{d}{2}} \cosh q_{xy} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ e^{-q_{xy}z} \sinh q_{xy} \frac{d}{2} & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

donde $m = 2, 4, 6, \dots$. A los modos impares les corresponden las componentes impares del potencial:

$$\Phi_-\left(\frac{\pi}{d}m\right) = \begin{cases} e^{q_{xy}z} \cosh q_{xy} \frac{d}{2} & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m+1}{2}} \sen \frac{m\pi}{d} z + e^{-q_{xy} \frac{d}{2}} \sinh q_{xy} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ -e^{-q_{xy}z} \cosh q_{xy} \frac{d}{2} & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

y derivando esta expresión se obtiene la componente z del desplazamiento, que escribiremos por simplicidad para $q_{xy} = 0$:

$$u_z(z) \propto \begin{cases} 0 & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m}{2}+1} \sen \frac{m\pi}{d} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ 0 & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

para $m = 2, 4, 6, \dots$ y

$$u_z(z) \propto \begin{cases} 0 & z < -\frac{d}{2} \\ (-1)^{\frac{m+1}{2}} \cos \frac{m\pi}{d} z & -\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2} \\ 0 & \frac{d}{2} < z \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

si $m = 1, 3, 5, \dots$

Las integrales de solapamiento de las funciones del pozo vienen dadas por:

$$G_{i,j} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i^* \varphi_j dz = A_i A_j \times \begin{cases} \frac{2}{K_{B_i} + K_{B_j}} \cos K_{P_i} d/2 \cos K_{P_j} d/2 + \\ + \frac{\text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{K_{P_i} - K_{P_j}} + \frac{\text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{K_{P_i} + K_{P_j}} & i, j \text{ pares} \\ \frac{2}{K_{B_i} + K_{B_j}} \text{sen} K_{P_i} d/2 \text{sen} K_{P_j} d/2 + \\ + \frac{\text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{K_{P_i} - K_{P_j}} - \frac{\text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{K_{P_i} + K_{P_j}} & i, j \text{ impares} \end{cases} \quad (C.5)$$

Los elementos de matriz de las funciones del pozo con el potencial del fonón confinado dependen del tipo de interacción que consideremos:

1. Potencial de deformación:

$$F_{i,j}(q_z) = \int \varphi_i^* u_z(z) \varphi_j dz \quad , \quad (C.6)$$

donde $q_z = m\pi/d$. Incluiremos la expresión únicamente para modos impares, puesto que son los que intervienen en el proceso Raman de primer orden en el caso de interacción vía Potencial de Deformación. Para modos impares (m impar) la función u_z es par, por lo que tenemos:

$$F_{i,j \text{ pares}}(m \text{ impar}) = A_i A_j q_z \left[\frac{\cos(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 - q_z^2} + \frac{\cos(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 - q_z^2} \right] \quad , \quad (C.7)$$

y para las impares:

$$F_{i,j \text{ impares}}(m \text{ impar}) = A_i A_j q_z \left[\frac{\cos(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 - q_z^2} - \frac{\cos(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 - q_z^2} \right] \quad . \quad (C.8)$$

2. Interacción Fröhlich:

$$F_{i,j}(\vec{q}) = \int \varphi_i^* \Phi_{\vec{q}}(z) \varphi_j dz \quad , \quad (C.9)$$

donde $q_z = m\pi/d$. Consideraremos los modos pares, que intervienen en un proceso Raman de primer orden vía interacción Fröhlich. Para estados pares tendremos:

$$\begin{aligned}
F_{i,j} \text{ pares}(m \text{ par}) &= 2A_i A_j \times \\
&\times \left\{ \frac{(K_{P_i} + K_{P_j}) \text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 - q_z^2} + \frac{(K_{P_i} - K_{P_j}) \text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 - q_z^2} \right. \\
&+ 2e^{-q_{xy}d/2} \frac{\text{senh } q_{xy}d/2 \cos K_{P_i}d/2 \cos K_{P_j}d/2}{K_{B_i} + K_{B_j} + q_{xy}} \\
&- e^{-q_{xy}d/2} \frac{(K_{P_i} + K_{P_j}) \cosh q_{xy}d/2 \text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&- e^{-q_{xy}d/2} \frac{q_{xy} \text{senh } q_{xy}d/2 \cos(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&- e^{-q_{xy}d/2} \frac{(K_{P_i} - K_{P_j}) \cosh q_{xy}d/2 \text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&\left. - e^{-q_{xy}d/2} \frac{q_{xy} \text{senh } q_{xy}d/2 \cos(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \right\}, \tag{C.10}
\end{aligned}$$

y para estados impares:

$$\begin{aligned}
F_{i,j} \text{ impares}(m \text{ par}) &= 2A_i A_j \times \\
&\times \left\{ - \frac{(K_{P_i} + K_{P_j}) \text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 - q_z^2} + \frac{(K_{P_i} - K_{P_j}) \text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 - q_z^2} \right. \\
&+ 2e^{-q_{xy}d/2} \frac{\text{senh } q_{xy}d/2 \cos K_{P_i}d/2 \cos K_{P_j}d/2}{K_{B_i} + K_{B_j} + q_{xy}} \\
&+ e^{-q_{xy}d/2} \frac{(K_{P_i} + K_{P_j}) \cosh q_{xy}d/2 \text{sen}(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&+ e^{-q_{xy}d/2} \frac{q_{xy} \text{senh } q_{xy}d/2 \cos(K_{P_i} + K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} + K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&- e^{-q_{xy}d/2} \frac{(K_{P_i} - K_{P_j}) \cosh q_{xy}d/2 \text{sen}(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \\
&\left. - e^{-q_{xy}d/2} \frac{q_{xy} \text{senh } q_{xy}d/2 \cos(K_{P_i} - K_{P_j})d/2}{(K_{P_i} - K_{P_j})^2 + q_{xy}^2} \right\}, \tag{C.11}
\end{aligned}$$

Apéndice D

Elementos de matriz de la interacción coulombiana

Los elementos de matriz que aparecen en el desarrollo perturbativo de la energía y función de onda del excitón (Ecuaciones (8.11) y (8.12)) pueden calcularse de forma analítica. Dado que la luz excita únicamente estados con momento angular 0, tomaremos $l = 0$. Los elementos de matriz correspondientes vienen dados por:

$$\langle F_{N,0}^0 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \rho | F_{M,0} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\lambda\sqrt{2}} \sum_{i=0}^N (-1)^i \binom{N}{i} \frac{1}{i!} \frac{\Gamma(i + \frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2} + M - i)}{\Gamma(M + 1)\Gamma(\frac{1}{2} - i)}, \quad (\text{D.1})$$

con $N \leq M$.

Los elementos de matriz de la interacción excitón-fonón han sido definidos ya en el Apéndice C (Ecuaciones (C.6) y (C.6)).

Bibliografía

- ¹J. A. Koningstein, *Introduction to the theory of the Raman effect*, D. Reidel Publish., Dordrecht-Holland (1972).
- ²Nature, 31 March, 21 April 1928.
- ³Die Naturwissenschaften, 6 May, 1928.
- ⁴B. Jusserand and M. Cardona in *Light Scattering in Solids V*, Topics in Applied Physics, Vol. 66 pag. 50. Springer-Verlag, Berlin (1989).
- ⁵T. Ruf, R. T. Phillips, A. Cantarero, G. Ambrazevičius, M. Cardona, J. Schmitz y U. Rössler, Phys. Rev. B **39**, 13378 (1989).
- ⁶T. Ruf, C. Trallero-Giner, R. T. Phillips y M. Cardona, Solid State Commun. **72**, 67 (1989).
- ⁷F. Agulló-Rueda, E. E. Mendez y J. M. Hong, Pys. Rev. B **38**, 12 720 (1988).
- ⁸T. Ruf, R. T. Phillips, C. Trallero-Giner y M. Cardona, Phys. Rev. B **41**, 3028 (1990).
- ⁹C. Trallero Giner, R. Ruf y M. Cardona, Phys. Rev. B **41**, 3028 (1990).
- ¹⁰J. R. Schrieffer en: *Semiconductor Surface Physics*. Ed.: R. H. Kingston. University of Pennsylvania Press, Filadelfia, p. 55 (1957).
- ¹¹A. Y. Cho y J. R. Arthur, Prog. Solid State Chem. **10**, 157 (1975).
- ¹²L. L. Chang y K. Ploog, eds., *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, Proc. Erice 1983 Summer School. Martinus Nijhoff, The Hague, 1985.
- ¹³W. T. Tsang, C. Weisbuch, R. C. Miller y R. Dingle, Appl. Phys. Lett. **35**, 673 (1979).
- ¹⁴P. D. Dapkus, Annu. Rev. Matter. Sci. **12**, 243 (1982).
- ¹⁵D. C. Tsui y R. A. Logan, Appl. Phys. Lett. **35**, 99 (1979).

- ¹⁶A. C. Gossard, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-22**, 1649 (1986).
- ¹⁷L. Esaki y R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* **14**, 61 (1970).
- ¹⁸L. Esaki, L. L. Chang y R. Tsu, en *Proc. 12th Int. Conf. on Low Temperature Physics*, Ed. Eizo Kanda (Keigaku, Tokyo, 1971), pág. 551.
- ¹⁹R. Dingle, W. Wiegmann y C. H. Henri, *Phys. Rev. Lett* **33**, 827 (1974).
- ²⁰L. L. Chang, L. Esaki y R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **45**, 494 (1973).
- ²¹K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- ²²C. Colvard, R. Merlin, M. V. Klein y A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 298 (1980).
- ²³A. K. Sood, J. Menéndez y M. Cardona, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2111 (1985).
- ²⁴G. Fasol, N. Mestres, H. P. Hughes, A. Fischer y K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2517 (1986).
- ²⁵P. A. Knipp, T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B (RC)* **48**, 5700 (1993).
- ²⁶L. Banyai, Y. Z. Hu, M. Lindberg, S. W. Koch, *Journal de Physique* **C2**, 225 (1988).
- ²⁷L. M. Falicov en *Group Theory and Its Applications* (Univ. Chicago Press, Chicago 1966).
- ²⁸O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, Vol. 2 de *Springer series in Solid State Sciences* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1978).
- ²⁹E. O. Kane en *Handbook on Semiconductors*, Ed. T. S. Moss. Tomo 1 (North Holland, Amsterdam, 1982), pág. 193.
- ³⁰S. R. Chelikowsky y M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **14**, 556 (1976).
- ³¹C. Kittel en *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York, 1963).
- ³²*Polarons and Excitons*, Editado por C. G. Kuper y G. D. Whitfield, (Oliver y Boyd, Edinburgh, 1966).

- ³³J. M. Luttinger y W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- ³⁴J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- ³⁵P. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- ³⁶E. O. Kane en *Semiconductors and Semimetals*, Eds. R. K. Williardson y A. C. Beer. Tomo 1 (Academic Press, New York 1966), pág. 75.
- ³⁷G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981).
- ³⁸N. Binggeli y A. Baldereschi, Phys. Rev. B (RC) **43**, (14 734) (1991).
- ³⁹G. Bastard y J. A. Brum, IEEE J. Quantum Electron QE-**22**, 1625 (1986).
- ⁴⁰G. C. La Rocca y M. Cardona, Phys. Stat. Sol. B **167**, 115 (1991).
- ⁴¹K. Greipel, *Subbandzustände in QWs unter dem Einfluß von Druck und akustischen Phononen*, Tesis Doctoral, Universidad de Regensburg, 1991.
- ⁴²L. Landau, Z. Phys. **64**, 629 (1930).
- ⁴³G. C. La Rocca, T. Ruf y M. Cardona, Phys. Rev. B **41**, 12 672 (1990).
- ⁴⁴T. Ruf, *Ramanstreuung in hohen Magnetfeldern*, Tesis Doctoral presentada en la Facultad de Física de la Universidad de Stuttgart junto con el Instituto Max Planck für Festkörperforschung en 1990.
- ⁴⁵J. Bardeen y W. Shockley, Phys. Rev. **80**, 72 (1950).
- ⁴⁶H. Fröhlich, Advances in Physics **3**, 325 (1954).
- ⁴⁷S. R. Yang, D. Broido y L. J. Sham, Phys. Rev. B **32**, 6630 (1985).
- ⁴⁸H. R. Trebin, U. Rössler y R. Ranvaud, Phys. Rev. B **20**, 686 (1979).
- ⁴⁹G. L. Bir y G. E. Pikus, Soviet Physics Solid State **2**, 2039 (1961).
- ⁵⁰J. Menendez y M. Cardona, Phys. Rev. B **31**, 3696 (1985).

- ⁵¹*Light Scattering in Solids II, Topics in Applied Physics*, tomo 50, Ed. M. Cardona y G. Güntherodt (Springer, Berlin, 1982).
- ⁵²B. Jusserand y M. Cardona, en *Light Scattering in Solids V, Topics in Applied Physics*, tomo 66, Ed. M. Cardona y G. Güntherodt (Springer, Berlin, 1989).
- ⁵³M. Cardona, *Superlattices Microstruct.* **5**, 27 (1989).
- ⁵⁴D. Strauch y B. Dorner, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 1457 (1990).
- ⁵⁵E. Molinari, A. Fasolino y K. Kunc, *Superlatt. and Microstruct.* **2**, 396 (1986).
- ⁵⁶H. Rücker, E. Molinari y P. Lugli, *Phys. Rev. B* **44**, 3463 (1991).
- ⁵⁷Huang y B. Zhu, *Phys. Rev. B* **38**, 13 377 (1988).
- ⁵⁸Z. V. Popović, M. Cardona, E. Richter, D. Strauch, L. Tapfer y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **41**, 5904 (1990).
- ⁵⁹J. E. Zucker, A. Pinczuk, D. S. Chemla, A. C. Gossard y W. Wiegmann, *Phys. Rev. B* **29**, 7065 (1984).
- ⁶⁰A. K. Sood, J. Menéndez, M. Cardona y K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2111 (1985).
- ⁶¹M. Cardona, *Superlatt. Microstruct.* **7**, 183 (1990).
- ⁶²D. J. Mowbray, M. Cardona y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **43**, págs. 1598 y 11 815 (1991).
- ⁶³M. Babiker, *J. Phys. C* **19**, 683 (1986).
- ⁶⁴C. Trallero Giner y F. Comas, *Phys. Rev. B* **37**, 4583 (1988)
- ⁶⁵C. Trallero-Giner, F. García Moliner, V. R. Velasco y M. Cardona, *Phys. Rev. B* **45**, 11 944 (1992).
- ⁶⁶G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 191 (1937).
- ⁶⁷L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Course of Theoretical Physics*, Tomo 3 (Pergamon Press, Oxford, 1977).

- ⁶⁸R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **108**, 1384 (1957).
- ⁶⁹W. Limmer, *Resonante Raman-Streuung an LO-Phononen in II-VI-Halbleitern*, Tesis doctoral, Universidad de Regensburg, Alemania, 1988.
- ⁷⁰M. Shinada y S. Sugano, *J. Phys. Soc. Japan*, **21**, 1936 (1966).
- ⁷¹O. Akimoto y H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Japan*, **22** 181 (1967).
- ⁷²R. C. Miller, D. A. Kleinman y A. C. Gossard, *Solid State Commun.* **60**, 213 (1986).
- ⁷³R. C. Miller, D. A. Kleinman, C. W. Tu y S. K. Sputz, *Phys. Rev. B* **34**, 7444 (1986).
- ⁷⁴D. A. Kleinman, R. C. Miller y A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **35**, 664 (1987).
- ⁷⁵H. Haug y S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, 1990.
- ⁷⁶F. Cerdeira, E. Anastassakis, W. Kauschke y M. Cardona, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3209 (1986).
- ⁷⁷T. Ando, A. B. Fowler y F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- ⁷⁸H. Leon y F. Comas, *Phys. Status Solidi B* **149**, 533 (1988).
- ⁷⁹R. Dingle, en *Festkörperprobleme XV, Advances in Solid State Physics*, editado por H. J. Queisser (Vieweg, Braunschweig, 1975), p.21.
- ⁸⁰*Light Scattering in Solids V*, editado por M. Cardona y G. Güntherodt, *Topics in Applied Physics Vol. 66* (Springer, Heidelberg, 1989).
- ⁸¹C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon y A. Woodbridge, *Phys. Rev. B* **34**, 4002 (1986).
- ⁸²G. Belle, J. C. Maan y G. Weimann, *Solid State Commun* **56**, 65 (1985).
- ⁸³Q. X. Zhao, P. O. Holtz, B. Monemar, T. Lundström, J. Wallin y G. Landgren, *Phys. Rev. B* **48**, 11 890 (1993).

- ⁸⁴M. Altarelli y G. Platero, *Surface Science* **196** (1988).
- ⁸⁵F. Ancilotto, A. Fasolino y J. C. Maan, *Phys. Rev. B* **38**, 1788 (1988).
- ⁸⁶D. A. Broido y L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **31**, 888 (1985).
- ⁸⁷T. Suemoto, G. Fasol y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **34**, 6034 (1986).
- ⁸⁸A. J. Shields, C. Trallero-Giner, M. Cardona, H. T. Grahn, K. Ploog, V. A. Haisler, D. A. Tenne, N. T. Moshegov y A. I. Toropov, *Phys. Rev. B* **46**, 6990 (1992).
- ⁸⁹V. F. Sapega, V. I. Belitsky, T. Ruf, H. D. Fuchs, M. Cardona y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **46**, 16 005 (1992).
- ⁹⁰N. J. Pulsford, R. J. Nicholas, P. Dawson, K. J. Moore, G. Duggan y C. T. B. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2284 (1989)
- ⁹¹F. Calle, J. M. Calleja, F. Meseguer, C. Tejedor, L. Viña, C. López y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **44**, 1113 (1991).
- ⁹²A. Cros, T. Ruf, J. Spitzer, A. Cantarero y M. Cardona, *Phys. Rev. B*, enviado
- ⁹³V. F. Sapega, M. Cardona, K. Ploog, E. L. Ivchenko y D. N. Mirlin, *Phys. Rev. B* **45**, 4320 (1991).
- ⁹⁴G. E. W. Bauer y T. Ando, *Phys. Rev. B* **38**, 6015 (1988).
- ⁹⁵*Model 3900 CW Ti:Sapphire Laser - Instruction Manual*, Spectra-Physics, Laser Products Division, 1089.
- ⁹⁶U. Ekenberg, *Phys. Rev. B* **40**, 7714 (1989).
- ⁹⁷R. J. Elliott y R. Loudon, *J. Phys. Chem. Solids* **15**, 196 (1960).
- ⁹⁸M. Altarelli y N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **7**, 3798 (1973).
- ⁹⁹M. Altarelli y N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **9**, 1733 (1974).
- ¹⁰⁰V. I. Belitsky, M. Cardona, I. G. Lang y S. T. Pavlov, *Phys. Rev. B* **46**, 15 767 (1992).

- ¹⁰¹*Handbook of Mathematical Functions*, Ed. M. Abramowitz e I. A. Stegun. (Dover, New York, 1972).
- ¹⁰²*Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*, editado por O. Madelung, M. Schultz y H. Weiss, Landolt-Börnstein Vols. 17a y 22a (Springer-Verlag, Berlin, 1982 y 1987).
- ¹⁰³A. García, A. Cantarero, V. Belitsky, en elaboración.
- ¹⁰⁴M. Altarelli y N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **7**, 3798 (1973).
- ¹⁰⁵M. Altarelli y N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **9**, 1733 (1974).
- ¹⁰⁶S.-R. Eric Yang y L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2598 (1987).
- ¹⁰⁷G. E. W. Bauer y T. Ando, *Phys. Rev. B* **37**, 3130 (1988).
- ¹⁰⁸L. J. Sham en *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 87. Editor: G. Landwehr (Springer, Berlin 1989).
- ¹⁰⁹R. J. Elliott y R. Loudon, *J. Phys. Chem. Solids* **8**, 382 (1959).
- ¹¹⁰R. J. Elliott y R. Loudon, *J. Phys. Chem. Solids* **15**, 196 (1960).
- ¹¹¹C. Trallero-Giner, A. Cantarero, M. Cardona y M. Mora, *Phys. Rev. B* **45**, 6601 (1992).
- ¹¹²W. Kauschke, A. K. Sood, M. Cardona y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **36**, 1612 (1987).
- ¹¹³A. Alexandrou, M. Cardona y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **38**, 2196 (1988).
- ¹¹⁴A. Alexandrou, C. Trallero-Giner, G. Kanellis y M. Cardona, *Phys. Rev. B* **40**, 1013 (1989).
- ¹¹⁵G. H. Golub y C. F. Van Loan, en *Matrix Computations*, editado por The Johns Hopkins University Press, (London, 1989).
- ¹¹⁶J. M. Calleja, L. Viña, A. Cros, A. Cantarero, T. Berendschot, sin publicar.

ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS

a_B	Radio de Bohr del excitón.
a_0	Constante de red.
\vec{A}	Potencial vector del campo magnético.
\hat{a}, \hat{a}^\dagger	Operadores de creación y destrucción asociados a los niveles de Landau.
b	Número cuántico. Indica el bloque al que pertenecen los estados del pozo cuántico según su paridad.
B	Como índice hace referencia al material de la barrera en un pozo cuántico.
\vec{B}	Campo magnético.
c	Velocidad de la luz en el vacío.
c	Como índice hace referencia a la banda de conducción.
$c \uparrow (\downarrow),$	
$c_{\pm 1/2}$	Parte periódica de la función Bloch de la banda de conducción con spin $\uparrow (1/2), \downarrow (-1/2)$.
C_F	Constante de Fröhlich.
d	Anchura del pozo.
d_0	Constante del potencial de deformación para el acoplamiento de las bandas de valencia mediante un fonón óptico.
$d\Omega$	Elemento de ángulo sólido.
$dS/d\Omega$	Eficiencia Raman.
$D_v^{v'}$	Elemento de matriz del potencial de deformación entre las bandas de valencia v y v' .
DP	Como índice, potencial de deformación.
$DRRS$	Dispersión Raman doble resonante.
D	Constante de dimensionalidad del excitón.

e	Carga elemental ($e > 0$).
\vec{e}	Vector de polarización de la luz.
E	Energía.
\vec{E}	Campo eléctrico.
E_0	Primera transición directa en el punto Γ entre la banda de valencia y de conducción.
E_v	Energía de los estados confinados del pozo cuántico.
E_g	Energía prohibida entre la banda de valencia y de conducción.
E_{N,k_z,m_s}	Energía de un electrón en un campo magnético en la dirección z .
F	Como índice, Fröhlich.
$F(a, b; z)$	Función hipergeométrica confluyente.
g_e	Factor de Landé del electrón libre.
g_i^*	Factor de Landé efectivo del electrón en la banda i .
hh	Hueco pesado.
H	Operador Hamiltoniano.
H_{SO}	Hamiltoniano de la interacción spin-órbita.
H_P	Hamiltoniano del campo de fonones libres.
H_R	Hamiltoniano del campo de fotones libres (campo de la radiación electromagnética).
H_{ER}	Hamiltoniano de interacción electrón-radiación.
H_{EP}	Hamiltoniano de interacción electrón-fonón.
j	Momento angular total del electrón.
\vec{k}	Vector de ondas.
$\vec{k} \cdot \vec{p}$	Método perturbativo de cálculo de bandas.
\hat{k}_z	Operador $-i\partial/\partial z$.
L_x, L_y, L_z	Longitud del cristal en las direcciones x, y, z .
lh	Hueco ligero.

LO	Fonón óptico longitudinal.
m_j	Componente del momento angular a lo largo de la dirección de cuantización.
m_0	Masa del electrón libre.
m_{z_i}	Masa efectiva del electrón en la banda i en la dirección z .
m_{xy_i}	Masa efectiva del electrón en la banda i en el plano xy .
M^*	Masa reducida de la celda primitiva unidad.
$M_{A(B)}$	Masa del catión (anión).
MBE	Epitaxia de haces moleculares.
MOVPE	Epitaxia metalorgánica en fase gaseosa.
N	Número cuántico de Landau.
n	Número cuántico orbital de Landau.
\hat{p}	Operador impulso.
P, Q, P'	Elementos de matriz del operador impulso.
P	Como índice hace referencia al material del pozo.
\vec{q}	Vector de onda del fonón.
\vec{q}_{xy}, \vec{q}_z	Vector de onda del fonón en el plano xy y en la dirección z .
q	Contribución anisotrópica al factor g en el Hamiltoniano de Luttinger.
\vec{r}	Vector de posición.
R	Elemento no diagonal del Hamiltoniano de Luttinger, par en el operador \hat{k}_z .
R_y	Rydberg del excitón.
R_y^*	Rydberg efectivo.
so	Banda de split-off.
$S_{\lambda,i}^{\lambda',j}$	Constante de acoplamiento del par electrón-hueco con el fonón.
S	Elemento no diagonal del Hamiltoniano de Luttinger, impar en el operador \hat{k}_z .

u_N	Función de onda del oscilador armónico.
\vec{u}	Desplazamiento del átomo de su posición de equilibrio.
v	Banda de valencia.
$v_{\pm 1/2, \pm 3/2}$	
$v_{lh}^{\pm}, v_{hh}^{\pm}$	Parte periódica de la función de Bloch para la banda de valencia con tercera componente del momento angular $\pm 1/2$ (lh), $\pm 3/2$ (hh).
V	Volumen del cristal.
V_c	Volumen de la celda primitiva unidad.
V_{hh}, V_{lh}, V_e	Discontinuidad de las bandas hh , lh y c debida a las características diferentes de los materiales que forman el pozo y la barrera de un pozo cuántico o superred.
W_{FI}	Amplitud de probabilidad de la transición $ I\rangle \rightarrow F\rangle$.
x_0	Centro de la órbita ciclotrónica.
$Y_{l,m}$	Armónicos esféricos.
\vec{k}_{xy}	Vector de ondas del electrón en el plano xy .
Z_{cv}	Desidad conjunta de estados.
α	Número cuántico. Hace referencia a los distintos estados de la banda de valencia.
φ_{ν_i}	Función de onda del pozo cuántico correspondiente a la subbanda ν de la banda i .
Φ_{ν, k_y, N, m_s}	Función de onda de un electrón en un pozo cuántico con campo magnético aplicado en la dirección z . Aproximación parabólica.
$\Phi_{n, k_y}^{\alpha, b}$	Función de onda de un electrón en un pozo cuántico con campo magnético aplicado en la dirección z . Aproximación no parabólica.
Γ	Centro de la zona de Brillouin.
Γ_j	Anchura de línea asociada al tiempo de vida media del par electrón-hueco en el estado j .

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$	Parámetros de Luttinger.
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker.
Δ_0	Separación de energía de la banda de split-off.
ϵ_0	Constante dieléctrica del vacío.
$\epsilon(0)$	Constante dieléctrica estática del medio.
$\epsilon(\infty)$	Constante dieléctrica dinámica del medio.
μ_0	Permitividad magnética del vacío.
μ_B	Magnetón de Bohr.
μ_i	Masa reducida del par electrón-hueco en el estado i .
$\eta_L(S)$	Índice de refracción del medio a la frecuencia de la luz incidente (dispersada).
$\vec{\kappa}$	Vector de onda del fotón.
κ	Contribución isotrópica al factor g en el Hamiltoniano de Luttinger.
λ	Radio de la órbita ciclotrónica.
$\vec{\rho}$	Vector de posición en el plano xy .
π_{b,m_j}	Paridad de las componentes m_j de la función de onda de un pozo cuántico pertenecientes al bloque b .
$\pi_{n,b,\alpha}$	Paridad de la función $\Phi_{n,k_y}^{\alpha,b}$.
$\chi(m_s)$	Espinor de dos componentes.
$\vec{\chi}$	Tensor de susceptibilidad.
ω_c	Frecuencia ciclotrónica.
ω_{c_i}	Frecuencia ciclotrónica del electrón en la banda i .
$\bar{\omega}_{c_i}$	Frecuencia ciclotrónica del par electrón-hueco en el estado i .
ω	Frecuencia del fotón.
ω_{LO}	Frecuencia del fonón longitudinal óptico.
$\omega_j(\vec{q})$	Frecuencia del fonón de la rama j con vector de ondas \vec{q} .
$\vec{\sigma}$	Matrices de Pauli σ_x, σ_y y σ_z .

PUBLICACIONES

Los resultados de esta Memoria han sido parcialmente publicados en los siguientes artículos:

- *Resonant Raman scattering in quantum wells in high magnetic fields: deformation potential interaction*, A. Cros, A. Cantarero, C. Trallero-Giner y M. Cardona, Phys. Rev. B **45**, 6106-6117 (1992).
- *Resonant Raman scattering in quantum wells under high magnetic fields*, A. Cros, A. Cantarero, C. Trallero-Giner y M. Cardona, Helv. Phys. Acta **65**, 343-344 (1992).
- *Magneto-Raman scattering in quantum wells: Fröhlich interaction*, A. Cros, A. Cantarero, C. Trallero-Giner y M. Cardona, Phys. Rev. B **46**, 12 627-12 634 (1992).
- *Magneto-Raman scattering in GaAs/AlAs multiple quantum wells*, A. Cros, J. Spitzer, T. Ruf, M. Cardona, K. Ploog y A. Cantarero, enviado a Phys. Rev. B.
- *Excitonic double resonance effects in magneto-Raman scattering in quantum wells*, J. M. Calleja, L. Viña, A. Cros, A. Cantarero y T. Berendschot, en fase de redacción.

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA

FACULTAD DE CIÈNCIES FÍSIOQUES

Reunit el Tribunal que subscriu, en el dia de la data,
acordà d'atorgar, per unanimitat, a aquesta Tesi Doctoral
d'En/ Na/ N' Ane Cros Stötter
la qualificació d' Apto cum Laude

València a 25 de Maig de 1994

El Secretari,

El President,



[Handwritten signature of the President]

[Handwritten signature of the Secretary]

