

Trabajo especial de
Licenciatura en Física

CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE EXCITONES
EN PUNTOS CUÁNTICOS
SEMICONDUCTORES USANDO UN MODELO
DE DOS BANDAS EN LA APROXIMACIÓN
DE MASA EFECTIVA

Alumno: Nicolás Legnazzi

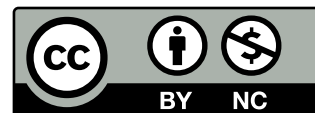
Director: Dr. Omar Osenda



Facultad de Matemática, Astronomía, Física y
Computación
Universidad Nacional de Córdoba
Argentina

Mayo 2021

Esta obra está bajo una licencia Creative Commons “Reconocimiento-NoCommercial 4.0 Internacional”.



Quiero agradecer en primer lugar a mi mamá, Carolina, y mi papá, Carlos, por su amor incondicional, y a mis tías, Analía y Liliana, por su cariño y apoyo. A Omar, mi director, quien me introdujo en este maravilloso tema de investigación y estuvo siempre para responder todas mis dudas e inquietudes. Al tribunal, Ricardo, Pablo y Federico, por tomarse el tiempo de leer y evaluar este trabajo. A Muriel, Gero, Amiel y Franco, con quienes estudié días y noches las materias de la carrera. A todes mis amigues, agradezco todo su amor que me llena de ánimos cada día.

Resumen

Las nanoestructuras formadas en semiconductores son de gran interés tanto desde el punto de vista tecnológico como desde el punto de vista de sus propiedades físicas básicas. El confinamiento producido por la nanoestructura altera la estructura de bandas del semiconductor y, correspondientemente, los estados electrónicos.

Dependiendo el fenómeno de interés a ser estudiado, los modelos utilizados para estudiar al mismo deben incluir la posibilidad de que la descripción del problema involucre varias bandas de niveles electrónicos. Esto es así en el estudio de los excitones, es decir, pares electron-hueco, cuyas propiedades físicas en una muestra macroscópica (o bulk) puede modelarse mediante una partícula ubicada en la banda de conducción (el electrón) y otra ubicada en la banda de valencia (el hueco). De esta forma, el agregado de un punto cuántico semiconductor a una matriz semiconductor modifica ambas bandas, pudiendo aparecer niveles de energía discretos permitidos cerca del fondo de la banda de conducción y del tope de la banda de valencia. Un excitón está confinado en el punto cuántico cuando un electrón se aloja en dichos niveles discretos cerca de la banda de conducción y un hueco se aloja en los niveles discretos por encima de la banda de valencia. Se estudian las propiedades espectrales de excitones confinados en puntos cuánticos de Arseniuro de Galio en la aproximación de masa efectiva de dos bandas.

El efecto del punto cuántico es modelado usando potenciales de confinamiento para el electrón y el hueco, mientras que la presencia de las dos bandas de niveles de interés se ve reflejada en el uso de la 'masa efectiva' de cada partícula en el Hamiltoniano del sistema. El Hamiltoniano resulta así una ecuación 'de Schrödinger' para dos partículas con masas distintas y que interactúan mediante el potencial de Coulomb electrostático de dos cargas puntuales, sin condiciones de contorno. El potencial de confinamiento posee simetría esférica.

Usando el método variacional de Rayleigh-Ritz se obtienen valores aproximados para la energía del estado fundamental. Para implementar el método se utilizan dos técnicas muy comunes en Físico Química, se escribe el Hamiltoniano en coordenadas bipolares, en las cuales la interacción adquiere una forma muy simple y se utilizan las funciones de Hylleras como base de funciones para el método variacional de Rayleigh-Ritz. Los elementos de matriz resultantes se pueden expresar en términos de integrales de funciones hipergeométricas. Se obtienen resultados para el valor de expectación del potencial

de Coulomb en función de los parámetros característicos del punto cuántico, radio y profundidad del potencial.

El valor de expectación de la interacción de Coulomb también es calculado usando Teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Para dicho cálculo se usó como estados del sistema sin perturbar las soluciones variacionales de un electrón confinado y de un hueco confinado, cada uno aislado y no interactuantes.

Con los resultados obtenidos se discute la relación entre los umbrales de ionización para el sistema usando los resultados perturbativos y los del cálculo con interacción 'completa'.

Palabras Claves: Nano-dispositivos. Semiconductores. Puntos cuánticos. Excitones

Abstract

Nanostructures formed in semiconductors are of great interest both from a technological point of view and from the point of view of their basic physical properties. The confinement produced by the nanostructure alters the band structure of the semiconductor and, correspondingly, the electronic states.

Depending on the phenomenon of interest, the models used to study it must include the possibility that the description of the problem involves several bands of electronic levels. This is so in the study of excitons, electron-hole pairs, whose physical properties in a macroscopic sample (or bulk) can be modeled by a particle located in the conduction band (the electron) and another located in the valence band (the hole). Thus, the addition of a semiconductor quantum dot to a semiconductor matrix modifies both bands, allowing discrete energy levels to appear near the bottom of the conduction band and the top of the valence band. An exciton is confined in the quantum dot when an electron is located at such discrete levels near the bottom of the conduction band and a hole is located at discrete levels above the valence band. In this work the spectral properties of excitons confined in gallium arsenide quantum dots are studied in a two-band effective mass approximation.

The effect of the quantum dot is modeled using binding potentials for the electron and the hole, while the presence of the two bands of levels of interest is reflected in the use of the 'effective mass' of each particle in the Hamiltonian of the system. In this way, the Hamiltonian results in a 'Schrödinger-like' equation for two particles with different masses that interact through the electrostatic Coulomb potential of two point charges, without boundary conditions. The binding potential has spherical symmetry.

Using the Rayleigh-Ritz variational method, approximate values for the ground state energy are obtained. To implement the method, two very common techniques from the Chemical-Physics are used, the Hamiltonian is written in bipolar coordinates, in which the interaction acquires a very simple form and the Hylleras functions are used as the basis of functions for the Rayleigh-Ritz variational method. The resulting matrix elements can be expressed in terms of integrals of hypergeometric functions. Results for the expectation value of the Coulomb potential as a function of the characteristic parameters of the quantum dot, radius and depth of the potential, are obtained.

The expectation value of the Coulomb interaction is also calculated using time independent perturbation theory. For this calculation, the variational

solutions of a confined electron and a confined hole, each isolated and non-interacting, were used as states of the system without perturbation.

With the results obtained, the relationship between the ionization thresholds for the system is discussed using the perturbative results and those of the calculation with 'complete' interaction.

Keywords: Nanodevices. Semiconductors. Quantum Dots. Excitons.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Semiconductores	1
1.1.1. Semiconductores: propiedades en bulk	1
1.1.2. Aproximación de masa efectiva	3
1.1.3. Excitones	5
1.2. Nanoestructuras Semiconductoras	7
1.2.1. Tipos de nanoestructuras	7
1.2.2. Estructura del trabajo	10
2. Modelo para un excitón confinado en un QD	12
2.1. Hamiltoniano de un exciton en un QD esférico	12
2.2. Parámetros utilizados para el GaAs	14
2.3. Principio variacional de Rayleigh-Ritz	15
2.4. Elementos de matriz del Hamiltoniano	17
2.5. Resultados	19
2.6. Conclusiones	25
3. Confinamiento de los portadores de carga en un potencial Gaussiano	26
3.1. Potencial Gaussiano de confinamiento	27
3.2. Elementos de Matriz del Hamiltoniano	28
3.3. Cálculo de la energía de interacción Coulombiana del excitón .	30
3.4. Resultados	31
3.5. Conclusiones	41
4. Cálculo de la energía de interacción del excitón utilizando Teoría de perturbaciones a primer orden	44
4.1. Hamiltoniano para las partículas no interactuantes	45

4.2. Elementos de matriz del Hamiltoniano de una partícula	46
4.3. Cálculo de la energía de interacción a primer orden perturbativo	46
4.4. Resultados	48
4.5. Conclusiones	56
5. Conclusiones y perspectivas	57
A. Coeficientes para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano con potencial de confinamiento cuadrático	59
B. Coeficientes para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano con potencial de confinamiento Gaussiano	62
C. Procedimiento numérico para el cálculo de energías mediante el método variacional de Rayleigh-Ritz	66

Capítulo 1

Introducción

1.1. Semiconductores

1.1.1. Semiconductores: propiedades en bulk

En la actualidad, en el desarrollo técnico de dispositivos electrónicos tales como transistores y circuitos integrados, es imprescindible el entendimiento teórico de los materiales semiconductores.

En esta sección se hará un breve resumen que permitirá al lector comprender algunas propiedades de los semiconductores en *bulk*, es decir sistemas de tamaños macroscópicos.

Para comenzar con el estudio de los materiales cristalinos y tener una noción acerca de qué es un semiconductor, resulta útil presentar las autofunciones de un problema de potencial periódico y sus correspondientes energías.

Los iones de un cristal perfecto se disponen de manera ordenada en el espacio tridimensional generando un potencial periódico para los electrones de valencia del sólido. Dicha periodicidad será la de la *Red de Bravais* [1] del material cristalino que se estudie. Así el potencial cumple:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (1.1)$$

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

Esto conlleva a que el Hamiltoniano que describe un electrón en el cristal posea una importante simetría, la simetría traslacional en los vectores de la red. A partir de esta invarianza el *Teorema de Bloch* establece que las

autofunciones del electrón tendrán la siguiente forma:

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

donde:

$$u_{n,k}(\mathbf{r}) = u_{n,k}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.3)$$

El índice n de la Ec.(1.2) y la Ec.(1.3) se denomina *índice de banda* y \mathbf{k} es un vector de onda que llamaremos *vectores de Bloch*.

Al aplicar al Hamiltoniano del cristal las autofunciones, Ec.(1.2), también llamadas *funciones de Bloch*, se obtiene un espectro de energías que presenta una estructura de bandas. En la Fig.(1.1) se puede ver que el Hamiltoniano tiene un espectro de energías, $E_{n,k}$, que habitualmente se denomina *estructura de bandas*, donde n es el índice de bandas.

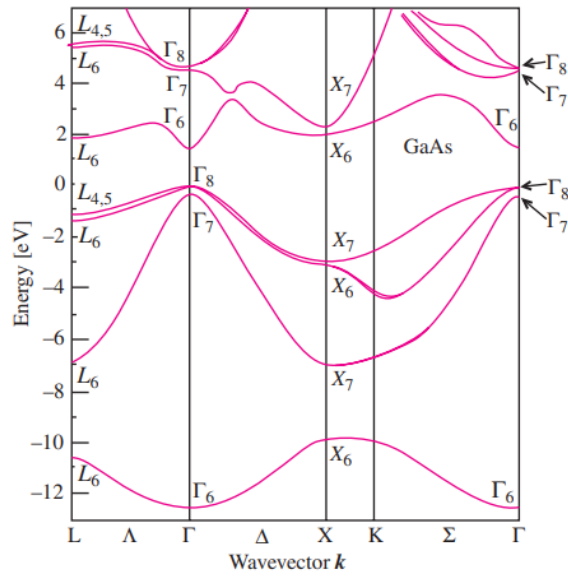


Figura 1.1: Espectro de energías típico calculado para el Arseniuro de Galio (GaAs) a partir de un método de pseudopotenciales [2].

Se puede apreciar que para distintos valores del vector de Bloch \mathbf{k} , se presentan regiones prohibidas de energía y bandas permitidas. Llamamos *banda de energías* a cada una de las regiones "permitidas" de la energía y *gap de energías* a la diferencia mínima de energías que existe entre cada banda. La banda E_n totalmente ocupada por electrones con el mayor índice

n a temperatura $T=0$ se denomina *banda de valencia* y está distanciadas por un gap de energía de la siguiente banda, la cual se denomina *banda de conducción*.

En un material aislante los gaps de energía suelen tener valores mayores a 4 eV mientras que para un conductor el gap es nulo.

En este punto es conveniente definir a un semiconductor como un material que presenta gaps de energías en un rango de 0-4 eV y cuya resistividad se encuentra entre 10^{-2} - $10^9 \Omega\text{cm}$ [2]. Al tener gaps de energías menores que un material aislante, los materiales semiconductores presentan mayores probabilidades de aumentar su conductividad al aumentar su temperatura. Esta característica también los diferencia de un metal, en el que el aumento de la temperatura disminuye su conductividad.

1.1.2. Aproximación de masa efectiva

Calcular la estructura de bandas de los electrones en un sólido cristalino en bulk requeriría la diagonalización de una matriz cuyo tamaño sea del orden de 10^{23} , por lo tanto existen diferentes métodos numéricos y de aproximación que permiten su obtención.

En este trabajo nos interesa estudiar la estructura de bandas cerca de los extremos de las bandas de valencia y la banda de conducción. La aproximación de masa efectiva [3] permite estimar los efectos del potencial periódico del sólido para valores k_0 cercanos a los extremos de las bandas de energía. Sólo tomaremos aquellos casos donde el extremo ocurre en la zona de alta simetría con $k_0 = 0$ y tratamos con semiconductores de gaps directos como se muestra en la Fig.(1.2)

Consideremos el Hamiltoniano electrónico del sólido cristalino:

$$H(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

donde m_0 es la masa del electrón y $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico del sólido. Al aplicarle las autofunciones de Bloch, Ec.(1.2), se obtiene:

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \right] u_{k,n}(\mathbf{r}) = \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \right] u_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

donde $E_n(\mathbf{k})$ denota la energía de la n -ésima banda. Se busca una aproximación alrededor de \mathbf{k}_0 , de modo que denotamos:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

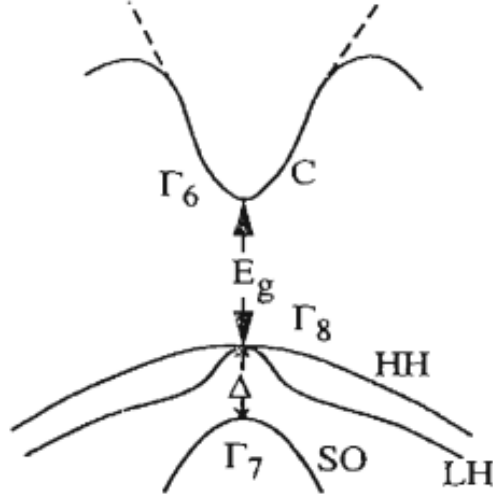


Figura 1.2: Estructura de banda cerca de los ejes para un semiconductor de GaAs alrededor de un punto de alta simetría donde $k_0=0$.

de manera que:

$$H_0 u_{n,0}(\mathbf{r}) = E_n(0) u_{n,0}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

$$\left[H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] u_{k,n}(\mathbf{r}) = \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{k,n}(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

Si se considera sólo una banda no degenerada se puede utilizar la teoría de perturbaciones a segundo orden en \mathbf{k} (recuerde que el método es útil para valores cercano a los extremos). De esta manera obtenemos:

$$u_{n,k}(\mathbf{r}) = u_{n,0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n',0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0} \rangle}{E_{n,0} - E_{n',0}}, \quad (1.9)$$

$$E_n(k) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n',0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0} \rangle|^2}{E_{n,0} - E_{n',0}}, \quad (1.10)$$

donde en la Ec.(1.10) se despreció el término lineal en \mathbf{k} , pues como \mathbf{k}_0 es un extremo de la banda con simetría esférica, la energía debe depender cuadráticamente cerca del mismo.

Si ahora se define a la *masa efectiva* m^* como:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n',0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0} \rangle|^2}{E_{n,0} - E_{n',0}}, \quad (1.11)$$

la expansión de la energía resulta:

$$E_n(k) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (1.12)$$

A m^* se lo denomina la *masa efectiva* del material pues como se nota en la Ec.(1.12), puede considerarse que la masa del electrón en un sólido difiere de la de un electrón libre debido al acoplamiento entre estados electrónicos entre diferentes bandas a través del término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, como se muestra en la Ec.(1.11).

De esta manera, en los modelos que se considerarán a partir de las Sección 2.1 se resumirá toda la información que contiene la banda de conducción y la banda de valencia de un semiconductor sin defectos tomando dos valores distintos de masa efectiva para cada una de las bandas.

1.1.3. Excitones

La estructura energética de los semiconductores y el hecho de que presenten gaps de bajas energías produce que ciertos fenómenos físicos no puedan ser modelados utilizando la aproximación de electrones independientes. Un ejemplo de esto se da cuando sobre un semiconductor inciden fotones con la suficiente energía como para excitar un electrón de la banda valencia hacia la banda de conducción como se muestra en la Fig.(1.3). Las propiedades de conducción de la banda de valencia con un electrón menos pueden describirse mediante una única partícula de carga positiva denominada *hueco*. Esta partícula tendrá la masa efectiva de un electrón en la banda de valencia.

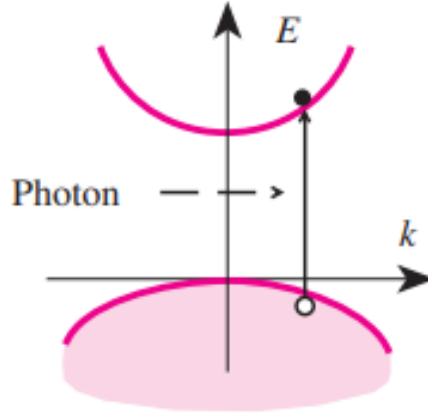


Figura 1.3: Esquema del proceso de absorción de un fotón y creación de un par electrón-hueco.

Distintos experimentos muestran que las cargas positivas y negativas de las distintas bandas interactúan. Este par se denomina excitón, y la interacción se modela mediante interacción Coulombiana. Debido a la interacción atractiva del par electrón-hueco, el excitón posee una energía menor que la que tendrían dichas partículas libres.

En bulk, mediante un modelo muy simple, el electrón y el hueco pueden considerarse como partículas libres, donde el único efecto de las bandas de energía está contenido en las masas efectivas. A su vez, en la mayoría de los semiconductores la constante dieléctrica suele ser muy grande. Como resultado, la interacción electrostática es menor que la de las mismas cargas en el vacío. A partir de este modelo se puede tomar al radio efectivo de la partícula en el estado fundamental r_0 y su energía efectiva E_H como:

$$a_x^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu e^2}, \quad (1.13)$$

$$E_H = \frac{\hbar^2}{\mu a_x^{*2}}, \quad (1.14)$$

donde μ es la masa efectiva reducida de las partículas, ϵ la constante dieléctrica del material y e la carga del electrón. Como el factor multiplicativo ϵ suele ser muy grande, el radio efectivo de los excitones es mucho mayor que la constante de red del material en el que se generan. Por otro lado, la energía fundamental del excitón adopta valores menores con respecto al vacío.

La aproximación antes mencionada, en la que el efecto de una banda de energía se expresa en las masas efectivas deja de ser representativa para el caso de nanoestructuras, donde se produce un confinamiento tanto del electrón como del hueco.

1.2. Nanoestructuras Semiconductoras

En la Sección 1.2. se hizo énfasis en semiconductores en bulk, con una cantidad de átomos del orden de 10^{23} . Las nanoestructuras por otro lado, son sistemas tridimensionales cuya longitud es del orden de los nanómetros y que al introducirse en semiconductores en bulk generan una pérdida de la simetría de traslación en alguna de las direcciones. Dicha pérdida de la simetría es ocasionada porque la nanoestructura presenta condiciones de borde en la interface con el semiconductor en bulk, o porque impone un potencial en la región donde está contenida.

El tamaño característico de las nanoestructuras (en la dimensión en la que generan la pérdida de simetría) son menores que las longitudes de onda de Broglie de electrones en la banda de conducción y en la banda de valencia, por lo tanto pueden manifestarse efectos de confinamiento de partículas y/o cambios en la estructura de bandas.

En esta sección se mencionarán algunos tipos de nanoestructuras, el proceso de creación del sistema estudiado en este trabajo y se detallará cuáles son los efectos del confinamiento cuántico de electrones y huecos en estas estructuras embebidas en un semiconductor macroscópico.

1.2.1. Tipos de nanoestructuras

Las nanoestructuras que se estudiarán son denominadas *auto-ensambladas*, las mismas son introducidas dentro de semiconductores cuyo material difiere del de dichas estructuras. Al ser de distintos materiales, sus estructuras de bandas son distintas, y la diferencia entre ellas genera el confinamiento cuántico.

El confinamiento cuántico produce en algunos casos la aparición de un espectro discreto, y cambia las propiedades de los estados de las bandas de energía. El interés en estos sistemas se manifiesta en que estos niveles de energía dependen de la forma de dichas estructuras. A continuación se

describirán brevemente tres de estas nanoestructuras: pozos cuánticos, hilos cuánticos y puntos cuánticos.

Un pozo cuántico o *Quantum Well* (QW) consiste en un pozo de potencial que restringe el movimiento de las partículas, confinándolas en dos dimensiones. En la Fig.(1.4) se muestra la disposición de distintos QW's entre dos semiconductores diferentes y su correspondiente diagrama de bandas.

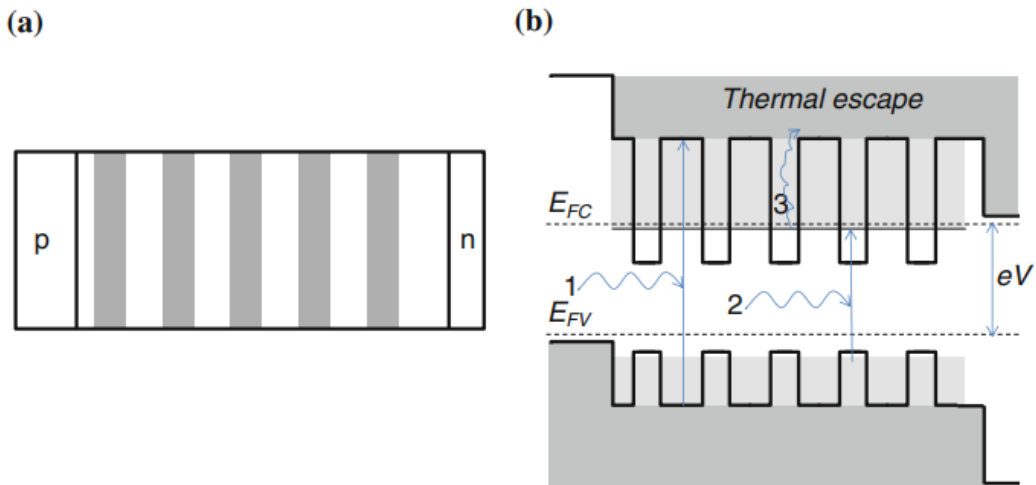


Figura 1.4: **a)** Esquema de la disposición espacial de diferentes QW's entre dos semiconductores distintos, uno de tipo n y otro de tipo p. **b)** Diagrama de bandas generado por diferentes QW's entre dos semiconductores distintos. E_{FC} y E_{FV} son las bandas de conducción y de valencia del dispositivo formado por los semiconductores n-p respectivamente. Se destacan dos procesos distintos dados por la absorción de fotones con diferentes energías. Con distintos tonos de grises se representa la densidad de estados: los tonos más claros denotan menor densidad.

Como se ve en la Fig.(1.4), las bandas de conducción y de valencia de los distintos QW's se encuentran por debajo y por encima de la banda de conducción y de valencia de los semiconductores donde se encuentran embebidos, respectivamente.

Se puede ver que el confinamiento de las partículas en una dirección genera funciones de onda correspondientes a niveles de energía discretos ubicados apenas por debajo de la banda de conducción. Sin embargo, dada la extensión

de las funciones de onda en las otras dos direcciones, las energías permitidas forman un continuo que comienza en el nivel discreto y se extiende hacia arriba.

Por otro lado, un hilo cuántico o *Quantum Wire* consiste en un cable conductor que confina a las partículas a una dimensión, pudiendo moverse libremente sólo en el eje transversal al cable como se muestra en la Fig.(1.5). El análisis del diagrama de bandas en estas estructuras es similar al de los Quantum Wells debido al grado de libertad en el eje transversal.

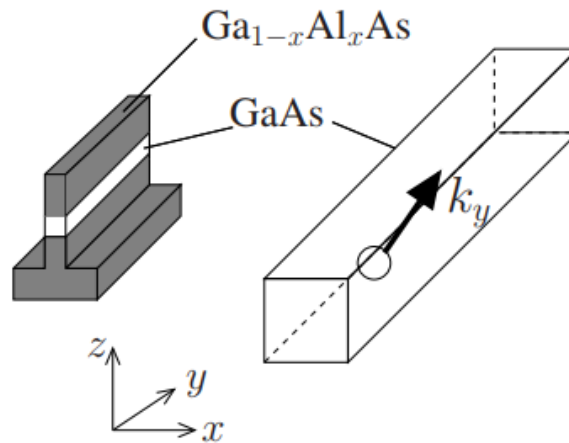


Figura 1.5: Disposición de un Quantum Wire de GaAs en un arreglo de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Las partículas sólo se mueven libremente a lo largo del eje transversal, en la dirección y .

Por último, los puntos cuánticos o *Quantum Dots* (QD) son estructuras denominadas cero-dimensionales, pues confinan a las partículas en las tres dimensiones.

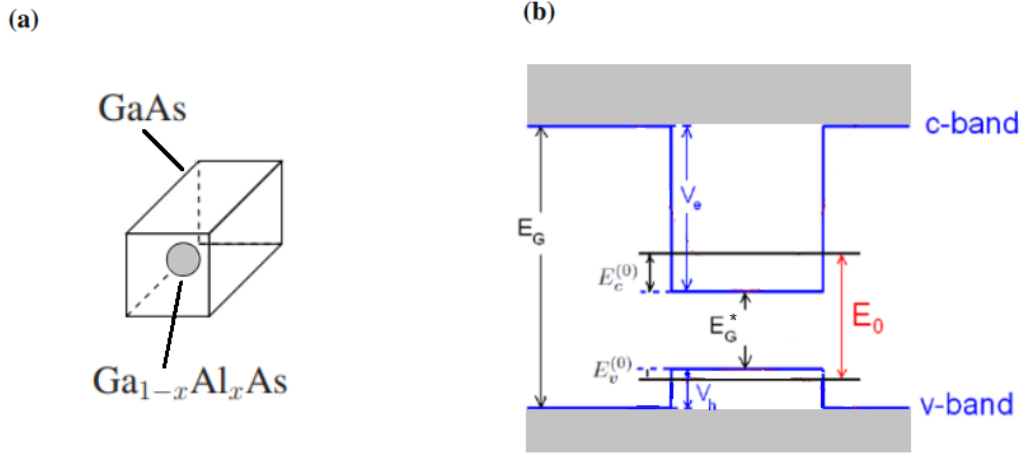


Figura 1.6: **a)** Esquema de un QD de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ embebido en un semiconductor de GaAs. **b)** Diagrama de bandas generado por un QD embebido en un semiconductor. E_C^0 y E_V^0 son las bandas de conducción y de valencia del QD. E_G es el gap de energía del semiconductor en bulk, mientras que E_G^* es el del QD.

Nuevamente, la banda de conducción y de valencia del QD se encuentra por debajo y por encima de la banda de conducción y de valencia del semiconductor en bulk, respectivamente.

Ahora la función de onda esta confinada en las tres direcciones, puede darse la aparición de niveles de energía discretos.

Si el número de grados de libertad se denota como \mathcal{D}_f y el número de direcciones de confinamiento como \mathcal{D}_c , todo sistema de estado sólido cumple [4]:

$$\mathcal{D}_f + \mathcal{D}_c = 3 \quad (1.15)$$

En este trabajo se estudiarán los efectos del confinamiento cuántico en un QD de GaAs.

1.2.2. Estructura del trabajo

El objetivo del Capítulo 2 es que el lector comprenda los métodos de cálculo que se utilizan a lo largo de esta tesis y corroborar su validez mediante la comparación con los resultados obtenidos por Sakiroglu, S. y colaboradores [5]. Para empezar, se plantea el Hamiltoniano con el que se modela un excitón

formado en un QD de GaAs cuyas partículas están fuertemente ligadas en un potencial de confinamiento cuadrático. Luego, se detalla el método variacional con el que se computan aproximaciones variacionales para las energías del sistema y se presentan las funciones de prueba de Hylleraas, que son una base de funciones adecuada para estudiar sistemas con interacciones Coulombianas. Seguido a esto, se propone un método de cálculo analítico para obtener los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición del problema. Por último, se muestran los resultados obtenidos y se comparan con otros trabajos [5].

En el Capítulo 3, se propone un modelo en el que las partículas están confinadas en un potencial de profundidad y rangos finitos. Se detalla el cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición del problema y se muestra cómo se calcula la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón. Por último, se muestra cómo varía la energía del sistema en función del radio del QD y el comportamiento de la energía de interacción Coulombiana entre las partículas.

En el Capítulo 4, se trata el problema de un electrón y un hueco como partículas independientes no interactuantes y distinguibles confinadas en un potencial del mismo tipo que el considerado en el Capítulo 3. Además, se calcula la energía de interacción entre ambas mediante la Teoría de perturbaciones a primer orden. De este modo, se muestra cómo varía la energía del estado fundamental de un electrón y un hueco como función del radio del QD. Por último, se compara la energía de interacción Coulombiana obtenida perturbativamente con la energía de interacción Coulombiana del sistema interactuante.

Capítulo 2

Modelo para un excitón confinado en un QD

En este capítulo se presenta el Hamiltoniano con el que se modelará la interacción de un par electrón-hueco confinados en un QD esférico utilizando un potencial cuadrático.

Primero, se explicitarán las unidades y coordenadas que se considerarán para tratar el problema. Luego, se comenta sobre el principio variacional de Rayleigh-Ritz con el cuál se calculó la energía del estado fundamental del sistema. Posteriormente, se introducen las transformadas integrales necesarias para poder calcular analíticamente los elementos de matriz del Hamiltoniano. Por último, se muestran los resultados obtenidos para distintos tamaños del QD.

2.1. Hamiltoniano de un exciton en un QD esférico

Antes de presentar el Hamiltoniano estudiado, se analizarán las coordenadas a utilizar. En función de que usaremos funciones de prueba que contengan un término de interacción entre el electrón y el hueco confinados en el QD, se hace uso de las coordenadas bipolares [6]. Las mismas constan de tres variables: dos de ellas que denotan la distancia desde el origen hacia la posición del electrón y el hueco, \mathbf{r}_e y \mathbf{r}_h , respectivamente, y una tercera que expresa la distancia que existe entre electrón y el hueco, $\mathbf{r}_{eh} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, como muestra la Fig.(2.1).

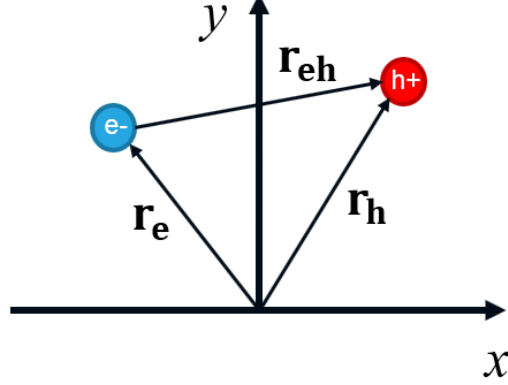


Figura 2.1: Esquema en el que se muestran las coordenadas bipolares posteriormente utilizadas en el Hamiltoniano.

De este modo, el Hamiltoniano utilizado para modelar un excitón de momento angular nulo en un QD esférico dentro del régimen de masa efectiva es el siguiente:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\nabla_h^2 + V(r_e) + V(r_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{eh}}, \quad (2.1)$$

donde el subíndice e hace referencia al electrón y el subíndice h al hueco. Los parámetros m_e^* y m_h^* son la masa efectiva isotrópica del electrón y el hueco, respectivamente. Por otro lado, ϵ es la constante dieléctrica relativa del material donde las partículas están inmersas. En el modelo planteado se desprecia la perturbación generada al potencial Coulombiano debido a la diferencia entre los medios dieléctricos del QD y la matriz donde está embebido.

En un principio, los potenciales de confinamiento $V(r_i)$ ($i=e,h$) fueron considerados como parabólicos. Esta es una buena aproximación para estados muy ligados.

De esta manera, el potencial esférico en el que se encuentran las partículas está dado por:

$$V(r_i) = \frac{1}{2}m_i^*w_0^2r_i^2 \quad (i = e, h), \quad (2.2)$$

donde w_0 es la frecuencia, que se asume igual para las dos partículas. Los potenciales cuadráticos son buenas aproximaciones para materiales como GaAs [7]. Por este motivo, todos los parámetros utilizados corresponderán a este material.

Lo próximo a analizar, son las unidades en las que se tratará el problema. En principio, se define la masa efectiva reducida como $\mu = 1/(m_e^{*-1} + m_h^{*-1})$ y la masa efectiva adimensionalizada para cada partícula como $\sigma_i = m_i/\mu$. A partir de esto, se utilizará como unidad de longitud al radio de Bohr efectivo del material semiconductor del QD $a_x^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2/\mu e^2$ y como unidad de energía a la energía de Harthree efectiva $E_H^* = \hbar^2/\mu a_x^{*2}$. Estas unidades son útiles para el problema tratado, pues para la mayoría de los semiconductores, un radio de Bohr efectivo es del orden de magnitud de los nanómetros, mientras que un de Harthree efectivo toma valores del orden de magnitud de los milielectronvoltios y los resultados serán comparados con semiconductores en bulk. Los órdenes de magnitud son similares a las longitudes características de un QD y las energías de un excitón confinado.

De esta manera, se adimensionaliza el Hamiltoniano del sistema:

$$\hat{H}^* = \frac{\hat{H}}{E_H^*} = -\frac{1}{2\sigma_e} \nabla_{\tilde{r}_e}^2 - \frac{1}{2\sigma_h} \nabla_{\tilde{r}_h}^2 + V(\tilde{r}_e) + V(\tilde{r}_h) - \frac{1}{r_{eh}}, \quad (2.3)$$

donde ahora los potenciales de confinamiento están dados por:

$$V(\tilde{r}_i) = \frac{1}{2}\sigma_i W^2 \tilde{r}_i^2. \quad (2.4)$$

En la Ec. (2.3) y (2.4) denotamos a \tilde{r}_i y W como la coordenada y frecuencia parabólica adimensionalizada respectivamente. Sin embargo, en lo que sigue no se utilizará la notación \tilde{r}_i , sino que simplemente se escribirá r_i por simplicidad.

Se toma a l_0 como la longitud característica de una partícula libre de masa σ_i en un potencial cuadrático con frecuencia w_0 . De este modo, se espera que el parámetro $W = \sqrt{a_x^*/l_0}$ sea de orden 1.

2.2. Parámetros utilizados para el GaAs

Como se modelará un excitón dentro de un QD de GaAs, se explicitará el valor de los parámetros de la Sección 2.1:

- $\epsilon = 13,1$
- $m_e^* = 0,067m_0$
- $m_h^* = 0,090m_0$
- $\mu = 0,038m_0$
- $\sigma_e = 1,76$
- $\sigma_h = 2,34$
- $a_x^* = 341 [a_0]$
- $E_H^* = 2,239 \times 10^{-4} [E_H]$

Cabe destacar, que a lo largo de este trabajo se considerarán huecos livianos (no huecos pesados) ya que poseen energías mayores y están mejor descriptos por modelos de momento angular nulo . Por ende, el valor de la masa efectiva m_h^* , corresponde a la de un hueco liviano en GaAs.

Las longitudes características de un QD son del orden de los 10 [nm] , mientras que el valor de un radio de bohr efectivo para el GaAs es de 18 [nm]. Por otro lado, los valores de energía de un excitón son del orden de 10 [meV], mientras que un Hartree de energía efectivo para el GaAs es 6,1 [meV].

Esto nos dice que las unidades escogidas resultan en ecuaciones con parámetros adimensionales pequeños.

2.3. Principio variacional de Rayleigh-Ritz

Para obtener valores aproximados de la energía del sistema dados determinados parámetros, se hizo uso del principio variacional de Rayleigh-Ritz. Dado un Hamiltoniano \hat{H} , el método consiste en utilizar funciones de prueba $|\psi\rangle$ formadas por una combinación lineal de \mathbf{n} estados $|i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |i\rangle, \quad (2.5)$$

donde el conjunto $\{i\}_{i=1,n}$ no necesariamente es un conjunto de funciones ortonormales, por lo que:

$$\langle i|j\rangle = \hat{S}_{i,j}. \quad (2.6)$$

Escribiendo el valor de expectación del Hamiltoniano utilizando dichos estados de prueba se obtiene:

$$E_\psi = \frac{(\sum_{j=1}^n c_j^* \langle j|) \hat{H} (\sum_{i=1}^n c_i |i\rangle)}{(\sum_{i,j=1}^n c_j^* \hat{S}_{j,i} c_i)} = \frac{\sum_{i,j=1}^n c_j^* \hat{H}_{i,j} c_i}{(\sum_{i,j=1}^n c_j^* \hat{S}_{i,j} c_i)}. \quad (2.7)$$

Luego, minimizando el valor de expectación E_ψ con respecto a los coeficientes de superposición c_i, c_j^* :

$$\frac{\partial E_\psi}{\partial c_i} = \frac{\partial E_\psi}{\partial c_j^*} = 0, \quad (2.8)$$

se obtiene un conjunto de \mathbf{n} ecuaciones lineales:

$$\sum_{i=1}^n H_{i,j} c_i = E_\psi \sum_{i=1}^n S_{i,j} c_i. \quad (2.9)$$

En resumen, el método de Rayleigh-Ritz se trata de tomar una base finita de \mathbf{n} funciones y resolver un problema de autovalores de una matriz $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$, donde los autovectores son los coeficientes de superposición c_i de la función de prueba, Ec.(2.5). Debido a esto, la elección de una función de prueba adecuada para el sistema es fundamental si se buscan valores precisos usando un conjunto de funciones $\{\psi_i\}_{i=1,N}$ pequeño.

Debido al término de interacción Coulombiana entre el electrón y el hueco en el Hamiltoniano del sistema que se desea resolver Ec.(2.3), se buscó incorporar en las funciones de prueba términos dependientes de la coordenada r_{eh} . Las funciones de Hylleraas han sido usadas en la física atómica para modelar eficientemente el estado fundamental de átomos con dos electrones [8]. Al tener un sistema con dos partículas interactuantes se hizo uso de las mismas:

$$\Phi^N(r_e, r_h, r_{eh}) = \sum_N C_N \psi^N(r_e, r_h, r_{eh}), \quad (2.10)$$

donde:

$$\psi^N(r_e, r_h, r_{eh}) = \phi(r_e) \phi(r_h) e^{-\lambda r_{eh}} r_e^{n_e} r_h^{n_h} r_{eh}^{n_{eh}}. \quad (2.11)$$

Las funciones $\phi(r_e)$ y $\phi(r_h)$ son las soluciones del estado fundamental de un sistema de una partícula no interactuante en el potencial cuadrático. Dichas funciones están dadas por:

$$\phi(r_i) = e^{-\gamma W \sigma_i \frac{r_i^2}{2}}. \quad (2.12)$$

Las funciones de Hylleraas, Ec.(2.11), están dadas por un conjunto de parámetros $N \equiv \{n_e, n_h, n_{eh}\}$ enteros positivos. El término $e^{-\lambda r_{eh}}$ se incorpora para incluir la correlación entre el electrón y el hueco. Por último, γ y λ son parámetros variacionales no lineales que cambian el tamaño de la región espacial donde estos términos intervienen y deben ser optimizados para minimizar la energía del estado fundamental.

Para el cálculo de las energías del estado fundamental del sistema en función del radio del QD se utilizaron 20 funciones de la base de Hylleraas.

2.4. Elementos de matriz del Hamiltoniano

Utilizando que el operador momento es Hermitiano:

$$\langle M | p^2 | N \rangle = \langle pM | pN \rangle, \quad (2.13)$$

donde M y N representan distintos conjuntos de parámetros de la función de Hylleraas, para el caso del excitón se tiene que los elementos de matriz del Hamiltoniano $\hat{H}_{M,N}$ son:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{M,N} = & \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_e} \nabla_{r_e} \psi^{M*} \cdot \nabla_{r_e} \psi^N + \psi^{M*} V(r_e) \psi^N \right] \\ & \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_h} \nabla_{r_h} \psi^{M*} \cdot \nabla_{r_h} \psi^N + \psi^{M*} V(r_h) \psi^N \right] \\ & \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\psi^{M*} U(r_{eh}) \psi^N \right], \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde $U(r_{eh}) = 1/r_{eh}$.

Usando que el operador gradiente en coordenadas bipolares está dado por:

$$\nabla_i = \hat{r}_i \frac{\partial}{\partial r_i} + \hat{r}_{eh} \frac{\partial}{\partial r_{eh}}, \quad (i = e, h), \quad (2.15)$$

se obtiene:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{M,N} = & \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_e} \frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_e} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_e} + \psi^{M*} V(r_e) \psi^N \right] \\
& \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_e} \left(\frac{r_e^2 - r_h^2 + r_{eh}^2}{2r_e r_h} \right) \left(\frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_e} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_{eh}} + \frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_{eh}} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_e} \right) \right] \\
& \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_h} \frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_h} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_h} + \psi^{M*} V(r_h) \psi^N \right] \\
& \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2\sigma_h} \left(\frac{r_h^2 - r_e^2 + r_{eh}^2}{2r_h r_{eh}} \right) \left(\frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_h} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_{eh}} + \frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_{eh}} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_h} \right) \right] \\
& \int \int d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \psi^{M*}}{\partial r_{eh}} \frac{\partial \psi^N}{\partial r_{eh}} + \psi^{M*} U(r_{eh}) \psi^N \right].
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Al hacer el reemplazo de las funciones de prueba de Hylleraas, Ec.(2.11), en la Ec.(2.16) se utilizan dos identidades típicamente empleadas para el cálculo en QDs 3D [9] :

$$\frac{e^{\lambda r}}{r} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{(\lambda^2 + q^2)} d\mathbf{q}, \tag{2.17}$$

$$\frac{1}{r_{eh}} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h}}{R^2} d\mathbf{R}. \tag{2.18}$$

Las mismas permiten lograr la siguiente expresión integral para los términos que incluyen a la coordenada r_{eh} en la Ec.(2.16):

$$\begin{aligned}
& \int \int d\Omega_e d\Omega_h e^{-\lambda r_{eh}} r_{eh}^{(p-1)} \\
& = 32\pi \int_0^\infty dq \frac{\sin(qr_e)}{r_e} \frac{\sin(qr_h)}{r_h} Q_{3D}(q, \lambda, p), \quad (p = 0, 1, 2, \dots),
\end{aligned} \tag{2.19}$$

donde:

$$Q_{3D}(q, \lambda, p) = (-1)^p \frac{\partial^p}{\partial \lambda^p} \left[\frac{1}{\lambda^2 + q^2} \right]. \tag{2.20}$$

Una vez utilizado el resultado de la integral de la Ec.(2.19), las integrales resultantes para los términos de la Ec.(2.16) sólo dependen de las coordenadas r_e y r_h . Las mismas están dadas por [10]:

$$\int_0^\infty r_i^{k+m+n+1} e^{-\gamma W \sigma_i r_i^2} \sin(qr_i) dr_i = G_{3D}(q, \gamma, \sigma_i, W, n, m, k), \quad (2.21)$$

donde:

$$G_{3D}(q, \gamma, \sigma_i, W, n, m, k) = \frac{q}{2} (W \gamma \sigma_i)^{\frac{k+m+n+2}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2)\right) \times {}_1F_1\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2); \frac{3}{2}; -\frac{q^2}{4W\gamma\sigma_i}\right). \quad (2.22)$$

En la Ec.(2.22), k es un número entero, Γ es la función Gamma y ${}_1F_1$ es la función hipergeométrica confluyente.

De esta manera, se obtienen los siguientes elementos de matriz para la matriz de superposición \hat{S} :

$$S_{M,N} = 32\pi \int_0^\infty Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1) \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, ne, me, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, nh, mh, 1) dq. \quad (2.23)$$

Resumiendo, los elementos de matriz del Hamiltoniano se escriben en términos de los coeficientes A_G, B_G, C_G, D_G definidos en el Apéndice A como:

$$H_{M,N} = 32\pi \int_0^\infty [Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh - 1) D_G + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh) C_G + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1) B_G + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 2) A_G] dq \quad (2.24)$$

Para resolver el problema de autovalores de Rayleigh-Ritz, Ec.(2.9), tanto los elementos de matriz de \hat{H} como de \hat{S} deben ser calculados numéricamente. Los detalles de la implementación numérica serán discutidos en el Apéndice C.

2.5. Resultados

Se utilizó el software Mathematica para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición. Una vez

calculados estos elementos de matriz, se resuelve el problema de autovalores, Ec.(2.9), empleando la rutina 'DSGYV' de la librería Lapack. Para más detalles sobre el cálculo numérico lea el Apéndice C.

Se construyeron la matrices del Hamiltoniano y la matriz de superposición utilizando 20 funciones de la base de Hylleraas.

Como se mencionó anteriormente, esta parte del trabajo es una corroboración de los resultados obtenidos en el artículo de Sakiroglu, S. y colaboradores [5]. Es por esto que a los parámetros variacionales no lineales los tomamos como parámetros fijos, iguales a los optimizados en el trabajo mencionado anteriormente. De este modo, $\gamma = 0,95$ y $\lambda = 0,7$. Aunque los métodos de cálculo fueron tomados de dicho artículo, las cuentas analíticas y el trabajo numérico tuvieron que realizarse desde cero.

Como a lo largo de esta tesis se utiliza el método variacional de Rayleigh-Ritz para calcular los autovalores del problema de autovalores, Ec.(2.9), siempre nos referiremos a las energías del sistema como dichos autovalores. Sin embargo, estos son cotas superiores para las energías.

Los resultados obtenidos para la energía del estado fundamental del excitón confinado en un pozo de potencial cuadrático en función de la frecuencia W se muestran en la Fig.(2.2). En los programas utilizados a lo largo de este trabajo, los potenciales y radios se eligen para que sean múltiplos del radio de Bohr efectivo, a_x^* , en el caso de las longitudes y múltiplos de un Hartree efectivo, E_H^* , en el caso de las energías. Sin embargo, en las gráficas se utilizarán siempre unidades de nanómetros (nm) para las longitudes y milielectronVoltios (meV) para las energías.

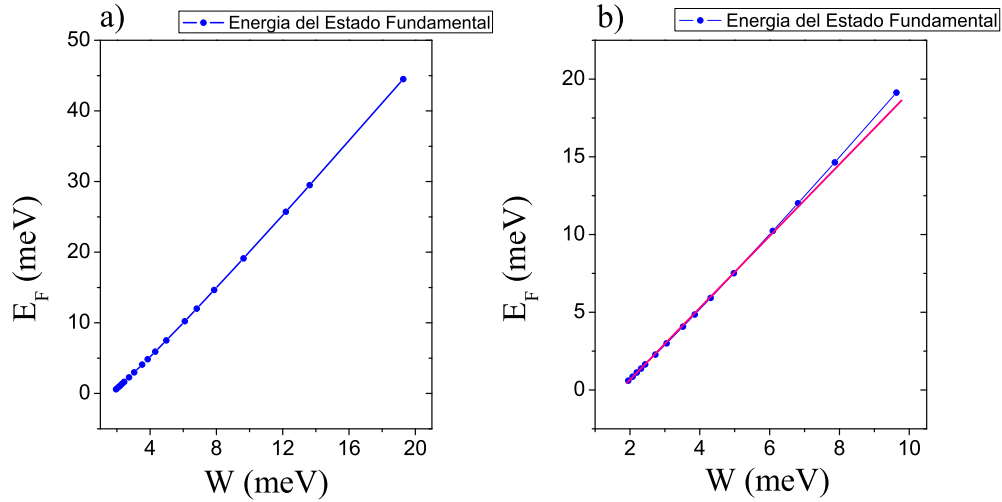


Figura 2.2: **a)** Energía del estado fundamental de un excitón, E_F , en un potencial cuadrático en función del ancho de la parábola W . **b)** Energía del estado fundamental de un excitón, E_F , para valores de $W < 10$ meV. Con puntos azules se muestran los valores de energía obtenidos al resolver el problema de autovalores de la Ec.(2.9).

Cabe destacar que como el potencial es cuadrático todos los estados serán estados ligados, es por eso que todas las energías mostradas en la Fig.(2.2) son energías de ligadura.

En la Fig.(2.2.a) se puede ver que para frecuencias crecientes, la energía del estado fundamental del excitón aumenta. Esto ocurre debido a que las energías de confinamiento del electrón y el hueco crecen con W . Por otro lado, a medida que el parámetro W decrece, el confinamiento es cada vez más débil y el comportamiento del excitón se asemeja al de uno en bulk. En la Fig.(2.2.b) se muestran las energías del estado fundamental para un intervalo $W < 10$ meV. A partir de la recta de color rojo trazada, se aprecia que para valores de $W < 6,5$ meV la energía tiene un comportamiento lineal. Sin embargo, para valores de $W > 6,5$ meV la pendiente de la curva es distinta. En la Fig.(2.3) se muestran dos ajustes lineales sobre los resultados: uno para valores de $W < 6,5$ meV y otro para valores de $W > 6,5$ meV.

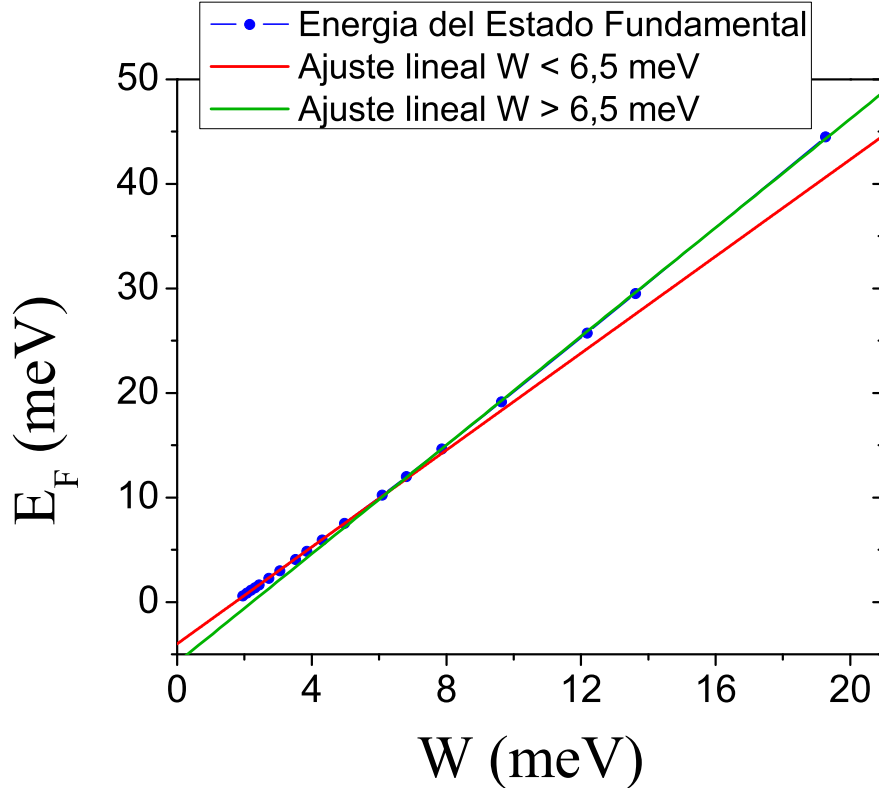


Figura 2.3: Energía del estado fundamental de un excitón, E_F , en un potencial cuadrático en función del ancho de la parábola W . Con una recta roja se muestra un ajuste lineal sobre los resultados para valores de $W < 6,5$ meV, mientras que con una recta verde para valores de $W > 6,5$ meV. Con puntos azules se muestran los valores de energía obtenidos al resolver el problema de autovalores de la Ec.(2.9).

Se puede ver que las pendientes de las rectas son distintas. Para valores grandes de W la pendiente es mayor. Como la energía de confinamiento es grande, el comportamiento de las energías es similar a la de dos partículas independientes confinadas en un pozo de potencial cuadrático. Mientras que, para valores pequeños de W , la energía de interacción es comparable a la energía de confinamiento y la pendiente de la curva se modifica.

Además, se graficó la energía del estado fundamental del excitón en función de la longitud característica $l_0 = a_x^*/W^2$ de una partícula libre de masa σ_i en un potencial cuadrático. El resultado se muestra en la Fig.(2.4). A me-

didada que el radio del QD crece, la energía del estado fundamental del sistema disminuye y es similar al comportamiento en el bulk. Mientras que a medida que el radio decrece, el confinamiento es más fuerte y la energía del excitón aumenta.

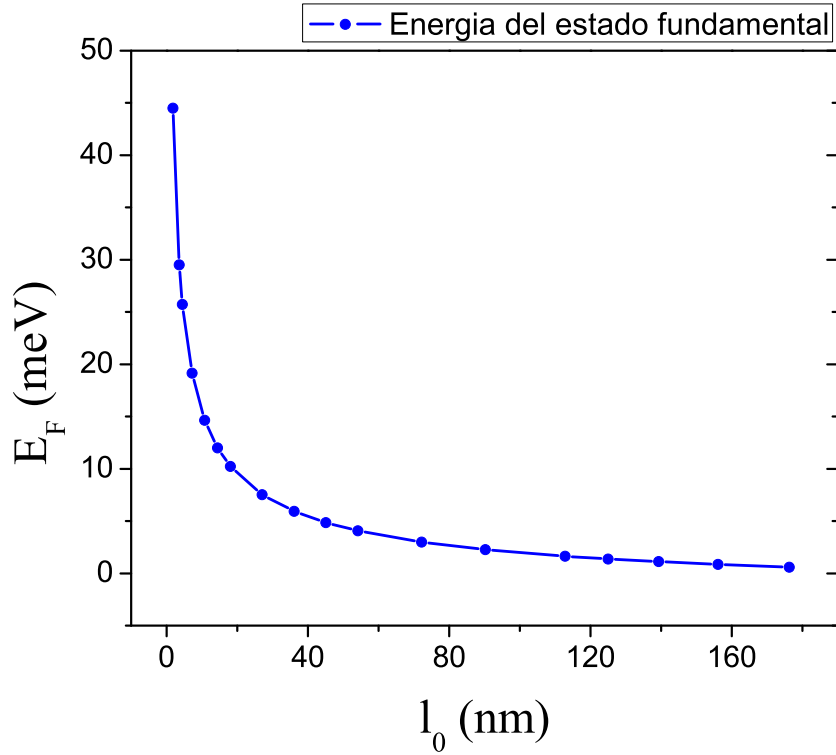


Figura 2.4: Energía del estado fundamental de un excitón, E_F , en un potencial cuadrático en función de la longitud característica l_0 . Con puntos azules se muestran los valores de energía obtenidos al resolver el problema de autovalores de la Ec.(2.9).

Si se relaciona la longitud característica l_0 con el tamaño del QD se puede observar que a medida que dicho tamaño decrece, la energía del estado fundamental crece rápidamente, mientras que para tamaños más grande la energía tiende a la energía del excitón en bulk.

Los resultados obtenidos coinciden con los calculados por Sakiroglu, S. y colaboradores [5]. La ventaja que posee el cálculo de los elementos de matriz

del Hamiltoniano utilizando funciones de Hylleraas es que con pocas funciones de la base se pueden obtener resultados muy precisos. En el trabajo de V. Halonen [11] se utilizaron 500 funciones de la base del sistema de partículas no interactuantes para poder describir con precisión la energía del estado fundamental del excitón.

Para tener una noción acerca de cómo es la energía de interacción en el estado fundamental del sistema, se restó la energía de dos partículas independientes confinadas en un pozo de potencial cuadrático, $E_{cuad} = 3W$, a la energía del estado fundamental del sistema. En la Fig.(2.5) se muestran los resultados.

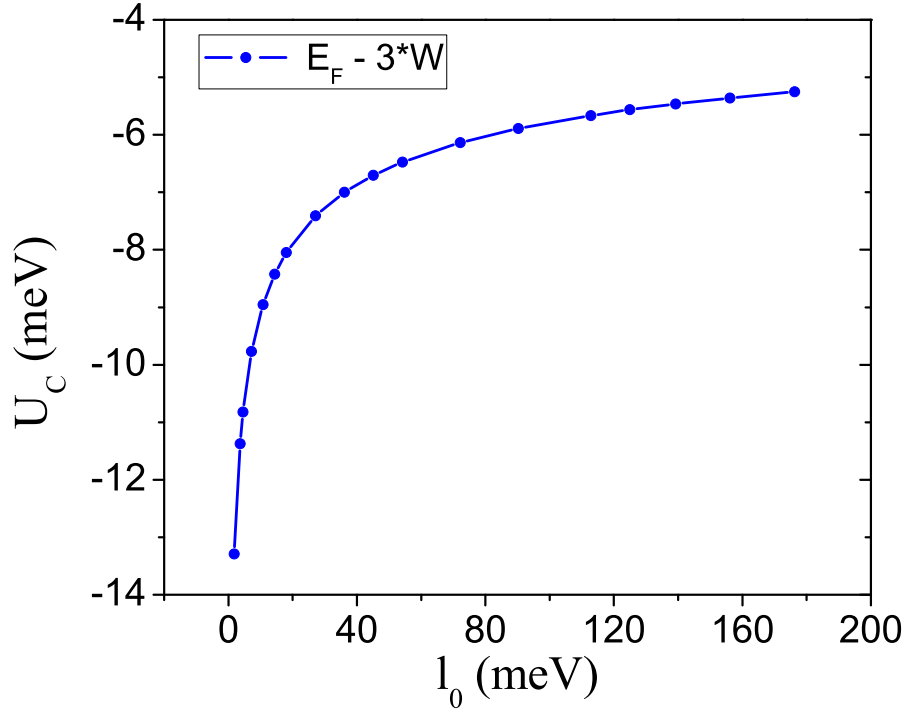


Figura 2.5: Energía de interacción en el estado fundamental, U_C , en un potencial cuadrático en función de la longitud característica l_0 .

Se puede ver que para tamaños del QD crecientes la energía de interacción crece hasta mantenerse prácticamente constante, mientras que para tamaños

del QD decrecientes la energía decrece monótonamente.

El carácter infinito del potencial cuadrático que utilizamos como modelo de potencial de confinamiento impone que las soluciones necesariamente sean estados ligados. Por ende, este modelo es favorable ante soluciones de un sistema donde el electrón y el hueco están muy ligados en sus respectivas bandas. Sin embargo, si se quisiera estudiar un sistema donde la ligadura de las partículas dependa fuertemente del radio del QD se debería hacer uso de un potencial de confinamiento finito en su profundidad y su rango.

2.6. Conclusiones

En esta sección se pudo realizar un cálculo analítico de la energía del estado fundamental de un excitón confinado en un QD esférico. Para ello se utilizaron las autofunciones de Hylleraas y mediante la introducción de transformadas de Fourier se pudieron calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano. Luego, utilizando el principio variacional de Rayleigh-Ritz se consiguieron computar valores de la energía del estado fundamental del excitón en función del parámetro del potencial W y la longitud característica l_0 .

Se muestra que a medida que el radio del QD crece o bien la frecuencia de la parábola W decrece, la energía del estado fundamental del excitón disminuye. Por otro lado, a medida que el radio decrece o la frecuencia de la parábola W aumenta, el potencial de confinamiento es mayor y por ende aumenta la energía del excitón.

Además, se estimaron valores para la energía de interacción Coulombiana. Se pudo ver que para tamaños crecientes del QD la energía de interacción crece hasta mantenerse prácticamente constante, mientras que para tamaños decrecientes del QD la energía decrece monótonamente.

El comportamiento monótonamente creciente de la energía a medida que el radio del QD disminuye está arraigado al uso del potencial cuadrático como potencial de confinamiento. En la próxima sección se estudiará el problema de un excitón confinado en un potencial finito para poder analizar un sistema donde no se asuma una fuerte ligadura de las partículas en cada una de sus bandas.

Capítulo 3

Confinamiento de los portadores de carga en un potencial Gaussiano

En este Capítulo se modificará el potencial de confinamiento de las partículas dentro del QD esférico con la finalidad de modelar un sistema que posea un espectro discreto y continuo según varíe el tamaño del QD, es decir con autoestados ligados y estados del continuo.

El potencial de confinamiento cuadrático posee una profundidad y rango infinitos, lo que implica que una partícula confinada en el mismo presentará infinitos estados ligados. Distintos cálculos teóricos muestran que potenciales de la forma de exponenciales de potencias dan buenas aproximaciones para el espectro de sistemas de dos partículas atrapadas en un QD de GaAs [12],[13]. En esta parte del trabajo se estudiará el caso en que el potencial es de tipo Gaussiano. Como este potencial no ha sido considerado previamente utilizando la base de funciones de Hylleraas, estudiamos la optimización de los parámetros no lineales del sistema, y una vez optimizados, se calcularon los valores de la energía del excitón en el estado fundamental en función del radio del QD.

Por conveniencia, para comparar con los resultados del Capítulo 2 se mantendrá el mismo sistema de unidades de la Sección 2.2. Es decir, las coordenadas espaciales se medirán en términos del radio del Bohr efectivo para el GaAs, a_x^* , y la energía en términos de la energía de Hartree efectiva, E_H^* .

3.1. Potencial Gaussiano de confinamiento

Para el problema de un excitón confinado en potenciales Gaussianos se utilizó el Hamiltoniano de la Ec.(2.3), pero con el siguiente potencial:

$$V(r_i) = -V_0 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r_i}{R_0}\right)^2}, \quad (3.1)$$

donde V_0 es la profundidad del pozo de potencial y R_0 es el ancho del pozo como se muestra en la Fig.(3.1).

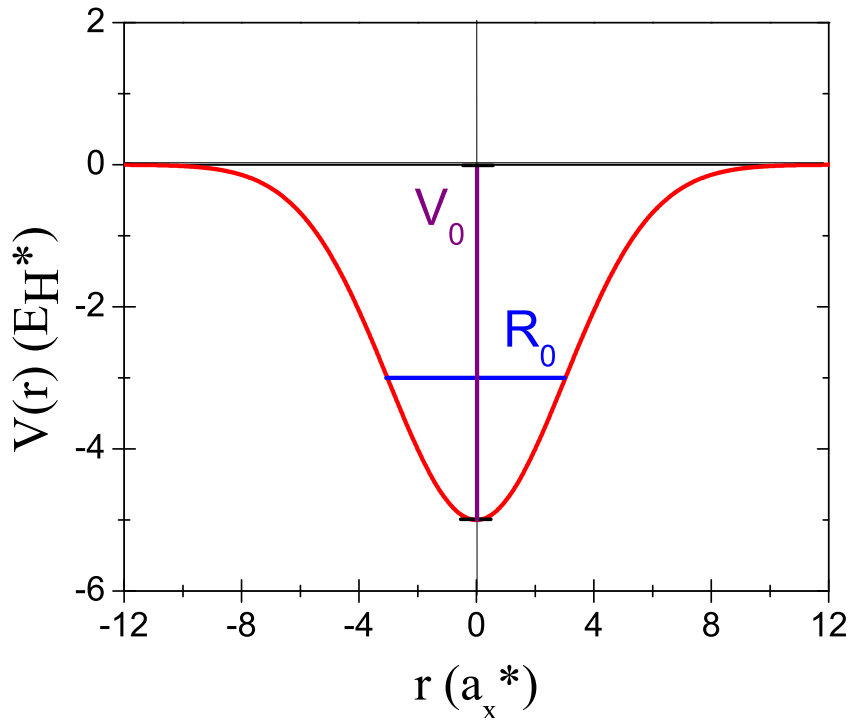


Figura 3.1: Pozo Gaussiano como potencial de confinamiento de las partículas del excitón. En azul se denota el ancho R_0 de un posible QD y en violeta la profundidad del pozo V_0

Las funciones $\phi(r_i)$ que se incluyen en las expresiones de la base de Hilleraas, Ec.(2.11), son las siguientes:

$$\phi(r_i) = e^{-\frac{\gamma}{2}(r_i)^2}. \quad (3.2)$$

Donde γ es un parámetro variacional no lineal que cambia el tamaño de la región espacial donde este término interviene. Recuerde que denotamos a r_i como la coordenada en dimensiones del radio efectivo de Bohr para el GaAS

3.2. Elementos de Matriz del Hamiltoniano

Se calcularon los elementos de matriz del Hamiltoniano y de la matriz de superposición \hat{S} para el potencial de confinamiento Gaussiano y las funciones de Hylleraas, respectivamente. El procedimiento es análogo al de la Sección 2.4, pero debido al cambio del potencial, deben definirse las siguientes funciones:

$$Y_{3D}^1(q, \gamma, n, m, k) = \frac{q}{2} \gamma^{\frac{k+m+n+2}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2)\right) \times {}_1F_1\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2); \frac{3}{2}; -\frac{q^2}{4\gamma}\right), \quad (3.3)$$

$$Y_{3D}^2(q, \gamma, R_0, n, m, k) = \frac{q}{2} \left(\gamma + \frac{1}{2R_0^2}\right)^{\frac{k+m+n+2}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2)\right) \times {}_1F_1\left(\frac{1}{2}(k+m+n+2); \frac{3}{2}; -\frac{q^2 R_0^2}{2(\gamma R_0^2 + 1)}\right). \quad (3.4)$$

Se puede notar que existe una correlación directa entre la función Y_{3D}^1 de la Ec.(3.3) y la función G_{3D} de la Ec.(2.22). De hecho, si se realiza el cambio del término multiplicativo $W\sigma\gamma \rightarrow \gamma$ se puede obtener la función G_{3D} a partir de la Ec.(3.3). Esto ocurre debido a que las funciones usadas para el caso de un potencial de confinamiento Gaussiano $\phi(r_i)$, Ec.(3.2), sólo difieren de las de la Ec.(2.12) por dicho término multiplicativo. Además, se debe observar que se introdujo una función Y_{3D}^2 que resulta de la integración de los términos de confinamiento en el Hamiltoniano. Esta función también difiere de las anteriores por un término multiplicativo que es más complejo que el de Y_{3D}^1 . Que sólo se presente dicho cambio en el factor multiplicativo se debe a que los potenciales de confinamiento Gaussiano son muy compatibles con la funciones de la base de Hylleraas al momento de integrar. Aunque la obtención de los elementos de matriz aparenta ser tan sencilla como realizar

este cambio en los factores multiplicativos, los cálculos deben desarrollarse y son muy complejos.

De esta manera, los elementos de matriz de la matriz de superposición \hat{S} son:

$$S_{M,N} = 32\pi \int_0^\infty Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1) \times Y_{3D}^1(q, \gamma, R_0, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, R_0, n_h, m_h, 1) dq. \quad (3.5)$$

Para poder realizar un análisis completo del cálculo de los elementos de matriz se separó el Hamiltoniano de la Ec.(2.3) de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \hat{H}_{Cine} + \hat{H}_{Cinh} + \hat{H}_{Pote} + \hat{H}_{Poth} + \hat{H}_{Cou}, \quad (3.6)$$

donde \hat{H}_{Cine} y \hat{H}_{Cinh} contienen los términos de energía cinética del electrón y el hueco respectivamente, \hat{H}_{Pote} y \hat{H}_{Poth} los términos de energía potencial y por último, \hat{H}_{Cou} el término de interacción Coulombiana.

Para el cálculo de los elementos de matriz de cada parte del Hamiltoniano se utilizaron los coeficientes $T_A^e, T_B^e, T_C^e, T_D^e, T_A^h, T_B^h, T_C^h, T_D^h, P^e, P^h, C_{ou}$ definidos en el Apéndice B:

$$H_{M,N}^{Cine} = 32\pi \int_0^\infty [Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh - 1)T_D^e + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh)T_C^e + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1)T_B^e + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 2)T_A^e] dq \quad (3.7)$$

$$H_{M,N}^{Cinh} = 32\pi \int_0^\infty [Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh - 1)T_D^h + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh)T_C^h + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1)T_B^h + Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 2)T_A^h] dq \quad (3.8)$$

$$H_{M,N}^{Pote} = 32\pi \int_0^\infty Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1)P_e dq \quad (3.9)$$

$$H_{M,N}^{Pote} = 32\pi V_0 \int_0^\infty Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh + 1) P_h dq \quad (3.10)$$

$$H_{M,N}^{Cou} = 32\pi V_0 \int_0^\infty Q_{3D}(q, 2\lambda, meh + neh) C_{ou} dq \quad (3.11)$$

Una de las ventajas del uso del potencial de confinamiento Gaussiano es que en los términos de potencial del Hamiltoniano Ec.(3.9) y Ec.(3.10) la profundidad del pozo V_0 se manifiesta de forma lineal y puede sacarse fuera de la integral. Como dichos elementos de matriz fueron evaluados con Mathematica esto resulta muy útil pues, para calcular las energías del sistema para diferentes profundidades del pozo sólo debe realizarse el cálculo una vez y luego simplemente multiplicarlo por el factor V_0 que se desea. Los detalles de la implementación numérica se muestran en el Apéndice C.

3.3. Cálculo de la energía de interacción Coulombiana del excitón

Una vez implementado el método de Rayleigh-Ritz para resolver el problema de autovalores, Ec.(2.9), se calculó la energía de interacción del estado fundamental del excitón. Para ello, se computó el valor de expectación del término de potencial Coulombiano utilizando los coeficientes de superposición C_i obtenidos.

Como se detalló en la Sección 2.3, las funciones de prueba del estado fundamental están dadas por:

$$\phi^0(r_e, r_h, r_{eh}) = \sum_j^N C_j^0 \psi^j(r_e, r_h, r_{eh}), \quad (3.12)$$

donde las funciones ψ^j son funciones de la base de Hylleraas y el entero N es la cantidad de funciones de la base que se usan en el método variacional.

Utilizando dichas funciones de prueba el valor de expectación del término Coulombiano del Hamiltoniano se escribe como:

$$\langle 0 | U(r_{eh}) | 0 \rangle = - \left\langle 0 \left| \frac{1}{r_{eh}} \right| 0 \right\rangle = \sum_j^N \sum_i^N C_i^* C_j U_{i,j}, \quad (3.13)$$

donde $U_{i,j} = \langle \psi^i | U | \psi^j \rangle$ son los elementos de matriz del potencial Coulombiano en la base de Hylleraas.

De esta manera, haciendo uso de la Ec.(3.13) es posible analizar la dependencia de la energía de interacción con el radio del QD, R_0 .

3.4. Resultados

Se utilizó el software Mathematica para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición. Una vez calculados estos elementos de matriz, se resuelve el problema de autovalores, Ec.(2.9), empleando la rutina 'DSGYV' de la librería Lapack. Para más detalles sobre el cálculo numérico lea el Apéndice C.

Se construyeron la matrices del Hamiltoniano y la matriz de superposición utilizando 20 funciones de la base de Hylleraas.

En primer lugar, se escogieron valores óptimos para los parámetros variacionales no lineales γ y λ que permitan una descripción deseable de las energías de los estados ligados del excitón. Para ello, se dejan fijos los valores de $R_0 = 1,0$ y $\lambda = 0,5$ y se varía el parametro variacional no lineal γ . Se tomó el valor óptimo $\gamma = 1,0$.

Una vez que se fijaron los parámetros no lineales se calculó la energía del estado fundamental de cada término del Hamiltoniano, Ec.(3.6), en función del radio del QD, R_0 , y la profundidad del pozo de potencial V_0 . En la Fig.(3.2) se muestran los resultados obtenidos para la misma. Los valores de V_0 en dicha figura surgen de que los elementos de matriz del Hamiltoniano se calculan en unidades adimensionales, tanto en energías como en longitudes, tal como se mencionó en la Sección 2.5.

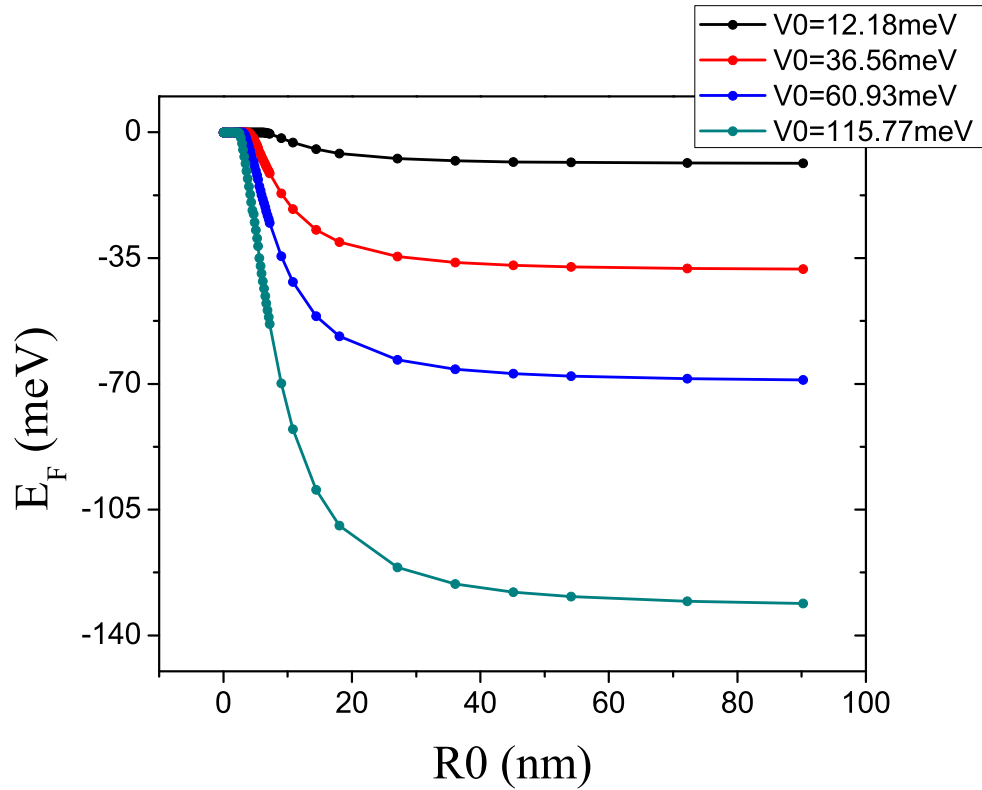


Figura 3.2: Energía del estado fundamental de un excitón, E_F , confinado en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . Se muestran los resultados obtenidos mediante el método variacional utilizando 20 funciones de la base de Hylleraas. Con puntos negros los resultados para un pozo de potencial de profundidad $V_0 = 12,18$ meV, con puntos rojos los resultados para una profundidad de $V_0 = 36,56$ meV, en azul para $V_0 = 60,93$ meV y en cian para $V_0 = 115,77$ meV, respectivamente

Se puede observar que para radios del QD menores al radio de bohr efectivo para el GaAs ($a_x^* \simeq 18$ nm), la energía del estado fundamental del sistema decrece y llega a valores muy próximos a cero. Por otro lado, para radios del QD mayores al radio de bohr efectivo para el GaAs ($a_x^* \simeq 18$ nm) la energía del estado fundamental es prácticamente independiente del radio.

Los resultados muestran dos condiciones que se esperan de un cálculo correcto. Por un lado, la energía del estado fundamental es siempre mayor que la suma de las profundidades del pozo de potencial del electrón y el hueco

igual a $2V_0$. Por otro lado, para el pozo menos profundo y en el límite donde los radios son muy grandes, la energía del estado fundamental se acerca a la energía del excitón en bulk, $E_H^* = -6,1$ meV.

Para radios menores a 5 nm, es decir cuando las energías tienden a cero, las partículas que conforman el excitón ya no pueden ser confinadas en el pozo de potencial Gaussiano. La ionización de las partículas produce que el excitón deje de estar ligado. Esto se analizará con mayor detalle en el Capítulo 4. Por otro lado, a medida que el radio del QD aumenta, el sistema se encuentra en estados cada vez más ligados hasta mantenerse prácticamente constante.

En la Tabla 3.1 se muestra para cada profundidad del pozo de potencial, los valores del radio del QD para los cuales el sistema se ionizó. Estos radios se denominan radios del umbral de ionización del sistema. Además, se consigna la energía del estado fundamental para el radio más grande calculado.

Profundidad del pozo V_0 (meV)	Radio del umbral de ionización (nm)	Energía del estado fundamental para el radio más grande (meV)
12,18	6,4	-8,6
36,56	4,1	-38,0
60,93	3,3	-68,9
115,77	2,7	-131,1

Tabla 3.1: Valores del radio del mayor radio del QD para el cual las partículas del excitón se ionizan y la mínima energía que adopta el estado fundamental para cada profundidad del pozo de potencial Gaussiano V_0 .

Para determinar los radios del umbral de ionización para las distintas profundidades del pozo de potencial se realizó un procedimiento gráfico. Se ajustó una recta en la zona crítica cercana al umbral de ionización como muestra la Fig.(3.3). Utilizando dicha recta, se extrapolaron el punto de intersección con el eje de las abscisas para determinar el radio de ionización de las partículas.

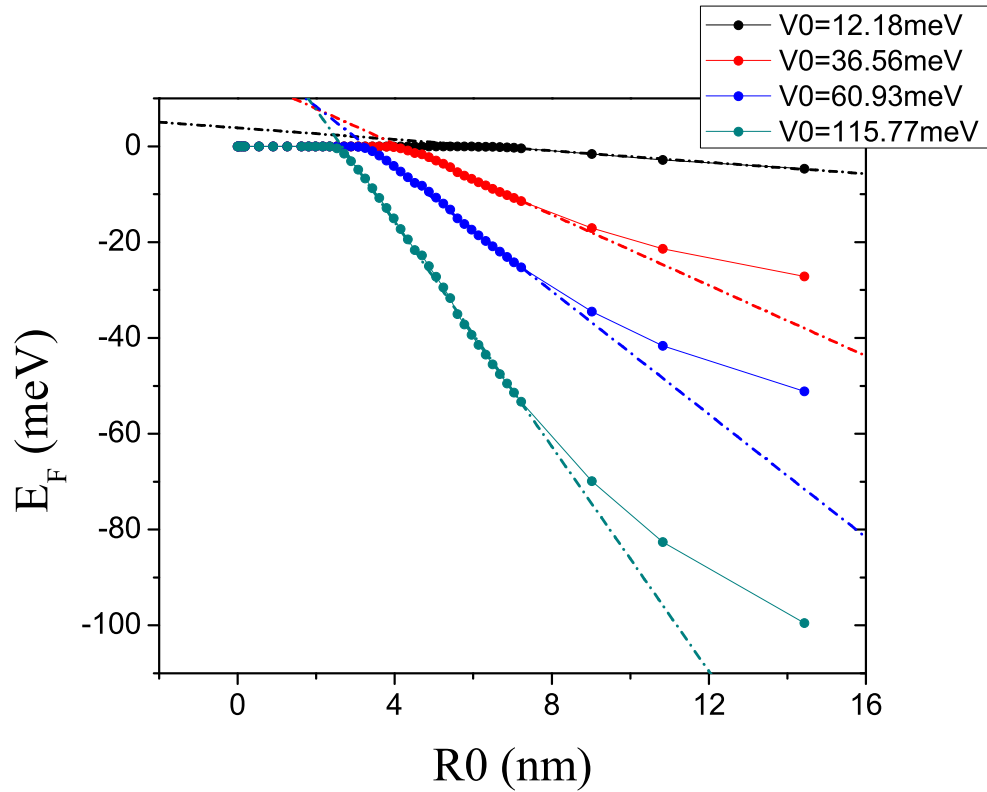


Figura 3.3: Energía del estado fundamental del excitón, E_F , confinado en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . Con puntos se muestran los resultados obtenidos mediante el método variacional y con línea de puntos los ajustes lineales antes del umbral de ionización para distintas profundidades del pozo.

Aunque se asumió un comportamiento lineal de la energía antes de alcanzar el umbral de ionización, se debe realizar un estudio más cuidadoso acerca del comportamiento de la energía en la zona crítica cercana al umbral de la ionización que se muestra en la Fig.(3.4). Para esto, consideramos que es necesario calcular una mayor cantidad de valores del radio del QD en esta región y tomar distintos tamaños de la base de funciones variacionales. En un futuro, estos cálculos se realizarán.

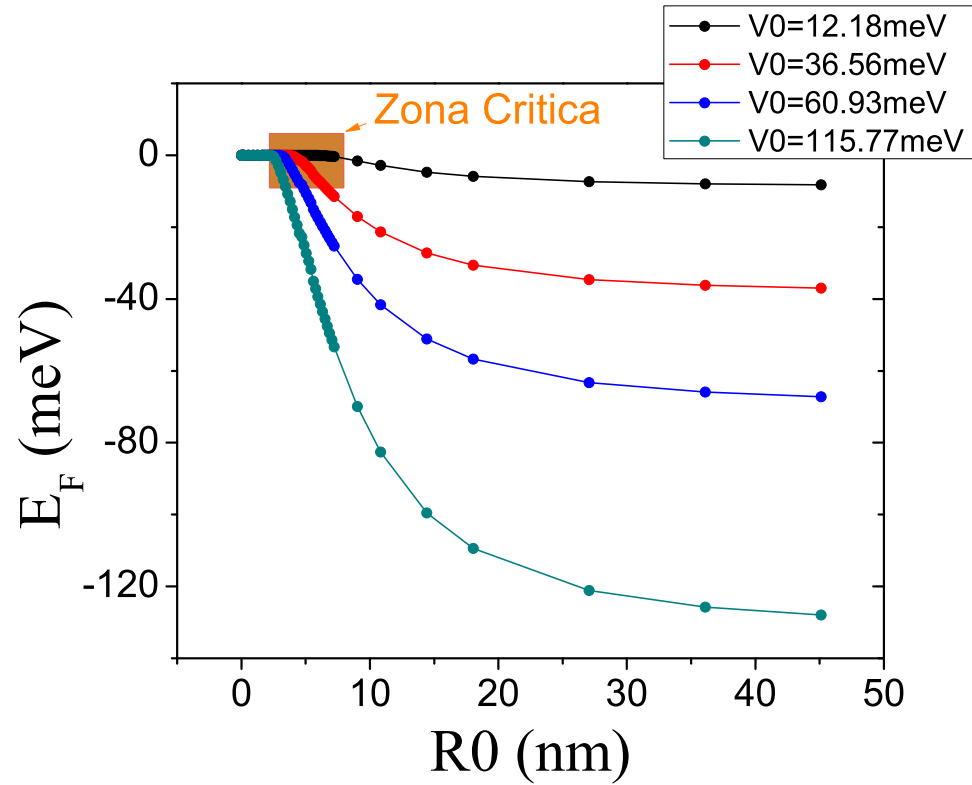


Figura 3.4: Zona crítica cercana al umbral de ionización del excitón.

Puede verse que a medida que la profundidad del pozo aumenta, el mayor radio del QD para el cual el sistema se ioniza es cada vez menor. Además, a partir de los menores valores obtenidos para la energía del estado fundamental se puede notar que dichas energías, en las que se incluye el valor de formación del excitón y la energía de confinamiento de las partículas, es mucho mayor que la energía del excitón en bulk ($E_H = -6,1 \text{ meV}$).

En la Fig.(3.5) se pueden observar los valores de energía del primer, segundo y tercer estado excitado del sistema en función del radio del QD obtenidos mediante el método variacional de Rayleigh-Ritz. La profundidad del pozo para la cual se graficó es $V_0 = 60,93 \text{ meV}$.

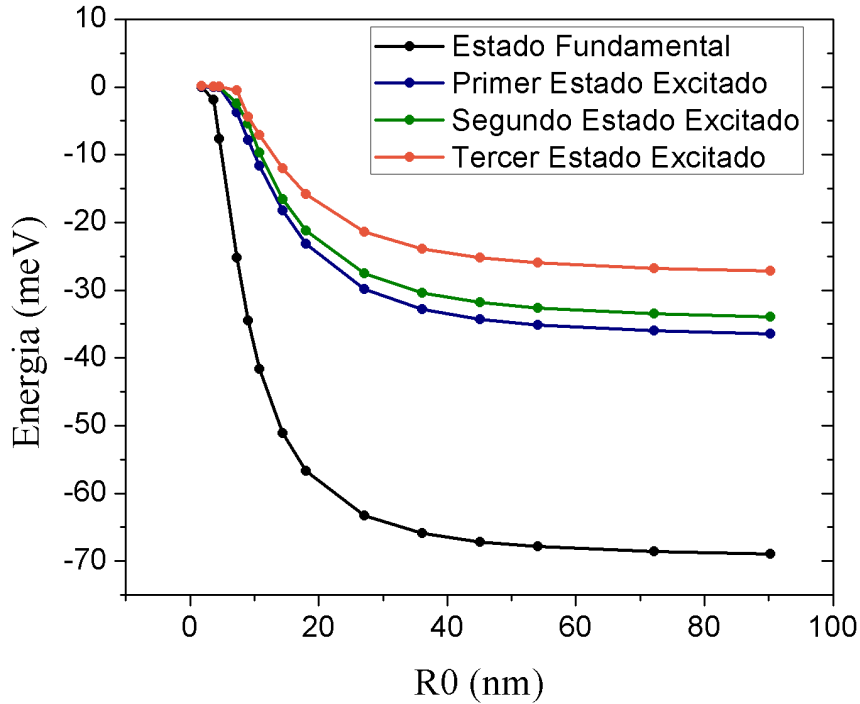


Figura 3.5: Energía del estado fundamental y del primer, segundo y tercer estado excitado de un excitón confinado en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . Con puntos negros se muestran los resultados obtenidos mediante el método variacional utilizando 20 funciones de la base de Hylleraas para la energía del estado fundamental, con puntos azules los resultados para el primer estado excitado, en verde para el segundo estado excitado y en naranja para el tercer estado excitado, respectivamente

Se puede observar que el comportamiento de las energías de los primeros estados excitados es similar a la de la energía del estado fundamental: para radios grandes se mantiene prácticamente constante, mientras que para radios pequeños tiende a cero. Se puede notar que la diferencia energética entre el estado fundamental y el primer estado excitado, una vez que la energía no depende del radio, es aproximadamente del 50% mientras que la diferencia energética entre los estados excitados es menor al 25%. Además, se puede ver que para estados más energéticos las partículas que forman al excitón se

ionizan para radios cada vez menores.

En la Fig.(3.6) se muestra los resultados obtenidos de la energía del estado fundamental del sistema en función del radio del QD, tanto para el modelo con potencial de confinamiento cuadrático como para el modelo con potencial de confinamiento Gaussiano. Para poder compararlos, se utilizaron las energías obtenidas para la profundidad del pozo Gaussiano $V_0 = 12,18$ meV y se restó esta cantidad al cero de las energías de los resultados obtenidos para el modelo con potencial cuadrático.

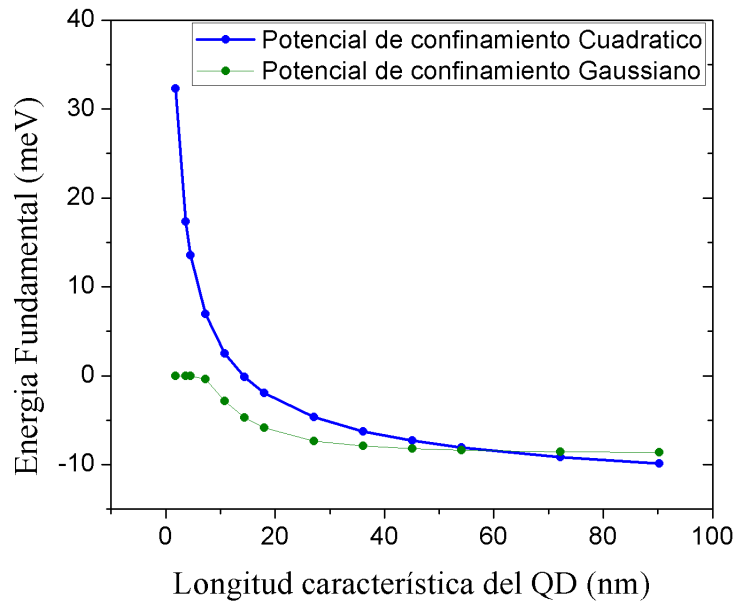


Figura 3.6: Energía del estado fundamental de un excitón en función de la longitud característica del QD (vea el texto) para el modelo con potencial de confinamiento cuadrático y Gaussiano. Con puntos azules se muestran los resultados obtenidos en el modelo con potencial de confinamiento cuadrático y con puntos verdes los resultados obtenidos en el modelo con potencial de confinamiento Gaussiano.

Es importante aclarar que la longitud característica en el potencial Gaussiano es R_0 , mientras que en el potencial cuadrático es l_0 .

En la Fig.(3.6) se ve cómo para longitudes del QD mayores a 50 nm, la energía del estado fundamental del sistema toma valores similares en ambos

modelos. Esto se debe a que si se expande el potencial Gaussiano de la Ec.(3.1) en una serie de Taylor, el primer orden no nulo de dicha expansión es justamente una parábola. Sin embargo, para longitudes características menores a 40 nm, la diferencia entre ambos modelos es muy grande.

Por último, en la Fig.(3.7) se muestra la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental para el problema con potencial de confinamiento Gaussiano en función del radio del QD calculadas mediante la Ec.(3.13).

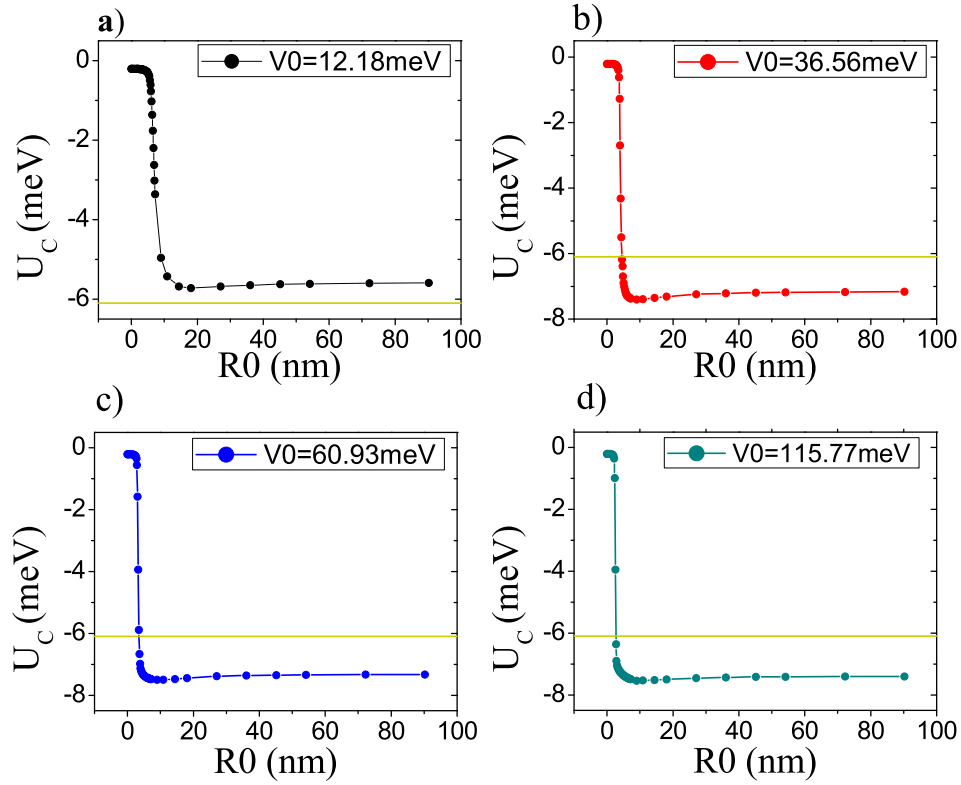


Figura 3.7: Energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón, U_C , en función del radio del QD. En **a)** se utiliza una profundidad del pozo de potencial de $V_0 = 12,81$ meV, en **b)** una profundidad de $V_0 = 36,56$ meV, en **c)** $V_0 = 60,93$ meV y en **d)** $V_0 = 115,77$ meV. Con una línea amarilla se indica el valor de un Hartree de energía efectiva para el GaAs

Se observa que para las diferentes profundidades del pozo de potencial V_0 la energía de interacción Coulombiana para radios muy pequeños (menores a

5 nm), tiende a cero. Se aprecia además, que las curvas muestran un mínimo para un radio $R_0 \simeq 18$ nm. Para valores del radio del QD crecientes, el módulo de la energía de interacción tiende a un valor independiente de dicho radio.

Se determinó el radio del QD a partir del cual la energía de interacción se anula como se muestra en la Fig.(3.8). Para esto, se utilizó el mismo procedimiento gráfico usado en la Fig.(3.3).

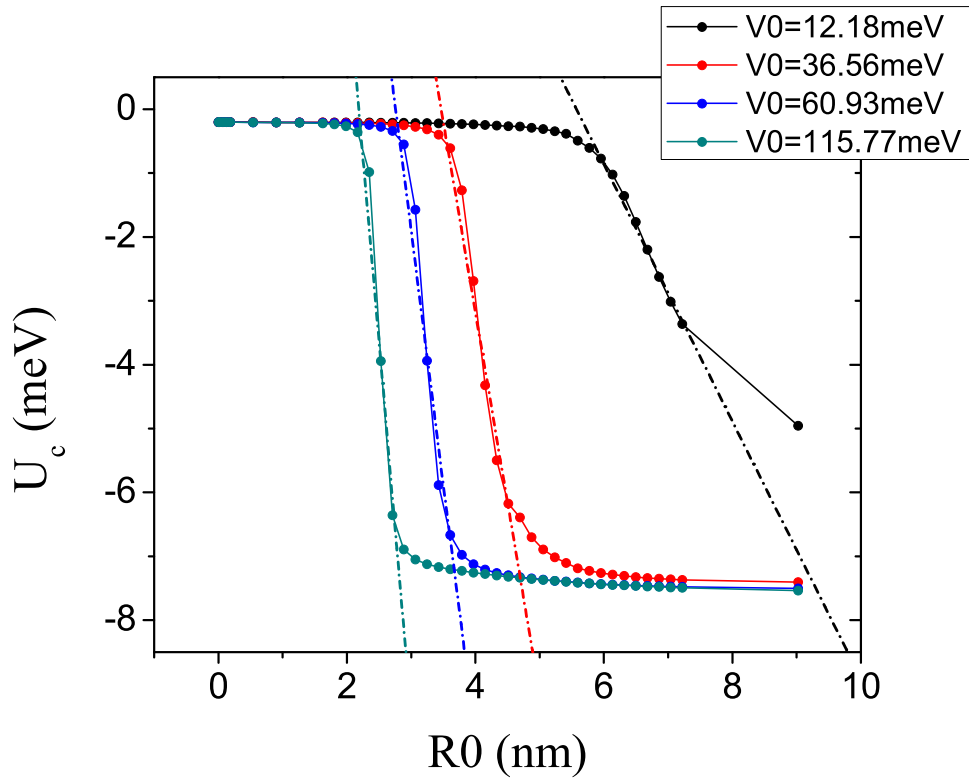


Figura 3.8: Energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón, U_C , en función del radio del QD. Con puntos se muestran los resultados obtenidos mediante la Ec.(3.13) y con línea de puntos los ajustes lineales antes de anularse la energía de interacción.

En la Tabla 3.2 se registran los valores del radio del QD a partir del cual la energía de interacción Coulombiana es cero, el radio en el cual la energía de interacción Coulombiana es mínima y el valor de dicha energía para distintas

profundidad del pozo de potencial.

Profundidad del pozo V_0 (meV)	Radio del QD a partir del cual la energía de interacción se anula (nm)	Radio del QD donde la energía de interacción es mínima (nm)	Energía mínima de interacción (meV)
12,18	6.7	18,0	-5,7
36,56	4.1	9,0	-7,4
60,93	3.2	9,0	-7,5
115,77	2.5	9,0	-7,5

Tabla 3.2: Valores del radio del QD para los cuales la energía de interacción del excitón se anula, la mínima energía que adopta la energía de interacción y el radio donde este mínimo ocurre para cada profundidad del pozo de potencial Gaussiano V_0 .

Al comparar la Tabla 3.1 con la Tabla 3.2 se puede notar que los radios del QD a partir de los cuales el excitón se desliga y los radios del QD a partir de los cuales la energía de interacción Coulombiana son similares . Aunque consideramos que es necesario una mayor cantidad de puntos cerca del umbral de ionización para realizar un análisis más cuidadoso, este resultado da soporte a la idea de que una vez que las partículas del excitón se ionizan, la energía de interacción se anula.

En la Sección 1.2.3 se mencionó que a partir de un modelo simple donde el electrón y el hueco pueden considerarse como partículas libres cuya masa es la masa efectiva del material, la energía de un excitón en bulk es aproximadamente un Hartree efectivo. Así, en la Fig.(3.7) y en la Tabla 3.2 puede notarse que para los potenciales $V_0 = 36,58$, $V_0 = 60,93$ y $V_0 = 115,77$ la energía de interacción Coulombiana alcanza valores menores a la energía de interacción de un excitón en bulk. La diferencia entre la energía de un excitón libre y uno confinado en un pozo de potencial Gaussiano puede llegar a ser de hasta el 20 % con las profundidades de pozo utilizadas. Sin embargo, para el valor de profundidad del pozo de confinamiento $V_0 = 12,18$ meV, el módulo de la energía del excitón en bulk es apenas mayor (0.4 meV más grande) que el mínimo que alcanza la energía de interacción del excitón confinado.

3.5. Conclusiones

En este Capítulo se muestra el resultado de aplicar el método variacional para un excitón confinado en un potencial Gaussiano con diferentes profundidades del potencial. La energía del estado fundamental del sistema para radios del QD menores a 5 nm tiende a cero, mientras que para radios crecientes, la energía disminuye hasta mantenerse prácticamente constante. A partir de un procedimiento gráfico, se determinaron valores para los radios del umbral de ionización del excitón. Se observa que para profundidades del pozo crecientes, el radio del umbral de ionización disminuye y se aleja del valor del radio del excitón en bulk.

Además, se compararon los resultados obtenidos utilizando un potencial de confinamiento cuadrático y al utilizar un potencial de confinamiento Gaussiano. Se ve que para radios mayores a 50 nm, los resultados son similares. Sin embargo, para radios menores a 40 nm la diferencia entre los modelos es muy grande.

Se calculó la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón como el valor de expectación del término de potencial Coulombiano, Ec.(3.13). Se puede observar una correspondencia entre los valores del radio del umbral de ionización del sistema y los radios del QD donde la energía de interacción se anula. También se vio que para pozos de potencial profundos el valor absoluto de la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental es mayor que la energía de un excitón en bulk.

Por último, en los diagramas de energías de la Fig.(3.9) se explica el comportamiento de las energías del excitón, Fig.(3.2), cerca del umbral de ionización. En la Fig.(3.9.a) se muestra el diagrama de energías para un excitón en un semiconductor en bulk. Como puede verse, la energía del gap entre la banda de conducción y de valencia del semiconductor en bulk (gap de energía en el caso de no haber interacción), E_{Gap-I} , es mayor al gap de energía entre la banda de valencia del semiconductor en bulk y el nivel de energía discreto del electrón, E_{Gap-II} . Esa diferencia entre los gaps de energía se da debido a la energía del excitón en el semiconductor en bulk, $E_{exc-bulk}$.

En la Fig.(3.9.b) se muestra el diagrama de energías para el caso de las partículas confinadas en los pozos de potenciales. Nuevamente se observa que el gap de energías en el caso de no formarse el excitón, E_{Gap-I} , es mayor que el gap de energía en el caso de formarse, E_{Gap-II} . Sin embargo, suponemos que la energía del excitón cuyas partículas están confinadas, $E_{exc-con}$, es menor a la energía del excitón en el semiconductor en bulk, $E_{exc-bulk}$. Dicha

suposición se basa en que en la Fig.(3.7) se grafica sólo la energía de interacción del excitón sin incluir a la energía cinética del mismo. En un futuro se calculará dicha energía cinética, pero estimamos que al añadirla, la energía del excitón confinado, $E_{exc-con}$, efectivamente será menor que la del excitón en el semiconductor en bulk, $E_{exc-bulk}$. Esto explicaría por qué los resultados de la Fig.(3.7) no muestran un umbral de ionización para un valor igual a $E_{exc-bulk}$.

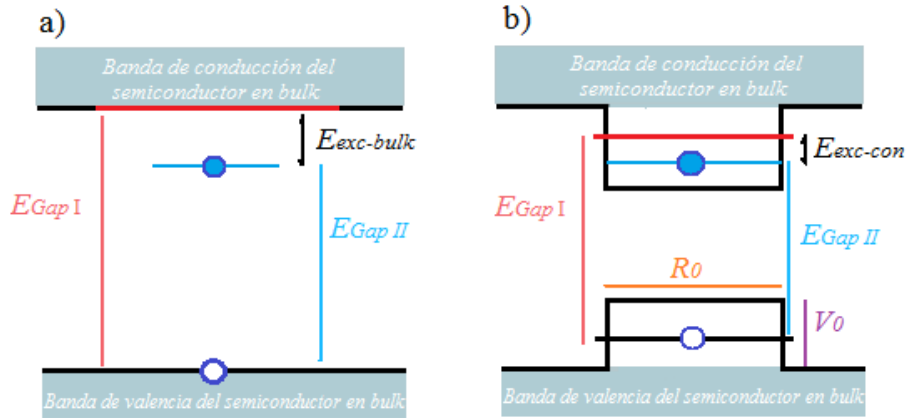


Figura 3.9: **a)** Diagrama de energías para un excitón en un semiconductor en bulk. Con un círculo azul se denota al electrón, con un círculo blanco al hueco. Con una línea roja se representa la energía de excitación del electrón en el caso de no formarse el excitón. El gap entre dicha energía y la banda de valencia del semiconductor en bulk se denota como E_{Gap-I} . Con una línea azul se representa el nivel discreto de energía que aparece cuando sí se forma el excitón. El gap entre dicha energía y la banda de valencia del semiconductor en bulk se denota como E_{Gap-II} . Con flechas negras se muestra la energía del excitón en un semiconductor en bulk, $E_{exc-bulk}$. **b)** Diagrama de energías para un excitón cuyas partículas están confinadas en pozos de potenciales de ancho R_0 y profundidad V_0 . Con un círculo azul se denota al electrón, con un círculo blanco al hueco. Con una línea roja se representa la energía de excitación del electrón en el caso de no formarse el excitón. El gap entre dicha energía y el nivel de energía discreto del hueco se denota como E_{Gap-I} . Con una línea azul se representa el nivel discreto de energía que aparece cuando sí se forma el excitón. El gap entre dicha energía y el nivel de energía discreto del hueco se denota como E_{Gap-II} . Con flechas negras se muestra la energía del excitón cuyas partículas están confinadas en pozos de potenciales, $E_{exc-con}$.

En el Capítulo siguiente se calculará la energía del estado fundamental de un electrón y un hueco no interactuantes confinados en un pozo de potencial Gaussiano. Estos resultados nos permitirán observar para ciertos radios del QD la posibilidad de que el excitón se mantenga ligado por más de que el potencial Gaussiano no pueda confinar a las partículas.

Capítulo 4

Cálculo de la energía de interacción del excitón utilizando Teoría de perturbaciones a primer orden

En el Capítulo 2 y 3 se ha corroborado que el uso de las funciones de prueba de Hylleraas demanda un cálculo analítico muy complicado para los elementos de matriz de la parte cinética del Hamiltoniano. Sin embargo, los términos de confinamiento y de interacción Coulombiana se obtienen de manera más directa, y la energía de interacción entre el electrón y el hueco puede ser calculada con buena precisión.

Si uno supone que la energía de interacción es pequeña con respecto a la energía de confinamiento de cada partícula del excitón, y que las partículas se consideran independientes y distinguibles, se puede utilizar la Teoría de perturbaciones a primer orden para calcular dicha energía de interacción. De este modo, sólo se deben resolver dos problemas variacionales de una sola partícula, lo que se sabe, es más sencillo que un problema de dos partículas interactuantes.

En este Capítulo se consideró el problema de dos partículas independientes, cada una confinada en un pozo de potencial Gaussiano. El motivo es analizar la diferencia que existe entre considerar el Hamiltoniano con un término de interacción entre las partículas, y en tomar a la interacción como una perturbación a primer orden del Hamiltoniano de las partículas independientes.

Para resolver el problema variacional de una sola partícula se utilizaron como funciones de prueba las soluciones del oscilador armónico tridimensional.

Se presentará el Hamiltoniano del problema de partículas independientes, las funciones de prueba utilizadas, la manera en la que se calcula la energía de interacción y por último los resultados obtenidos.

4.1. Hamiltoniano para las partículas no interactuantes

Se utilizarán las mismas unidades que se han empleado desde la Sección 2.2. El Hamiltoniano para dos partículas no interactuantes se escribe como:

$$\hat{H} = H_e + H_h, \quad (4.1)$$

donde H_e y H_h corresponden a los Hamiltonianos del electrón y el hueco independientes respectivamente y pueden ser tratados por separados.

El Hamiltoniano del oscilador armónico tridimensional en las unidades utilizadas en este trabajo es el siguiente:

$$H_{Osc} = -\frac{1}{2\sigma_i} \nabla_{r_i}^2 + \frac{1}{2} W \sigma_i r_i^2 \quad (i = e, h), \quad (4.2)$$

donde el parámetro W es la frecuencia angular adimensionalizada del oscilador y r_i la coordenada adimensionalizada del hueco o el electrón.

Las autofunciones para el Hamiltoniano de la Ec.(4.2) son las siguientes:

$$\psi_{Osc}(r, \theta, \phi) = N_{kl} r^l e^{-\nu r^2} L_k^{l+\frac{1}{2}}(2\nu r^2) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4.3)$$

donde θ y ϕ son las coordenadas angulares usuales del sistema de coordenadas esféricas, $L_k^{(l+\frac{1}{2})}$ son los polinomios generalizados de Laguerre de orden k . Las constantes $N_{k,l}$ y ν están dadas por:

$$N_{k,l} = \sqrt{\sqrt{\frac{2\nu^3}{\pi} \frac{2^{k+2l+3} k! \nu^l}{(2k+2l+1)!!}}, \quad (4.4)$$

$$\nu = \frac{\sigma_i W}{2}. \quad (4.5)$$

4.2. Elementos de matriz del Hamiltoniano de una partícula

Como se puede apreciar en la Ec.(4.3), las funciones de prueba para el problema de una partícula están asociadas a tres números cuánticos $N \equiv \{k, l, m\}$. Notar también que para este caso dichas funciones de prueba son ortogonales entre sí, por lo que se cumple que $\hat{S} = \hat{I}$.

Para calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano, es útil considerar el resultado de aplicar el operador Laplaciano a las funciones de prueba:

$$\begin{aligned} \nabla_{r_i}^2 \psi_{Osc}(r_i, \theta_i, \phi_i) &= \frac{N_{k,l}}{2\sigma_i} e^{-\nu r_i^2} r_i^{l-2} \left[16r_i^4 L_{k-2}^{l+\frac{5}{2}}(2\nu r_i^2) \right. \\ &\quad + 4r_i^2 \nu (4\nu r_i^2 - 2l - 3) L_{k-1}^{l+\frac{3}{2}}(2\nu r_i^2) \\ &\quad \left. + (l + l^2 - 4l\nu r_i^2 + 2\nu r_i^2(2\nu r_i^2 - 3)) L_k^{(l+\frac{1}{2})}(2\nu r_i^2) \right] \\ &\quad \times Y_{l,m}(\theta_i, \phi_i) \end{aligned} \quad (4.6)$$

De este modo, los elementos de matriz del Hamiltoniano $H_{M,N}$ (donde M y N son dos conjuntos generados por los tres números cuánticos k, l, m), son los siguientes:

$$\begin{aligned} H_{M,N} &= \int_0^\infty \int [\psi^{*M}(r_i, \theta_i, \phi_i) \nabla_{r_i}^2 \psi^N(r_i, \theta_i, \phi_i) \\ &\quad - V_0 \psi^{*M}(r_i, \theta_i, \phi_i) e^{-\frac{1}{2}(\frac{r_i}{R_{0P}})^2} \psi^N(r_i, \theta_i, \phi_i)] r^2 dr d\Omega, \end{aligned} \quad (4.7)$$

Las primitivas de las integrales de la Ec.(4.7) pueden calcularse analíticamente, sin embargo las mismas fueron evaluadas utilizando Mathematica.

4.3. Cálculo de la energía de interacción a primer orden perturbativo

Una vez calculados los elementos de matriz del Hamiltoniano, puede aplicarse el método variacional de Rayleigh-Ritz para obtener tanto las energías del sistema (ya sea para un hueco o un electrón), como también los coeficientes de superposición necesarios para computar las autofunciones que lo

describen. De este modo, las autofunciones de cada sistema adoptan la siguiente forma:

$$\Psi_e^N(r_e, \theta_e, \phi_e) = \sum_j C_{j,N}^e \psi_{Osc}^j(r_e, \theta_e, \phi_e) \quad (electron), \quad (4.8)$$

$$\Psi_h^N(r_h, \theta_h, \phi_h) = \sum_j C_{j,N}^h \psi_{Osc}^j(r_h, \theta_h, \phi_h) \quad (hueco), \quad (4.9)$$

donde Ψ_e^N y Ψ_h^N denotan la autofunciones del oscilador N-ésimas del electrón y el hueco, respectivamente, y $C_{j,N}^e$ y $C_{j,N}^h$ son los coeficientes variacionales calculados (mediante el principio variacional) para el N-ésimo estado.

Al ser partículas independientes y distinguibles, las autofunciones del Hamiltoniano de dos partículas están dadas por el producto de las autofunciones de cada partícula:

$$\langle r, \theta, \phi | N \rangle = \Phi^N(r, \theta, \phi) = \Psi_e^N(r_e, \theta_e, \phi_e) \times \Psi_h^N(r_h, \theta_h, \phi_h). \quad (4.10)$$

Para calcular la energía de interacción del estado fundamental como perturbación del Hamiltoniano a primer orden, se debe computar el valor de expectación del término Coulombiano:

$$E_{Int} = - \left\langle 0 \left| \frac{1}{r_{eh}} \right| 0 \right\rangle, \quad (4.11)$$

donde $|0\rangle$ corresponde al estado fundamental del sistema de dos partículas no interactuantes y distinguibles.

Para poder realizar el cálculo del valor de expectación de la Ec.(4.11) se utiliza la expansión de Laplace en el término de interacción:

$$\frac{1}{r_{eh}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} (-1)^m \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{-m}(\theta_e, \phi_e) Y_l^m(\theta_h, \phi_h). \quad (4.12)$$

Sin embargo, teniendo en cuenta que sólo se considerará el estado fundamental de las partículas que son independientes de las variables angulares, se utilizará solo el primer orden de la expansión. Esta aproximación se denomina, aproximación esférica:

$$\frac{1}{r_{eh}} \simeq \frac{1}{r_{>}}, \quad (4.13)$$

donde $r_>$ denota la posición de la partícula que se encuentra a mayor distancia radial del origen.

Es así como desarrollando la Ec.(4.11) utilizando las ecuaciones Ec.(4.13), (4.10), (4.8) y (4.9) para construir la autofunción del estado fundamental, se obtiene:

$$\begin{aligned}
E_{Int} = & \sum_{k,l,m} \sum_{k',l',m'} C_{k,l,m}^e C_{k',l',m'}^{e*} C_{k,l,m}^h C_{k',l',m'}^{h*} N_{k,l}^e N_{k',l'}^e N_{k,l}^h N_{k',l'}^h \\
& \int d\Omega \left[\int_0^\infty \left(\int_0^{r_e} (r_h^2 r_e) \psi^{*k',l',m'}(r_e, \theta_e, \phi_e) \psi^{k,l,m}(r_e, \theta_e, \phi_e) \right. \right. \\
& \times \psi^{*k',l',m'}(r_h, \theta_h, \phi_h) \psi^{k,l,m}(r_h, \theta_h, \phi_h) dr_h \\
& + \int_{r_e}^\infty (r_h r_e^2) \psi^{*k',l',m'}(r_e, \theta_e, \phi_e) \psi^{k,l,m}(r_e, \theta_e, \phi_e) \\
& \left. \left. \times \psi^{*k',l',m'}(r_h, \theta_h, \phi_h) \psi^{k,l,m}(r_h, \theta_h, \phi_h) dr_h \right) dr_e \right]. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

A partir de una evaluación numérica de esta expresión utilizando el software Mathematica, se obtiene la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón.

4.4. Resultados

Se utilizó el software Mathematica para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano de cada partícula, Ec.(4.1). Una vez calculados los elementos de matriz del Hamiltoniano de cada partícula, se resuelve el problema de autovalores, Ec.(2.9), empleando la rutina 'DSYEV' de la librería Lapack para la diagonalización de matrices. Para más detalles sobre el cálculo numérico lea el Apéndice C.

Se construye el Hamiltoniano de cada partícula utilizando 20 funciones de la base de autofunciones del problema del oscilador armónico 3D, Ec.(4.10).

Las funciones de la base de autofunciones del oscilador armónico 3D, Ec.(4.10), tienen un parámetro variacional no lineal, W , el cual fue optimizado para el hueco y para el electrón. De este modo, los valores que se utilizaron en el método variacional fueron $W_e = 1,1464$ para el electrón y $W_h = 0,8535$ para el hueco.

En la Fig.(4.1.a) y Fig.(4.1.b) se muestra la energía del estado fundamental del electrón y el hueco en función del radio del QD, R_0 , y de la profundidad del pozo V_0 , respectivamente.

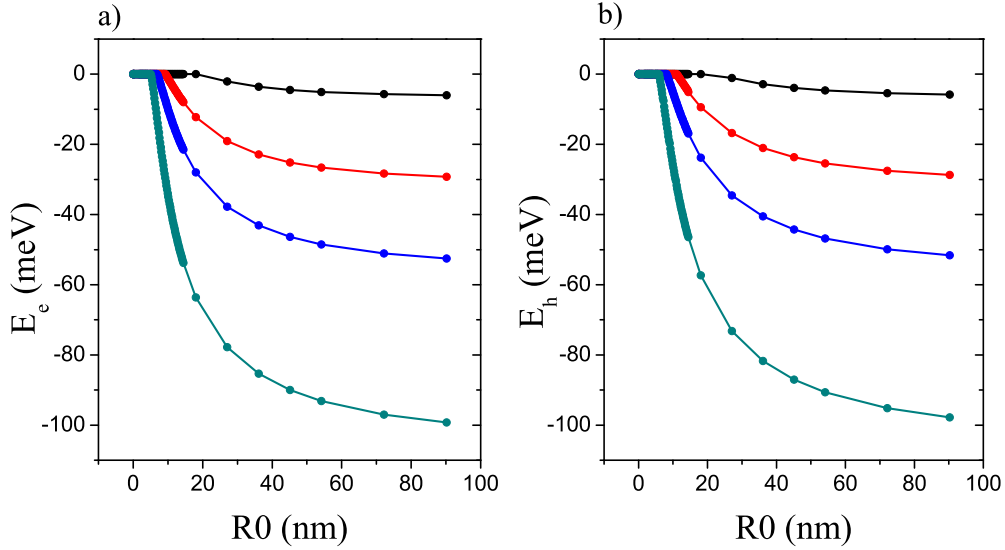


Figura 4.1: Energía del estado fundamental de un electrón, E_e , (a), y un hueco, E_h , (b) no interactuantes confinados en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . Con puntos negros se muestran los resultados obtenidos mediante el método variacional utilizando 20 funciones de la base de Hylleraas para un pozo de potencial de profundidad $V_0 = 12,18$ meV, con puntos rojos los resultados para una profundidad de $V_0 = 36,56$ meV, en azul para $V_0 = 60,93$ meV y en cian para $V_0 = 115,77$ meV, respectivamente.

El comportamiento de las energías del estado fundamental de las partículas independientes en función del radio del QD es similar a la mostrada en la Fig.(3.2) de la Sección 3.4. Para radios pequeños (menores a 5 nm) la energía llega a valores cercanos a cero, mientras que, para valores crecientes del radio, la energía disminuye hasta que se mantiene prácticamente independiente de dicho radio.

Mediante un procedimiento gráfico similar al de la Sección 3.4 se determinó el umbral de ionización de cada partícula para las distintas profundidades del pozo de potencial. Se ajustó una recta en la zona crítica cercana al umbral de ionización como muestra la Fig.(4.2). Utilizando dicha recta, se extrapoló

el punto de intersección con el eje de las abscisas para determinar el radio de ionización de las partículas. En la Tabla 4.1 se consignan dichos radios de ionización y la energía del estado fundamental para el radio más grande.

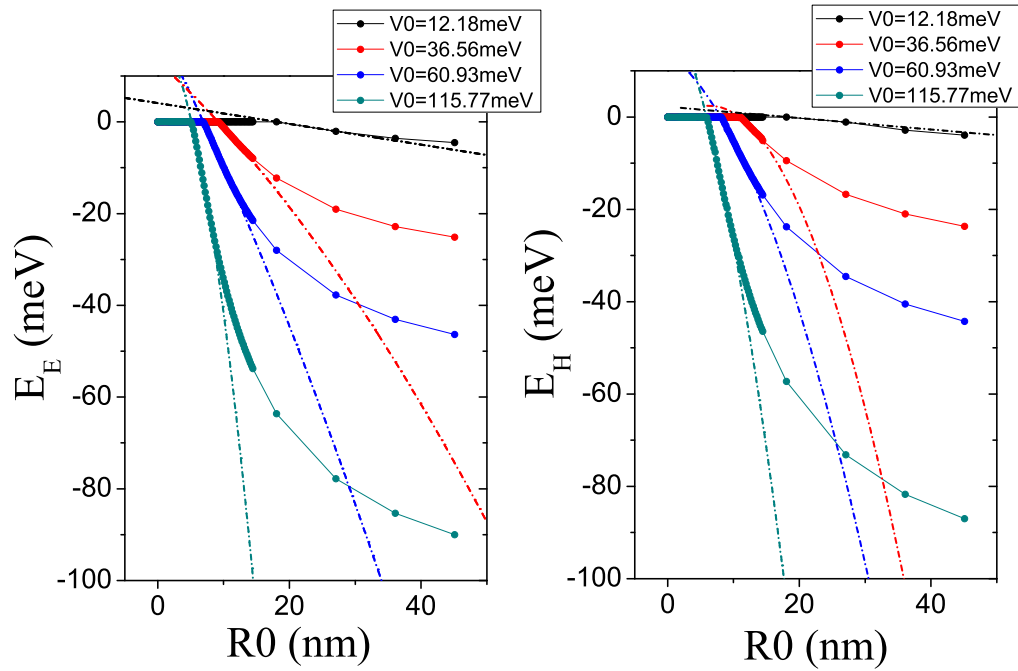


Figura 4.2: **a)** Energía del estado fundamental de un electrón, E_e , confinado en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . **b)** Energía del estado fundamental de un hueco, E_h confinado en un pozo de potencial Gaussiano en función del radio del QD, R_0 . Con puntos se muestran los resultados obtenidos mediante el método variacional y con línea de puntos los ajustes lineales antes del umbral de ionización para distintas profundidades del pozo.

Partícula	Profundidad del pozo V_0 (meV)	Radio del umbral de ionización (nm)	Energía del estado fundamental para el radio más grande (meV)
Electrón	12,18	18,0	-6,0
	36,56	9,2	-29,2
	60,93	6,9	-52,5
	115,77	5,1	-99,2
Hueco	12,18	18,1	-5,8
	36,56	11,1	-28,7
	60,93	8,1	-51,6
	115,77	5,9	-97,8

Tabla 4.1: Valores del radio del umbral de ionización y de la energía del estado fundamental para el radio más grande para distintas profundidades, V_0 , del pozo de potencial Gaussiano.

Aunque se asumió un comportamiento lineal de la energía antes de alcanzar el umbral de ionización, teoremas indican que la dependencia de la energía del estado fundamental de una partícula confinada en un pozo de potencial en dicha zona debe ser cuadrática. Sin embargo, para poder observar dicha dependencia y realizar un estudio más cuidadoso consideramos que es necesario calcular una mayor cantidad de valores del radio del QD en esta región y tomar distintos tamaños de la base de funciones variacionales. En un futuro, estos cálculos se realizarán.

Al comparar la Tabla 3.1 con la Tabla 4.1 se puede ver que los radios de ionización para el problema de partículas no interactuantes son mayores que en el caso en que se considera la interacción entre dichas partículas. Esta diferencia muestra que aunque el potencial Gaussiano no pueda confinar a las partículas, existe un intervalo de radios del QD en el que la interacción Coulombiana entre ellas puede mantenerlas ligadas. En el panel superior de la Fig.(4.3) se puede ver la energía del estado fundamental de un electrón, un hueco y un excitón confinados en un pozo de potencial Gaussiano de profundidad $V_0 = 60,93$ meV. En el panel inferior, se muestra la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón para dicha profundidad del pozo de potencial.

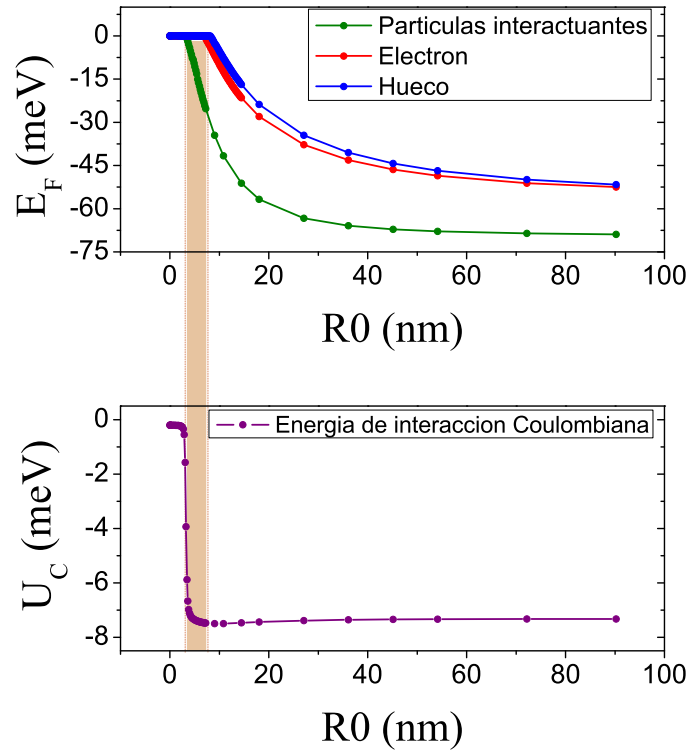


Figura 4.3: En el panel superior, la energía del estado fundamental de un hueco (puntos azules), un electrón (puntos rojos), y un excitón (puntos verdes) confinados en un pozo de potencial Gaussiano de profundidad $V_0 = 60,93$ meV. En el panel inferior, la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental de un excitón.

En el intervalo de radios del QD marcado con color naranja, la interacción Coulombiana es distinta de cero y las partículas independientes han ionizado. En esta zona afirmamos que el excitón está ligado debido a la interacción Coulombiana entre las partículas, mientras que dichas partículas independientes no.

Se utilizó la Ec. (4.14) para calcular la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón como perturbación del Hamiltoniano de

las partículas independientes a primer orden. En la Fig.(4.4.a) se pueden ver los resultados obtenidos para diferentes valores de la profundidad del pozo de potencial.

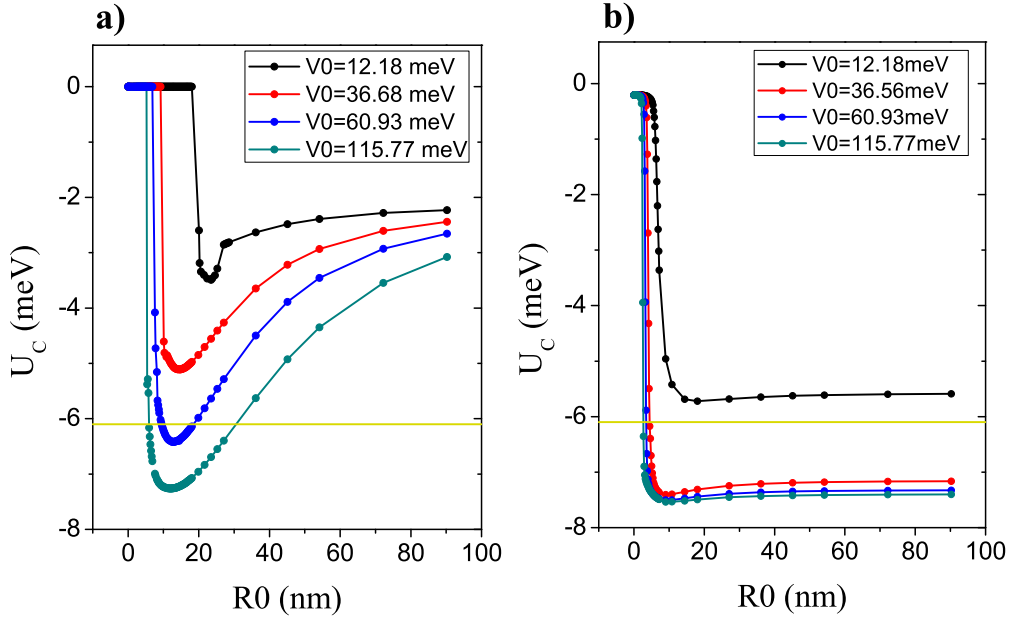


Figura 4.4: **a)**. Energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón, U_C , calculada como perturbación a primer orden del Hamiltoniano de partículas independientes. **b)**. Energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón, U_C , calculada como el valor de expectación del potencial Coulombiano utilizando las funciones de prueba del Hamiltoniano interactuante. Con una línea amarilla se indica el valor de la energía fundamental de un excitón en bulk.

Se determinó el radio del QD a partir del cual la energía de interacción se anula para el caso perturbativo como se muestra en la Fig.(4.5). Para esto, se utilizó el mismo procedimiento gráfico usado en la Fig.(4.2).

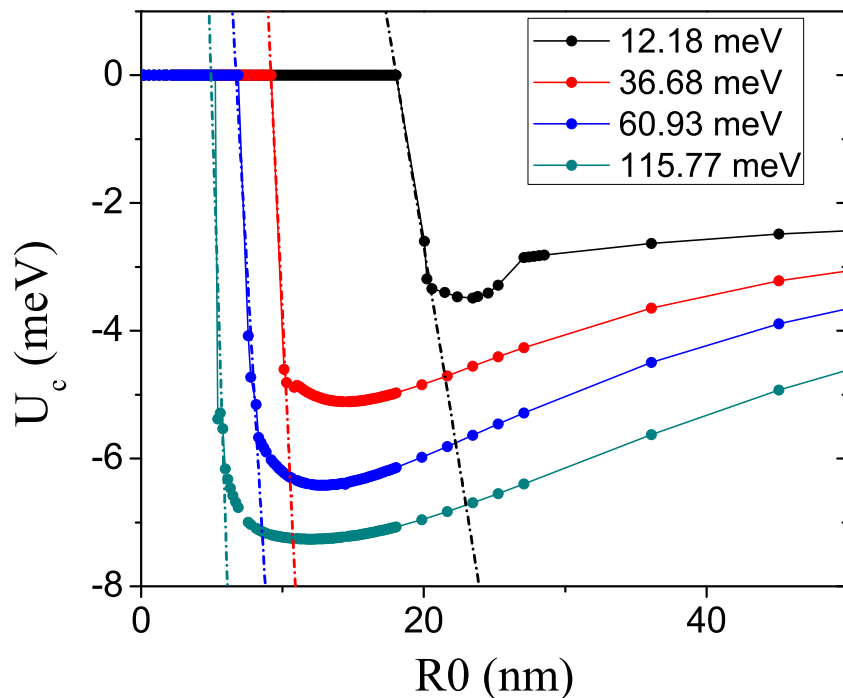


Figura 4.5: Energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón, U_C , calculada como perturbación a primer orden del Hamiltoniano de partículas independientes. Con puntos se muestran los resultados obtenidos mediante la Ec. (4.14) y con línea de puntos los ajustes lineales antes antes de anularse la energía de interacción.

En la Tabla 4.2 se pueden ver, para distintas profundidades del pozo V_0 , los valores del radio donde la interacción Coulombiana se anula, el valor del mínimo de energía y el radio donde este ocurre.

Profundidad del pozo V_0 (meV)	Radio del QD a partir del cual la energía de interacción se anula (nm)	Radio del QD donde la energía de interacción es mínima (nm)	Energía de interacción mínima (meV)
12,18	18,0	36,1	-3,5
36,56	9,2	14,6	-5,1
60,93	6,7	12,8	-6,4
115,77	4,9	11,9	-7,3

Tabla 4.2: Valores del radio a partir del cual la energía de interacción del excitón se anula, la energía de interacción Coulombiana mínima y el radio donde este mínimo ocurre para cada profundidad del pozo de potencial Gaussiano V_0 .

Para poder determinar de forma más precisa los valores de la Tabla (4.2), se debería realizar el cálculo para una mayor cantidad de valores del radio del QD y para distintos tamaños de la base de funciones variacionales utilizadas. En un futuro dichos cálculos se realizarán.

En la Fig.(4.4.b) se muestra la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón calculada como el valor de expectación del observable $-1/r_{eh}$ en término de las funciones de prueba del Hamiltoniano interactuante, Ec.(3.12). Se puede observar que en general, el cálculo perturbativo subestima el valor absoluto de la energía de interacción del excitón. Al comparar la Tabla 4.2 con la Tabla 3.2 se ve que esto ocurre para todas las profundidades del pozo. Lo mismo ocurre para los radios donde la energía de interacción Coulombiana se anula.

Al comparar con la Tabla 4.1, se puede ver que los radios donde ocurre el umbral de ionización de las partículas son similares a los radios donde la energía de interacción Coulombiana se anula. Aunque en un futuro el cálculo deba realizarse con mayor cantidad de puntos para hacer un análisis más preciso, consideramos que el intervalo donde el excitón se mantiene ligado sólo por el efecto de interacción Coulombiana (vea la Fig.(4.3)) será menor al calcular dicha energía de manera perturbativa.

4.5. Conclusiones

Al calcular las energías del estado fundamental del problema de un electrón o un hueco confinados en un potencial Gaussiano, se observa que los radios del umbral de ionización son mayores que en el problema de partículas interactuantes. A partir de este resultado, se deduce que existe un intervalo de radios del QD donde el potencial de confinamiento Gaussiano no puede confinar a las partículas pero el excitón se mantiene ligado por la interacción Coulombiana entre ellas.

Al calcular la energía de interacción del estado fundamental del excitón como perturbación del Hamiltoniano de las partículas no interactuantes se puede ver que el módulo de dicha energía se subestima con respecto al caso donde sí se considera la interacción en el Hamiltoniano.

Por último, se puede notar que en el cálculo perturbativo de la energía de interacción del estado fundamental del excitón, el intervalo de radios del QD donde el excitón se mantiene estable pero las partículas independientes no, es pequeño y no se observa como en el caso del problema de dos partículas interactuantes (vea la Fig.(4.3)).

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se utilizó el método variacional de Rayleigh-Ritz para calcular las energías de un excitón cuyas partículas se encuentran confinadas en un QD esférico. Para ello, se propusieron dos modelos con distintos potenciales de confinamiento: por un lado un potencial de confinamiento cuadrático, y por el otro un potencial de confinamiento Gaussiano. Además, se calcularon las energías de un electrón y un hueco no interactuantes y distinguibles confinados en un pozo de potencial Gaussiano. Por último, se obtuvo la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón a partir de dos métodos: por un lado, tomando el valor de expectación del término de potencial Coulombiano, Ec.(3.13), y por otro lado utilizando la Teoría de perturbación a primer orden y tratando la interacción Coulombiana como una perturbación del Hamiltoniano de las partículas no interactuantes.

Se compararon los resultados obtenidos para la energía del estado fundamental del excitón en el modelo cuyo potencial de confinamiento es cuadrático y en el modelo cuyo potencial de confinamiento es Gaussiano. Se pudo ver que para radios del QD mayores a 50 nm las energías son similares. Sin embargo, para radios del QD menores a 40 nm, la diferencia entre los resultados es muy grande. Mientras que para el modelo con un potencial de confinamiento cuadrático la energía crece monótonamente a medida que el radio del QD disminuye, para el modelo con un potencial de confinamiento Gaussiano la energía tiende a cero.

Se determinaron los radios del threshold de ionización de un electrón y un hueco confinados en un potencial Gaussiano. Se observó que existe un intervalo de radios del QD en el que las partículas independientes ionizan, mientras que el excitón es estable debido a la interacción Coulombiana entre

dichas partículas.

Se compararon los distintos resultados obtenidos para la energía de interacción Coulombiana del estado fundamental del excitón. Se pudo ver que el cálculo perturbativo de la energía de interacción subestima el valor absoluto de dicha energía con respecto al caso donde sí se considera la interacción en el Hamiltoniano.

Consideramos que para realizar un análisis más cuidadoso de los resultados obtenidos y en particular, para poder determinar con mayor precisión los radios del umbral de ionización y la dependencia de la energía en dicha región, debería calcularse una mayor cantidad de valores del radio del QD y utilizarse distintos tamaños de la base de funciones variacionales. Dichos cálculos se realizarán en un futuro.

Como perspectivas a futuro, se espera utilizar MPFUN para poder evaluar en Fortran los elementos de matriz del Hamiltoniano y las matrices de superposición con precisión arbitraria. El grupo de investigación con el que llevaré a cabo mi tesis doctoral dispone de acceso a clusters de cálculo, con lo que se podrían tomar bases de funciones más grandes y recalcularse todos los resultados de este trabajo.

Apéndice A

Coeficientes para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano con potencial de confinamiento cuadrático

Los cálculos que deben realizarse para obtener las Ec.(2.23) y (2.24) a partir de las Ec.(2.6) y (2.16), respectivamente, son complejos. Como se puede ver en la Sección 2.4, se utilizaron transformadas integrales para que los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición queden expresadas en integrales de una sola variable denominada q . En este Apéndice se muestran los coeficientes A_G, B_G, C_G, D_G que se obtienen al realizar dicho cálculo. Cabe destacar que las variables $\{m_e, m_h, m_e h\}$ pertenecen al conjunto de números enteros positivos M, mientras que $\{n_e, n_h, n_e h\}$ pertenecen al conjunto de números enteros positivos N. De este modo, los coeficientes son:

$$\begin{aligned} A_G = & \left(-\frac{m_h}{4\sigma_h} - \frac{n_h}{4\sigma_h} \right) \lambda G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, -1) \\ & + \left(-\frac{m_e}{4\sigma_e} - \frac{n_e}{4\sigma_e} \right) \lambda G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, -1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\ & + W\gamma \lambda G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1), \end{aligned} \tag{A.1}$$

$$\begin{aligned}
B_G = & \left(-\frac{m_e W \gamma}{2} - \frac{m_{eh} W \gamma}{2} - \frac{m_h W \gamma}{2} - \frac{n_e W \gamma}{2} - \frac{n_{eh} W \gamma}{2} - \frac{n_h W \gamma}{2} - \frac{\lambda^2}{2} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{m_e n_e}{2\sigma_e} + \frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} + \frac{m_e n_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, -1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{1}{2} W^2 \sigma_e + \frac{1}{2} W^2 \gamma^2 \sigma_e \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 3) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{m_h n_h}{2\sigma_h} + \frac{m_{eh} n_h}{4\sigma_h} + \frac{m_h n_{eh}}{4\sigma_h} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, -1) \\
& + \left(\frac{1}{2} W^2 \sigma_h + \frac{1}{2} W^2 \gamma^2 \sigma_h \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 3)
\end{aligned} \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}
C_G = & \left(-1 - \frac{m_{eh} \lambda}{2} - \frac{n_{eh} \lambda}{2} - \frac{m_e \lambda}{4\sigma_e} - \frac{n_e \lambda}{4\sigma_e} - \frac{m_h \lambda}{4\sigma_h} - \frac{n_h \lambda}{4\sigma_h} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(-\frac{m_e \lambda}{4\sigma_e} - \frac{n_e \lambda}{4\sigma_e} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, -1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 3) \\
& + \left(-\frac{m_h \lambda}{4\sigma_h} - \frac{n_h \lambda}{4\sigma_h} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 3) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, -1)
\end{aligned} \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}
D_G = & \left(\frac{m_{eh} n_{eh}}{2} + \frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} + \frac{n_{eh} m_e}{4\sigma_e} + \frac{m_{eh} n_h}{4\sigma_h} + \frac{n_{eh} m_h}{4\sigma_h} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(-\frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} - \frac{m_e n_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, -1) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, 3) \\
& + \left(-\frac{m_{eh} n_h}{4\sigma_h} - \frac{m_h n_{eh}}{4\sigma_h} \right) G_{3D}(q, \gamma, \sigma_e, W, n_e, m_e, 3) \\
& \times G_{3D}(q, \gamma, \sigma_h, W, n_h, m_h, -1).
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Estos coeficientes se implementaron en los programas numéricos utiliza-

dos para calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición \hat{S} . Para más detalle sobre el cálculo numérico lea el Apéndice C

Apéndice B

Coeficientes para el cálculo numérico de los elementos de matriz del Hamiltoniano con potencial de confinamiento Gaussiano

En el Capítulo 3 se reemplaza el potencial de confinamiento cuadrático por un potencial de confinamiento Gaussiano. En la Sección 3.1 se mostraron los cambios que esto genera en las funciones de prueba, y por lo tanto en el cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano y de la matriz de superposición. En la Sección 3.2, se introdujeron dos nuevas funciones Y_{3D}^1 y Y_{3D}^2 muy relacionados con las funciones G_{3D} del Capítulo 2 (para más detalles vea el texto de la Sección 3.2). Además, para analizar los distintos términos del Hamiltoniano se calcularon sus respectivos elementos de matriz por separado. En este Apéndice se muestran los coeficientes necesarios para el cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano de las Ec.(3.7),(3.8),(3.9),(3.10),(3.11).

$$\begin{aligned} T_A^e &= \left(-\frac{m_e}{4\sigma_e} - \frac{n_e}{4\sigma_e} \right) \lambda \\ &\quad \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, -1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\ &\quad + \frac{\gamma\lambda}{2\sigma_e} Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1), \end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
T_B^e = & \left(-\frac{m_e \gamma}{2\sigma_e} - \frac{n_e \gamma}{2\sigma_e} - \frac{m_{eh} \gamma}{4\sigma_e} - \frac{n_{eh} \gamma}{4\sigma_e} - \frac{\lambda^2}{2\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{m_e n_e}{2\sigma_e} + \frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} + \frac{m_e n_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, -1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \frac{\gamma^2}{2\sigma_e} Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1),
\end{aligned} \tag{B.2}$$

$$\begin{aligned}
T_C^e = & \left(-\frac{m_{eh} \lambda}{2\sigma_e} - \frac{n_{eh} \lambda}{2\sigma_e} - \frac{m_e \lambda}{4\sigma_e} - \frac{n_e \lambda}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{\lambda \gamma}{2\sigma_e} \right) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{\lambda^2 \gamma}{2\sigma_e} \right) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3),
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\begin{aligned}
T_D^e = & \left(\frac{m_{eh} n_{eh}}{2\sigma_e} + \frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} + \frac{n_{eh} m_e}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(-\frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} - \frac{m_e n_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, -1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3) \\
& \left(\frac{-\gamma n_{eh}}{4\sigma_e} - \frac{\gamma m_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& \left(\frac{\gamma n_{eh}}{4\sigma_e} + \frac{\gamma m_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3),
\end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
T_A^h = & \left(-\frac{m_h}{4\sigma_h} - \frac{n_h}{4\sigma_h} \right) \lambda \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, -1) \\
& + \frac{\gamma \lambda}{2\sigma_h} Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1),
\end{aligned} \tag{B.5}$$

$$\begin{aligned}
T_B^h = & \left(-\frac{m_h \gamma}{2\sigma_h} - \frac{n_h \gamma}{2\sigma_h} - \frac{m_{eh} \gamma}{4\sigma_h} - \frac{n_{eh} \gamma}{4\sigma_h} - \frac{\lambda^2}{2\sigma_h} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{m_h n_h}{2\sigma_h} + \frac{m_{eh} n_h}{4\sigma_h} + \frac{m_h n_{eh}}{4\sigma_h} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, -1) \\
& + \frac{\gamma^2}{2\sigma_h} Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3),
\end{aligned} \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}
T_C^h = & \left(-\frac{m_{eh} \lambda}{2\sigma_h} - \frac{n_{eh} \lambda}{2\sigma_h} - \frac{m_h \lambda}{4\sigma_h} - \frac{n_h \lambda}{4\sigma_h} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(\frac{\lambda \gamma}{2\sigma_h} \right) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3) \\
& + \left(\frac{\lambda^2 \gamma}{2\sigma_h} \right) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1),
\end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
T_D^h = & \left(\frac{m_{eh} n_{eh}}{2\sigma_h} + \frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} + \frac{n_{eh} m_e}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& + \left(-\frac{m_{eh} n_e}{4\sigma_e} - \frac{m_e n_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, -1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3) \\
& \left(\frac{-\gamma n_{eh}}{4\sigma_e} - \frac{\gamma m_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 3) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1) \\
& \left(\frac{\gamma n_{eh}}{4\sigma_e} + \frac{\gamma m_{eh}}{4\sigma_e} \right) \\
& \times Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 3)
\end{aligned} \tag{B.8}$$

$$P^e = -Y_{3D}^2(q, \gamma, R_0, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1), \tag{B.9}$$

$$P^h = -Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^2(q, \gamma, R_0, \sigma_h, n_h, m_h, 1), \tag{B.10}$$

$$C_{ou} = -Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_e, n_e, m_e, 1) Y_{3D}^1(q, \gamma, \sigma_h, n_h, m_h, 1). \tag{B.11}$$

Estos coeficientes se implementaron en los programas numéricos utilizados para calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano y la matriz de superposición \hat{S} . Para más detalle sobre el cálculo numérico lea el Apéndice C.

Apéndice C

Procedimiento numérico para el cálculo de energías mediante el método variacional de Rayleigh-Ritz

Para el cálculo numérico de las energías mediante el método variacional de Rayleigh-Ritz se implementaron dos programas: uno para evaluar los elementos de matriz del Hamiltoniano y de la matriz de superposición \hat{S} , y otro para resolver el problema de autovalores, Ec.(2.9). En este Apéndice se discute el proceso que se llevó a cabo a lo largo del trabajo para poder implementar cada uno de los programas.

Para el programa encargado de evaluar los elementos de matriz del Hamiltoniano se debieron asegurar dos condiciones. Por un lado, una evaluación precisa de las funciones hipergeométricas confluentes, Ec.(2.22),(3.3) y (3.4). Por otro lado, un algoritmo capaz de evaluar las integrales definidas en términos de la variable q , Ec.(2.23),(2.24),(3.5),(3.7).

Para evaluar las funciones hipergeométricas confluentes se escribieron tres programas, cada uno en un software de cómputo distinto: Fortran, Matlab y Mathematica. Matlab y Mathematica incluyen librerías que permiten evaluar las funciones hipergeométricas con precisión arbitraria. En Fortran se buscó una rutina capaz de evaluar dichas funciones [14]. Por un lado, se evaluaron 3000 puntos de la función ${}_1F_1(4; \frac{3}{2}; \frac{-x^2}{37,69})$ en Mathematica y en Matlab con 18 cifras significativas. Por otro lado, se realizó la misma evaluación utilizando la rutina de Fortran en doble precisión. Una vez obtenido los resultados se

restaron entre sí para verificar con qué precisión evalúa las funciones la rutina de Fortran. De esta manera, se vio que los resultados de la rutina de Fortran difieren en la octava cifra significativa con los de Mathematica y Matlab como muestra la Fig.(C.1).

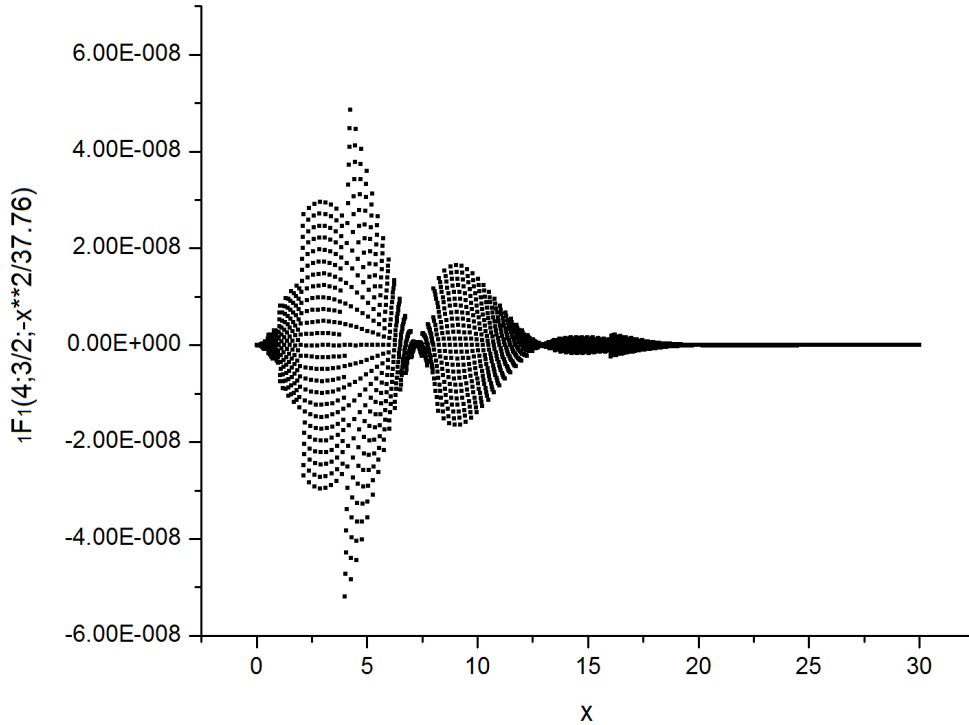


Figura C.1: Diferencia entre los resultados de la evaluación de la función ${}_1F_1(4; \frac{3}{2}; \frac{-x^2}{37.69})$ en Fortran y Mathematica utilizando 3000 puntos.

Para evaluar las integrales que requiere el cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano y de la matriz de superposición se utilizó la regla de Simpson. Para definir hasta qué valor se integraría utilizando este algoritmo, se calculó la integral de los elementos de matriz del Hamiltoniano , Ec.(2.24), para diferentes límites superiores de la integral. Luego se repitió este procedimiento para distintos conjuntos de números enteros M y N . Los resultados para distintos conjuntos M y N son similares a los que se observan en la Fig.(C.2). Es decir, funciones que convergen rápidamente a un valor prácticamente constante, más precisamente, convergen antes de un valor del límite

superior de la integral $b = 10$.

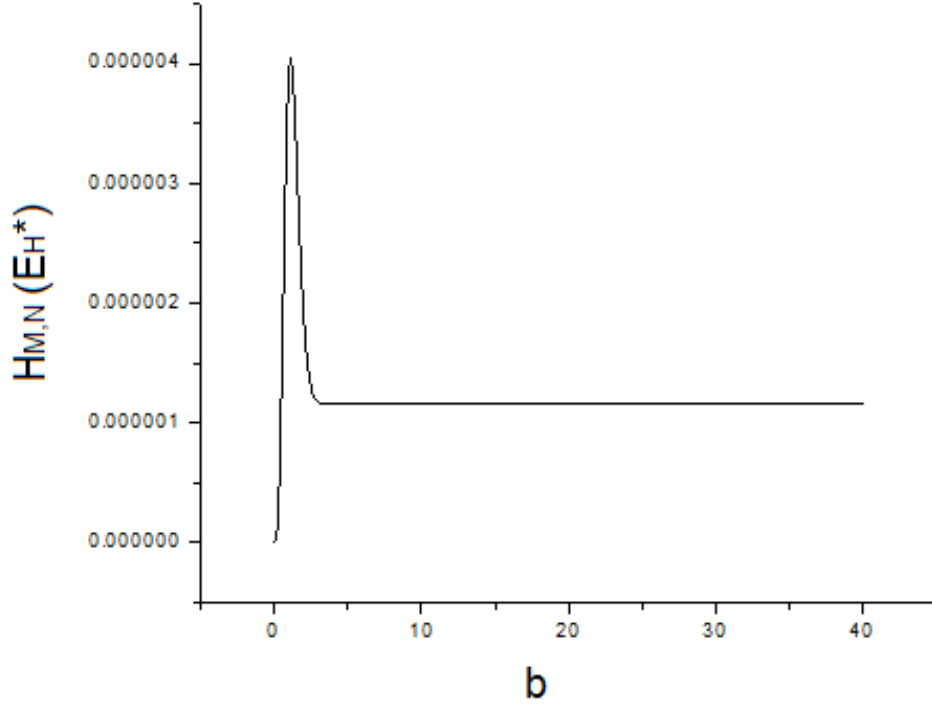


Figura C.2: Valores del elemento de matriz $H_{M,N}$ en función del límite superior de la integral, b . Los conjuntos M y N utilizados son: $m_e = 3, m_h = 2, m_{eh} = 2, n_e = 2, n_h = 1, n_{eh} = 2$.

De este modo, las integrales numéricas se calcularon desde 0 hasta 30 para incluir las fluctuaciones de los elementos de matriz antes de converger a un valor.

Fortran es el software que computa más rápido los elementos de matriz, tanto del Hamiltoniano como de la matriz de superposición. Aunque finalmente se utilizó Mathematica por las facilidades que provee para definir los coeficientes de los Apéndices A y B, en un futuro se trabajará con MPFUN que permite utilizar Fortran con precisión arbitraria.

El programa que se utilizó para resolver el problema de autovalores, Ec.(2.9), fue escrito en Fortran. El mismo se encarga de ordenar los elementos de matriz calculados anteriormente y diagonalizarla. Para esto último,

se utilizaron las rutinas 'DSGYV' y 'DSYEV' de Lapack, que se encargan justamente de resolver el problema de autovalores generalizado y el problema de autovalores cuya matriz de superposición es la identidad, respectivamente.

Bibliografía

- [1] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt, 1976.
- [2] Peter Y. Yu and Manuel Cardona. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. Springer, 2010.
- [3] Shung Lien Chuang. *Physics Of Electronic Devices*. Wiley Series, 1995.
- [4] P. Harrison and A. Valavanis. *Quantum Wells, Wires and Dots*. Wiley Series, 2016.
- [5] S. Sakiroglu, Ünal Doğan, Aylin Yildiz Tunali, Kadir Akgungor, Hakan Epik, Yuksel Ergun, Hüseyin Sari, and İsmail Sökmen. Ground state energy of excitons in quantum dot treated variationally via hylleraas-like wavefunction. *Chinese Physics B*, 18:1578–1585, 04 2009.
- [6] G. Pestka. The schrodinger equation for a spherical two-particle system in r_1, r_2, r_{12} variables. *J. Phys*, 41:1–13, 02 2008.
- [7] T. Garm. Exciton states in spherical parabolic gaas quantum dots. *J. Phys.: Condens. Matter*, 8(2):5725–5735, 1996.
- [8] Chien-Hao Lin Yen-Chang Lin Yew Kam Ho. Quantification of linear entropy for quantum entanglement in he, h and ps ions using highly-correlated hylleraas functions. *Few-Body Syst*, 54:2147–2153, 2013.
- [9] N. C. Deb. Fourier transform technique to calculate matrix elements in the basis of hydrogenic wave functions. *J. Phys.: Condens. Matter*, 49:550–552, 1994.
- [10] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. *Table of Integrals Series and Products*. Wiley Series, 7^o edition, 2007.

- [11] P. Pietilainen V. Halonen, Tapash Chakraborty. Excitons in a parabolic quantum dot in magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 45(11):5980–5985, 1992.
- [12] B. Chatterjee A. Jahan, K.L. Boyacioglu. Effect of confinement potential shape on the electronic, thermodynamic, magnetic and transport properties of a gaas quantum dot at fnite temperature. *Scientific Reports*, 9(15824), 2019.
- [13] B. Szafran J. Adamowski, M. Sobkowicz and S. Bednarek. Electron pair in a gaussian confining potential. *Phys. Rev. B*, 62(7):4234–4237, 2000.
- [14] A. Miller. Solution to the confluent hypergeometric function. <https://jblevins.org/mirror/amiller/toms707.f90>, 1992.