



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"

UNIVERSIDAD DE SONORA

División de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Investigación en Física

“Dispersión Raman Electrónica en Alambres Cuánticos Semiconductores”

Trabajo de Tesis para Obtener el Grado de Doctor en
Ciencias (Física)

Presenta:

Manuel Munguía Rodríguez

Director:

Ricardo Betancourt Riera

Co-Director:

Raúl Riera Aroche

Hermosillo, Sonora, México. 2019

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

PRODUCTOS OBTENIDOS

ARTÍCULOS PUBLICADOS

“Electron states and electron Raman scattering in semiconductor double cylindrical quantum well wire.”

M. Munguía Rodríguez, Ri Betancourt Riera, Re Betancourt Riera, R. Riera & J. M. Nieto Jalil. *Chinese Physics B Vol. 25, No. 11(2016)*.

<http://dx.doi.org/10.1088/1674-1056/25/11/117302>

“Electron states and electron Raman scattering in a semiconductor step quantum well wire.”

Ri Betancourt Riera, Re Betancourt Riera & M. Munguía Rodríguez. *Physica B: Condensed Matter Vol. 515 (2017)*

<http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2017.03.034>

TRABAJOS EN CONGRESOS

a) Electron states and electron Raman scattering in a double cylindrical semiconductor quantum well wire. LIX Congreso Nacional de Física (2016). Manuel Munguía Rodríguez, Ricardo Betancourt Riera, René Betancourt Riera, Raúl Riera Aroche y Rodrigo Arturo Rosas Burgos.

b) Electron states and electron Raman scattering in a semiconductor step-quantum well wire. Symposium at the XXVI International Materials Research Congress held in Cancun, Mexico (2017). Manuel Munguía Rodríguez, Ricardo Betancourt Riera, René Betancourt Riera

AGRADECIMIENTOS

A **CONACYT** por el apoyo económico brindado para llevar a cabo mi posgrado.

A la **UNISON**, especialmente al Departamento de Investigación en Física.

Al **Dr. Ricardo Betancourt Riera**, por sus enseñanzas en el ámbito profesional. Por la paciencia, apoyo y dirección en este trabajo de tesis.

Al **Dr. Raúl Riera Aroche**, mi tutor y Co-Director, por sus enseñanzas y por su apoyo incondicional.

A mi comité de seguimiento: **Dr. Raúl Riera Aroche, Dr. René Betancourt Riera, Dr. Rodrigo Arturo Rosas Burgos**, quienes me aconsejaron siempre durante este trabajo.

A los jurados **Dr. Rolando Pérez Álvarez, Dr. Alvaro Posada Amarillas, Dr. Adalberto Corella Madueño y Dr. Jorge Garza Olguín** por sus observaciones y recomendaciones que enriquecieron este trabajo de tesis.

A todos los **profesores** que contribuyeron a lo largo de mi formación profesional.

RESUMEN

Las técnicas y procedimientos de fabricación de nanoestructuras semiconductoras, como la fabricación de alambres o hilos cuánticos, ha permitido el desarrollo de nuevos dispositivos electrónicos, dando lugar a una revolución no sólo en la electrónica, sino también en la optoelectrónica. La física del estado sólido es fundamental para el estudio de las nanoestructuras cristalinas de diferentes tamaños y simetrías, como por ejemplo; pozos cuánticos, pozos cuánticos múltiples, superredes, alambres cuánticos, entre otras, ya que provee la base del conocimiento teórico y experimental para estudiar esta clase de sistemas.

El modelo de la función envolvente es adecuado para estudiar teóricamente las propiedades de las cuasi-partículas en las estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad cuando están sometidas a un potencial externo. Este es un método dinámico para la determinación de las bandas de energía de las partículas en la Física del Estado Sólido. Las nanoestructuras son consideradas sistemas dinámicos debido a que son sólidos que pueden alojar partículas físicas como electrones por medio de un potencial de barrera o de confinamiento, el cual puede lograrse mediante campos magnéticos o creciendo estructuras cuyas distintas regiones sean de materiales diferentes. En este trabajo estudiaremos los estados estacionarios de un electrón en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica de doble sección transversal circular y de un alambre cuántico semiconductor con un potencial escalón, obtenidos a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. Además, calculamos y analizamos la dispersión Raman de estas nanoestructuras, asumiendo que el sistema sólo tiene una banda de conducción la cual se desdobra en un sistema de subbandas debido al confinamiento, despreciando así, las bandas de valencia, ya que no consideraremos portadores intrínsecos.

ABSTRACT

The techniques and procedures for manufacturing semiconductor nanostructures, such as the manufacture of quantum wires, have allowed the development of new electronic devices, resulting in a revolution not only in electronics, but also in optoelectronics. The physics of the solid state is fundamental for the study of crystalline nanostructures of different sizes and symmetries, as for example; quantum wells, multiple quantum wells, quantum wires, among others, since it provides the theoretical and experimental knowledge base to study this class of systems.

The model of the envelope function is suitable to study theoretically the properties of the quasi-particles in the semiconductor structures of low dimensionality when they are subjected to an external potential. This is a dynamic method for the determination of the energy bands of the particles in the Physics of the Solid State. Nanostructures are considered dynamic systems because they are solids that can accommodate physical particles such as electrons by means of a potential barrier or confinement, which can be achieved by magnetic fields or by growing structures whose different regions are made of different materials. In this thesis we will study the stationary states of an electron in a semiconductor double cylindrical quantum well wire and in a semiconductor step quantum well wire obtained from a matrix of $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. In addition, we calculate and analyze the Raman dispersion of these nanostructures, assuming that the system only has a conduction band which unfolds into a subband system due to confinement, thus neglecting the valence bands, since we will not consider intrinsic carriers.

Índice

Introducción	1
Capítulo 1: Fundamentos teóricos	14
1.1 Dinámica de los electrones	14
1.2 Aproximaciones para la solución del problema cuántico del sólido cristalino	16
1.2.1 Aproximación de valencia	17
1.2.2 Aproximación de Born-Oppenheimer	18
1.2.3 Aproximación de campo medio o Aproximación monoeléctrica	21
1.2.4 Aproximación de la masa efectiva	22
1.3 Hamiltoniano de la interacción electrón-fotón	27
1.4 Sección eficaz diferencial de dispersión Raman	30
Capítulo 2: Estados electrónicos de alambres cuánticos semiconductores	33
2.1 Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de disco	34
2.2 Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo	39
2.3 Estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica (QWW-Doble)	45
2.4 Discusión de resultados de los estados electrónicos del alambre cuántico semiconductor doble	51
2.5 Estados electrónicos en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con un potencial en escalón (QWW-Escalón)	57
2.6 Discusión de resultados de los estados electrónicos del alambre cuántico con un potencial en escalón	59
Capítulo 3: Dispersión Raman electrónica	66
3.1 Elementos matriciales	67
3.2 Sección diferencial de dispersión Raman	70
3.3 Discusión de resultados	73
3.3.1 Resultados del alambre cuántico semiconductor doble (QWW-Doble)	74
3.3.2 Resultados del alambre cuántico con un potencial en escalón (QWW-Escalón)	80
Conclusiones y recomendaciones	87
Referencias	88

LISTA DE FIGURAS

Figura		Página
1	Representación esquemática de los sistemas confinados	4
2	Tipos de nanoestructuras semiconductoras	6
3	Representación de los tipos de dispersión que puede presentar una muestra	9
4	Estructura de bandas del <i>GaAs</i>	15
5	Representación esquemática de la estructura de bandas de un semiconductor de <i>gap</i> directo	25
6	Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco	34
7	Niveles de energía de un alambre cuántico semiconductor.	38
8	Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo	40
9	Estados electrónicos correspondientes a un QWW con sección transversal en forma de anillo; <i>a)</i> $r_b = 100 \text{ \AA}$ y <i>b)</i> $r_b = 200 \text{ \AA}$	43
10	Estados electrónicos de un QWW con sección transversal en forma de anillo, donde se fija el ancho del cascarón $d = 100 \text{ \AA}$	45

11	Representación de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica	46
12	Niveles de energía del alambre cuántico doble (líneas continuas), donde r_b varía de r_a a r_c	53
13	Niveles de energía de un alambre cuántico doble (líneas continuas), donde varía la barrera $b = r_b - r_a$	56
14	Densidad de probabilidad electrónica normalizada a través del sistema y energía debido al confinamiento (\mathcal{E}_r) para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón	60
15	Energía de los estados electrónicos debido al confinamiento espacial (\mathcal{E}_r) para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón	62
16	Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman en un alambre cuántico doble con $r_a = 9$ nm, $r_b = 12$ nm y $r_c = 17$ nm; para un fotón incidente con energía de $\hbar\omega_l = 0.28$ eV	75
17	El espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman para el alambre cuántico doble con una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_l = 0.28$ eV y polarización (σ_s^-, σ_l^+)	77
18	La tasa de transición $ T^-(0,1)T^-(1,0) ^2$, de un alambre cuántico doble, donde la barrera $b = r_b - r_a$ varía	79

19	Taza de transición de probabilidad de tres niveles de energía para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón	81
20	Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman para un QWW-Escalón con $r_c = 40 \text{ \AA}$ y $d_s = 40 \text{ \AA}$	83
21	Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman de un QWW-Escalón para una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_i = 0.90 \text{ eV}$ y polarización (σ_s^-, σ_l^+)	85
22	Posición de las singularidades resonantes intra-subbanda (líneas sólidas) e inter-subbanda (líneas discontinuas) del espectro de un proceso de emisión Raman en un QWW-Escalón	86

Introducción

Los sistemas nanométricos son aquellos que presentan un tamaño del orden de nanómetros (10^{-9} m) en una o varias de sus direcciones espaciales. La caracterización y manipulación de la materia a escala nanométrica ha marcado una revolución tecnológica en el siglo XXI denominada nanotecnología, que continúa con un paso arrollador en la actualidad. Este evento mundial fue antecedido por el desarrollo de teorías físicas que forman los pilares de la ciencia moderna, tal como la mecánica cuántica, la ciencia de materiales, y en general lo que se conoce como nanociencia.

Richard Feynman fue el primero en hacer referencia a las posibilidades de la nanociencia y la nanotecnología. En Caltech (Instituto Tecnológico de California) en el año de 1959 Feynman presentó una conferencia llamada “There’s plenty of room at the bottom” (En el fondo hay espacio de sobra), en la cual predijo la existencia de una gran cantidad de nuevos descubrimientos en sistemas de dimensiones atómicas o moleculares, si éstos se pudieran fabricar con un control absoluto de su tamaño, simetría y dimensiones. Hace algunos años, en la segunda mitad del siglo XX, las ideas de Feynman se hicieron realidad y desde entonces se han construido sistemas y dispositivos del orden de nanómetros.

Este desarrollo ha dado origen a dos disciplinas, la nanociencia y la nanotecnología. La nanociencia es aquella parte de la ciencia que se dedica al estudio de los fenómenos y la manipulación de la materia a escala nanométrica [1], mientras que la nanotecnología se trata del diseño, caracterización, producción y aplicación de estructuras, dispositivos y sistemas a través del control del tamaño y la forma en dimensiones nanométricas [1].

Las propiedades naturales de la materia a escala nanométrica son distintas a las que se presentan en escalas superiores, microscópicas o macroscópicas, es decir, muchas de las propiedades físicas dependen del tamaño de los materiales, por ejemplo, la conductividad eléctrica, la capacidad calorífica, entre otras. Esto ha generado que gran parte de la investigación científica se oriente al estudio y manipulación de los materiales confinados con el fin de aprovechar el mejoramiento en sus propiedades volumétricas y el surgimiento de otras no presentes en el estado macroscópico.

El estudio de los fenómenos que se originan a escalas nanométricas tiene una gran importancia para el desarrollo científico y tecnológico. La nanotecnología promete incrementar la eficiencia de la industria tradicional y desarrollar nuevas aplicaciones a través de las tecnologías emergentes. Son múltiples las áreas en las que la nanotecnología tiene aplicaciones potenciales, de hecho su avance ya influye y repercute en una amplia gama de industrias como: la de cosméticos, la farmacéutica, los electrodomésticos, la del cuidado personal, la construcción, las comunicaciones, la de seguridad y defensa, la automotriz, la aeroespacial, los semiconductores, la optoelectrónica, entre otras [2,3] . En estos momentos la nanociencia y la nanotecnología aún se encuentran en una etapa temprana de investigación y desarrollo, en la que las investigaciones, y la mayoría de las inversiones, están dirigidas hacia la comprensión de los fenómenos, los procesos y la creación de nuevos materiales en su condición de nanoestructuras [4].

Existe una gran variedad de nanoestructuras en lo que a ciencia de los materiales se refiere, entre ellas están las metálicas, aplicadas en la catálisis química, purificación y desinfección de agua, en dispositivos fotovoltaicos y en la obtención de aleaciones nanoestructuradas, algunas de las cuales son de elevada dureza. También existen los nanotubos de carbono que se utilizan en la obtención de materiales muy ligeros y resistentes, y los semiconductores que son ampliamente utilizados en la construcción de dispositivos electrónicos debido a sus propiedades ópticas y de transporte [5].

Los electrones pueden confinarse en nanoestructuras que se obtienen mediante diversos métodos de manipulación y crecimiento, las cuales se pueden caracterizar usando técnicas

ópticas como la microscopía electrónica de barrido y de transmisión, la dispersión Raman, la difracción de Rayos X, entre otras, con la intención de aprovechar o corroborar características físicas relacionadas con el tamaño y forma del sistema.

En la década de los 60s se construyeron las primeras nanoestructuras semiconductoras gracias a los trabajos pioneros de Keldish sobre las superredes [6,7]. Años después, en los años 70 se logró la construcción de las primeras superredes bajo el intenso y exhaustivo trabajo de Esaki y Tsu [8]. Esto, en gran parte, fue gracias a las técnicas de crecimiento y de dopado como la Epitaxia por haces moleculares (MBE, del inglés Molecular Beam Epitaxy), la Deposición química de vapor metal-orgánico (MOCVD, del inglés Metal Organic Chemical Vapor Deposition), Epitaxia de fase líquida, (LPE, del inglés Liquid Phase Epitaxy), técnicas de litografía de rayos electrónicos de alta resolución, entre otras [3,9,10], aunado al desarrollo paralelo de modelos teóricos de pozos cuánticos, permitiendo la síntesis de los pozos cuánticos simples y múltiples [5], así como la construcción de otras estructuras como alambres cuánticos, que son el objeto de estudio de este trabajo.

Los dispositivos semiconductores se han desarrollado ampliamente aportando grandes avances en la tecnología electrónica, sustituyendo en la mayoría de las aplicaciones el uso de las válvulas o tubos de vacío como diodos, tríodos, tetrodos, entre otros. Los primeros dispositivos semiconductores fueron desarrollados a base de Germanio y Silicio, que se usaron para conformar lo que se conoce como dispositivos PN, los cuales se dopan con elementos de la tabla periódica de los grupos III y V [11]. A los semiconductores tipo N se les añade átomos del grupo V de la tabla periódica, para aumentar los portadores de carga libre negativos o electrones, mientras que a los de tipo P se les añade cierto tipo de átomos del grupo III, para aumentar los portadores de carga libre positivos o huecos. El germanio y el silicio son conocidos como semiconductores no polares.

Los materiales pueden clasificarse en conductores, aislantes y semiconductores, dependiendo de sus características electrónicas; además existen materiales que no oponen resistencia alguna al paso de la corriente eléctrica, dichos materiales se denominan superconductores. La diferencia entre conductores, aislantes y semiconductores es una

propiedad física llamada gap o banda prohibida, que es la diferencia energética entre la banda de valencia y la banda de conducción de los materiales. En los metales la banda de valencia se traslapa con la banda de conducción, por lo tanto, no existe esta brecha prohibida, mientras que en los aislantes el gap es de varios electrón-volts (eV) y en los semiconductores es mayor que cero pero menor al de los aislantes, por ejemplo, el valor del gap del germanio es de 0.67 eV.

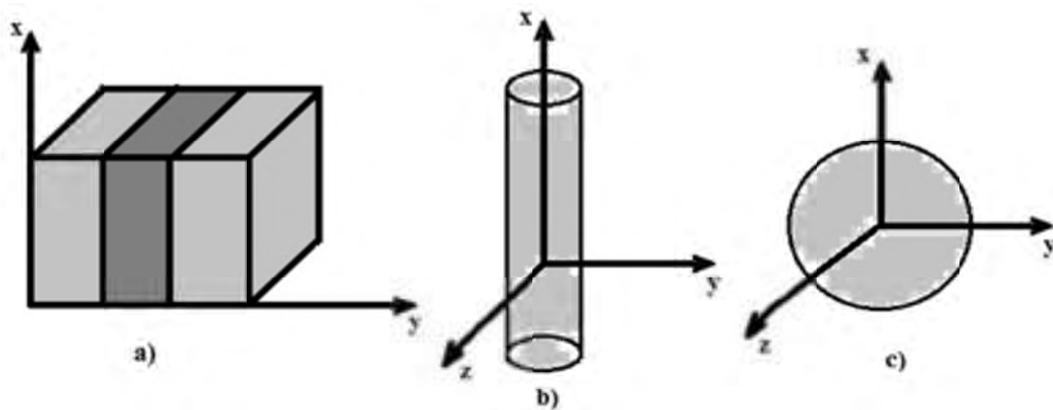


Figura 1. Representación esquemática de los sistemas confinados, a) Pozo cuántico (QW, del inglés Quantum Well), b) Alambre cuántico (QWW, del inglés Quantum Well Wire) y c) Punto cuántico (QD, del inglés Quantum Dot) de simetría esférica [3].

Con el paso del tiempo, debido a la necesidad de mejores dispositivos electrónicos, los científicos construyeron artificialmente nuevos semiconductores, llamados semiconductores polares, con el fin de poder manipular las propiedades optoelectrónicas que anteriormente no se podían. Un ejemplo es el *GaAs*, que es un semiconductor que tiene las mejores cualidades físicas del Germanio y del Silicio. Así, con estos nuevos semiconductores, los dispositivos electrónicos mejoraron en calidad, eficiencia y potencia de funcionamiento, además de ser más pequeños, del orden de micras (10^{-6} m), pero aun con estas dimensiones el comportamiento de las partículas y cuasipartículas involucradas en los dispositivos, tal como los electrones y fonones, no muestran cambios por el efecto del tamaño, ya que la longitud de onda del electrón puede considerarse infinitamente

pequeña comparada con las dimensiones de un dispositivo donde cada uno de sus lados son del orden de las micras.

En las últimas décadas se han construido sistemas nanoestructurados en donde las dimensiones del dispositivo son del orden de la longitud de onda del electrón en al menos una dirección. Los sistemas con una dimensión espacial confinada y dos libres se denominan cuasi-bidimensionales (Q2D), luego con dos direcciones confinadas y una libre se denominan cuasi-unidimensionales (Q1D) y con las tres dimensiones confinadas y cero libre cuasi-cerodimensionales (Q0D); el número de dimensiones confinadas del sistema afecta fuertemente las propiedades de las cuasi-partículas (electrones, huecos, excitones, fonones, etc) en los semiconductores. La geometría del sistema confinado también afecta las propiedades físicas que presentan las partículas y cuasi-partículas, como son las propiedades ópticas dadas por las reglas de selección. La clasificación de los sistemas no sólo está dada por el número de direcciones confinadas, sino también por la forma o simetría de la región resultante (ver figura 1) [12,13,14,4].

En los pozos cuánticos (QW) del inglés (Quantum Well) el confinamiento del movimiento de las partículas se da en una dirección, de tal forma que su movimiento se hace cuasi-bidimensional teniéndose dos direcciones para el movimiento libre, para el alambre cuántico (QWW) se confinan las partículas en dos direcciones, teniéndose sólo una dirección de movimiento libre, es decir, el movimiento sería cuasi-unidimensional, y en los puntos cuánticos (QD) se confinan las tres direcciones por lo que la partícula no puede moverse libremente en ninguna dirección siendo cuasi-cerodimensional [3,5,15,16,13].

Los sistemas cuasi-unidimensionales más estudiados teóricamente son los de simetría rectangular y cilíndrica debido que en estas simetrías la ecuación de Schrödinger es separable en varios casos, simplificando su solución y obteniéndose expresiones analíticas tanto de la función de onda como de la energía de los estados electrónicos. Los materiales más utilizados para la producción de nanoestructuras son, primeramente, los semiconductores y los metales, y después, los dieléctricos, magnéticos y superconductores. También se han utilizado materiales orgánicos, polímeros y biomateriales [3].

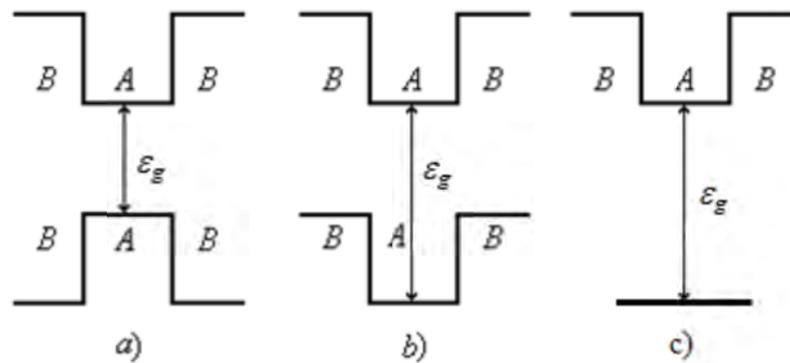


Figura 2. Tipos de nanoestructuras semiconductoras. a) Tipo I; b) Tipo II; c) Tipo III [17].

En general, las nanoestructuras son fabricadas con dos materiales semiconductores a los que podríamos identificar con las letras A y B , con *gaps* de energía \mathcal{E}_g^A y \mathcal{E}_g^B , respectivamente. En el proceso de crecimiento uno de los materiales, es depositado al lado del otro, de manera que se forma una barrera de potencial en las intercaras debido a la diferencia de *gaps* (*band-offset*). De acuerdo a la posición del *gap* se pueden distinguir varios tipos de nanoestructuras [5]. Por ejemplo, en las nanoestructuras tipo I el material crea una barrera tanto para los electrones de la banda de conducción como para los de la banda de valencia, esta barrera se encuentra dentro del material A (ver figura 2a). Ejemplos de este tipo de nanoestructuras son $GaAs/GaAlAs$, $Ga_{0.4}As_{0.53}/InP$ y $GaSb/AlSb$. En las nanoestructuras tipo II, también llamadas nanoestructuras escalonadas, el material A actúa para los electrones de conducción como un pozo de potencial y para los electrones de valencia como una barrera (ver figura 2b). Ejemplo de este tipo de nanoestructuras son $InP/Al_{0.53}In_{0.47}As$, donde los electrones están en su mayoría en InP y los huecos en el $Al_{0.53}In_{0.47}As$, y el $InAs/GaSb$ donde los electrones en su mayoría se concentran en $InAs$ y los huecos en $GaSb$. En las nanoestructuras tipo III las excitaciones se encuentran en las interfaces donde las partículas que interactúan están separadas espacialmente, una situación que recuerda a la de los estados límite de impurezas creados por las impurezas colocadas en las barreras de las estructuras cuánticas [3].

Un alambre cuántico es un sistema cuasiunidimensional, donde la dirección confinada es la radial. Existen muchos tipos de alambres cuánticos, metálicos (Ni, Pt, Au), semiconductores ($Si, Ge, GaAs$) y aislantes (SiO_2). Los alambres cuánticos tienen múltiples aplicaciones, por ejemplo, en sensores, celdas fotovoltaicas, láseres, dispositivos de almacenamiento de memoria, creación de imágenes, y muchas otras [18,19]. También, se espera la creación de transistores basados en alambres cuánticos los cuales presentan una movilidad mucho mayor de los portadores de carga que los transistores convencionales y con ellos se puede construir láseres con una mayor estabilidad térmica. En general, el diámetro de un alambre cuántico oscila entre uno y cien nanómetros y su longitud llega hasta los cien micrómetros [20].

En los primeros intentos para construir estructuras tipo alambres cuánticos se toparon con diversas dificultades, ya que durante el procedimiento se utilizaba un dispositivo tipo pozo cuántico ya desarrollado y se separaba del sistema original, esto propiciaba que el pozo fuera contaminado por el aire exterior, propiciando que los portadores se recombinaran de manera no radiativa, además se utilizaban métodos químicos que podían dañar el dispositivo [20,21]. Se han implementado métodos para mejorar el proceso de construcción de alambres cuánticos, una de ellos es el procedimiento de decrecimiento en donde se utiliza $GaAlAs$ para cubrir las paredes del pozo, logrando con esto una banda de energía prohibida más grande. Con el paso del tiempo nacieron nuevos métodos que permitían tener alambres de mayor calidad tales como el método *in situ*, donde el procedimiento es realizado en ultra alto vacío, además de varios métodos complicados y sofisticados que no permiten la exposición de la nanoestructura a agentes externos que pudieran mermar la calidad [22].

Los métodos ópticos son ampliamente utilizados para la caracterización de nanoestructuras semiconductoras, especialmente la espectroscopia Raman que ha mostrado ser muy eficaz para estudiar propiedades físicas de nanoestructuras semiconductoras [23,15,24,25]. Esto es debido a que la espectroscopia Raman nos permite caracterizar sustancias en cualquier estado de agregación y en muchas ocasiones no se requiere la preparación de muestras, además de que éstas pueden encontrarse en diferentes formas (cristales, polvos, filamentos

de polímeros, muestras líquidas, soluciones). La gran importancia de la espectroscopia Raman radica en su precisión y versatilidad, lo que hace posible el análisis de estructuras como las moléculas y sólidos, cuyos análisis por otros medios serían de gran complejidad. La dificultad más destacable de la espectroscopia Raman es la interferencia entre la radiación dispersada por la muestra y la proveniente de la fluorescencia que es un proceso de emisión en el cual las moléculas son excitadas por la absorción de radiación electromagnética y al relajarse al estado basal liberan el exceso de energía en forma de fotones. La intensidad de la fluorescencia es varios órdenes de magnitud más grande que la de la dispersión Raman. Es frecuente que al querer obtener un espectro Raman observemos solamente fluorescencia y, aunque esto no ocurre en todos los casos, muchas veces ésta nos impide analizar moléculas por este método, por lo que se han desarrollado técnicas que permiten eliminar o reducir la emisión por fluorescencia.

El efecto Raman es un proceso que implica la dispersión inelástica de la luz en la que las moléculas o átomos ganan o pierden energía, de forma que la luz incidente sobre la muestra difiere de la dispersada [26]. La denominación Raman se debe a C.V. Raman, que descubrió el efecto, que ahora lleva su nombre, experimentalmente en 1928, investigando la dispersión de la luz por las moléculas, por lo cual fue galardonado con el premio nobel de 1930. Cabe mencionar que el efecto había sido predicho teóricamente por Smekal en 1923. El efecto Raman suele ocurrir por un cambio en los estados vibracionales, rotacionales o vibrorotacionales de las moléculas [26]. En 1923, uno de los alumnos de Raman observó que el color de la luz cambió cuando atravesó unas muestras de agua y alcoholes purificados que Raman utilizaba para estudiar la dispersión de los rayos de luz, el efecto no pudo ser eliminado por lo que se pensó que este fenómeno era una propiedad característica de la materia. Poco después, en 1928, Raman y su discípulo Krishnan publicaron en la revista Nature lo que sería su más famoso artículo, en el que describieron este nuevo tipo de radiación secundaria [27]. En ese año Landsberg y Mandelstam, reportaron el mismo fenómeno pero en el cuarzo [28].

La espectroscopia Raman se basa en hacer incidir un haz de luz monocromática de frecuencia ν_0 sobre una muestra para caracterizarla por medio de la dispersión que se

produce. La mayor parte de la luz dispersada presenta la misma frecuencia que la luz incidente, pero una fracción muy pequeña presenta un cambio en la frecuencia, como resultado de la interacción de la luz con la materia [5]. La luz que mantiene la misma frecuencia ν_0 , de la luz incidente se conoce como dispersión Rayleigh y no aporta ninguna información sobre la composición de la muestra analizada. La luz dispersada que presenta frecuencias distintas a la de la radiación incidente, es la que proporciona información sobre la composición molecular de la muestra y es la que se conoce como dispersión Raman. Si la energía de la radiación dispersada es menor que la de la radiación incidente se denomina dispersión Stokes, en cambio, si el fotón obtiene energía de la muestra se denomina dispersión Anti-Stokes, ver figura 3.

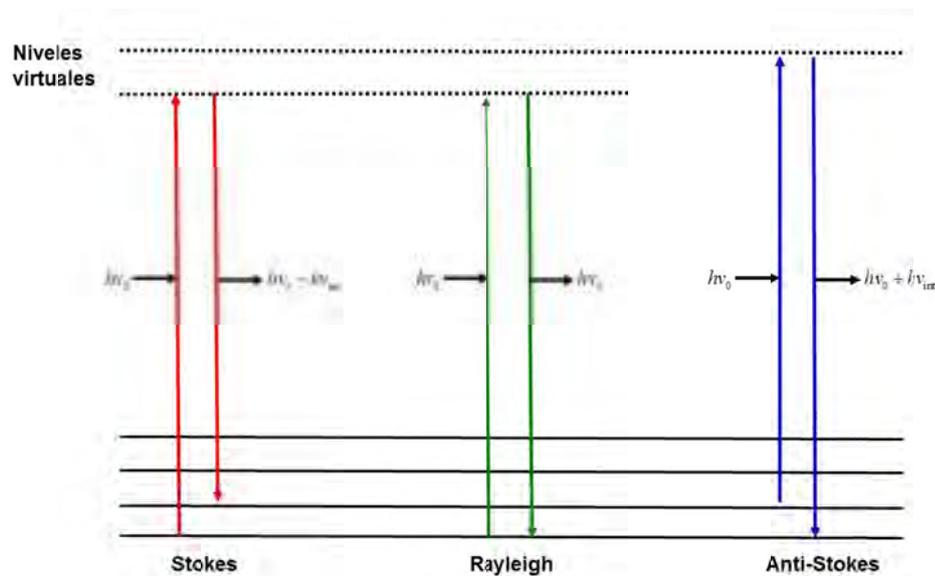


Figura 3. Representación de los diferentes tipos de dispersión que puede presentar una muestra. Las líneas verdes representan la dispersión de Rayleigh, en donde el fotón dispersado tiene la misma energía que el fotón incidente. Las líneas rojas representan la dispersión de Stokes, que ocurre cuando el fotón dispersado tiene menor energía que el fotón incidente, esto puede ocurrir debido a un cambio de estado rotacional, vibracional o vibrorotacional de la molécula. La línea azul representa la dispersión Anti-Stokes que ocurre cuando el fotón dispersado tiene mayor energía que el fotón incidente debido a que obtuvo energía de la muestra.

Como hemos mencionado, el estudio teórico de las propiedades de las nanoestructuras se puede realizar desde la perspectiva de la mecánica cuántica y la física del estado sólido. La función de onda y los niveles de energía del sistema se obtienen al resolver la ecuación de Schrödinger que contiene la información del sistema, para esto podemos elegir el sistema coordinado que más convenga para analizar alguna estructura y así facilitar la solución matemática de la ecuación, por ejemplo, si el sistema tiene simetría cuadrada, utilizamos las coordenadas cartesianas. En nuestro caso estudiamos un alambre cuántico doble y un alambre cuántico en escalón, ambos con geometría cilíndrica por lo tanto las coordenadas más adecuadas para estudiar esta estructura son las cilíndricas.

La función de onda de un electrón en un sólido puede obtenerse aunque sea de manera aproximada con diferentes métodos, como el tight-binding (electrón fuertemente ligado), el de combinación lineal de ondas planas (electrón cuasilibre), el de ondas planas ortonormalizadas (OPW seudopotencial) o con los métodos basados en primeros principios [29]; en cada uno debe considerarse la interacción de los iones con el material.

Sin embargo, el método que utilizaremos es el de la Aproximación de la Masa Efectiva (*EMA*) o Aproximación de la Función Envolvente (*EFA*); este método simplifica la interacción del potencial cristalino con los electrones del material, redefiniendo o renormalizando la masa del electrón usando la teoría de bandas. Así podemos considerar al electrón como una cuasi-partícula que existe en el material con una “masa distinta” que puede ser medida en el laboratorio.

En los últimos 40 años se ha dedicado un gran esfuerzo al estudio de propiedades ópticas en sistemas confinados semiconductores, en particular se ha estudiado la dispersión Raman por diferentes canales y régimen de confinamientos con y sin campos externos por ejemplo, los primeros trabajos se concentraron en estos estudios solo con transiciones interbandas en sistemas volumétricos en semiconductores de gap pequeño [29,30], luego se realizaron investigaciones sobre la dispersión Raman en presencia de campos eléctricos y campos magnéticos externos [31,32]; además se obtuvo la sección eficaz de dispersión Raman interbanda en un semiconductor cubico en ausencia y presencia de campo eléctrico externo

[33] y se consideraron efectos excitónicos [34]. Recientemente, se ha investigado la dispersión Raman en varios tipos de nanoestructuras, estudiándose procesos de distinta naturaleza, donde se consideran o no la presencia de fonones [20,35], como en pozos cuánticos con diferentes perfiles de potencial [36,37,38,39,40], alambres cuánticos de distinta geometría [5,41,42,43,44] y puntos cuánticos [45,46,47,48,49], considerándose la presencia de campos eléctricos y magnéticos. Como resultados de estas investigaciones se demostró que la dispersión Raman electrónica en el caso de las nanoestructuras permite determinar la estructura de bandas de los sistemas, siendo una técnica muy sensible a cambios de dimensionalidad o de simetría de la región de confinamiento. Por otro lado, en los últimos años se han investigado nanoestructuras semiconductoras para su posible uso como fuentes láser, conocidos como Intersubband Raman Laser [50,51,52,53,54,55] ya que los dispositivos optoelectrónicos semiconductores juegan un papel fundamental en la nanofotónica debido a las limitantes inherentes de los circuitos integrados y la demanda de mayor velocidad en la comunicación por medio de chips [55]. En particular ha emergido el campo de la fotónica de alambres cuánticos (nanowire photonics) en la búsqueda de fuentes coherentes de luz en donde se ha investigado la emisión, propagación, modulación y amplificación de luz de estos sistemas [55]. En los últimos 10 años se han buscado nanoalambres adecuados para ser utilizados como fuentes de luz láser a temperatura ambiente [55].

En este trabajo se desarrolló una metodología para estudiar los estados estacionarios de un electrón sometido a un potencial de confinamiento del perfil de un alambre cuántico semiconductor doble y de un alambre cuántico en escalón, ambos de sección transversal cilíndrica, obtenidos a partir de una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$. También se analizaron los casos límites que son el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco circular y con forma de anillo circular. Esto con el objetivo de probar y validar los nuevos resultados obtenidos.

Así, los objetivos principales de este trabajo de tesis son:

1. Obtener los estados electrónicos de un alambre cuántico doble semiconductor y de un alambre cuántico semiconductor en escalón ambos de simetría cilíndrica, utilizando la aproximación de la masa efectiva y considerando que el sistema ha sido crecido en una matriz de $GaAs/AlGaAs$.
2. Analizar con detalle el comportamiento de los estados electrónicos al variar diferentes parámetros del sistema.
3. Cálculo de la sección eficaz de dispersión por unidad de ángulo sólido y de frecuencia de la radiación emitida del alambre cuántico semiconductor doble.
4. Estudiar la eficiencia cuántica de los alambres cuánticos semiconductores.

Con el objetivo de facilitar la lectura y comprensión de este trabajo, hemos organizado el manuscrito de la siguiente forma: primeramente iniciamos con el prefacio, donde se presenta al lector un resumen del trabajo a realizarse; una introducción que muestra la importancia, actualidad y motivación de la tesis, que ubica al lector sobre la temática tratada desde un punto de vista general; después en el capítulo 1 se exponen los fundamentos teóricos necesarios para la investigación realizada; en el capítulo 2 se obtienen los estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor doble y un alambre cuántico semiconductor en escalón así como también los casos límites; en el capítulo 3 se calcula y estudia la ganancia y la dispersión Raman para distintas configuraciones de los sistemas mencionados en el capítulo 2, por último se incluyen las conclusiones y recomendaciones de este trabajo de investigación.

El grupo de trabajo donde se dirigió la investigación posee una amplia experiencia en el estudio de propiedades ópticas en semiconductores polares tridimensionales y confinados con paredes infinitas y finitas en régimen de confinamiento fuerte y débil, restringiendo las dimensiones espaciales por diferencias de gap en semiconductores o con campo magnético. Se pueden observar en las bases de datos internacionales más de 50 publicaciones científicas entre artículos y capítulos de libros que incluyen no solo propiedades ópticas, sino también de transporte, electrónicas y otras de carácter físico-químico de estos sistemas, investigados por diferentes canales: electrónicos, pares electrón-hueco, excitones y otros. En el caso de las investigaciones en sistemas confinados, el confinamiento es utilizado para

manipular y controlar las propiedades de los materiales. En particular lo novedoso de mi investigación no es el nivel de teoría utilizado en el cálculo de la dispersión Raman electrónica, sino el estudio de dos nuevos objetos o sistemas confinados, el alambre cuántico semiconductor doble y el alambre cuántico con un potencial en escalón, que no habían sido abordados desde el punto de vista teórico por ningún investigador en la forma en que lo investigamos y es lo que consideramos totalmente nuevo. Esto permitió las publicaciones en las revistas científicas que están en JCR.

Capítulo 1: Fundamentos teóricos

En este capítulo desarrollaremos el marco teórico correspondiente a este trabajo de tesis. Haremos referencia a los modelos, fundamentos físicos como leyes, conceptos, juicios, teorías y aproximaciones más importantes que se utilizan para obtener los estados electrónicos en una nanoestructura. Para ello estudiaremos la dinámica de los electrones en el sólido, en especial la aproximación de la función envolvente.

1.1 Dinámica de los electrones

En un sólido existen regiones del espectro energético de los electrones con energías permitidas y prohibidas debido a la estructura periódica de los iones que conforman la red del cristal; por ejemplo en la Figura 4 se muestra la estructura de bandas del $GaAs$, la cual es representativa de los materiales III-V. En los semiconductores se presentan varias bandas de energía, las cuales pueden estar totalmente ocupadas, a las que se les denomina **bandas de valencia**, y otras totalmente o parcialmente vacías, las cuales se denominan **bandas de conducción** (si el semiconductor es dopado con impurezas donadoras entonces la banda de conducción está parcialmente llena). En los materiales III-V en la mayoría de los casos tanto el máximo de la banda de valencia como el mínimo de la banda de conducción se encuentran en el punto Γ , por lo que son conocidos como materiales de gap directo. También es posible que los extremos de las bandas de conducción o de valencia puedan hallarse en los puntos L , X o en cualquier otro punto de alta simetría del cristal, éstos son conocidos como materiales de gap indirecto, un ejemplo de ello es el silicio (Si).

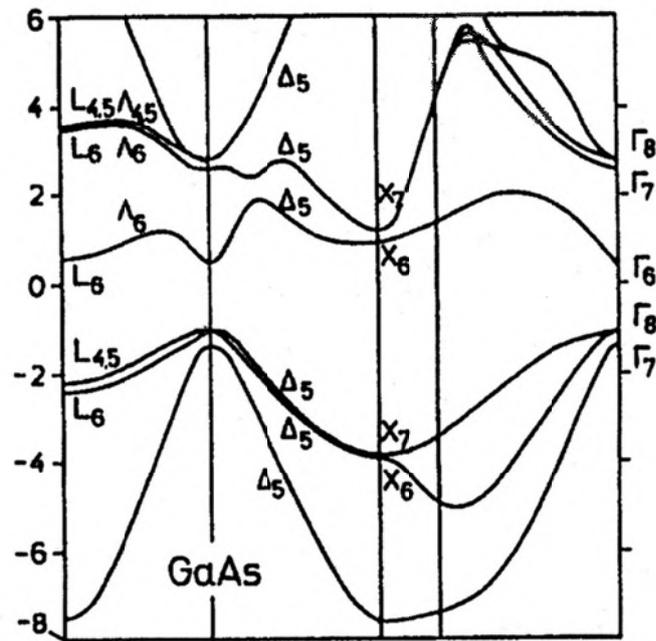


Figura 4. Estructura de bandas del *GaAs* [56]

Existen varios métodos y aproximaciones para estudiar el problema dinámico de la mecánica de los electrones en un sólido cristalino. Una de las aproximaciones más utilizada es la llamada **Aproximación de la masa efectiva (EMA)**, también conocida como **Aproximación de la función envolvente (EFA)**, la cual fue desarrollada por primera vez por Luttinger y Kohn [57]. Esta teoría reemplaza la interacción del potencial cristalino con los electrones por un tensor de masa efectiva, es decir renormaliza la masa del electrón. Las componentes del tensor de masa efectiva se pueden determinar experimentalmente permitiendo realizar cálculos analíticos e interpretaciones físicas, lo que en ocasiones es imposible si usáramos otros métodos, en especial si se considera con un potencial adicional externo al cristalino, como: el electrón fuertemente ligado (*tight binding*), ondas planas ortonormalizadas (*seudo-potencial*) y $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Estos métodos en general resuelven el problema de los electrones cuando solo el electrón está sometido al potencial del cristal que es el caso estático, pero en el caso de una nanoestructura donde existe un potencial de confinamiento adicional, entonces en ocasiones hay que determinar la solución desde su

inicio con técnicas de cálculo computacionales.

La característica que define el grado de confinamiento de los electrones es la longitud de onda de De-Broglie y en el caso de semiconductores el radio efectivo de Böhr de los excitones a_B^* , siendo el excitón una cuasipartícula que porta las propiedades ópticas en los semiconductores y se considera un par electrón-hueco ligado por el potencial coulombiano de atracción. Esta magnitud es generalmente mucho mayor que la constante de la red, a_L , por lo que es comparable con el tamaño del confinamiento d en cada una de sus direcciones. De esta comparación se pueden determinar dos regímenes de confinamiento de las cuasi-partículas:

- **Régimen de confinamiento débil:** cuando $a_B^* \ll d$, entonces los pares electrón-hueco se comportan como excitones, por ser el potencial de atracción coulombiano más fuerte que el de confinamiento.
- **Régimen de confinamiento fuerte:** cuando $a_B^* \gg d$ y $d \gg a_L$ entonces los componentes de los pares electrón-hueco se consideran libres y no forman excitones por ser el potencial de confinamiento mucho mayor que el de la interacción coulombiana.

En el régimen de confinamiento fuerte el electrón y el hueco pueden ser consideradas predominantemente como partículas independientes, es decir, se desprecia la interacción coulombiana entre ellas, con sólo una pequeña corrección espacial. En este régimen no es posible utilizar el modelo de barreras infinitas para describir las nanoestructuras; ya que al ser el radio de Böhr mayor que el tamaño del confinamiento la posibilidad de que una de las partículas, el electrón o el hueco, salga de la nanoestructura es muy grande (efecto túnel) y si las barreras de potencial son infinitas la posibilidad de tunelaje es nula.

1.2 Aproximaciones para la solución del problema cuántico del sólido cristalino

En un sólido cristalino se encuentran dos grandes sistemas de partículas, los electrones y los iones que forman la red cristalina. Para encontrar la solución a la ecuación de

Schrödinger en el sólido cristalino es necesario determinar las interacciones que se presentan en este tipo de sistema, es decir, el hamiltoniano. En el hamiltoniano se debe de incluir la energía cinética de los electrones \hat{H}_e^k y la energía cinética de los iones \hat{H}_I^k , además debemos conocer la interacción entre los electrones \hat{H}_{e-e}^{int} , la interacción entre iones \hat{H}_{I-I}^{int} y la interacción entre iones y electrones \hat{H}_{I-e}^{int} . Así el hamiltoniano toma la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_e^k + \hat{H}_I^k + \hat{H}_{e-e}^{int} + \hat{H}_{I-I}^{int} + \hat{H}_{I-e}^{int} \quad (1.1)$$

Debido a que este es un problema de un gran número de partículas de diferente naturaleza (electrones e iones), donde existen interacciones entre partículas del mismo tipo y de diferentes tipos, la solución de la ecuación de Schrödinger no se puede obtener si no se utilizan algunos modelos físicos y aproximaciones que permitan por ejemplo separar el sistema en dos sistemas de partículas diferentes, uno para los electrones y otro para el núcleo, por lo tanto se han buscado alternativas para estudiar el sistema de forma aproximada, que nos simplifique el problema sin modificar su esencia. Enseguida describiremos algunos de los métodos y aproximaciones más comunes, entre los cuales abordaremos la aproximación de la masa efectiva que es de especial interés en este trabajo.

1.2.1 Aproximación de valencia

La aproximación de valencia consiste principalmente en considerar sólo las excitaciones de los electrones más externos o electrones de valencia del átomo, ya que en estos recaen la mayoría de las propiedades químicas y eléctricas [5]. Bajo estos argumentos el átomo puede considerarse compuesto por dos partes:

- 1) Los **electrones de valencia**, que son aquellos electrones correspondientes a las capas externas semi-llenas de los átomos, y que son los responsables de casi todas las propiedades del material, entre ellas las propiedades químicas, ópticas, electrónica, de transporte y estructurales características de los sólidos [58,59].
- 2) El **corazón iónico**, el cual está formado por el núcleo y los electrones internos correspondientes a las capas completamente llenas, es decir, los orbitales más

profundos y cercanos al núcleo. Estos electrones están fuertemente ligados a los núcleos, y se distribuyen en torno a ellos de forma similar a como lo hacen en los átomos aislados.

Los electrones de valencia son susceptibles a las perturbaciones externas, ya sean campos eléctricos, magnéticos, temperatura, entre otras, y su densidad de carga varía considerablemente al estar débilmente ligados a núcleo atómico. Por el contrario, el corazón iónico se puede considerar casi insensible al entorno del átomo, pues sus electrones están fuertemente ligados al núcleo, por lo que su densidad electrónica prácticamente no varía.

1.2.2 Aproximación de Born-Oppenheimer

La segunda aproximación que se requiere para la obtención de los estados electrónicos del sólido es llamada Aproximación de Born-Oppenheimer. Esta aproximación consiste en considerar el movimiento de los electrones por separado del movimiento de los núcleos, es decir desacoplar los grados de libertad electrónicos de los vibracionales de un sólido [59]. La aproximación de Born-Oppenheimer consiste en que electrones y iones están sometidos a fuerzas de igual magnitud, pero al ser la masa de los electrones mucho menor que la de los iones la velocidad de los dos movimientos son muy diferentes, por lo que podemos considerar que los electrones responden inmediatamente al movimiento de los iones; mientras que los iones van evolucionando conforme a un potencial de interacción con los electrones, que se obtiene resolviendo la correspondiente ecuación electrónica para diferentes configuraciones iónicas fijas [60,61,62]. Esto significa que los electrones siempre “ven” al ion fijo en una sola posición lo que se corresponde con la aproximación de Born-Oppenheimer de orden cero en teoría de perturbaciones que es lo que se conoce como aproximación adiabática.

El operador hamiltoniano del sólido, ver ecuación (1.1), puede escribirse de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_l \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right) + \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_l V_{l-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l) \right) \quad (1.2)$$

en este caso \mathbf{R}_l es la posición del l -ésimo ión, con respecto a su posición de equilibrio, \mathbf{r}_i es la posición del i -ésimo electrón, M es la masa de los iones, y μ la masa de los electrones.

Este hamiltoniano puede ser considerado como la suma de dos hamiltonianos, un hamiltoniano para los iones y otro para los electrones, por esta razón la solución a la ecuación se puede representar como la multiplicación de dos funciones, una que represente a la solución para los electrones y otra que represente la solución para los iones, es decir

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \phi(\mathbf{R}) \quad (1.3)$$

De tal forma que $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ satisface la ecuación de Schrödinger para los electrones en una red estática con el ión l -ésimo fijo en \mathbf{R}_l y $\phi(\mathbf{R})$ es una ecuación similar para los iones.

Entonces la ecuación de Schrödinger para los electrones toma la forma

$$\sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \sum_{ij} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{il} V_{l-e}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l) \right] \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \varepsilon_e(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Aplicando el hamiltoniano a la solución propuesta para el sólido y utilizando la ecuación (1.4), tenemos que:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} \Psi + \varepsilon_e(\mathbf{R}) \Psi + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \Psi \\ &= \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \varepsilon_e(\mathbf{R}) + \sum_{l < s} V_{l-l}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right\} \phi(\mathbf{R}) + C(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (1.5)$$

donde

$$C(\mathbf{R}) = -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M} \left\{ 2 \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{R}_l} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}_l} + \phi \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{R}_l^2} \right\} \quad (1.6)$$

Si fuera posible despreciar $C(\mathbf{R})$, se obtiene una ecuación Schrödinger para el movimiento de los iones de la siguiente forma

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \varepsilon_e(\mathbf{R}) + \sum_{l < s} V_{l-s}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s) \right\} \phi(\mathbf{R}) = \varepsilon_l \phi(\mathbf{R}) \quad (1.7)$$

cuya única diferencia es que hemos añadido a la interacción directa entre los iones $\varepsilon_e(\mathbf{R})$, que es la energía de los electrones en términos de las posiciones de los iones, esta es la contribución adiabática de los electrones a la energía de la red; contribución que cambia al seguir el movimiento de los electrones en la red.

El término $C(\mathbf{R})$ depende de la configuración electrónica del sólido, la cual en la práctica no varía de forma notable, ya que los procesos de conductividad normal en los sólidos sólo implican el reajuste de “pocos” electrones cerca de la superficie de Fermi. De manera que $C(\mathbf{R})$ puede calcularse considerando que todos los electrones se encuentran en su estado fundamental. Se puede demostrar, que el término $C(\mathbf{R})$, el cual es conocido como el término no adiabático, prácticamente no contribuye al valor energía de la del sistema en el estado Ψ .

El primer término se hace cero en el cálculo del valor esperado de la energía ya que produce integrales del siguiente tipo:

$$\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{R}_l} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_l} \iint \psi^* \psi d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{\partial n_e}{\partial \mathbf{R}_l} \quad (1.8)$$

donde n_e es el número total de electrones. El segundo término es pequeño debido a que los electrones están fuertemente ligados a los iones y por lo tanto el cambio de posición de los iones es pequeño, es decir, $\psi(\mathbf{R}_l, \mathbf{r}_i) = \psi(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l)$, esto genera una contribución de la siguiente forma:

$$-\int \psi^* \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{R}_l^2} d\mathbf{r} = -\int \psi^* \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{r}_i^2} d\mathbf{r} = -\frac{\mu}{M} \int \psi^* \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{r}_i^2} d\mathbf{r} \quad (1.9)$$

donde podemos ver que la ecuación anterior es μ/M veces la energía cinética de los electrones, que comparado con las energías térmicas ordinarias es una cantidad que se puede despreciar, ya que μ/M es del orden de 10^{-4} y 10^{-5} [60,63].

Los elementos del término adiabático $C(\mathbf{R})$ que se encuentran fuera de la diagonal, son los que dan lugar a las transiciones electrónicas cuando los iones se mueven, esto no es otra cosa que la interacción electrón-fonón, la cual no consideramos en este trabajo.

Así el hamiltoniano queda en forma reducida como:

$$\hat{H} = \hat{H}_e^k + \hat{H}_{e-e}^{\text{int}} + \hat{H}_{I-e}^{\text{int}}. \quad (1.10)$$

A pesar de todas las consideraciones la ecuación sigue sin ser separable, debido a que depende de todas las coordenadas de cada uno de los electrones de valencia, esto nos lleva a realizar otras aproximaciones.

1.2.3 Aproximación de campo medio o Aproximación monoeléctronica

Después de utilizar la aproximación de valencia y la aproximación adiabática, se puede dar otro paso para simplificar la ecuación Schrödinger que describe el sistema físico de los electrones e iones, es decir, del sólido. Éste consiste en representar la función de onda del sólido, como funciones de onda individuales para cada electrón, lo que se logra utilizando el método de Hartree-Fock [59,61].

La aproximación del Campo Medio consiste en cambiar la energía potencial de interacción entre los electrones por un campo de energía potencial de la forma $\sum_{k=0}^n \tilde{U}(r_i)$, que representa la interacción del i -ésimo electrón con cierto potencial efectivo, de manera que cada electrón se mueve de forma independiente. Se debe considerar que el movimiento del i -ésimo electrón modifica el campo medio ya que es parte del mismo [61]. Siendo así que el hamiltoniano no depende de la interacción entre los electrones y es la suma de los hamiltonianos de cada electrón por separado. Con esto tenemos que la solución a la

ecuación de Schrödinger es un producto de las funciones de onda monoeléctricas, es decir, de la función de onda de cada electrón del sistema.

Por el principio de exclusión de Pauli, la función de onda tiene que cumplir la condición de ser antisimétrica, es decir, la función de onda se puede escribir como un determinante Slater [64]:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & & \psi_2(\mathbf{r}_N) \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.11)$$

donde N es el número total de electrones y \mathbf{r}_i representa las tres coordenadas y el espín de cada electrón. Este determinante cumple con que la función de onda sea antisimétrica respecto a la permutación de dos partículas cualesquiera. Si se buscan variacionalmente las funciones de onda monoeléctricas de manera que se minimice el valor medio de la energía se obtienen las llamadas ecuaciones de Hartree-Fock. Estas ecuaciones se pueden resolver directamente y sirven de base para un conjunto de métodos numéricos que se agrupan bajo el nombre de química cuántica [5,65,4].

1.2.4 Aproximación de la masa efectiva

Con la aproximación de la Masa Efectiva se obtienen ecuaciones de gran utilidad para estudiar los estados que se presentan energéticamente en los límites de la banda de conducción, ya que son ecuaciones relativamente sencillas pero cualitativamente correctas, que permiten un análisis bastante completo de la física del sólido [57]. Entonces tenemos que en un cristal la ecuación de Schrödinger monoeléctrica es de la forma:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu_0} + V(\mathbf{r}) \right) \psi = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

donde μ_0 es la masa del electrón libre, $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico de la red cristalina y $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador de momento y E es la energía del sistema. Además se tiene que el conmutador del hamiltoniano con el operador de traslación es cero, $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, esto es debido a que el hamiltoniano es invariante ante traslaciones en la red, lo que hace de \mathbf{k} un buen número cuántico. Así podemos escoger autofunciones del hamiltoniano y del operador de traslación \hat{T}_d simultáneamente.

$$\hat{T}_d \psi_k(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{d}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}} \psi_k(\mathbf{r}) \quad (1.13)$$

El teorema de Bloch permite escribir la función de onda electrónica de un cristal infinito como producto de una función periódica $u_{nk}(\mathbf{r})$ definida en la celda unidad del cristal, denominada función de Bloch, por una función envolvente $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ que cambia lentamente en la estructura.

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

Así la función de onda queda matemáticamente compuesta por un producto de una onda plana $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ que es modulada por una función $u_{nk}(\mathbf{r})$ en la celda unidad, con la cual se puede describir las perturbaciones de la red sobre los electrones libres en el sólido cristalino.

Sustituyendo (1.14) en (1.12), tenemos

$$\hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}} u_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.15)$$

siendo

$$\hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu_0} + \frac{\hbar}{2\mu_0} \mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_0} + V(\mathbf{r}) \quad (1.16)$$

que es conocido como el hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, el cual describe la función de onda de un electrón libre en un cristal tridimensional infinito. Para un \mathbf{k} dado, el conjunto de todas las

$u_{nk}(\mathbf{r})$ es completo para funciones con la periodicidad del cristal. Por lo tanto, si tomamos $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, la función de onda para cualquier \mathbf{k} puede expresarse en términos de $u_{nk_0}(\mathbf{r})$.

$$u_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_n C_{n,n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{nk_0}(\mathbf{r}) \quad (1.17)$$

La ecuación (1.15) puede reescribirse como sigue:

$$\left\{ \hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}} + \frac{\hbar}{\mu_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2\mu_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right\} u_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

A partir de la cual se obtiene una ecuación de autovalores para la energía si multiplicamos por $u_{nk}^*(\mathbf{r})$ e integramos en el volumen de la celda unitaria, entonces

$$\sum_n \left[\left\{ E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{2\mu_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right\} \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{\mu_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) \quad (1.19)$$

donde

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int u_{nk_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'k_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.20)$$

Para un semiconductor de *gap* directo la diagonalización del hamiltoniano proporciona la distribución de los niveles energéticos en los alrededores del centro de la zona de Brillouin (punto $\Gamma, \mathbf{k} = 0$), como se ilustra en la figura 5 [66,67,68]. La diagonalización del Hamiltoniano puede realizarse con el uso de computadoras o con aproximaciones como el método perturbativo de Löwdin [59,69,70,71]. Dicha distribución muestra la división de las bandas de energía, etiquetadas por el número cuántico n , donde aparecen regiones de energía prohibida o *gaps*, inducidas por el potencial periódico del sistema.

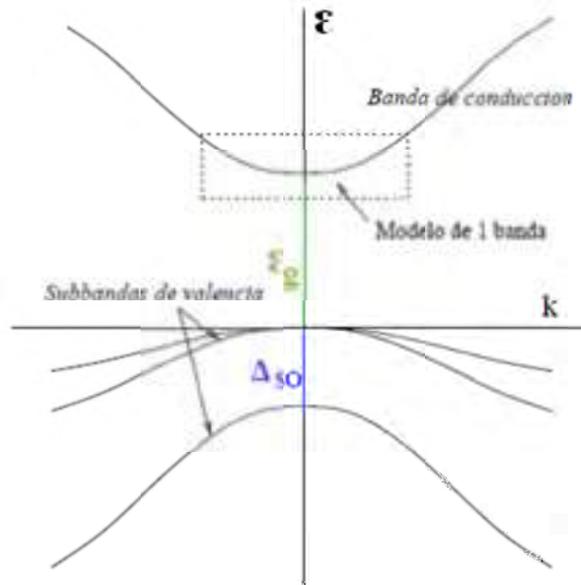


Figura 5. Representación esquemática de la estructura de bandas de un semiconductor de *gap* directo en las proximidades del punto Γ de la zona de Brillouin donde \mathcal{E}_g es el gap entre la banda de valencia y de conducción, mientras que Δ_{SO} es la diferencia de energía entre las subbandas señaladas. [72].

La banda de conducción está compuesta de orbitales atómicos de tipo s y por tanto, al contrario de la banda de valencia, está constituida por una única subbanda (doblemente degenerada si se consideran los grados de libertad del espín), separada de la banda de valencia por una cantidad de energía \mathcal{E}_g . Cuando \mathcal{E}_g es lo suficientemente grande como para apreciar la separación de la banda de valencia y la de conducción, el hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ puede ser aproximado a un hamiltoniano de una sola banda [5].

Sabemos que los autovalores de una cantidad física en general forman una matriz con todos los posibles resultados, para la ecuación (1.19) se obtienen elementos fuera de la diagonal que vuelven un poco complicado el análisis físico, pero cuando el valor $\mathbf{k} \cong \mathbf{k}_0$ los elementos fuera de la diagonal son pequeños:

$$\frac{\hbar}{\mu_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{mm'} \quad (1.21)$$

y entonces pueden tratarse como una perturbación del hamiltoniano $\hat{H}_{\mathbf{k}_0, \mathbf{p}}$. Para el caso de una sola banda se usa la teoría de perturbaciones hasta segundo orden, teniendo como resultado que la ecuación de autovalores (1.19) queda como sigue:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{\mu_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{nn} + \frac{\hbar^2}{2\mu_0}(k^2 - k_0^2) + \frac{\hbar^2}{\mu_0^2} \sum_{n'} \frac{|(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \quad (1.22)$$

esta ecuación es válida en el entorno de \mathbf{k}_0 , por lo regular \mathbf{k}_0 es un valor donde se ubica un extremo de la banda, lo que implica que el término lineal, $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = 0$.

Así utilizando los ejes principales tenemos que la energía de una partícula es [57,67,73]

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{0i})^2}{\mu_i^*} \quad (1.23)$$

Aquí

$$\frac{1}{\mu_i^*} = \frac{1}{\mu_0} + \frac{2}{\mu_0^2} \sum_{n'} \frac{|\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{P}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \quad (1.24)$$

donde μ_i^* son las llamadas masas efectivas en las direcciones de simetría y \mathbf{u}_i son los vectores de dichas direcciones. Cuando el sistema físico es isótropo las masas efectivas son iguales en cualquier dirección, con esto la ecuación (1.23) se reduce a:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{\mu^*} \quad (1.25)$$

que representa la energía de una partícula libre de masa μ^* . Este modelo muestra que la interacción de un electrón con el potencial cristalino es equivalente a un cambio de masa de la partícula.

En el caso de un electrón la energía tiene la siguiente relación de dispersión parabólica:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \mathbf{k}^2 \quad (1.26)$$

donde se puede deducir que μ^* es la nueva masa del electrón bajo la acción de un potencial constante determinada por la curvatura de la relación de dispersión,

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2} \quad (1.27)$$

La masa efectiva en general es un tensor de segundo rango, y sus valores dependen del vector de onda \mathbf{k} que es distinto para cada dirección, debido a esto la masa efectiva en general es anisótropa. Así, la respuesta de un electrón frente a un potencial cristalino es una respuesta dinámica.

El análisis anterior se realizó utilizando un método perturbativo por lo que este modelo sólo funciona para valores cercanos a $\mathbf{k} = 0$, si consideramos valores mayores la aproximación parabólica para $E(\mathbf{k})$ deja de ser cierta, por lo tanto la masa efectiva deja de ser una constante. De esta forma, la aproximación de la función envolvente no es un método general. Fundamentalmente, su rango de aplicación se restringe a la vecindad de puntos de alta simetría como Γ , X y otros de la Zona de Brillouin. De cualquier manera, este modelo es relativamente sencillo comparado con otros, pero ha resultado ser de gran utilidad para el cálculo de propiedades físicas con una adecuada precisión, sus resultados han sido ampliamente comprobados y minimiza el tiempo de cómputo comparado con otros modelos, para este trabajo resulta de gran interés ya que es la aproximación que utilizaremos para encontrar los valores de energía de nuestro sistema cuántico.

1.3 Hamiltoniano de la interacción electrón-fotón

Para realizar los cálculos de este trabajo es necesario obtener un hamiltoniano adecuado para la interacción de un electrón con la radiación electromagnética o hamiltoniano de interacción electrón-fotón, así pues, primeramente partimos del hamiltoniano general de un sistema compuesto por un electrón y un campo electromagnético, el cual está dado por la expresión

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) + e\hat{\phi} + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}), \quad (1.28)$$

donde $\hat{\mathbf{A}}$ es el potencial vectorial del campo electromagnético, \mathbf{B} un campo magnético externo, μ la masa del electrón, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ las matrices de Pauli y c la velocidad de la luz en el vacío [73]. Además, de las ecuaciones de Maxwell

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.29)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (1.30)$$

utilizando la norma de coulomb y considerando que ϕ no depende del tiempo tenemos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.31),$$

El término $\frac{e\hbar}{2\mu c} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B})$ es debido a la interacción del espín del electrón con el campo magnético lo cual da una cierta probabilidad de que el espín del electrón cambie de orientación, aunque esta probabilidad es muy pequeña y se desprecia [74,75].

Entonces la ecuación (1.28) toma la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) + e\hat{\phi} \quad (1.32)$$

considerando que

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{2e}{c} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + \frac{e^2}{c^2} \hat{\mathbf{A}}^2 \quad (1.33)$$

ya que los operadores $\hat{\mathbf{p}}$ y $\hat{\mathbf{A}}$ conmutan, la ecuación (1.32) puede escribirse

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) - \frac{e}{\mu c} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2\mu c^2} \hat{\mathbf{A}}^2 + e\hat{\phi} \quad (1.34)$$

El término $-\frac{e}{\mu c}(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2\mu c^2} \hat{\mathbf{A}}^2$ corresponde a la interacción del electrón con el campo electromagnético, mientras que el primer término corresponde a la energía cinética, el segundo término al potencial cristalino y el tercer término a la interacción del electrón con el campo periódico del cristal.

El término $\hat{\mathbf{A}}^2$ corresponde a la interacción del electrón con dos fotones simultáneamente, lo cual es importante en procesos de segundo orden, cuando la longitud de onda es menor o igual a la longitud característica del sistema, lo cual no suele ocurrir en semiconductores, al menos para los estados importantes para las propiedades ópticas [5]. Entonces podemos despreciar el término cuadrático del potencial vectorial de campo electromagnético.

Así, la interacción electrón-campo electromagnético queda

$$\hat{\mathbf{H}}_{e-r} = -\frac{e}{\mu_0 c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (1.35)$$

Por otro lado, el potencial vectorial puede escribirse como una onda plana con vector de onda \mathbf{k} y frecuencia ω , entonces

$$\mathbf{A} = A_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{e}_r = \frac{1}{2} A_0 \left[e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \mathbf{e}_r, \quad (1.36)$$

donde \mathbf{e}_r es el vector de polarización de la onda

El campo eléctrico sería

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = A_0 \frac{\omega}{c} \text{sen}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{e}_r \quad (1.37)$$

La densidad de energía del campo eléctrico es

$$\overline{\frac{E^2}{4\pi}} = \frac{A_0^2 \omega^2}{4\pi c^2} \overline{\text{sen}^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \frac{A_0^2 \omega^2}{8\pi c^2} \quad (1.38)$$

Si ahora consideramos N fotones en un volumen V la densidad de energía puede escribirse como $N\hbar\omega/V$, entonces

$$\frac{N\hbar\omega}{V} = \frac{A_0^2\omega^2}{8\pi c^2}, \quad (1.39)$$

de aquí podemos obtener que

$$A_0 = 2c\sqrt{\frac{2\pi N\hbar}{V\omega}} \quad (1.40)$$

Sustituyendo (1.36) y (1.40) en (1.35) tenemos

$$\hat{\mathbf{H}}_{e-r} = -\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi N\hbar}{V\omega}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{p}) \quad (1.41)$$

Si consideramos $N=1$ y desarrollando la exponencial en serie; tenemos

$$\hat{\mathbf{H}}_{e-r} = -\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}\left[1 - i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - \frac{(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2}{2} - \dots\right](\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{p}) \quad (1.42)$$

El primer término de la expansión en serie corresponde a la aproximación dipolar y el segundo a la cuadripolar [75].

Considerando la aproximación dipolar el hamiltoniano de interacción electrón-fotón tiene la forma

$$\hat{\mathbf{H}}_{e-r} = -\frac{e}{\mu}\sqrt{\frac{2\pi N\hbar}{V\omega}}(\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{p}) \quad (1.43)$$

1.4 Sección eficaz diferencial de dispersión Raman

Desde la perspectiva cuántica la dispersión Raman es una dispersión inelástica de la luz, en donde un fotón que incide sobre una muestra es dispersado con energía mayor o menor a la energía de incidencia. La dispersión Raman es una técnica muy útil para estudiar la estructura de bandas de las nanoestructuras. Por tanto, la sección eficaz diferencial de

dispersión Raman nos permite determinar la estructura de subbandas de los sistemas nanoestructurados por inspección directa de la posición de las singularidades del espectro, considerando las reglas de selección de las transiciones de un electrón entre diferentes estados electrónicos debido a la interacción de este con la radiación bajo diferentes polarizaciones para la luz incidente y dispersada.

En general el cálculo de la sección eficaz de dispersión Raman muestra las singularidades relacionadas a las transiciones interbanda (entre distintas bandas) e intrabanda (transiciones dentro de una misma banda), en nuestro caso consideramos solo transiciones intrabanda.

Si definimos $W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s)$ como la probabilidad por unidad de tiempo de la transición desde un estado inicial con un fotón con frecuencia de incidencia ω_l hasta un estado final con un fotón de frecuencia dispersada ω_s y polarización $\hat{\mathbf{e}}_s$ entonces, el número de fotones dispersados por unidad de tiempo con vector de onda entre \mathbf{k}_s y $\mathbf{k}_s + d\mathbf{k}_s$ se puede escribir como

$$dN_s = W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s) \frac{V}{(2\pi)^3} d^3\mathbf{k}_s, \quad (1.44)$$

donde V es el volumen del sistema.

Cambiando las unidades a unidades de frecuencia la ecuación (1.44) puede escribirse

$$dN_s = W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s) \frac{V}{(2\pi)^3} \omega_s^2 d\omega_s d\Omega \quad (1.45)$$

La sección eficaz $d\sigma$ y el número de fotones dN_s son directamente proporcionales y la relación que se establece entre ellos es

$$d\sigma = \frac{\eta(\omega_s)V}{\eta(\omega_l)c} dN_s \quad (1.46)$$

Sustituyendo la ecuación (1.45) en la ecuación (1.46) tendremos la sección eficaz de dispersión Raman por unidad de frecuencia ω_s y ángulo sólido Ω [32,76]

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \frac{V^2 \omega_s^2 \eta(\omega_s)}{8\pi^3 c^4 \eta(\omega_l)} W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s). \quad (1.47)$$

Para determinar la probabilidad de transición $W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s)$ utilizamos la regla de oro de Fermi siendo

$$W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |M_f|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (1.48)$$

Donde E_f y E_i son las energías del estado final e inicial respectivamente. $|M_f|^2$ es la amplitud de probabilidad para la transición desde un estado inicial i hasta un estado final f , la cual se obtiene mediante la teoría de perturbaciones, teniendo en cuenta que los estados y las energías son las autofunciones y los autovalores del sistema no perturbado [75,4].

Capítulo 2: Estados electrónicos de alambres cuánticos semiconductores

En este capítulo se estudian los estados electrónicos para cuatro casos de alambres cuánticos semiconductores de geometría cilíndrica donde la longitud es lo suficientemente grande para evitar los efectos del confinamiento en esa dirección (ver figura 6). Primero se estudia el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco y de anillo, (estos son los casos límites de un alambre cuántico doble y de un alambre cuántico con escalón, los que se pueden considerar una combinación de estos dos sistemas), en segundo lugar un alambre cuántico doble y por último un alambre cuántico con un potencial de barrera en escalón. Para este estudio se obtienen la función de onda y los niveles de energía que corresponden a estos sistemas. Asumiremos un modelo simple de bandas parabólicas para el electrón confinado, las cuales se desdoblán en un sistema de subbandas, debido al confinamiento. Se estudiarán los estados cerca del centro de la zona de Brillouin. Por lo regular este método se utiliza para estudiar semiconductores binarios del tipo II-VI y III-V, lo cual es consistente con tratamiento previos [77,78]. Además, consideramos que el sistema está a una temperatura de $T = 0$ K. Como tenemos un electrón confinado por un potencial de barrera en una nanoestructura, utilizaremos la aproximación de la función envolvente o de la masa efectiva. Esta aproximación fue discutida en el capítulo 1 y debemos señalar que fue utilizada por primera vez en sistemas cuasi-bidimensionales por Bastard [79,68].

2.1 Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de disco

Consideraremos un electrón confinado en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal en forma de disco, de radio r_a y longitud L . Para obtener los estados de energía de la cuasi-partícula en una nanoestructura, en el esquema de la función envolvente, es necesario que las condiciones de contorno cumplan la parte de variación lenta de la función de onda en la superficie entre los dos semiconductores (intercara). Para esto consideraremos que las redes de los materiales que constituyen la nanoestructura tienen la misma estructura cristalina las cuales empalman perfectamente. Para aplicar la aproximación de la función envolvente se requiere que se cumplan dos requerimientos claves.

- 1) Obtener la función de onda a partir de la ecuación de Schrödinger del sólido.
- 2) Las partes periódicas de las funciones de Bloch son asumidas iguales en cada material que constituye la nanoestructura.

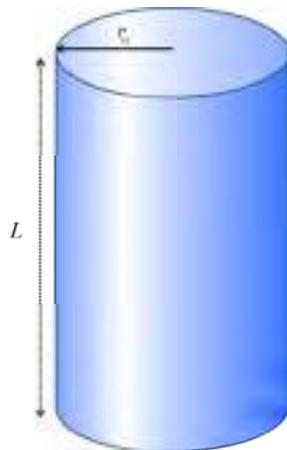


Figura 6. Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco, de radio r_a y longitud L . La región azul es la región donde se confina el electrón.

La función de onda de las cuasi-partículas para nuestro caso se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger, con el respectivo perfil de potencial y de masa efectiva,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = \mathcal{E}_r \varphi \quad \text{siendo} \quad V(r), \mu = \begin{cases} 0, & \mu_1, & r \leq r_a \\ V_0, & \mu_2, & r > r_a \end{cases} \quad (2.1)$$

donde V_0 representa la “altura” de la barrera de potencial; mientras que μ_1 y μ_2 son la masas efectivas de electrón en la región de confinamiento y fuera de la región de confinamiento del alambre respectivamente. Las condiciones de frontera son las condiciones de Ben Daniel-Duke:

$$\varphi|_{r\epsilon S^-} = \varphi|_{r\epsilon S^+} \quad \text{y} \quad \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r\epsilon S^-} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r\epsilon S^+} \quad (2.2)$$

Para el caso en que la energía $\mathcal{E}_r < V_0$, la solución de la ecuación (2.1) se obtiene utilizando el método de método de separación de variables y se propone como solución el siguiente producto de funciones [80,81,82,83].

$$\varphi(r, \theta, z) = R(r)\Phi(\theta)Z(z) \quad \text{y} \quad E = \mathcal{E}_z + \mathcal{E}_r \quad (2.3)$$

donde (r, θ, z) es el conjunto de coordenadas cilíndricas.

Sustituyendo (2.3) en (2.1) y trabajando en coordenadas cilíndricas, tenemos que la ecuación de Schrödinger queda de la forma

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{rR(r)} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{1}{r^2 \Phi(\theta)} \frac{d^2}{d\theta^2} \Phi(\theta) + \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2}{dz^2} Z(z) \right] = [V(r) - \mathcal{E}_z - \mathcal{E}_r] \quad (2.4)$$

De esta forma al usar el método de separación de variables obtenemos un sistema de dos ecuaciones

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0 \quad \text{donde} \quad k_z^2 = \frac{2\mu_1^{(2)}}{\hbar^2} \mathcal{E}_z \quad (2.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{rR(r)} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{1}{r^2 \Phi(\phi)} \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi(\phi) \right] + [V(r) - \mathcal{E}_r] = 0 \quad (2.6)$$

La solución para la ecuación (2.5) es una función oscilatoria normalizada de la siguiente forma:

$$Z(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ik_z z} \quad \text{donde} \quad \mathcal{E}_z = \frac{\hbar^2}{2\mu_{1(2)}} k_z^2, \quad (2.7)$$

La ecuación (2.6) la podemos separar en una parte angular y una parte radial. Entonces para la parte angular tenemos que

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \lambda_\phi \Phi = 0. \quad (2.8)$$

Considerando la simetría del sistema se debe cumplirse que $\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta)$, por tanto

$$\lambda_\phi = m^2 \quad \text{con} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.9)$$

así la solución normalizada queda,

$$\Phi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \quad (2.10)$$

La parte radial de la ecuación (2.6) tiene la siguiente forma

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V_0 - \frac{m^2}{r} \right] R(r) = 0 \quad \text{si} \quad r \leq r_a \quad (2.11)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d}{dr} R(r) \right] - \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 - \mathcal{E}_r) + \frac{m^2}{r} \right] R(r) = 0 \quad \text{si} \quad r > r_a \quad (2.12)$$

La solución de las ecuaciones (2.11) y (2.12) son las conocidas funciones de Bessel, la función de onda debe estar acotada en $r = 0$ y $r = \infty$, por lo tanto la solución queda de la siguiente forma:

$$R(r) = \begin{cases} A_m J_m(x), & r \leq r_a \\ B_m K_m(y), & r > r_a \end{cases} \quad (2.13)$$

donde

$$x(r) = r\sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2} \mathcal{E}_r} \quad \text{y} \quad y(r) = r\sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} \quad (2.14)$$

J_m y K_m son la función Bessel de orden m y la función Bessel modificada m , respectivamente. Para determinar las constantes A_m y B_m de la ecuación (2.13) debemos aplicar la primera condición de frontera, $\varphi|_{r \in S^-} = \varphi|_{r \in S^+}$ para $r=r_a$, definiendo que $x_a = x(r_a)$ y que $y_a = y(r_a)$, encontramos que:

$$B_m = \frac{J_m(x_a)}{K_m(y_a)} A_m. \quad (2.15)$$

Si aplicamos la condición de normalización se obtiene a A , que tiene la siguiente forma

$$A_m = \left\{ \|J_m(x_a)\|^2 + \left[\frac{J_m(x_a)}{K_m(y_a)} \right]^2 \|K_m(y_a)\|^2 \right\}^{-1/2} \quad (2.16)$$

donde $\|J_m(x_a)\|$ y $\|K_m(y_a)\|$ son las normas de la función Bessel y la función Bessel modificada, respectivamente:

$$\begin{aligned} \|J_\nu(\alpha)\|^2 &= \int_0^{r_0} J_\nu^2(\alpha r) r dr = \frac{r_0^2}{2} \left\{ [J'_\nu(\alpha r_0)]^2 + \left[1 - \left(\frac{\nu}{\alpha r_0} \right)^2 \right] J_\nu^2(\alpha r_0) \right\}, \\ \|K_\nu(\alpha)\|^2 &= \int_{r_0}^{\infty} K_\nu^2(\alpha r) r dr = \frac{r_0^2}{2} \left\{ [K'_\nu(\alpha r_0)]^2 - \left[1 + \left(\frac{\nu}{\alpha r_0} \right)^2 \right] K_\nu^2(\alpha r_0) \right\}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para obtener la energía debido al confinamiento, \mathcal{E}_r , debemos aplicar la segunda condición

de frontera, $\frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r \in S^-} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r \in S^+}$ para $r=r_a$, así obtenemos la siguiente ecuación

trascendente:

$$\mu_1 y_a K'_m(y_a) J_n(x_a) = \mu_2 x_a J'_m(x_a) K_n(y_a) \quad (2.18)$$

Finalmente utilizando las ecuaciones (2.3), (2.7), (2.10), (2.13) y (2.18), tenemos la

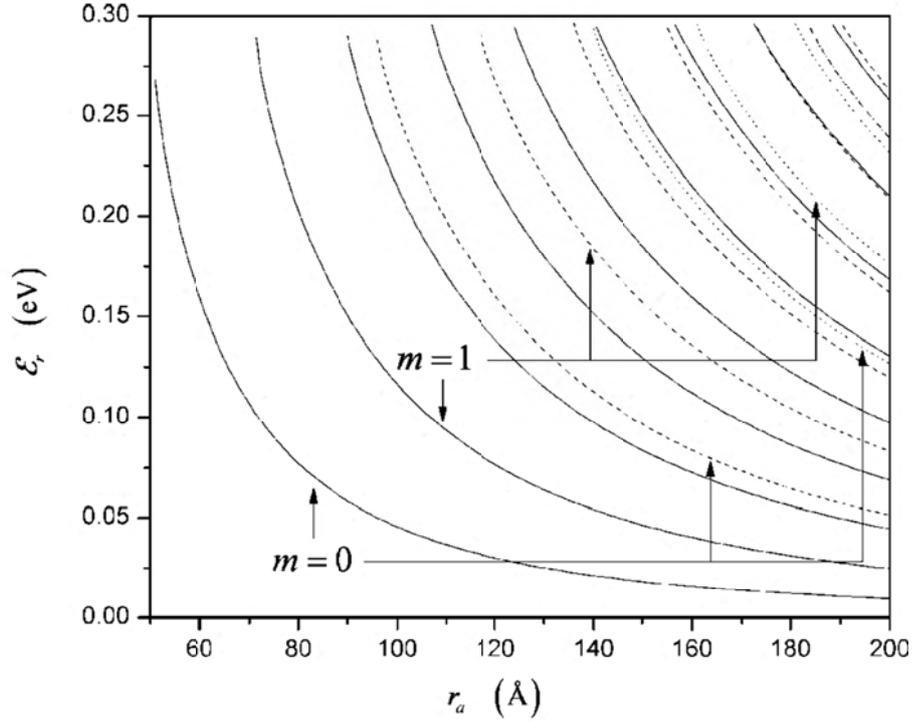


Figura 7. Niveles de energía de un alambre cuántico semiconductor. Las líneas continuas representa los niveles de energía para $n = 1$, las líneas de rayas los niveles de energía para $n = 2$, las líneas de puntos los niveles de energía para $n = 3$ y las líneas de rayas-puntos los niveles de energía para $n = 4$ [41].

solución de la ecuación de Schrödinger del sistema

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_{nm}(\vec{r})u(\vec{r}), \text{ siendo } \varphi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} \begin{cases} A_m J_m(x), & r \leq r_a \\ B_m K_m(y), & r > r_a \end{cases} \quad (2.19)$$

donde $u(\vec{r})$ es la parte periódica de la función de Bloch. La energía total del sistema se puede determinar a partir de las ecuaciones (2.3), (2.7) y (2.18):

$$E_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_{1(2)}} k_z^2 \quad (2.20)$$

donde el número cuántico $n=1,2,3,\dots$ denota el orden del cero de la ecuación trascendente. Los estados obtenidos son doblemente degenerados, ya que $m = \pm 1, \pm 2, \dots$ excepto para $m=0$.

Para ilustrar nuestro cálculo consideramos un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de disco, crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, siendo los parámetros físicos parámetros $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$ y $V_0 = 0.30$ eV, donde μ_0 es la masa libre electrón. En la figura 7 mostramos los niveles de energía \mathcal{E}_r , para un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con respecto al radio del alambre. De esta figura se observa que la energía de los estados incrementa con el aumento del número cuántico m y también con el aumento del número cuántico n . Además, se nota que los estados se agrupan en subbandas de energía donde el número cuántico principal es n . Como podemos observar el aumento del radio del alambre provoca que un número mayor de estados entren al alambre, mientras que disminuye la energía de los estados que ya se encontraban dentro del alambre.

2.2 Estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo

Consideraremos en este caso un electrón confinado en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo, de radio interno r_a , radio externo r_b y longitud L , donde L es lo suficientemente grande para evitar los efectos de confinamiento en esa dirección (ver figura 8). La función de onda de las cuasi-partículas para este caso se obtiene a partir de la siguiente ecuación de Schrödinger,

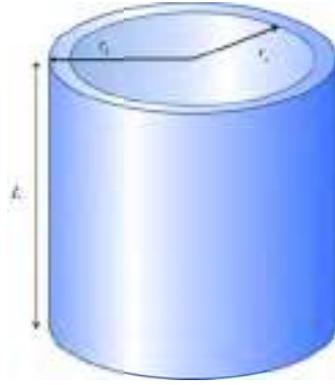
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = E\varphi \quad \text{siendo} \quad V(r), \mu = \begin{cases} V_0, & \mu_2, & 0 \leq r < r_a \\ 0, & \mu_1, & r_a \leq r < r_b \\ V_0, & \mu_2, & r_b \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.21)$$

Bajo las mismas consideraciones que describimos en el epígrafe anterior, se determina que la solución en la dirección z y θ es la misma y entonces la solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (2.21)) para este sistema tiene la forma.

$$\varphi_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi+k_z z)} R(r) \quad (2.22)$$

donde

Figura 8. Representación de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal con forma de anillo, de radio interno r_a , radio externo r_b y longitud L . La región azul es la región donde se confina el electrón.



$$R(r) = \begin{cases} A_m I_m(y), & 0 \leq r < r_a \\ A_{1m} J_m(x) + B_{1m} N_m(x), & r_a \leq r < r_b \\ B_m K_m(y), & r_b \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.23)$$

donde I_m y K_m son las funciones de Bessel modificadas de orden m de primer y segundo tipo, respectivamente, mientras que J_m y N_m son las funciones de Bessel de orden m de primer y segundo tipo respectivamente. Para determinar las constantes A_m , A_{1m} , B_{1m} y B_m además de la energía \mathcal{E}_r , aplicamos las condiciones de Ben Daniel-Duke y la condición de normalización de la parte radial de la función de onda.

Entonces en $r = r_a$ tenemos que

$$A_m I_m(y_a) = A_{1m} J_m(x_a) + B_{1m} N_m(x_a) \quad (2.24)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} A_m I'_m(y_a) = \sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2} \mathcal{E}_r} [A_{1m} J'_m(x_a) + B_{1m} N'_m(x_a)] \quad (2.25)$$

Para el caso $r = r_b$, donde $x_b = x(r_b)$ y que $y_b = y(r_b)$, tenemos que,

$$A_{1m} J_m(x_b) + B_{1m} N_m(x_b) = B_m K_m(y_b) \quad (2.26)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2} \mathcal{E}_r} [A_{1m} J'_m(x_b) + B_{1m} N'_m(x_b)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} B_m K'_m(y_b) \quad (2.27)$$

Utilizando la ecuaciones (2.24), (2.25) y (2.26) y definiendo;

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu_1 V_0 - \mathcal{E}_r}{\mu_2 \mathcal{E}_r}}, \quad (2.28)$$

podemos determinar A_{1m} , B_{1m} y B_m en términos de A , con lo que se llega a que

$$A_{1m} = \frac{\bar{A}_{1m}}{\bar{C}_m} A_m, \quad B_{1m} = -\frac{\bar{B}_{1m}}{\bar{C}_m} A_m \quad \text{y} \quad B_m = \frac{J_m(x_b) \bar{A}_{1m} + N_m(x_b) \bar{B}_{1m}}{K_m(y_b) \bar{C}_m} A_m \quad (2.29)$$

Donde

$$\begin{aligned} \bar{A}_{1m} &= I_m(y_a) N'_m(x_a) - \beta I'_m(y_a) N_m(x_a) \\ \bar{B}_{1m} &= I_m(y_a) J'_m(x_a) - \beta I'_m(y_a) J_m(x_a) \\ \bar{C}_m &= J_m(x_a) N'_m(x_a) - \beta J'_m(x_a) N_m(x_a) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Para determinar la constante A utilizamos la condición de normalización,

$\int R(r) R^*(r) r dr = 1$, por lo que queda de la forma siguiente,

$$A = [I_1 + I_2 + I_3]^{-1/2} \quad (2.31)$$

siendo,

$$I_1 = \int_0^{r_a} I_m^2(y) r dr, \quad I_2 = \frac{1}{\bar{C}^2} \int_{r_a}^{r_b} [\bar{A}_1 J_m(x) - \bar{B}_1 N_m(x)]^2 r dr$$

$$y \quad I_3 = \left[\frac{\bar{A}_1 J_m(x_b) + \bar{B}_1 N_m(x_b)}{\bar{C} K_m(y_b)} \right] \int_{r_b}^{\infty} K_m^2(y) r dr$$
(2.32)

La energía debido al confinamiento, \mathcal{E}_r , la podemos determinar utilizando la ecuación (2.27), de donde obtenemos la siguiente ecuación trascendente,

$$\bar{A}_1 [K_m(y_b) J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b) J_m(x_b)] =$$

$$\bar{B}_1 [K_m(y_b) N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b) N_m(x_b)]$$
(2.33)

donde el número cuántico n denota el orden del cero de la ecuación trascendente. Al igual que en el caso anterior los estados obtenidos son doblemente degenerados excepto para $m=0$.

Finalmente, usando las ecuaciones (2.22) y (2.23), tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger del sistema, la cual toma la siguiente forma,

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_{nm}(\vec{r}) u(\vec{r})$$
(2.34)

siendo

$$\varphi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} \begin{cases} A_m I_m(y), & 0 \leq r < r_a \\ A_{1m} J_m(x) + B_{1m} N_m(x), & r_a \leq r < r_b \\ B_m K_m(y), & r_b \leq r < \infty \end{cases}$$
(2.35)

donde

$$E_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2$$
(2.36)

Para ilustrar nuestros resultados consideramos un alambre cuántico semiconductor con sección transversal con forma de anillo crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$,

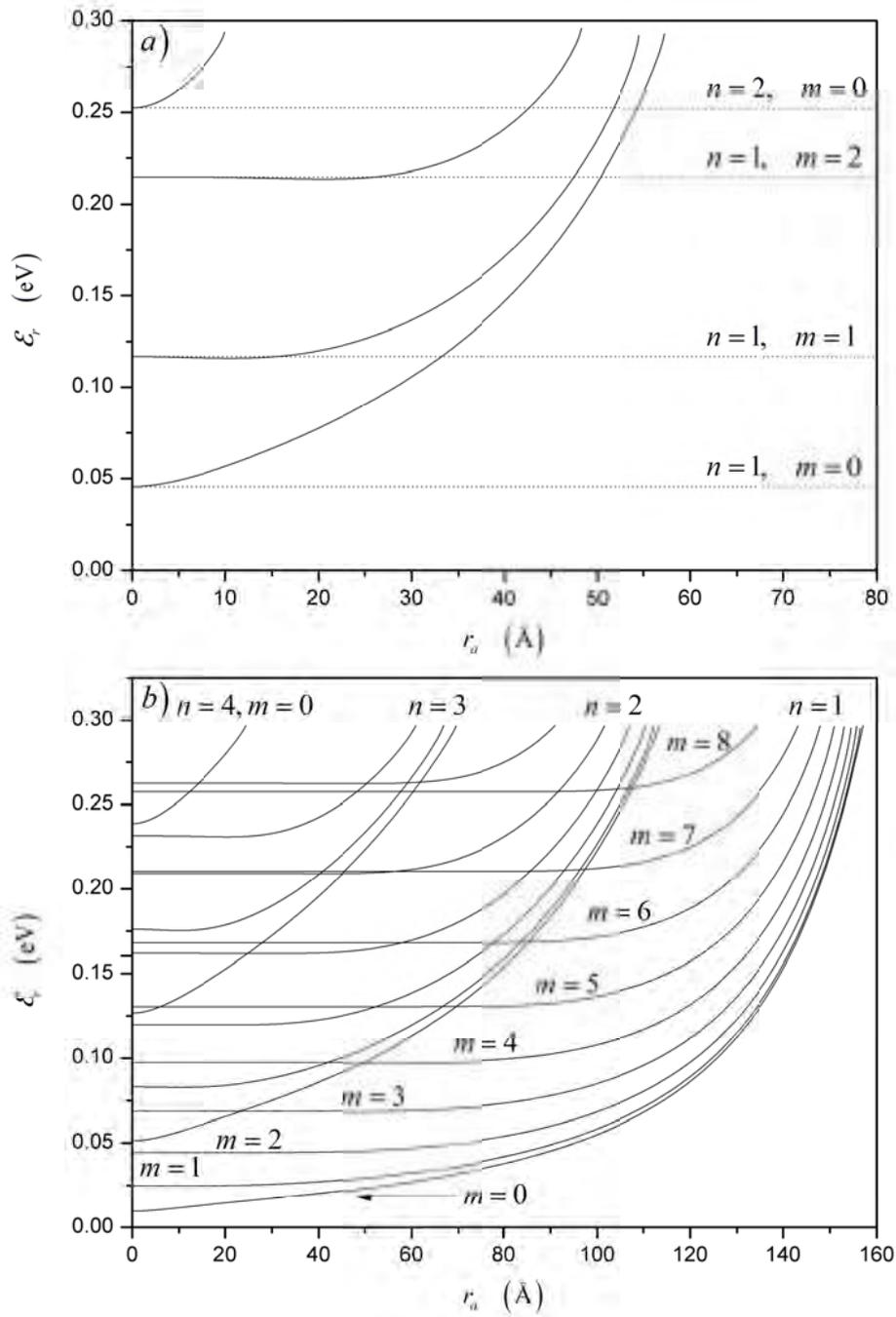


Figura 9. Estados electrónicos correspondientes a un alambre cuántico semiconductor con sección transversal en forma de anillo, para dos casos a) $r_b = 100 \text{ \AA}$ y b) $r_b = 200 \text{ \AA}$ [84].

usando los mismos parámetros que en el caso anterior. Entonces en la figura 9 se muestra la energía correspondiente a la parte confinada del sistema en función de r_a , para dos casos *a*) $r_b = 100 \text{ \AA}$ y *b*) $r_b = 200 \text{ \AA}$. En la figura 9*a* podemos observar que cuando r_a aumenta la energía también aumenta ya que el ancho del anillo, $d = r_b - r_a$, es cada vez menor, aumentando el confinamiento del sistema. Debemos señalar que si el ancho del anillo es lo suficientemente pequeño termina por “sacar” los estados electrónicos de la región activa del sistema, además cada nivel de energía comienza de un nivel de un QWW con sección transversal en forma de disco, (líneas punteadas), ya que $r_a = 0 \text{ \AA}$. En la figura 9*b* se puede observar claramente que los niveles se agrupan en subbandas determinadas por n , a medida que aumenta n crece la energía de todas las subbandas por lo que es más fácil “sacarlas” del sistema. También se observa que no hay cruces entre los niveles que conforman una misma subbanda pero si cortan los estados electrónicos pertenecientes a otras subbandas. Las energías de los niveles dentro de cada subbanda quedan determinadas por m , a medida que aumenta m crece la energía. Además, se puede observar que al aumentar m el efecto de confinamiento es menor al principio, para cada subbanda n , ya que al aumentar m el efecto de aumentar el radio es menor.

En la Figura 10 se muestran los niveles de energía correspondientes a la parte radial para a un alambre cuántico semiconductor con sección transversal en forma de anillo en función del radio interno, r_a , manteniendo constante el ancho del sistema en $d = 100 \text{ \AA}$. Las líneas continuas corresponden a los niveles con $n=1$, mientras que las líneas discontinuas a $n=2$; en la figura podemos observar que los estados se agrupan una vez más en subbandas, determinadas por el número cuántico n . Todas las subbandas tienden a un nivel mínimo cuando r_a aumenta, ya que el ancho del sistema está fijo. Es importante señalar que aun, para valores grandes de r_a ($\cong 300 \text{ \AA}$) no obtendremos los niveles de energía de un pozo cuántico como se podría esperar, esto es debido a la simetría del sistema. Notamos también que no hay cruces en los niveles pertenecientes a una misma subbanda, con n

igual, pero un nivel sí puede cortar a otro nivel perteneciente a una diferente subbanda, con n diferente.

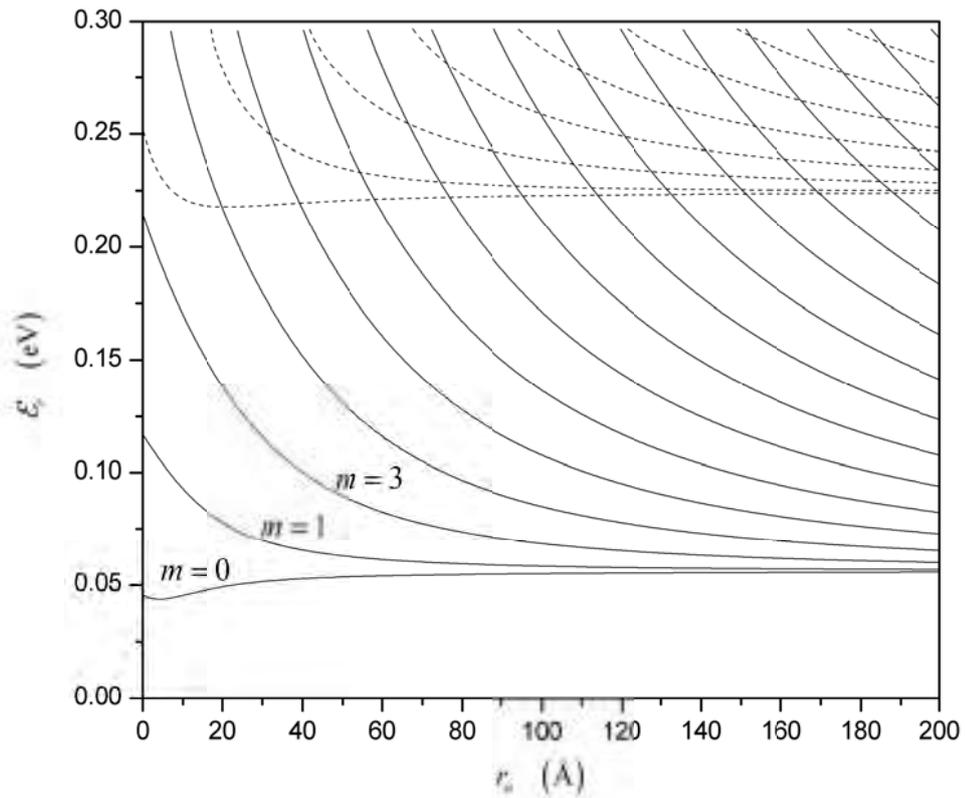


Figura 10. Estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor con sección transversal en forma de anillo, donde se fija el ancho del cascarón $d = 100 \text{ \AA}$ [84].

2.3 Estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica (QWW-Doble)

De forma similar los casos analizados en los epígrafes anteriores consideraremos que el electrón está confinado en un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica con radio interno r_a , radio intermedio r_b , radio externo r_c y longitud L , donde L

es lo suficientemente grande para evitar los efectos de confinamiento en esa dirección (ver figura 11).

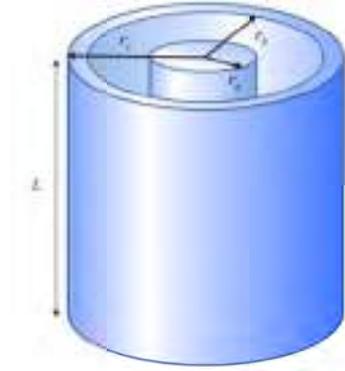


Figura 11. Representación de un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica con radio interno r_a , radio intermedio r_b , radio externo r_c y longitud L . La región azul es la región donde se confina al electrón.

Como se puede apreciar este sistema es la combinación del alambre cuántico con sección transversal en forma de disco, al cual llamaremos núcleo y un alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo al que nos referiremos simplemente como cascarón.

La función de onda del electrón para este caso se obtiene a partir de la siguiente ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi = E\varphi \quad \text{con} \quad V(r), \mu = \begin{cases} 0, & \mu_1, & 0 \leq r < r_a \\ V_0, & \mu_2, & r_a \leq r < r_b \\ 0, & \mu_1, & r_b \leq r < r_c \\ V_0, & \mu_2, & r_c \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.37)$$

Como en los casos anteriores el estado del sistema queda determinado por la solución de la ecuación de Schrödinger. Utilizando el método de separación de variables, de la misma forma que en los casos anteriores, tenemos que la solución de la ecuación (2.37) tiene la forma

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_{nm}(\vec{r})u(\vec{r}) \quad \text{siendo} \quad \varphi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} R(r) \quad (2.38)$$

donde

$$R(r) = \begin{cases} A_m J_m(x) & 0 \leq r < r_a \\ A_{2m} I_m(y) + B_{2m} K_m(y) & r_a \leq r < r_b \\ A_{3m} J_m(x) + B_{3m} N_m(x), & r_b \leq r < r_c \\ B_m K_m(y), & r_c \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.39)$$

Las constantes A_m , A_{2m} , B_{2m} , A_{3m} , B_{3m} y B_m , además de la energía \mathcal{E}_r , se obtienen aplicando las condiciones de frontera para la función de onda, $\varphi|_{r \in S^-} = \varphi|_{r \in S^+}$ y $(1/\mu_1)[\partial\varphi/\partial r]_{r \in S^-} = (1/\mu_2)[\partial\varphi/\partial r]_{r \in S^+}$. Entonces en $r = r_a$, $r = r_b$ y $r = r_c$, tenemos que,

$$A J_m(x_a) = A_{2m} I_m(y_a) + B_{2m} K_m(y_a) \quad (2.40)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2}} \mathcal{E}_r A_m J'_m(x_a) = \sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2}} [V_0 - \mathcal{E}_r] [A_{2m} I'_m(y_a) + B_{2m} K'_m(y_a)] \quad (2.41)$$

Para $r = r_b$, se obtiene

$$A_{2m} I_m(y_b) + B_{2m} K_m(y_b) = A_{3m} J_m(x_b) + B_{3m} N_m(x_b) \quad (2.42)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2}} [V_0 - \mathcal{E}_r] [A_{2m} I'_m(y_b) + B_{2m} K'_m(y_b)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2}} \mathcal{E}_r [A_{3m} J'_m(x_b) + B_{3m} N'_m(x_b)] \quad (2.43)$$

Para $r = r_c$, definiendo $x_c = x(r_c)$ y que $y_c = y(r_c)$, se llega a que

$$A_{3m} J_m(x_c) + B_{3m} N_m(x_c) = B_m K_m(y_c) \quad (2.44)$$

$$\sqrt{\frac{2}{\mu_1 \hbar^2}} \mathcal{E}_r [A_{3m} J'_m(x_c) + B_{3m} N'_m(x_c)] = \sqrt{\frac{2}{\mu_2 \hbar^2}} [V_0 - \mathcal{E}_r] B_m K'_m(y_c) \quad (2.45)$$

De las ecuaciones (2.40) y (2.41) podemos determinar A_{2m} y B_{2m} en términos de A_m , usando la ecuación (2.28), se obtiene que:

$$A_{2m} = \frac{J_m(x_a) K'_m(y_a) - \beta^{-1} J'_m(x_a) K_m(y_a)}{I_m(y_a) K'_m(y_a) - I'_m(y_a) K_m(y_a)} A_m \quad (2.46)$$

$$B_{2m} = \frac{J_m(x_a)I'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)I_m(y_a)}{I'_m(y_a)K_m(y_a) - I_m(y_a)K'_m(y_a)} A_m \quad (2.47)$$

a partir de las ecuaciones (2.42) y (2.43) podemos determinar A_{3m} y B_{3m} en términos de A_m , entonces

$$A_{3m} = A_{2m} \frac{I_m(y_b)N'_m(x) - \beta I'_m(y_b)N_m(x_b)}{J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x_b)N_m(x_b)} + B_{2m} \frac{K_m(y_b)N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)N_m(x_b)}{J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x_b)N_m(x_b)} \quad (2.48)$$

$$B_{3m} = A_{2m} \frac{I_m(y)J'_m(x_b) - \beta I'_m(y_b)J_m(x_b)}{N_m(x_b)J'_m(x_b) - N'_m(x_b)J_m(x_b)} + B_{2m} \frac{K_m(y_b)J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)J_m(x_b)}{N_m(x_b)J'_m(x_b) - N'_m(x_b)J_m(x_b)} \quad (2.49)$$

Siguiendo el mismo método, podemos determinar B_m con la ecuación (2.44) de manera relativamente sencilla:

$$B_m = A_{3m} \frac{J_m(x_c)}{K_m(y_c)} + B_{3m} \frac{N_m(x_c)}{K_m(y_c)}. \quad (2.50)$$

Con el fin simplificar la forma de las ecuaciones para las constantes obtenidas haremos las siguientes definiciones,

$$\begin{aligned}
A_{21} &= J_m(x_a)K'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)K_m(y_a), \\
B_{21} &= J_m(x_a)I'_m(y_a) - \beta^{-1}J'_m(x_a)I_m(y_a), \\
C_2 &= I_m(y_a)K'_m(y_a) - I'_m(y_a)K_m(y_a), \\
A_{31} &= I_m(y_b)N'_m(x) - \beta I'_m(y_b)N_m(x_b), \\
A_{32} &= K_m(y_b)N'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)N_m(x_b), \\
B_{31} &= I_m(y)J'_m(x_b) - \beta I'_m(y_b)J_m(x_b), \\
B_{32} &= K_m(y_b)J'_m(x_b) - \beta K'_m(y_b)J_m(x_b), \\
C_3 &= J_m(x_b)N'_m(x_b) - J'_m(x)N_m(x_b), \\
B_{41} &= \frac{J_m(x_c)}{K_m(y_c)} \quad \text{y} \quad B_{42} = \frac{N_m(x_c)}{K_m(y_c)}
\end{aligned} \tag{2.51}$$

de esta manera tenemos que las ecuaciones (2.46) - (2.50) quedan

$$A_{2m} = \frac{A_{21}}{C_2} A_{1m}, \quad B_{2m} = -\frac{B_{21}}{C_2} A_{1m}, \tag{2.52}$$

$$A_{3m} = \frac{A_{21}A_{31} - B_{21}A_{32}}{C_2C_3} A_{1m}, \tag{2.53}$$

$$B_{3m} = -\frac{A_{21}B_{31} - B_{21}B_{32}}{C_2C_3} A_{1m}, \tag{2.54}$$

$$B_m = \frac{(A_{21}A_{31} - B_{21}A_{32})B_{41} - (A_{21}B_{31} - B_{21}B_{32})B_{42}}{C_2C_3} A_{1m}. \tag{2.55}$$

Debemos determinar A_{1m} , esto se hace con la condición de normalización, entonces se cumple que $\int R(r)R^*(r)rdr = 1$; considerando las cuatro regiones de nuestro problema y la ecuaciones (2.52)-(2.55), se obtiene que

$$A_m = [I_1 + I_2 + I_3 + I_4]^{-\frac{1}{2}} \tag{2.56}$$

donde

$$I_1 = \int_0^{r_a} J_m^2(x) r dr, \quad I_2 = \frac{1}{C_2^2} \int_{r_a}^{r_b} [A_{21} I_m(y) - B_{21} K_m(y)]^2 r dr, \quad (2.57)$$

$$I_3 = \frac{1}{C_2^2 C_3^2} \int_{r_b}^{r_c} [(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) J_m(x) - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) N_m(x)]^2 r dr \quad (2.58)$$

$$I_4 = \frac{[(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) B_{41} - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) B_{42}]^2}{C_2^2 C_3^2} \int_{r_c}^{\infty} K_m^2(y) r dr. \quad (2.59)$$

Para el caso de la función trascendente que determina la energía asociada a la dirección radial, si usamos las ecuaciones (2.44) y (2.45), se obtiene que

$$A_{3m} A_{41} + B_{3m} A_{42} = 0 \quad (2.60)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{41} &= K_m(y_c) J'_m(x_c) - \beta K'_m(y_c) J_m(x_c) \\ A_{42} &= K_m(y_c) N'_m(x_c) - \beta K'_m(y_c) N_m(x_c) \end{aligned} \quad (2.61)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.53) y (2.54) en la ecuación (2.60), tenemos que,

$$\frac{A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}}{C_2 C_3} A_{1m} A_{41} - \frac{A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}}{C_2 C_3} A_{1m} A_{42} = 0 \quad (2.62)$$

Finalmente

$$(A_{21} A_{31} - B_{21} A_{32}) A_{41} - (A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}) A_{42} = 0 \quad (2.63)$$

Por tanto, usando las ecuaciones (2.38) y (2.39), tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma

$$\Psi_{nm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{-i(m\phi + k_z z)} u(r) \begin{cases} A_m J_m(x) & 0 \leq r < r_a \\ A_{2m} I_m(y) + B_{2m} K_m(y) & r_a \leq r < r_b \\ A_{3m} J_m(x) + B_{3m} N_m(x), & r_b \leq r < r_c \\ B_m K_m(y), & r_c \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.64)$$

y también

$$E_{nm}(k_z) = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu_1} k_z^2 \quad (2.65)$$

al igual que en los casos anteriores el número cuántico $n = 1, 2, 3, \dots$ denota el orden del cero de la ecuación trascendente (2.63).

2.4 Discusión de resultados de los estados electrónicos del alambre cuántico semiconductor doble

En este caso consideramos como sistema un alambre cuántico semiconductor doble crecido en una matriz de *GaAs/AlGaAs*. Donde el núcleo y el cascarón están compuestos por *GaAs*, mientras que la barrera externa está compuesta por *Al_{0.35}Ga_{0.65}As*. Debido a esto usamos los siguiente parámetros físicos para los cálculos realizados [15,85]: $\mu_1 = 0.096\mu_0$, $\mu_2 = 0.0665\mu_0$ y $V_0 = 0.30$ eV, donde μ_0 es la masa libre del electrón. Por otro lado, cuando hablemos de “acoplamiento” nos referimos a que los estados cuánticos pertenecen al sistema como un todo, no a una región específica ya que la región activa está compuesta de varias capas. Sin embargo, estos estados cuánticos se encuentran mayormente contenidos en el núcleo o en el cascarón [39,86]. Por lo tanto, si decimos que un estado cuántico se encuentra totalmente contenido en el núcleo o en el cascarón significa que el sistema está desacoplado. Los cálculos en esta tesis se llevaron a cabo con el software Mathematica en base a la función FindRoot que permite obtener soluciones de ecuaciones trascendentes.

En la figura 12 se muestran los estados electrónicos del alambre cuántico doble (líneas continuas), donde r_b varía desde r_a hasta r_c , mientras que r_a y r_c permanecen constantes: a) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, b) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$, c) $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$. Las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico simple con radio r_a . Este sistema tiene dos casos límites: el primero es un alambre cuántico con sección transversal en forma de disco, y sus resultados pueden consultarse en la referencia [41]; el segundo caso límite es el alambre

cuántico con sección transversal en forma de anillo, este sistema fue investigado en la referencia [84]. Como puede observarse en la figura cuando $r_b = r_a$ se obtiene en primer caso límite por lo que obtenemos los niveles de energía de un alambre cuántico con sección transversal en forma de disco con radio r_c , a medida que r_b aumenta aparece la barrera y se forma un alambre cuántico doble donde el ancho del cascarón externo es $d = r_c - r_b$ va disminuyendo con el aumento del ancho de la barrera, ya que r_c tiene un valor fijo. Cuando $r_b = r_c$ se obtiene como caso límite una vez más el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco en este caso con radio r_a . En la figura 12a podemos ver que el nivel de energía determinado por $n=1$ y $m=0$ pertenece mayormente al núcleo, siendo el estado base del sistema. Debemos notar que el estado denotado por $n=2$ y $m=0$ pertenece en este caso al cascarón, siendo el estado de menor energía del cascarón, pero esto sólo se puede definir para valores de $r_b > 66 \text{ \AA}$, por lo que éste es el punto donde el acoplamiento del sistema comienza a romperse de forma que podemos decir que para $0 < r_b < 66 \text{ \AA}$ existe una región de acoplamiento fuerte. Se observa que para valores de $r_b \approx 80 \text{ \AA}$ los estados correspondientes al cascarón “salen” del sistema, debido a que aumenta el confinamiento del electrón en el cascarón al reducir el ancho de este (d). Además vemos un nivel que pertenece al núcleo que se iguala a la energía de un alambre cuántico simple de radio r_a a partir de $r_b \approx 100 \text{ \AA}$ por lo que podemos decir que a partir de este valor el acoplamiento del sistema es débil.

En la figura 12b incrementamos el valor de r_c con respecto al valor fijado en la figura 12a, tomando $r_c = 140 \text{ \AA}$, una consecuencia inmediata del aumento de r_c es el aumento en el número de niveles con respecto al primer caso de la figura 12a. De nuevo sólo tenemos un estado electrónico dentro del núcleo, $n=1$ y $m=0$, lo cual es de esperarse puesto que mantuvimos el mismo valor de $r_a = 60 \text{ \AA}$, siendo este nuevamente el estado base del sistema.

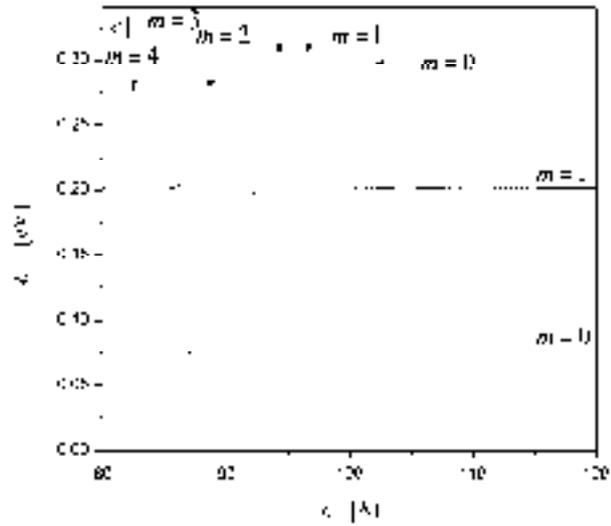
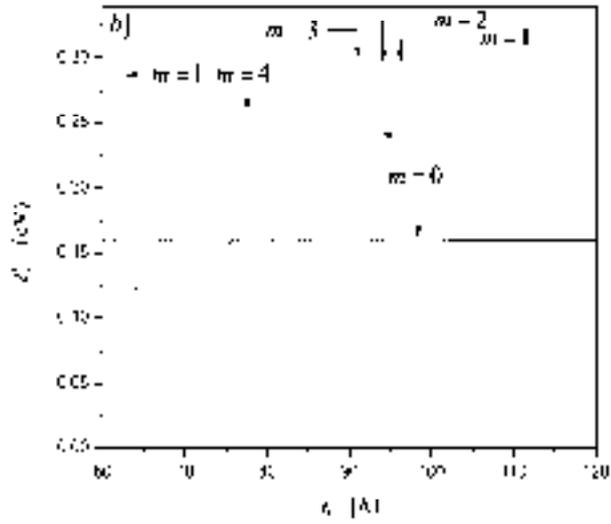
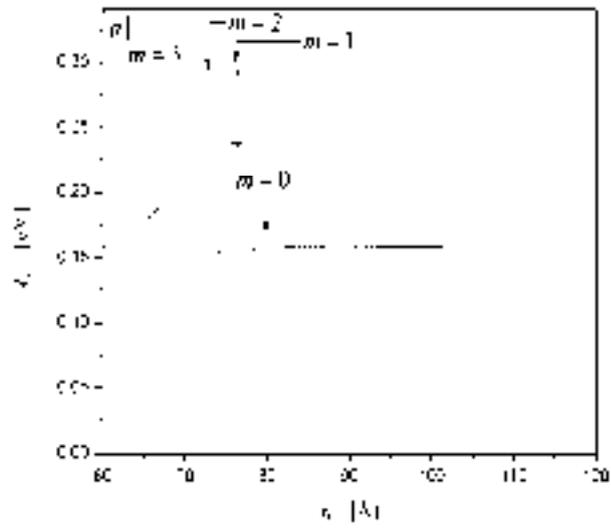


Figura 12. Niveles de energía del alambre cuántico doble (líneas continuas), donde r_b varía de r_a a r_c , mientras que a) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 120 \text{ \AA}$, b) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$, c) $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$. Las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico simple con radio r_a [87].

Podemos apreciar que el nivel $n=2$ y $m=0$ corta el nivel del cascarón con $n=1$ y $m=1$ aproximadamente en $r_b = 80 \text{ \AA}$ donde termina la región de acoplamiento fuerte. También, podemos apreciar una organización de los niveles en forma de subbandas para los niveles asociado principalmente con el cascarón (ver epígrafe 2.2). Además vemos que el estado que pertenece al núcleo se iguala a la energía de un alambre cuántico simple a partir de que $r_b \approx 100 \text{ \AA}$, al igual que en la figura anterior. Por otro lado, en la figura 12c se fija $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $r_c = 140 \text{ \AA}$, esto significa que el radio del núcleo es mayor que en el caso de la figura 12b, mientras que el valor de r_c es el mismo. Podemos observar que el aumento del radio del núcleo aumenta el número de estados que “cabén” dentro de él, de manera que ahora existen dos niveles de energía para el núcleo. Podemos observar que los estados con distinto valor de m pueden cortarse, mientras que los que tienen el mismo valor de m no se cortan. En los estados electrónicos perteneciente al núcleo se observa que mientras mayor es la energía mayor es el acoplamiento, esto es debido a que es menor la “altura de la barrera” a vencer por los electrones. Como se puede comprobar con el ancho de la barrera controlamos el número de estados dentro del sistema con un valor máximo que se corresponde con el número de estados del alambre cuántico con sección transversal en forma de disco con radio r_c , y el valor mínimo de estados corresponde con el alambre cuántico con sección transversal en forma de disco con radio r_a .

En la figura 13 se muestran los cambios que se producen en los niveles de energía por el desplazamiento del cascarón externo con ancho fijo $d = r_c - r_b$ si se mantiene constante el radio del núcleo r_a . Esto se logra variando r_c a la misma razón que r_b , de manera que d es contante y la barrera $b = r_b - r_a$ va aumentando. En los tres casos que se muestran la

figura 13 inicialmente la barrera no existe ($b = 0$), es decir al principio tenemos un alambre cuántico con sección transversal con forma de disco de radio r_c . En la figura 13a, se puede observar que a medida que la barrera se incrementa los niveles de energía se van ajustando a los niveles de energía que se corresponde a los casos límites. Entonces, el cascarón mantiene un ancho constante y su caso límite sería el alambre cuántico con sección transversal con forma de anillo (líneas de puntos), mientras que el núcleo tiene como caso límite el alambre cuántico con sección transversal con forma de disco manteniendo el radio constante (líneas de rayas).

Para valores de la barrera de aproximadamente 40 \AA no se percibe diferencia entre los niveles del alambre doble y los del cascarón o del núcleo para ningún nivel de energía, esto implica que se han desacoplado los valores de energía del cascarón externo y del núcleo. Debemos señalar que mientras tengan más energía los estados electrónicos ligados mayormente al cascarón, tenderán más rápido a los niveles correspondientes del sistema desacoplado. En el caso del núcleo el valor de la barrera para que se desacoplen los niveles es de aproximadamente $b = 5 \text{ \AA}$, es decir, mucho más rápido que para el cascarón.

En la figura 13b, se ha aumentado el ancho del cascarón a 80 \AA , siendo el radio interno r_a , el mismo; esto produce un aumento en el número de niveles “dentro” del sistema. Podemos apreciar que los niveles de energía del alambre cuántico doble se hacen prácticamente iguales a los niveles del cascarón externo, a partir de un ancho aproximadamente de $b = 20 \text{ \AA}$, es decir, al aumentar el ancho del cascarón los niveles tienden a ajustarse más rápido. Sin embargo, si comparamos con la figura 13a el nivel de energía asociado al alambre interno requiere un valor mayor de la barrera, en este caso aproximadamente $b = 50 \text{ \AA}$. En la figura 13c se ha tomado $r_a = 80 \text{ \AA}$, pero el ancho del cascarón externo es de 60 \AA mismo tamaño que el de la figura 13a. Primeramente notamos que aparecen dos estados electrónicos asociados al núcleo, esto es de esperarse puesto que el radio es más grande que en el caso de las figuras 13a y 13b. Se puede observar que el ajuste de los niveles de energía del cascarón cuántico ocurren para un radio similar al de la figura 13a en la cual el ancho del cascarón es el mismo.

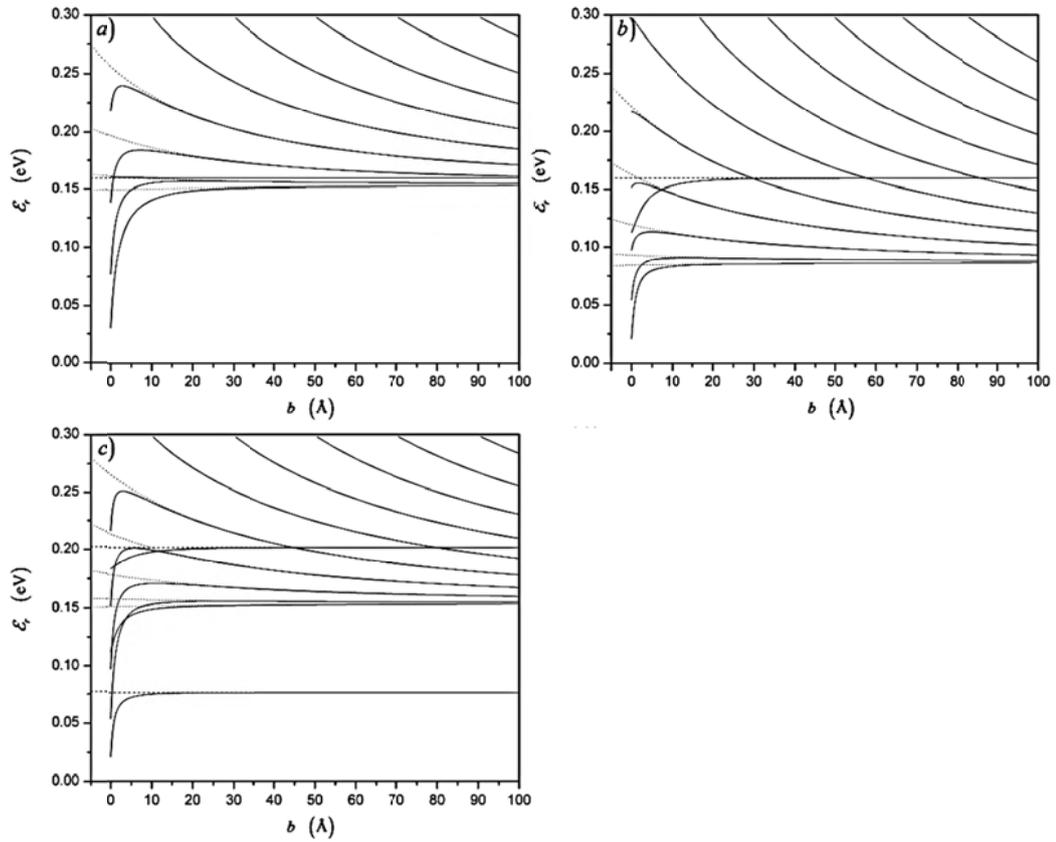


Figura 13. Niveles de energía de un alambre cuántico doble (líneas continuas), donde varía la barrera $b = r_b - r_a$, mientras que mantenemos fijo r_a y $d = r_c - r_b$: a) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$, b) $r_a = 60 \text{ \AA}$ y $d = 80 \text{ \AA}$, c) $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$. Las líneas de puntos corresponden a un alambre cuántico con sección transversal en forma de anillo con ancho $d = r_c - r_b$, mientras que las líneas de rayas corresponden a un alambre cuántico con sección transversal en forma de disco de radio r_a [87].

Por tanto, el ajuste de los niveles de energía del cascarón depende en mayor medida de su ancho y no del radio del núcleo; mientras que en el caso del núcleo esto depende tanto del ancho del cascarón como del propio núcleo. Finalmente podemos concluir que en este caso el aumento de la barrera provoca que el número de estados dentro del núcleo se mantengan constantes y su energía se desacopla del cascarón, además el número de estados dentro del cascarón aumentará con el aumento de la barrera desacoplándose del núcleo.

2.5 Estados electrónicos en un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con un potencial en escalón (QWW-Escalón)

Ahora determinaremos los estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con un potencial en escalón de longitud L y radio r_w , en este caso compuesto por dos regiones de simetría cilíndrica, la primera región de radio r_c la llamaremos “núcleo” y la segunda de ancho d_s la llamaremos cascarón. En consecuencia $r_w = r_c + d_s$. En este caso perfil del potencial de confinamiento $V(r)$ y la masa efectiva μ están dados por:

$$V(r), \mu = \begin{cases} V_0, & \mu_2, & 0 \leq r \leq r_c \\ 0, & \mu_1, & r_c < r < r_w \\ V_1, & \mu_3, & r_w < r < \infty \end{cases} \quad (2.66)$$

Considerando la aproximación de la masa efectiva y siguiendo los mismos procedimientos de los casos anteriores la solución a la ecuación de Schrödinger es de la forma:

$$\Psi_{n,m,k_z}(\mathbf{r}) = \frac{\exp[i(m\theta + k_z z)]}{\sqrt{2\pi L}} \varphi_{n,m}(r), \quad (2.67)$$

la energía del electrón está dada por:

$$E_{n,m}(k_z) = \mathcal{E}_r(n,m) + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_z^2 \quad (2.68)$$

en donde \mathcal{E}_r es la energía del electrón debido al confinamiento espacial, n es el número cuántico radial y m es el número cuántico azimutal. Finalmente k_z es el número de onda del electrón en la dirección z . Finalmente la parte radial tiene la siguiente forma:

$$\varphi_{n,m}(r) = \begin{cases} A_1 I_m(y), & 0 \leq r < r_c \quad y \quad \mathcal{E}_r \leq V_0 \\ A_1 J_m(y), & 0 \leq r < r_c \quad y \quad \mathcal{E}_r > V_0 \\ A_2 J_m(x) + B_2 N_m(x), & r_c \leq r < r_w \\ B_3 K_m(z), & r_w \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.69)$$

con

$$\begin{aligned}
x(r) &= \sqrt{\frac{2\mu_1 r^2}{\hbar^2} \mathcal{E}_r}, & y(r) &= \sqrt{\frac{2\mu_2 r^2}{\hbar^2} |V_0 - \mathcal{E}_r|}, & z(r) &= \sqrt{\frac{2\mu_3 r^2}{\hbar^2} |V_1 - \mathcal{E}_r|}, \\
\beta_1 &= \sqrt{\frac{\mu_1 |V_0 - \mathcal{E}_r|}{\mu_2 \mathcal{E}_r}} & y & & \beta_2 &= \sqrt{\frac{\mu_3 \mathcal{E}_r}{\mu_1 |V_1 - \mathcal{E}_r|}}
\end{aligned} \tag{2.70}$$

donde las constantes tienen la siguiente forma

$$A_2 = \frac{A_{21}}{C} A_1, \quad B_2 = -\frac{B_{21}}{C} A_1 \quad \text{and} \quad B_3 = \frac{A_{21} B_{31} - B_{21} B_{32}}{C} A_1, \tag{2.71}$$

con

$$\begin{aligned}
A_{21} &= \begin{cases} I_m(y_c) N'_m(x_c) - \beta_1 I'_m(y_c) N_m(x_c), & \mathcal{E}_r \leq V_0 \\ J_m(y_c) N'_m(x_c) - \beta_1 J'_m(y_c) N_m(x_c), & \mathcal{E}_r > V_0 \end{cases} \\
B_{21} &= \begin{cases} I_m(y_c) J'_m(x_c) - \beta_1 I'_m(y_c) J_m(x_c), & \mathcal{E}_r \leq V_0 \\ J_m(y_c) J'_m(x_c) - \beta_1 J'_m(y_c) J_m(x_c), & \mathcal{E}_r > V_0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.72}$$

y

$$\begin{aligned}
B_{31} &= \frac{J_m(x_w)}{K_m(z_w)}, & B_{32} &= \frac{N_m(x_w)}{K_m(z_w)}, \\
C &= J_m(x_c) N'_m(x_c) - J'_m(x_c) N_m(x_c).
\end{aligned} \tag{2.73}$$

Siendo $x_k = x(r_k)$, $y_k = y(r_k)$, y $z_k = z(r_k)$. A_1 se obtiene utilizando la condición de normalización

$$A_1 = [I_1 + I_2 + I_3]^{-1/2}, \tag{2.74}$$

donde

$$I_1 = \begin{cases} \int_0^{r_c} I_m^2(y) r dr, & E_r \leq V_0 \\ \int_0^{r_c} J_m^2(y) r dr, & E_r > V_0 \end{cases} \tag{2.75}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \frac{1}{C^2} \int_{r_c}^{r_w} [A_{21}I_m(y) - B_{21}K_m(y)]^2 r dr \\
I_3 &= \left[\frac{A_{21}B_{31} - B_{21}B_{32}}{C} \right]^2 \int_{r_w}^{\infty} K_m^2(z) r dr.
\end{aligned} \tag{2.76}$$

Finalmente, obtenemos una ecuación trascendente la cual al resolverla nos permite obtener los niveles de energía confinados en la parte radial (\mathcal{E}_r):

$$A_{21}A_{31} - B_{21}B_{32} = 0 \tag{2.77}$$

siendo

$$\begin{aligned}
A_{31} &= J_m(x_w)K'_m(z_w) - \beta_2 J'_m(x_w)K_m(z_w), \\
B_{32} &= N_m(x_w)K'_m(z_w) - \beta_2 N'_m(x_w)K_m(z_w).
\end{aligned} \tag{2.78}$$

En consecuencia para cada de valor de m se obtienen n valores de energía. Por lo tanto los estados electrónicos son descritos por: $m = 0, 1, 2, 3, \dots$; $n = 0, 1, 2, 3, \dots$; y k_z (ver referencias [87] y [84]). Es importante dejar claro que el número cuántico principal n denota las subbandas, mientras que el número cuántico secundario m denota los estados electrónicos que pertenecen a cada subbanda. Además, hay que resaltar que los estados electrónicos que pertenecen a diferentes subbandas pueden tener la misma energía, lo cual resulta imposible para estados pertenecientes a una misma subbanda [84]. Finalmente, el número cuántico k_z toma valores continuos de energía, puesto que la dirección z no se encuentra confinada [84]

2.6 Discusión de resultados de los estados electrónicos del alambre cuántico con un potencial en escalón

En este caso consideramos como sistema un alambre cuántico semiconductor con potencial en escalón crecido en una matriz de $GaAs/AlGaAs$, donde el núcleo es $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, el cascarón $GaAs$ y la barrera externa $AlAs$. Debido a esto usamos los siguiente parámetros

físicos para los cálculos realizados [15,85]: $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$, $\mu_3 = 0.124\mu_0$, $V_0 = 0.30$ eV y $V_1 = 0.968$ eV, donde μ_0 es la masa libre del electrón.

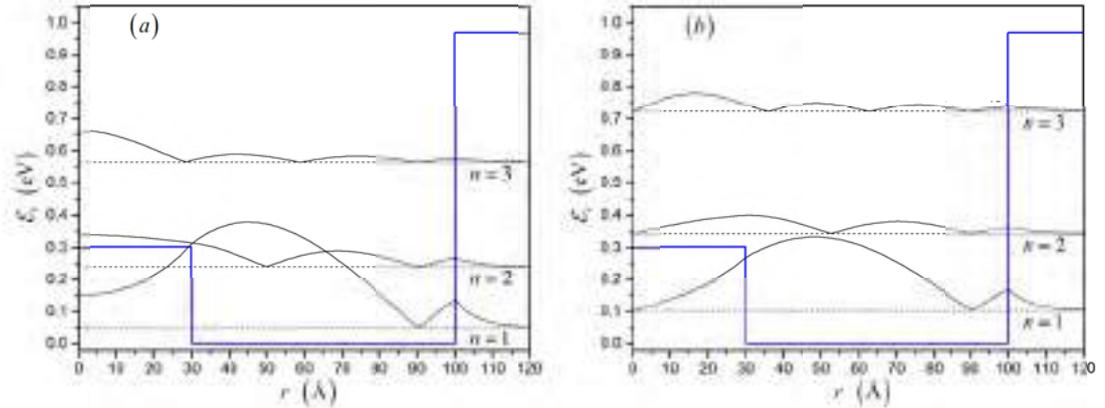


Figura 14. Densidad de probabilidad electrónica normalizada a través del sistema y energía debido al confinamiento (\mathcal{E}_r) para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón: (a) $m=0$, (b) $m=1$ [88].

En la figura 14 se muestra la densidad de probabilidad electrónica normalizada a través del sistema y energía debido al confinamiento (\mathcal{E}_r) para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón: (a) $m=0$, (b) $m=1$. Este sistema tiene solo un caso límite, el alambre cuántico con sección transversal con forma de disco el cual se obtiene cuando no existe el núcleo o el cascarón [41]. Como se puede observar el radio del núcleo es $r_c = 30$ Å y el ancho del cascarón $d_s = 70$ Å. Además, la estructura de la barrera de potencial del sistema está representada por la línea azul, la energía por la línea negra discontinua, y la función de onda por la línea negra continua, luego: (a) $m = 0$, (b) $m = 1$. En esta figura puede observarse que la densidad de probabilidad electrónica normalizada se distribuye a través del sistema. Debido a esto podemos concluir que el sistema se encuentra fuertemente acoplado, ya que la probabilidad de que el electrón se encuentre solo en el núcleo o solo en el cascarón es muy baja. Este resultado es similar al del pozo con un

potencial en escalón descrito en la referencia [37]. Otro aspecto que hay que enfatizar es que a medida que incrementa el número cuántico n , para un mismo m , la energía de los estados electrónicos incrementa y la densidad de probabilidad se hace más “plana”. Por otro lado, cuando comparamos las figuras 14a y 14b se puede ver que con el incremento del número cuántico m la energía de los estados electrónicos con el mismo valor n también incrementan [84].

La figura 15 muestra los estados de energía electrónicos del alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón debido al confinamiento espacial (\mathcal{E}_r). Las líneas continuas corresponden a los estados electrónicos etiquetados como $m = 0$, mientras que las líneas discontinuas corresponden a los estados electrónicos etiquetados con $m = 1$. Además, la línea punteada corresponde a la energía de la barrera V_0 .

En las figuras 15a y 15b se fija el ancho del cascarón (d_s), mientras se varía el valor del radio del núcleo (r_c); mientras que para las figuras 15c y 15d mantenemos el radio del núcleo fijo, y se varía el ancho del cascarón. Finalmente en las figuras 15e y 15f, fijamos el valor del radio del sistema (r_w) del alambre cuántico con un potencial en escalón, donde $r_w = r_c + d_s$. Luego: (a) $d_s = 80 \text{ \AA}$, (b) $d_s = 100 \text{ \AA}$, (c) $r_c = 80 \text{ \AA}$, (d) $r_c = 100 \text{ \AA}$, (e) $r_w = 100 \text{ \AA}$, (f) $r_w = 120 \text{ \AA}$.

En las figuras 15a y 15b cuando $r_c = 0$ tenemos el caso límite, es decir un alambre cuántico con sección transversal con forma de disco de radio d_s .

En este caso, es posible observar estados electrónicos con una energía por debajo de V_0 . Después, con el incremento de r_c el núcleo aparece y se forma el alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón. Comparando las figuras 15a y 15b se puede observar que con el incremento del ancho del cascarón el número de estados electrónicos “dentro” del sistema incrementan, mientras que la energía de los estados que ya estaban contenidos en el sistema disminuyen.

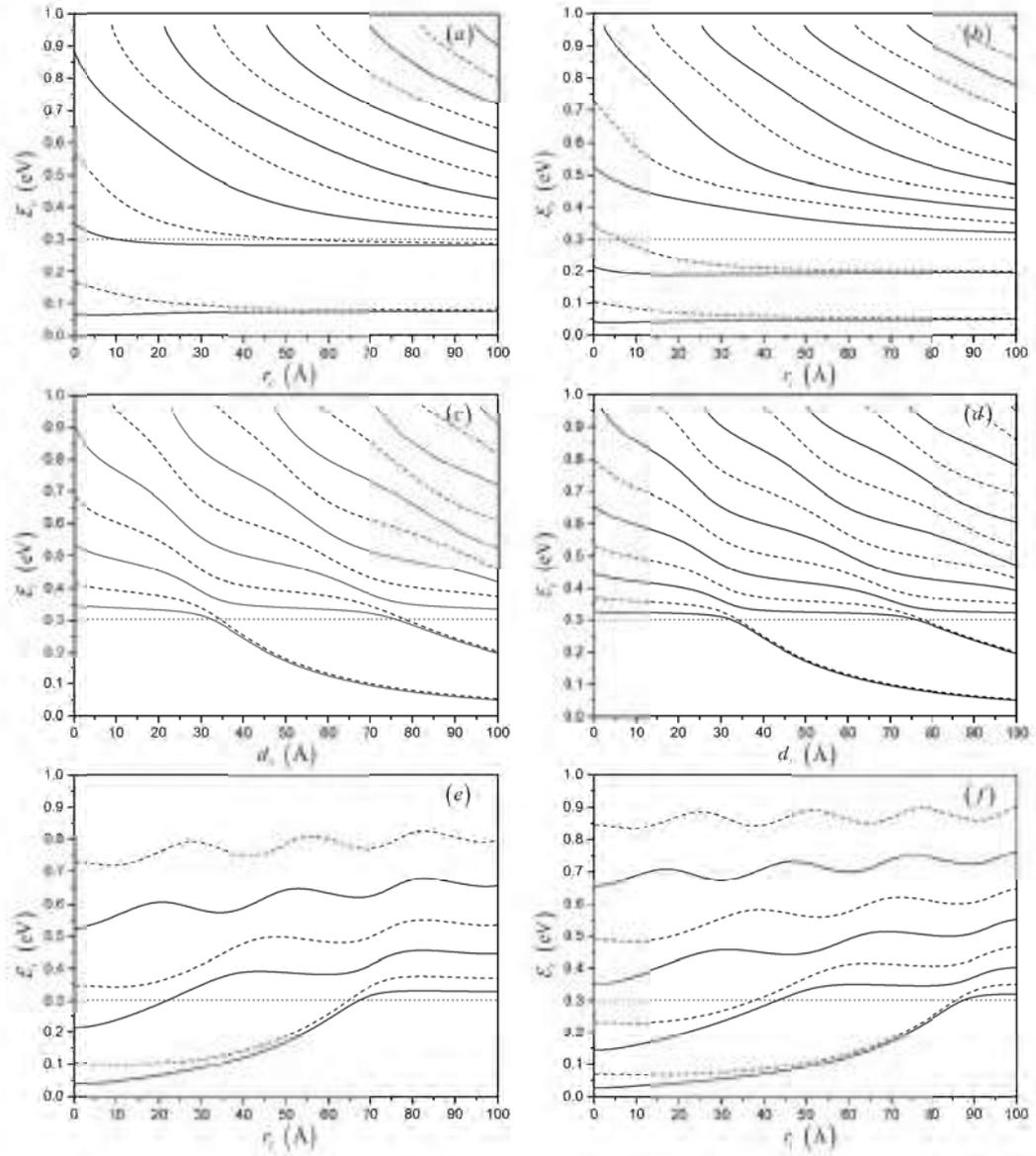


Figura 15. Energía de los estados electrónicos debido al confinamiento espacial (ε_c) para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón. Las líneas sólidas corresponden a los estados electrónicos etiquetados como $m = 0$, mientras que las líneas discontinuas corresponden a los estados electrónicos etiquetados como $m = 1$, donde: (a) $d_s = 80 \text{ \AA}$, (b) $d_s = 100 \text{ \AA}$, (c) $r_c = 80 \text{ \AA}$, (d) $r_c = 100 \text{ \AA}$, (e) $r_w = 100 \text{ \AA}$, (f) $r_w = 120 \text{ \AA}$. Además, la línea punteada corresponde a la energía de la barrera V_0 [88].

Por otro lado se puede observar dos comportamientos diferentes; el primero está relacionado a los estados electrónicos por encima de la barrera V_0 , mientras r_c incrementa estos estados de energía tienen un comportamiento similar a los estados del alambre cuántico de geometría cilíndrica y sección transversal con forma de disco, donde los estados electrónicos decrecen proporcionalmente a r_w^{-2} . El segundo se relaciona con los estados electrónicos por debajo de la barrera V_0 . En este caso, mientras r_c incrementa, los estados electrónicos tienen un comportamiento similar al del alambre cuántico con sección transversal con forma de anillo (véase la referencia [84]).

Esto implica como en todos los casos que el incremento de r_c causa un incremento en el número de estados electrónicos dentro del sistema. Por lo otro se puede inferir que cuando $r_c \rightarrow \infty$ debe reproducir los estados cuánticos correspondientes a un pozo cuántico con ancho d_s , como sea, esto no ocurre para valores de $r_c \approx 200 \text{ \AA}$ debido a que para estos valores la geometría cilíndrica aun retiene sus efectos, véase la figura 2.5 de la referencia [84].

Al inicio en las figuras 15c y 15d, tenemos un alambre cuántico con sección transversal con forma de disco de radio r_c , lo que significa que el cascarón no existe. Lógicamente, a diferencia de lo que pasa en la figuras 15a y 15b, los estados cuánticos con energía por debajo de V_0 no pueden observarse en un inicio. De manera que el cascaron aparece con el incremento de d_s y se forma el alambre cuántico con potencial en escalón. Finalmente debemos señalar que en las figuras 15a hasta 15d, se observa que con el incremento del radio del núcleo se incrementan el número de niveles de energía dentro del alambre cuántico con un potencial en escalón y disminuye la energía de los estados que ya estaban en el sistema, al igual que en todos los sistemas que hemos estudiado. Cuando comparamos las figuras 15c y 15d, es interesante notar que con el incremento del valor de r_c se produce un pequeño decremento en el valor del ancho d_s , desde el cual los niveles comienzan a estar por debajo de V_0 . Esto se confirma cuando se determina que en $m = 0$ los estados

entran al cascarón en $d_s = 34.5 \text{ \AA}$ con $r_c = 80 \text{ \AA}$ y en $d_s = 32.4 \text{ \AA}$ con $r_c = 100 \text{ \AA}$; mientras que para $m = 1$ los estados entran al cascarón en $d_s = 34.5 \text{ \AA}$ con $r_c = 80 \text{ \AA}$ y en $d_s = 33.9 \text{ \AA}$ con $r_c = 100 \text{ \AA}$.

En esta caso, a diferencia de lo que pasa en las figuras 15a y 15b para valores grandes de d_s , simplemente reproduce los estados de un alambre cuántico simple ya que el núcleo sería despreciable ($r_c \ll d_s$).

Las figuras 15e y 15f difieren de las figuras 15a y 15b. Al igual que en las figuras 15a y 15b cuando $r_c = 0$ ($d_s = r_w$) tenemos un alambre cuántico con sección transversal con forma de disco y barrera V_1 , por tanto se observan algunos estados cuánticos por debajo de V_0 . En segundo lugar, cuando $r_c = r_w$ ($d_s = 0$) tenemos un alambre cuántico con sección transversal con forma de disco con barrera $V_1 - V_0$ donde los estados cuánticos por debajo de V_0 no pueden observarse como sucede en las figuras 15c y 15d. Comparando las figuras 15e y 15f se puede inferir que con el incremento del radio, r_w , de un alambre con un potencial en escalón, el número de niveles dentro del sistema incrementa y la energía de los niveles que ya pertenecían al sistema disminuye. Además es interesante notar que el incremento de r_w esta asociado con el incremento del radio del núcleo en donde todos los niveles tienen energías superiores a la de la barrera V_0 aunque el ancho del cascarón permanece más o menos constante, tal como se analiza en las figuras 15c y 15d. También aparecen fluctuaciones en los niveles de energía por encima de 0.30 eV. Esto puede observarse en las figuras 15a y 15b y más notoriamente en las figuras 15c y 15d, indicando que la presencia del otro material tiene una fuerte influencia. Además, es fácil notar que los estados cuánticos con diferentes valores de m no se cortan, lo cual es opuesto a lo que puede observarse en el alambre cuántico doble [87]. Esto es debido a que el alambre cuántico con un potencial en escalón es un sistema que no puede desacoplarse, mientras que el alambre cuántico doble esto si es posible. También debemos señalar que el número

de estados electrónicos dentro del sistema casi no cambia, esto significa que r_w determina el número de estados dentro del sistema. Finalmente podemos concluir que en este caso podemos controlar el número de estados por debajo de V_0 (ver figura 1e y 15f, esto se consigue controlando el ancho del núcleo y manteniendo fijo el radio del núcleo y radio del sistema. Además se puede observar que el radio del sistema determina en lo fundamental el número de estados electrónicos dentro del alambre cuántico doble.

Capítulo 3: Dispersión Raman electrónica

En este capítulo calcularemos la sección eficaz diferencial de dispersión Raman para el alambre cuántico doble y el alambre cuántico con un potencial en escalón, ambos descritos en el capítulo 2. Para llevar a cabo el cálculo de la sección diferencial de dispersión debemos calcular la probabilidad de transición $W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s)$ de la ecuación (1.47), recordemos que:

$$W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |M_f|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \quad (3.1)$$

Donde

$$M_f = \sum_a \frac{\langle f | \hat{H}_s | a \rangle \langle a | \hat{H}_l | i \rangle}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_a + i\Gamma_a} + \sum_b \frac{\langle f | \hat{H}_l | b \rangle \langle b | \hat{H}_s | i \rangle}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_b + i\Gamma_b} \quad (3.2)$$

El proceso de dispersión Raman electrónica (ERS, por sus siglas en inglés Electron Raman Scattering) puede ser descrito cualitativamente de la siguiente forma: (i) primero, un electrón de la banda de conducción absorbe un fotón de radiación incidente de energía $\hbar\omega_l$ y realiza una transición intrabanda, luego el electrón emite un fotón de radiación secundaria de energía $\hbar\omega_s$ debido a una nueva transición intrabanda esto se considera en el primer término de la ecuación (3.2) ; o (ii) primero, un electrón de la banda de conducción emite un fotón de radiación secundaria de energía $\hbar\omega_s$ y realiza una transición intrabanda, luego el electrón absorbe un fotón de radiación incidente de energía $\hbar\omega_l$ realizando una nueva

transición intrabanda esto se refleja en el segundo término de la ecuación (3.2). Además consideramos un electrón confinado en la banda de conducción dentro del alambre cuántico a temperatura $T = 0$ K que puede realizar transiciones intrabanda (dentro de una misma banda) en el sistema.

3.1 Elementos matriciales

Debemos obtener los elementos matriciales involucrados en la ecuación (3.2). Para ello usamos el hamiltoniano de interacción electrón-fotón obtenido en el capítulo 1.3. La aproximación dipolar es comúnmente utilizada para la dispersión Raman tanto electrónica como resonante en nanoestructuras semiconductoras [23,87,39].

Consideremos dos estados diferentes a y b , entonces

$$\langle a | \hat{H}_r | b \rangle = -i\hbar \frac{|e|}{\mu} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_p}} \hat{e}_r \cdot \langle a | \vec{\nabla} | b \rangle \quad (3.3)$$

cambiando la base vectorial

$$\hat{e}_\pm = \frac{\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y}{\sqrt{2}} \quad (3.4)$$

los vectores base en simetría circular son

$$\begin{aligned} \hat{e}_r &= \cos\phi \hat{e}_x + \text{sen}\phi \hat{e}_y \\ \hat{e}_\phi &= -\text{sen}\phi \hat{e}_x + \cos\phi \hat{e}_y. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Se puede demostrar que los vectores base pueden escribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \hat{e}_r &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\phi} \hat{e}_- + e^{-i\phi} \hat{e}_+] \text{ y} \\ \hat{e}_\phi &= \frac{i}{\sqrt{2}} [e^{i\phi} \hat{e}_- - e^{-i\phi} \hat{e}_+]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Por otro lado, el operador gradiente en coordenadas cilíndricas es

$$\vec{\nabla} = \vec{\nabla}_{r,\phi} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.7)$$

siendo

$$\vec{\nabla}_{r,\phi} = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{e}_\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (3.8)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.6) en la ecuación (3.8) obtenemos

$$\vec{\nabla}_{r,\phi} = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} \hat{e}_- \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] + \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} \hat{e}_+ \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (3.9)$$

definiendo

$$\nabla_{\pm} = \hat{e}_{\mp} \frac{e^{\pm i\phi}}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (3.10)$$

Considerando la función de onda de los sistemas estudiados en esta tesis (ecuación (2.38)) y que la dispersión Raman no puede producirse en la dirección libre z ($k_z = 0$). Se puede demostrar que los elementos matriciales de la ecuación (3.2) toman la forma [5]

$$\langle \Psi_{m',n',k'_z} | \hat{H} | \Psi_{m'',n'',k''_z} \rangle_{\pm} = -i\hbar \frac{|e|}{\mu_0 r_w} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_\rho}} (e_\rho \cdot e_{\pm}) T_{\pm}(m',m'') \delta_{m' \pm 1, m''} \delta_{k', k''} \quad (3.11)$$

donde μ_0 es la masa libre del electrón, Ψ_{m',n',k'_z} y Ψ_{m'',n'',k''_z} son el estado final y el estado inicial de la transición y

$$T_{\pm}(m',m'') = I_{m',m''} \pm m'' II_{m',m''} \quad (3.12)$$

la ecuación (3.12) depende del tipo de alambre, ya sea el QWW-Doble o el QWW-Escalón.

Para el QWW-Doble tenemos que:

$$I_{m',m''} = I_{m',m''}^d + I_{m',m''}^f \quad (3.13)$$

$$II_{m',m''} = II_{m',m''}^d + II_{m',m''}^f \quad (3.14)$$

en donde

$$I_{m',m''}^d = \frac{\mu_0 r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \left[A_{m'} A_{m''}^* \int_0^{r_a} J_{m'} [x(r)] J_{m''} [x(r)] r dr + \int_{r_b}^{r_c} \left[A_{3m'} J_{m'} [x(r)] + B_{3m'} N_{m'} [x(r)] \right] \left[A_{3m''}^* J_{m''} [x(r)] + B_{3m''}^* N_{m''} [x(r)] \right] r dr \right] \quad (3.15)$$

$$I_{m',m''}^f = \frac{\mu_0 r_w}{\sqrt{2\mu_2}} \left\{ \int_{r_a}^{r_b} \left[A_{2m'} I_{m'} [y(r)] + B_{2m'} N_{m''} [y(r)] \right] \left[A_{2m''}^* I_{m''} [y(r)] + B_{2m''}^* K_{m''} [y(r)] \right] r dr + B_{m'} B_{m''}^* \int_{r_c}^{\infty} K_{m'} [y(r)] K_{m''} [y(r)] r dr \right\} \quad (3.16)$$

$$II_{m',m''}^d = \frac{\mu_0 r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \left\{ A_{m'} A_{m''}^* \int_0^{r_a} J_{m'} [x(r)] J_{m''} [x(r)] dr + \int_{r_b}^{r_c} \left[A_{3m'} J_{m'} [x(r)] + B_{3m'} N_{m'} [x(r)] \right] \left[A_{3m''}^* J_{m''} [x(r)] + B_{3m''}^* N_{m''} [x(r)] \right] dr \right\} \quad (3.17)$$

$$II_{m',m''}^f = \frac{\mu_0 r_w}{\sqrt{2\mu_2}} \left\{ \int_{r_a}^{r_b} \left[A_{2m'} I_{m'} [y(r)] + B_{2m'} K_{m''} [y(r)] \right] \left[A_{2m''}^* I_{m''} [y(r)] + B_{2m''}^* K_{m''} [y(r)] \right] dr + B_{m'} B_{m''}^* \int_{r_c}^{\infty} K_{m'} [y(r)] K_{m''} [y(r)] dr \right\} \quad (3.18)$$

Con

$$r_w = \frac{r_a (r_c - r_b)}{r_a - r_b + r_c}, \quad x(r) = r \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2} \mathcal{E}_r} \quad y(r) = r \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} [V_0 - \mathcal{E}_r]} \quad (3.19)$$

en el caso del QWW-Escalón cuando $\mathcal{E}_r < V_0$ tenemos que:

$$I_{m',m''} = \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_2}} (A_1^* A_1) \int_0^{r_c} I_{m'} [y(r)] I_{m''} (y) r dr + \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \times \int_{r_c}^{r_w} \left[A_2^* J_{m'} [x(r)] + B_2^* N_{m'} [x(r)] \right] \left[A_2 J_{m''} [x(r)] + B_2 N_{m''} [x(r)] \right] r dr + \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_3}} (B_3^* A_3) \int_{r_w}^{\infty} K_{m'} [z(r)] K_{m''} [z(r)] r dr \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned}
H_{m',m''} &= \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_2}} (A_1^* A_1) \int_0^{r_c} I_{m_a} [y(r)] I_{m_b} [y(r)] dr + \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \times \\
&\int_{r_c}^{r_w} [A_2 J_{m_a} [x(r)] + B_2 N_{m'} [x(r)]] [A_2 J_{m''} [x(r)] + B_2 N_{m''} [x(r)]] dr + \\
&\frac{r_w}{\sqrt{2\mu_3}} (B_3^* A_3) \int_{r_w}^{\infty} K_{m'} [z(r)] K_{m''} [z(r)] dr
\end{aligned} \tag{3.21}$$

si $\mathcal{E}_r > V_0$ entonces,

$$\begin{aligned}
I_{m_a,m_b} &= \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_2}} \gamma_1 (A_1^* A_1) \int_0^{r_c} J_{m'} [y(r)] J'_{m''} [y(r)] r dr + \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \times \\
&\int_{r_c}^{r_w} [A_2^* J_{m'} [x(r)] + B_2^* N_{m'} [x(r)]] [A_2 J'_{m''} [x(r)] + B_2 N'_{m''} [x(r)]] r dr + \\
&\frac{r_w}{\sqrt{2\mu_3}} (B_3^* A_3) \int_{r_w}^{\infty} K_{m'} [z(r)] K'_{m''} [z(r)] r dr
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
H_{m_a,m_b} &= \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_2}} (A_1^* A_1) \int_0^{r_c} J_{m'} (y) J_{m''} (y) dr + \frac{r_w}{\sqrt{2\mu_1}} \times \\
&\int_{r_c}^{r_w} [A_2 J_{m'} [x(r)] + B_2 N_{m'} [x(r)]] [A_2 J_{m''} [x(r)] + B_2 N_{m''} [x(r)]] dr + \\
&\frac{r_w}{\sqrt{2\mu_3}} (B_3^* B_3) \int_{r_w}^{\infty} K_{m'} (z) K_{m''} (z) dr
\end{aligned} \tag{3.23}$$

en donde $z(r) = r \sqrt{\frac{2\mu_3}{\hbar^2} [V_1 - \mathcal{E}_r]}$.

3.2 Sección diferencial de dispersión Raman

En esta sección determinaremos la sección diferencial de dispersión Raman en un volumen por unidad de ángulo sólido con luz incidente de frecuencia ω_i y luz dispersada de frecuencia ω_s , para un alambre cuántico doble semiconductor (QWW-doble) y un alambre cuántico con potencial en escalón (QWW-escalón).

La sección eficaz de dispersión Raman se calcula a partir de ecuación;

$$W(\omega_l, \mathbf{e}_l, \omega_s, \mathbf{e}_s) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |M_f|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \quad (3.24)$$

Las energías del estado inicial y final son

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_{m'',n''}(k_z) + \hbar\omega_l \\ \mathcal{E}_f &= \mathcal{E}_{m,n}(k_z) + \hbar\omega_s \end{aligned} \quad (3.25)$$

mientras que las energías de los estados intermedios son

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_a &= \mathcal{E}_{m',n'}(k_z) \\ \mathcal{E}_b &= \mathcal{E}_{m',n'}(k_z) + \hbar\omega_l + \hbar\omega_s \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde $E_{m,n} = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu} K_z^2$. Esta es de acuerdo a lo planteado en las ecuaciones (3.1) y (3.2)

.Considerando que la energía se conserva la energía inicial debe ser igual a la energía final, es decir, $\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_f$, entonces,

$$\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_a = \hbar\omega_s + \mathcal{E}_{m,n}(k_z) - \mathcal{E}_{m',n'}(k_z) \quad (3.27)$$

$$\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_b = -\hbar\omega_l + \mathcal{E}_{m,n} - \mathcal{E}_{m',n'} \quad (3.28)$$

esto está garantizado por la delta de Dirac que aparece en la ecuación(3.1).

Por otro lado

$$\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f = \hbar\omega_l - \hbar\omega_s + \mathcal{E}_{m'',n''}(k_z) - \mathcal{E}_{m,n}(k_z). \quad (3.29)$$

Recordemos que la dispersión Raman no puede producirse en la dirección libre z por lo cual es necesario que $k_z = 0$.

Sustituyendo las ecuaciones (3.11), (3.25) y (3.26) en (3.2) obtenemos;

$$\begin{aligned} M_f &= -\frac{2\pi\hbar^3 e^2}{V(\mu_o r_w)^2} \frac{\delta_{k'_z, k''_z}}{\sqrt{\omega_l \omega_s}} \left[M_{++} \sigma_s^+ \sigma_l^+ \delta_{m+1,m} \delta_{m'+1,m''} + M_{+-} \sigma_s^+ \sigma_l^- \delta_{m+1,m} \delta_{m'-1,m''} \right. \\ &\quad \left. + M_{-+} \sigma_s^- \sigma_l^+ \delta_{m-1,m} \delta_{m'+1,m''} + M_{--} \sigma_s^- \sigma_l^- \delta_{m-1,m} \delta_{m'-1,m''} \right] \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde

$$M_{\pm\pm} = \sum_{n'} T_{\pm}(m, m \mp 1) T_{\pm}(m \mp 1, m \mp 2) \times \left[\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar\omega_s + \mathcal{E}_r(m, n) - \mathcal{E}_r(m \pm 1, n') + i\Gamma_a} - \frac{E_0}{\hbar\omega_l - \mathcal{E}_r(m, n) + \mathcal{E}_r(m \pm 1, n') - i\Gamma_b} \right] \quad (3.31)$$

$$M_{\mp\pm} = \sum_{n'} T_{\mp}(m, m \pm 1) T_{\pm}(m \pm 1, m) \times \left[\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar\omega_s + \mathcal{E}_r(m, n) - \mathcal{E}_r(m \pm 1, n') + i\Gamma_a} - \frac{E_0}{\hbar\omega_l - \mathcal{E}_r(m, n) + \mathcal{E}_r(m \pm 1, n') - i\Gamma_b} \right] \quad (3.32)$$

con $\mathcal{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu_0 r_w^2}$ y $\sigma_{\rho}^{\pm} = \mathbf{e}_{\rho} \cdot \mathbf{e}_{\pm}$

Finalmente, usando las ecuaciones (3.30)-(3.32) se obtienen cuatro contribuciones con respecto a la sección eficaz de dispersión, dependiendo de la radiación emitida y la radiación incidente, así que podemos reescribir la ecuación (1.47) como:

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right] = \left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{++} + \left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{+-} + \left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{-+} + \left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{--} \quad (3.33)$$

donde

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{\pm\pm} = \sigma_0 (\sigma_s^{\pm} \sigma_l^{\pm})^2 \sum_{m, n, n''} \frac{|M_{\pm\pm}|^2}{[\hbar\omega_l - \hbar\omega_s + \mathcal{E}_r(m \pm 2, n'') - \mathcal{E}_r(m, n)]^2 + \Gamma_f^2} \quad (3.34)$$

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\omega} \right]_{\mp\pm} = \sigma_0 (\sigma_s^{\pm} \cdot \sigma_l^{\pm})^2 \sum_{m, n, n''} \frac{|M_{\mp\pm}|^2}{[\hbar\omega_l - \hbar\omega_s + \mathcal{E}_r(m, n'') - \mathcal{E}_r(m, n)]^2 + \Gamma_f^2} \quad (3.35)$$

y

$$\sigma_0 = \frac{\eta(\omega_s)}{\eta(\omega_i)} \left(\frac{e}{c} \right)^4 \frac{\hbar \Gamma_f \omega_s}{\pi r_0 \mu_0^2 \omega_i} \quad (3.36)$$

En estas ecuaciones sustituimos la delta de Dirac por una función Lorentziana

$$\delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_f}{(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)^2 + \Gamma_f^2} \quad (3.37)$$

3.3 Discusión de resultados

Se calculó la sección diferencial de dispersión Raman y la ganancia Raman para dos tipos de alambres cuánticos: QWW-Doble y QWW-Escalón crecidos es una matriz de *GaAs/AlGaAs* donde $\Gamma_a = \Gamma_b = \Gamma_f = 1 \text{ meV}$ y las masa efectivas son $\mu_1 = 0.096\mu_0$, $\mu_2 = 0.0665\mu_0$ y para el caso del QWW-Escalón incluimos $\mu_3 = 0.124\mu_0$ debido a la barrera externa de *AlAs*. Primero se analizarán los resultados obtenidos para el QWW-Doble y posteriormente para el QWW-Escalón. El estudio de la dispersión Raman requiere del análisis de los espectros de emisión y de excitación y de las singularidades presentes por medio de la sección eficaz de dispersión.

En este caso debemos notar que las ecuaciones (3.31) y (3.32) poseen singularidades resonantes las cuales son independientes de la energía del fotón incidente en el espectro de emisión y del fotón dispersado en el espectro de excitación.

$$\hbar\omega_\rho(m \pm 1, n', m, n) \rightarrow \hbar\omega_\rho = \begin{cases} \mathcal{E}_r(m \pm 1, n') - \mathcal{E}_r(m, n), & \rho = s, \\ \mathcal{E}_r(m, n) + \mathcal{E}_r(m \pm 1, n'), & \rho = l, \end{cases} \quad (3.38)$$

donde $\rho = s$ es para el espectro de emisión y $\rho = l$ para el espectro de excitación.

Mientras que para las ecuaciones (3.34) y (3.35), tenemos singularidades no resonantes, que son dependientes de la energía del fotón incidente en el caso del espectro de emisión y del fotón incidente en el espectro de excitación.

$$SL_\rho = (m+a, n'', m, n) \rightarrow \hbar\omega_\rho = \begin{cases} \hbar\omega_l + E_r(m \pm a, n'') - E(m, n), & \rho = s, \\ \hbar\omega_s - E_r(m \pm a, n'') + E(m, n), & \rho = l, \end{cases} \quad (3.39)$$

donde $a = 2$ para las polarizaciones (σ_s^+, σ_l^+) y (σ_s^-, σ_l^-) , mientras que $a = 0$ para las polarizaciones (σ_s^+, σ_l^-) y (σ_s^-, σ_l^+) . Si la energía de la radiación incidente es distinta a la resonancia, esta diferencia se llama “detuning”.

La ganancia Raman se calcula según la ecuación

$$G_R = \frac{2I\hbar\omega_s}{c^2\mathcal{E}_r\mathcal{E}_0^2\hbar} \frac{\rho e^2 \left| \langle \Psi_i | \hat{H}_r | \Psi_a \rangle \right|^2 \left| \langle \Psi_a | \hat{H}_r | \Psi_f \rangle \right|^2}{\Gamma^3} \quad (3.40)$$

3.3.1 Resultados del alambre cuántico semiconductor doble (QWW-Doble)

La figura 16 muestra el espectro de emisión de un alambre cuántico semiconductor doble con geometría cilíndrica con $r_a = 9$ nm, $r_b = 12$ nm, y $r_c = 17$ nm, para una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_l = 0.28$ eV, donde (a) (σ_s^-, σ_l^-) , (b) (σ_s^+, σ_l^+) y (c) (σ_s^-, σ_l^+) . Los cálculos se llevaron a cabo utilizando los mismos parámetros que en la sección de resultados del capítulo 2. Si comparamos la contribución (σ_s^-, σ_l^-) con la contribución (σ_s^+, σ_l^+) , podemos ver que la intensidad de las singularidades resonantes es más pequeña en el primer caso, además se nota que la posición de las singularidades resonantes cambia. Esto es debido a que las dos figuras corresponden a dos diferentes polarizaciones de radiación secundaria, σ_s^\pm , las cuales afectan las reglas de selección de $m \pm 1 = m'$. Como podemos ver, la posición de las singularidades en la gráfica está relacionada al “gap” entre los dos niveles de energía envueltos, mientras que la intensidad del pico está relacionada principalmente a la probabilidad de transición y al “detuning”, si la radiación incidente

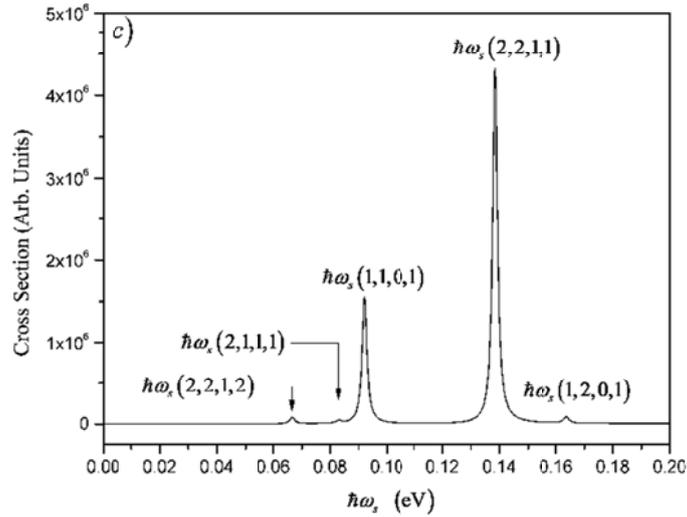
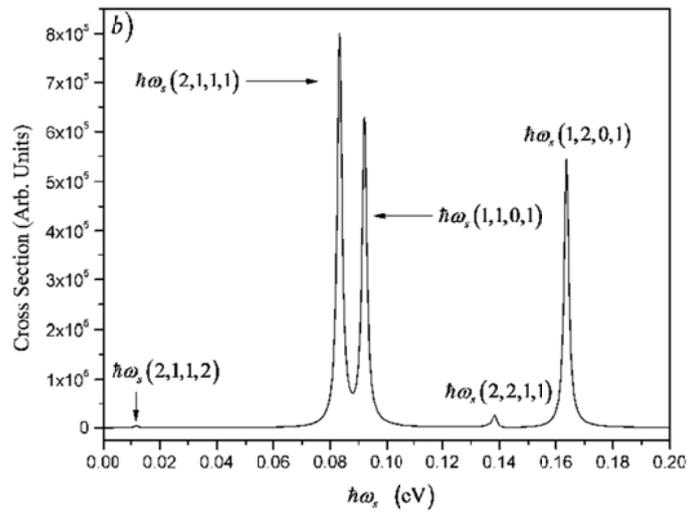
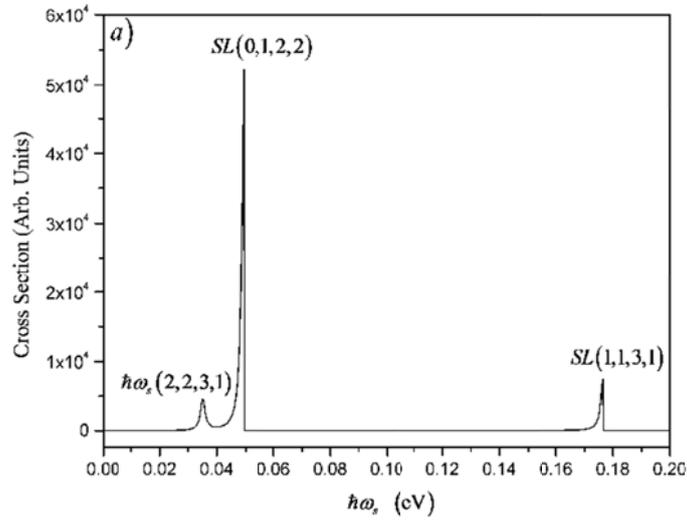


Figura 16. Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman en un alambre cuántico doble con $r_a = 90 \text{ \AA}$, $r_b = 120 \text{ \AA}$ y $r_c = 170 \text{ \AA}$; para un fotón incidente con energía $\hbar\omega_i = 0.28 \text{ eV}$ y polarizaciones: (a) (σ_s^-, σ_l^-) ; (b) (σ_s^+, σ_l^+) ; (c) (σ_s^+, σ_l^-) [87].

$(\hbar\omega_l)$ es la misma. Si comparamos las figuras 16c con las figuras 16a y 16b, es fácil ver que la intensidad de la singularidad resonante es más grande por casi un orden de una magnitud, siendo esta la razón principal de la contribución a la sección diferencial de dispersión. También podemos ver que, las singularidades resonantes de las polarizaciones (σ_s^+, σ_l^+) y (σ_s^+, σ_l^-) son iguales, esto es debido a que en ambos la radiación secundaria cumple con la misma regla de selección.

La figura 17 muestra el espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman con una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_i = 0.28 \text{ eV}$ y con una polarización (σ_s^-, σ_l^+) . En la figura 17a, se muestra el espectro de emisión Raman con polarización (σ_s^-, σ_l^+) y energía del fotón incidente $\hbar\omega_i = 0.28 \text{ eV}$, la línea discontinua corresponde a un radio $r_a = 90 \text{ \AA}$, $r_b = 100 \text{ \AA}$, y $r_c = 150 \text{ \AA}$, mientras que la línea sólida corresponde a $r_a = 90 \text{ \AA}$, $r_b = 100 \text{ \AA}$ y $r_c = 150 \text{ \AA}$. En la figura 17b la línea discontinua corresponde a un radio $r_a = 80 \text{ \AA}$, $r_b = 100 \text{ \AA}$, y $r_c = 160 \text{ \AA}$, mientras que la línea sólida corresponde a $r_a = 80 \text{ \AA}$, $r_b = 120 \text{ \AA}$ y $r_c = 170 \text{ \AA}$. Además, en la figura 17b la línea discontinua ha sido multiplicada por 10.

Como puede verse en la figura 17a el incremento del radio, r_a , produce un aumento en el número de singularidades y el cambio de posición de las mismas a posiciones de menor energía. Esto es debido a que con el incremento de r_a se produce un aumento de los estados “dentro” del sistema, especialmente aquellos que se encuentran principalmente en el alambre, mientras que el “gap” entre distintas subbandas disminuye ver ecuación (3.38). Esto se corrobora si observamos la singularidad resonante denotada por $\hbar\omega_s(1,1,0,1)$ en ambas figuras. En adición a esto, en la figura 17b mantenemos fijo el radio del alambre,

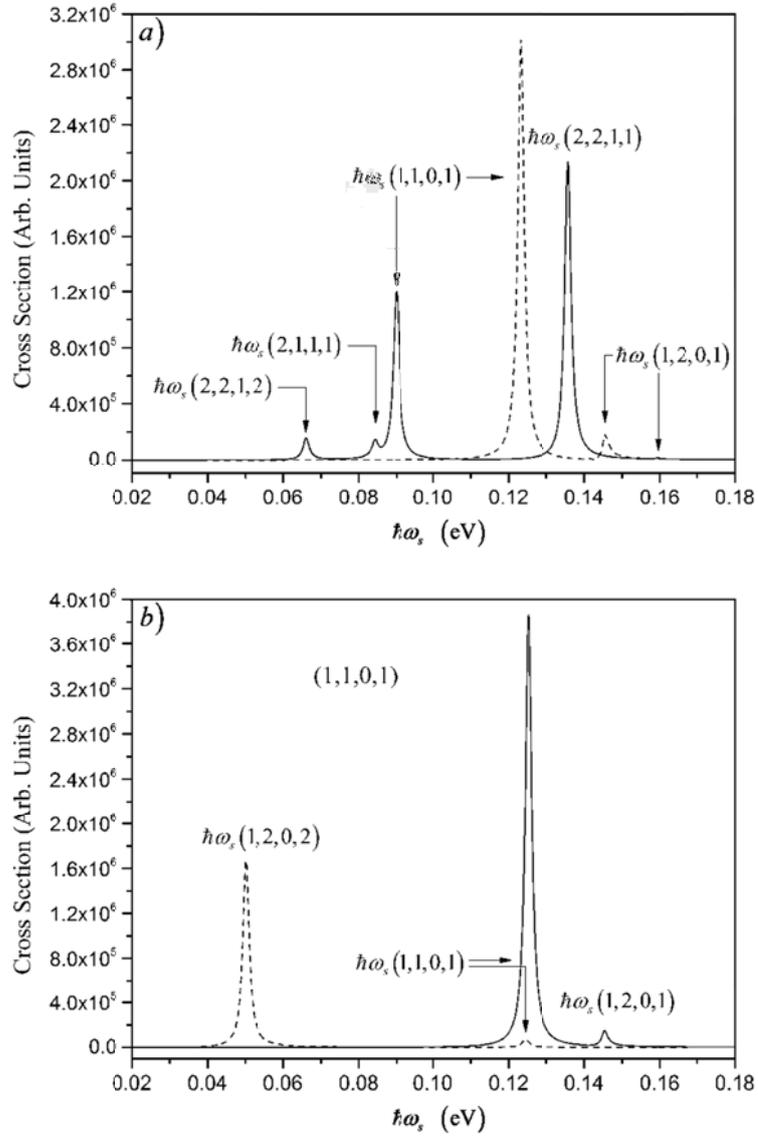


Figura 17. El espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman para el alambre cuántico doble con energía del fotón incidente de $\hbar\omega_i = 0.28$ eV y polarización (σ_s^-, σ_i^+) , donde (a) la línea discontinua corresponde a un radio $r_a = 80$ Å, $r_b = 100$ Å y $r_c = 150$ Å, mientras que la línea sólida corresponde a $r_a = 90$ Å, $r_b = 100$ Å y $r_c = 150$ Å. (b) la línea discontinua corresponde a un radio $r_a = 80$ Å, $r_b = 100$ Å, y $r_c = 160$ Å, mientras que la línea sólida corresponde a $r_a = 80$ Å, $r_b = 120$ Å y

$r_c = 170 \text{ \AA}$. En la figura (b) la línea discontinua se ha multiplicado por 10 [87].

$r_a = 80 \text{ \AA}$, mientras que variamos el ancho del cascarón y la barrera. Sin embargo, la posición de la singularidad $\hbar\omega_s(1,1,0,1)$, permanece constante. Esto confirma que los estados $m' = 1, n' = 1$ y $m = 0, n = 1$ pertenecen principalmente al alambre. Si miramos la singularidad $\hbar\omega_s(1,2,0,1)$, esta se mueve a una posición de mayor energía, debido que el estado cuántico etiquetado como $m = 1, n = 2$, esta principalmente relacionado con el cascarón. Además, podemos comparar las líneas discontinuas de las figuras 17a y 17b. En este caso, el ancho del cascarón se incrementa con el incremento de r_c , causando un efecto similar al descrito en la figura 17a, pero afectando principalmente a los estados del cascarón. Clarificando que con el incremento de r_a se ven afectados principalmente los niveles que pertenecen al alambre, mientras que con el incremento de r_c se ven afectados los niveles que pertenecen principalmente al cascarón. Finalmente, la línea discontinua de la figura 17a y la línea sólida de la figura 17b pueden compararse. Podemos ver que con el incremento de la barrera b , manteniendo un ancho fijo d , solo produce pequeños cambios en la posición de los picos resonantes, pero afecta la intensidad de las singularidades.

El cambio en la intensidad de la sección diferencial de dispersión Raman en un alambre cuántico doble está relacionado al acoplamiento entre el alambre y el cascarón. Esto se observa de manera evidente en la figura 18, en el cual se muestra la razón de transición del siguiente proceso: primero, un electrón en la banda de conducción absorbe un fotón de radiación incidente, resultando en una transición desde el estado inicial $m'' = 0, n'' = 1$ al estado intermedio $m' = 1, n' = 1$; después, el electrón emite un fotón de radiación secundaria debido a una nueva transición, desde el estado intermedio $m' = 1, n' = 1$ al estado final $m = 0, n = 2$. Es importante notar que la ganancia neta Raman es directamente proporcional a $|T^-(0,1)T^+(1,0)|^2$. Así, la figura 18 muestra una transición desde un alambre cuántico semiconductor doble a un alambre cuántico semiconductor de geometría cilíndrica con sección transversal en forma de disco, donde la barrera b varía mientras se

mantienen fijos los valores de r_a y d . En adición, debemos señalar que la línea sólida corresponde a un alambre cuántico doble con $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$, siendo la línea punteada un alambre cuántico doble con $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 80 \text{ \AA}$. Estas líneas son muy parecidas a las obtenidas para el pozo cuántico múltiple asimétrico [39] pero distintas a las obtenidas para el pozo cuántico con potencial en escalón [37], esto es debido a que el alambre cuántico doble puede desacoplarse así como lo hace el pozo cuántico múltiple asimétrico, pero en el caso del alambre cuántico doble el acoplamiento es mucho más débil que en un pozo cuántico asimétrico doble.

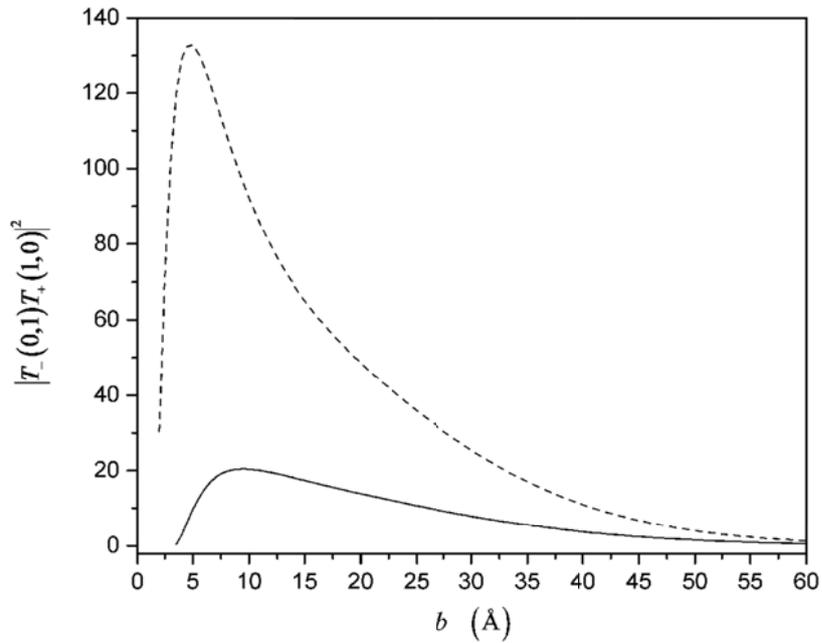


Figura 18. La tasa de transición $|T_{-(0,1)}T_{+(1,0)}|^2$, de un alambre cuántico doble, donde la barrera $b = r_b - r_a$ varía mientras que r_a y $d = r_c - r_a$ se mantienen fijos. La línea sólida corresponde a $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 60 \text{ \AA}$, mientras que la línea discontinua corresponde a $r_a = 80 \text{ \AA}$ y $d = 80 \text{ \AA}$ [87].

De los resultados obtenidos se puede concluir que el acoplamiento en un alambre cuántico semiconductor doble de geometría cilíndrica es más débil que el del pozo cuántico

asimétrico doble. En adición, es notorio que para cualquier cambio en los parámetros del sistema se producen fuertes cambios en la razón de transición, haciendo que el sistema sea muy difícil de optimizar. Sin embargo, a pesar de que el acoplamiento es débil, es decir, el alambre cuántico se desacopla rápidamente en este sistema, la razón de transición es mayor que el obtenido para el pozo cuántico doble asimétrico, que se puede observar en la figura 6 de la referencia [39], debido a la simetría del sistema. Debemos clarificar que cuando nos referimos al acoplamiento, nos referimos a la interacción de las distintas regiones que componen el sistema, que en este caso son el alambre y el cascarón. La interacción afecta los estados electrónicos del sistema, debido a esto los estados son una combinación entre los estados del alambre y el cascarón.

3.3.2 Resultados del alambre cuántico con un potencial en escalón (QWW-Escalón)

La figura 19 muestra la tasa de probabilidad de transición $|T^-(0,1)T^+(1,0)|^2$ para un alambre cuántico con un potencial en escalón en donde se han usado los mismos parámetros que en el capítulo 2.

En las figuras 19a-19c consideramos los estados electrónicos (0,1), (1,2) y (0,2); que denotamos como (m,n) para obtener la tasa de transición. La figura 19d muestra la tasa de transición de probabilidad para los niveles de energía $n_1 = 1$, $n_2 = 2$ y $n_3 = 3$ del alambre cuántico con un potencial en escalón en donde hemos utilizado los resultados de la referencia [37], siendo $d = 100 \text{ \AA}$ (línea discontinua) y $d = 200 \text{ \AA}$ (línea sólida). En la figura 20a el comportamiento es similar al observado en la figura 5 de la referencia [87], donde se muestra la tasa de transición para un alambre cuántico semiconductor doble.

En este caso el máximo está relacionado al comportamiento de los estados cuánticos asociados con un alambre cuántico de simetría cilíndrica, es decir el cascarón, ver la figura 2 de la referencia [84]. Además, el incremento de la intensidad está asociado al decremento del gap cuando incrementa d , si comparamos la figura 19b con las figuras 15c y 15d, se demuestra que el máximo está relacionado a el número de niveles de energía debajo de la barrera $V_0 = 0.30 \text{ eV}$ y con las fluctuaciones que aparecen por debajo de V_0 . De esto se

pueden dar dos conclusiones: la primera es que con el incremento del radio del núcleo la ganancia Raman máxima cambia para valores mayores del ancho del cascarón, y la intensidad decrece ligeramente.; esto es debido a que el gap entre los niveles disminuye. La segunda conclusión es que se alcanza un máximo de eficiencia cuando la energía de los estados electrónicos está por debajo de V_0 .

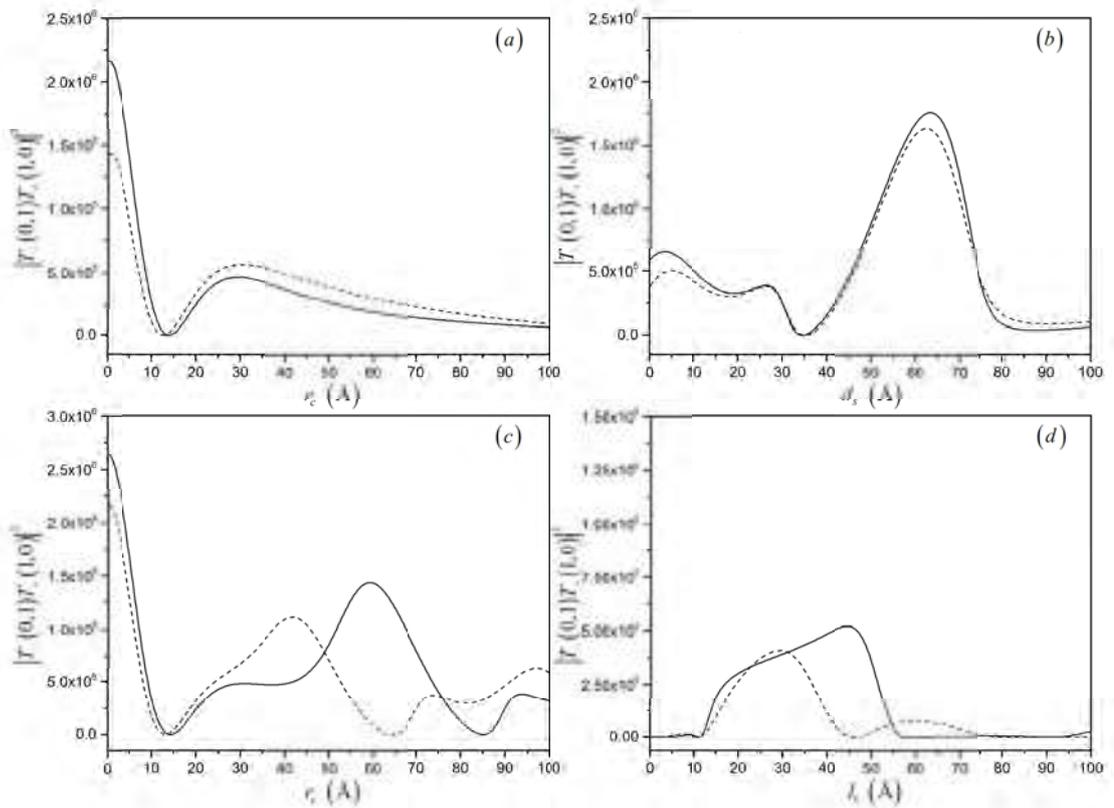


Figura 19. Taza de transición de probabilidad de tres niveles de energía para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón , donde; a) $r_c = 80 \text{ \AA}$ (línea discontinua) y $r_c = 100 \text{ \AA}$ (línea sólida), (b) $d_s = 80 \text{ \AA}$ (línea discontinua) y $d_s = 100 \text{ \AA}$ (línea sólida), (c) $r_w = 100 \text{ \AA}$ (línea discontinua) y $r_w = 120 \text{ \AA}$ (línea sólida), (d) taza de transición para un alambre cuántico en escalón, obtenido usando los resultados de la referencia [37], siendo $d = 100 \text{ \AA}$ (línea discontinua) y $d = 200 \text{ \AA}$ (línea sólida) [88].

Además, el segundo y tercer máximo de eficiencia más importante se obtienen cuando la energía de los tres estados electrónicos está por debajo de V_0 . Estas curvas son similares a las obtenidos para en pozo en escalón (ver referencia [37]); donde la eficiencia máxima se obtiene cuando solo un nivel está por debajo de $V_0 = 0.30$ eV . Por otra parte, las curvas son diferentes a las obtenidas para el pozo con un potencial en escalón, para un pozo cuántico múltiple asimétrico y para el alambre cuántico doble (ver referencias [87], [39]) debido a la simetría del sistema y al hecho de que el alambre cuántico con un potencial en escalón es un sistema fuertemente acoplado, mientras que el sistema de pozos cuánticos múltiples se desacopla para ciertos valores de la barrera.

En la figura 19c el comportamiento es distinto que el de las figuras 19a y 19b. Estos máximos están relacionados al comportamiento de los estados cuánticos asociados con el cascarón, ver figura 2 de la referencia [84]. Además, el incremento en la intensidad está asociado con el decremento de la energía del gap cuando incrementa d_s . También, el segundo máximo de la eficiencia está relacionado con el decremento de la energía del gap. La figura 19d muestra la tasa de transición de probabilidad del alambre cuántico con un potencial en escalón es alrededor de tres veces más grande que para el pozo cuántico con un potencial en escalón [85].

En la figura 20, se muestra el espectro de emisión Raman para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón donde la energía del fotón incidente es de $\hbar\omega_l = 0.90$ eV, siendo $r_c = 40$ Å y $d_s = 40$ Å. Las polarizaciones: (a) (σ_s^+, σ_l^+) , (b) (σ_s^+, σ_l^-) , (c) (σ_s^-, σ_l^+) y (d) (σ_s^-, σ_l^-) . Si comparamos las polarizaciones (σ_s^+, σ_l^+) y (σ_s^+, σ_l^-) , vea la figura 20a y 20b, se muestra que las singularidades resonantes son iguales, esto es debido a que las singularidades resonantes están relacionadas al fotón emitido de la radiación secundaria que coincide en estos casos.

Esto también puede observarse para las polarizaciones (σ_s^-, σ_l^-) y (σ_s^-, σ_l^+) de las figuras 20c y 20d. En contraste, las singularidades no resonantes no coinciden ya que están

relacionadas con la absorción del fotón incidente. Debemos notar que las únicas polarizaciones, que tiene singularidades no resonantes en común son (σ_s^+, σ_l^-) y (σ_s^-, σ_l^+) , figuras 20b y 20c respectivamente, pero estas polarizaciones no comparten singularidades resonantes.

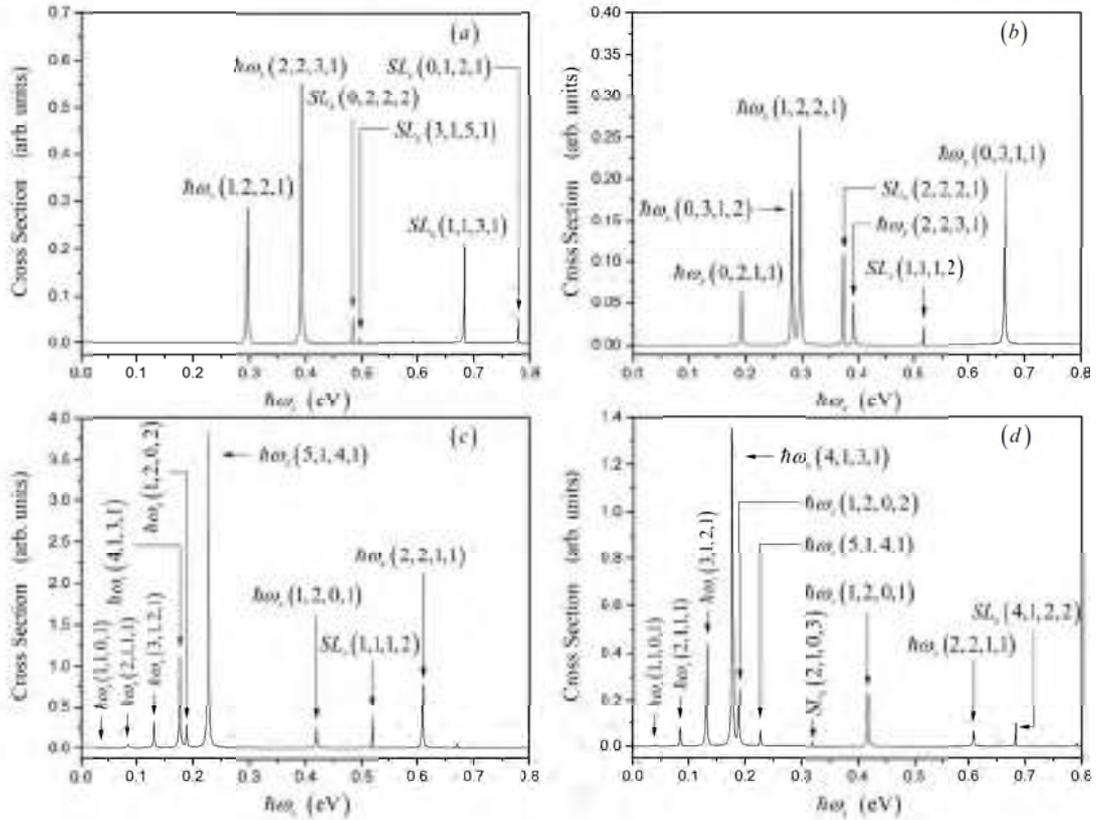


Figura 20. Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman para un QWW-Escalón con $r_c = 40 \text{ \AA}$ y $d_s = 40 \text{ \AA}$ para una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_i = 0.90 \text{ eV}$ y polarizaciones a) (σ_s^+, σ_l^+) , b) (σ_s^+, σ_l^-) , c) (σ_s^-, σ_l^+) , d) (σ_s^-, σ_l^-) [88].

A partir de las figuras podemos confirmar que los picos resonantes ocurren como resultado de la emisión de un fotón de radiación secundaria (dispersado) y las transiciones que cumplen con la regla de selección $m \pm 1 = m'$; mientras que los picos no resonantes están

relacionados con el estado final del sistema que debe satisfacer $m \pm 2 = m''$ o $m = m''$. Por otra parte, la intensidad de las singularidades resonantes es mayor para la polarización (σ_s^-, σ_l^+) , siendo así la mayor contribución para la sección eficaz diferencial de dispersión. También, los picos que involucran estados electrónicos con mayor energía generalmente poseen mayores intensidades; esto es debido a que en estos casos el “detuning” es menor (ver la referencia [37]). Debemos señalar que la posición de las singularidades resonantes en el espectro Raman están relacionadas solo con el gap entre los dos estados electrónicos involucrados, mientras que la intensidad está principalmente relacionada a dos aspectos, primero la tasa de transición y segundo el detuning [37]. Debemos recordar que los estados electrónicos en un alambre cuántico se agrupan en subbandas, siendo n el número cuántico principal y m el número cuántico secundario. Esto se discute en la referencia [84]. Esto implica que tenemos dos tipos de singularidades resonantes, una relacionada a las transiciones intra-subbanda y otra relacionada a las transiciones inter-subbanda. En las polarizaciones (σ_s^+, σ_l^+) y (σ_s^+, σ_l^-) solo se pueden observar los picos relacionados a las transiciones inter-subbanda, mientras que para las polarizaciones (σ_s^-, σ_l^+) y (σ_s^-, σ_l^-) se pueden observar singularidades resonantes de ambos tipos.

Por otro lado, en la figura 21 el espectro de emisión Raman se muestra para un alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón para una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_s = 0.90$ eV y polarización (σ_s^-, σ_l^+) , donde: (a) $r_c = 60$ Å y $d_s = 40$ Å, (b) $r_c = 40$ Å y $d_s = 60$ Å. En esta figura, mostramos las singularidades resonantes asociadas con transiciones intra-subbanda, interviniendo subbandas con los números cuánticos $n = 1$, $n = 2$ y $n = 3$. Como puede observarse estos picos resonantes aparecen generalmente en la misma región. Se ha elegido $r_w = 100$ Å, encontrando que con el incremento del radio del núcleo no cambia el número de singularidades debido a que el número de estados electrónicos tampoco cambia. Sin embargo, la posición de los picos cambia ligeramente. Evidencia de esto es el cambio observado en la posición de las singularidades etiquetadas por $\hbar\omega_s(7,1,6,1)$ y $\hbar\omega_s(2,2,1,2)$.

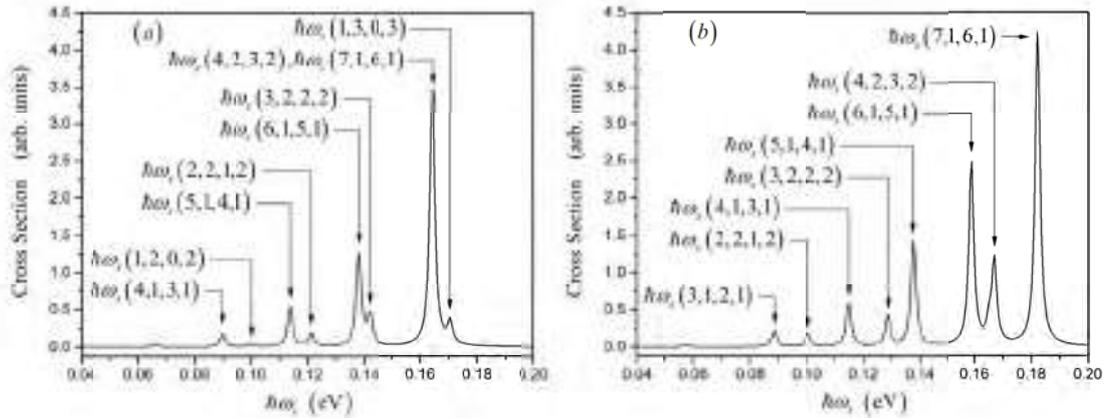


Figura 21. Espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman de un QWW-Escalón para una energía del fotón incidente de $\hbar\omega_i = 0.90$ eV y polarización (σ_s^-, σ_i^+) , donde: a) $r_c = 60$ Å y $d_s = 40$ Å, b) $r_c = 40$ Å y $d_s = 60$ Å [88].

Además, si comparamos las figuras 21a y 20c podemos ver que si el ancho del cascarón permanece fijo, mientras que el radio del núcleo incrementa, el número de estados electrónicos aumenta y entonces el número de singularidades resonantes en el espectro Raman también incrementa. También, si comparamos las figuras 21b con 20c podemos ver que el efecto es el mismo si incrementamos el ancho del cascarón.

En la figura 22 se muestra la posición de las singularidades resonantes relacionadas a las transiciones intra-subbanda (líneas sólidas) denotadas por $\hbar\omega_s(1,1,0,1)$ y $\hbar\omega_s(1,2,0,2)$ y las singularidades resonantes relacionadas a las transiciones inter-subbanda (líneas discontinuas) denotadas por $\hbar\omega_s(1,2,0,1)$ y $\hbar\omega_s(2,2,1,1)$, para el espectro de emisión de un proceso de dispersión Raman electrónica en el alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón, donde $d_s = 40$ Å. Como puede observarse, las energías de las singularidades disminuyen con el incremento del radio del núcleo mientras que el ancho del cascarón permanece fijo, pero sería lo mismo en el caso en que d_s incrementa, mientras que el radio del núcleo permanece fijo. Por último, debe notarse que los picos resonantes

asociados con las transiciones inter-subbandas tienen mayor energía que aquellas ligadas a las transiciones intra-subbanda, agrupándose las singularidades en ciertas regiones del espectro.

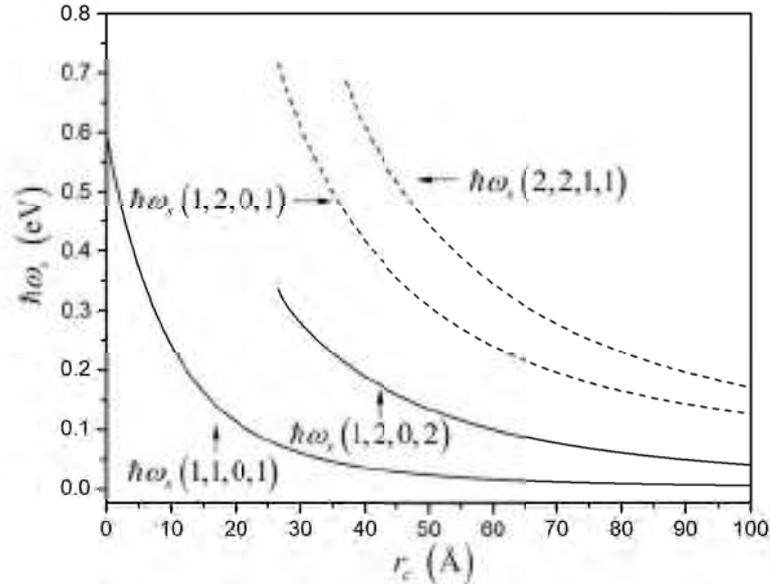


Figura 22. Posición de las singularidades resonantes intra-subbanda (líneas sólidas) e inter-subbanda (líneas discontinuas) del espectro de un proceso de emisión Raman en un QWW-Escalón, con $d_s = 40 \text{ \AA}$ [88].

De los resultados obtenidos se puede concluir que el alambre cuántico con un potencial en escalón es un sistema más fuertemente acoplado que el alambre cuántico doble y que muestra características que no se presentan en otros sistemas tales como el pozo en escalón, el alambre cuántico doble o en el pozo cuántico asimétrico múltiple. También podemos decir que es un sistema difícilmente de optimizar ya que cualquier cambio en los parámetros del sistema causa cambios muy notables en la tasa de transición y en la energía los estados electrónicos, pero la eficiencia del alambre cuántico con un potencial en escalón es mayor que la del pozo en escalón y la del alambre cuántico doble, como puede verse en las referencias [37,87].

Conclusiones y recomendaciones

En este trabajo presentamos una metodología sobre cómo se pueden obtener las funciones de onda y las energías de los estados electrónicos para alambres cuánticos semiconductores de distintos tipos crecidos en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, ilustrando los casos del alambre cuántico semiconductor doble y del alambre cuántico con un potencial en escalón. Por otro lado, demostramos que la estructura de la sección diferencial de dispersión Raman permite entender claramente la estructura de las subbandas de energía. Nuestro estudio ha demostrado que el acoplamiento del alambre cuántico semiconductor con un potencial en escalón es más fuerte que el acoplamiento del alambre cuántico doble y de otros sistemas tales como el del pozo cuántico en escalón y el del pozo cuántico asimétrico múltiple. También hemos demostrado que los sistemas cilíndricos son difíciles de optimizar debido a que cualquier cambio en los parámetros produce cambios notables en la tasa de transición y en la energía de los estados electrónicos. Sin embargo, la eficiencia del alambre cuántico con un potencial en escalón es mayor a la del alambre cuántico semiconductor doble y que la del pozo cuántico en escalón. Adicionalmente, podemos señalar que en este trabajo se ha aplicado un modelo simplificado para obtener la estructura electrónica del sistema. Para obtener resultados más realistas podría considerarse el acoplamiento entre bandas empleando el modelo de Luttinger-Kohn o el modelo de Kane, sin embargo, obtuvimos las principales características físicas del sistema.

Referencias

- [1] Charles P. Poole Jr., *Encyclopedic dictionary of condensed matter physics*. Rusia: Elsevier, 2004.
- [2] Charles P. Poole jr. and Frank J. Owens, *Introduction of nanotechnology*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2003.
- [3] J. L. Marín, R. Riera, and R. Rosas, "Confined systems and nanostructured materials," in *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, Hari Singh Nalwa, Ed.: Academic Press, 2001, vol. 6, pp. 291-416.
- [4] René Betancourt Riera, *Dispersión Raman Electrónica en un Alambre Cuántico en Presencia de un Campo Magnético*, 2012, Tesis.
- [5] Re. Betancourt-Riera, Ri. Betancourt-Riera, J. M. Nieto Jalil, and R. Riera, "One phonon resonant Raman scattering in semiconductor quantum wires: Magnetic field effect," *Physica B*, vol. 410, pp. 126-130, Febrero 2013.
- [6] L. V. Keldysh, "Effect of ultrasonics on the electron spectrum of crystals," *Soviet Physics-Solid State*, vol. 1658, p. 2265, 1963.
- [7] L. V. Keldysh, "Optical characteristics of electrons with a band energy spectrum in a strong electric field," *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 16, p. 471, 1963.
- [8] L. Esaki and R. Tsu, "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors," *IBM Journal of Research and Development*, vol. 14, no. 1, pp. 61-65, Enero 1970.
- [9] P. B., Csanády, A., Radnoczi, G., Urban, K. and Timmer, U. Barna, "Quasi-Crystalline Structure Formation in Thin Films".
- [10] Alireza Yasan and Manijeh. Razeghi, "Review of Crystal, Thin-Film, and Nanostructure Growth Technologies".
- [11] R. Riera and Ri. Betancourt-Riera, *Estudio de la dispersión Raman en Sistemas Nanoestructurados*, Agosto 2004.
- [12] H. Sakaki, "Scattering suppression and high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 19, no. 12, pp. 735-738, Septiembre 1980.
- [13] Paul Harrison, "Quantum well, wires and dots", 2001.

- [14] P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan, and W. Wiegmann, "Toward quantum well wires: fabrication and optical properties," *Applied Physics Letters*, vol. 41, no. 7, p. 635, 1982.
- [15] Ri. Betancourt-Riera, J. M. Nieto-Jalil, R. Riera, and R. Rosas, "'Electron Raman Scattering in Nanostructures'," *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, no. 13, p. 427, 2011.
- [16] R. Riera, Re. Betancourt-Riera, R. Rosas, Ri. Betancourt-Riera, and J.M. Nieto.Jalil, "'Electronic States in Self-Assembled Quamtum Dots: Quantum Lens"'.
- [17] Alejandro Fainstein and Karen Hallberg, "La física de alambres moleculares, átomos artificiales y cavidades nanoscópicas," *Ciencia Hoy*, vol. 14, no. 84, pp. 16-23, 2005.
- [18] Y. Arakawa, K. Vahala, A. Yariv, and K. Lau, "Enhanced modulation bandwidth of GaAlAs double heterostructure lasers in high magnetic fields: dynamic response with quantum wire effects.," 1985.
- [19] S. T. Chou, K. Y. Cheng , L. J. Chou, and K. C. Hsieh, "'Multiple-quantum-wire lasers grown by the strain-induced lateral-layer ordering process"', 1995.
- [20] M. López, A. Miguel, and L. Meléndez, "Pozos, hilos y puntos cuánticos: estructuras semiconductoras de baja dimensión," *Avance y Perspectiva*, vol. 16, pp. 243-254, Agosto 1997.
- [21] K. Kash, "Optical properties of III-V semiconductor quantum wires and dots," *Journal of Luminescence*, vol. 46, no. 2, pp. 69-82, Marzo 1990.
- [22] M. B. Panish, H. Temkin, R. A. Hamm, and S. N. G. Chu, "Optical properties of very thin GaInAs(P)/InP quantum wells grown by gas source molecular beam epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. 49, no. 3, pp. 164-166, Julio 1986.
- [23] Ri. Betancourt-Riera, J. M. Nieto Jalil, R. Riera , and R. Rosas, "'One-Phonon Resonant Raman Scattering in Nanostructures"', *American Scientific Publishers*, vol. 20, pp. 67-126, 2011.
- [24] M. Cardona and G. Güntherodt, "'Light scattering in solid V"', *Topics in Aplied Physics*, vol. 66, 1989.
- [25] M. V. Klein, "Phonons in semiconductor superlattices," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 22, no. 9, pp. 1760-1770, Septiembre 1986.
- [26] Alberto Requena and José Zuñiga, *Espectroscopia*. Madrid, España: Pearson, 1995.

- [27] C. V. Raman and K. S. Krishnan, "A new type of secondary radiation," *Nature Publishing Group*, vol. 121, p. 501, Marzo 1928.
- [28] G. Landsberg and L. Mandelstam, *A novel effect of light scattering in crystals.*: Naturwiss, 1928, vol. 16.
- [29] R. Enderlein, "Theory of intersubband resonance Raman Scattering in small-gap semiconductors," *Phys. Stat. Sol. (b)*, vol. 70, pp. 263-268, Julio 1975.
- [30] M. V. Klein and M. Cardona, "Light scattering in solids," *Springer-Verlag*, no. 147, 1975.
- [31] R. F. Wallis and D. L. Millis, "Theory of interband Raman scattering in semiconductors in magnetic fields," *PhysRevB*, vol. 3, no. 10, p. 3581, Mayo 1971.
- [32] A. V. Goltsev, I. G. Lang, and S. T. Pavlov, "Electron-phonon and electron raman scattering in polar semiconductors in high magnetic Fields," *Phys. Status. Sol. (b)*, vol. 94, pp. 37-50, 1979.
- [33] F. Bechstedt, R. Enderlein, and K. Peukere, "Theory of inter-valence-band electronic raman scattering in cubic semiconductors without and with an external electric field," *phys. stat. sol. (b)*, vol. 68, pp. 43-52, 1975.
- [34] A. V. Goltsev, I. G. Lang, and S. T. Pavlov, "Zero-phonon Raman scattering of light in semiconductors," *Sov. Phys. Solid State*, vol. 20, p. 1473, 1978.
- [35] C. Trallero-Giner, T. Ruf, and M. Cardona, "Theory of one-phonon resonant Raman scattering in a magnetic field," *Phys. Rev. B*, vol. 41, no. 5, pp. 3028-3038, Febrero 1990.
- [36] R. Riera, F. Comas, C. T. Giner, and S. T. Pavlov, "Electron Raman Scattering in Semiconductor Quantum Wells," *phys. stat. sol. (b)*, vol. 148, no. 2, pp. 533-542, Agosto 1988.
- [37] L.A. Ferrer-Moreno, Ri. Betancourt-Riera, Re. Betancourt-Riera, and R. Riera, "Electron Raman scattering in semiconductor step-quantum well," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 477, pp. 87-93, Noviembre 2015.
- [38] A. Tiutiunnyk et al., "Electron Raman scattering in a double quantum well tuned by an external nonresonant intense laser field," *Electron Raman scattering in a double quantum well tuned by an external nonresonant intense laser field*, vol. 64, pp. 496-501, Febrero 2017.
- [39] Ri. Betancourt-Riera, R. Rosas, I. Marín-Enríquez, R. Riera, and J.L. Marín, "Electron Raman scattering in asymmetrical multiple quantum wells," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 17, no. 28, p. 4451, Julio 2005.

- [40] C.A. Duque et al., "Intersubband linear and nonlinear optical response of the delta-doped SiGe quantum well," *Superlattices and Microstructures*, vol. 87, pp. 125-130, Noviembre 2015.
- [41] J. M. Bergues, R. Riera, F. Comas, and C Trallero-Giner, "Electron Raman scattering in cylindrical quantum wires," *J. Phys.: Condensed Matter*, vol. 7, no. 36, p. 7273, Septiembre 1995.
- [42] F. Comas, A. Cantarero, C. Trallero-Giner, and M. Moshinsky, "Polar optical oscillations in quantum wires and free-standing wires: the electron-phonon interaction Hamiltonian," *J. Phys.: Condensed Matter*, vol. 7, no. 9, p. 1789, Febrero 1995.
- [43] G. Rezaei, M. J. Karimi, and H. Pakarzadeh, "Magnetic field effects on the electron Raman scattering in coaxial cylindrical quantum well wires," *Journal of Luminescence*, vol. 143, pp. 551-557, Noviembre 2013.
- [44] J. Sangtawee, W. Srikom, and A. Amthong, "Coaxial Quantum Well Wires in Magnetic/Nonmagnetic Heterostructures," *Phys. Status Solidi B*, vol. 255, no. 7, Mayo 2018.
- [45] R. Riera, J. L. Marín, M. Bergues, R. Betancourt-Riera, and M. Fernández, "Electron Raman scattering in a spherical quantum dot," *Rev. Mex. Fis.*, vol. 44, no. 2, pp. 167-172, Abril 1998.
- [46] E. Roca, C. Trallero-Giner, and M. Cardona, "Polar optical vibrational modes in quantum dots," *Phys. Rev. B*, vol. 49, no. 19, pp. 13704-13711, Mayo 1994.
- [47] C. Trallero-Giner, "Polar-optical oscillations and electron-phonon interaction in quantum wires and quantum dots," *Physica Scripta*, vol. 1994, no. T55, p. 50, Marzo 1994.
- [48] A. Tiutiunnik, V. Akimov, M.E. Ramos Mora, M.E. Mora-Ramos, and E. Kasapoglu, "Electron and donor-impurity-related Raman scattering and Raman gain in triangular quantum dots under an applied electric field," *The European physical Journal B*, Abril 2016.
- [49] M.J. Karimi, G. Rezaei, and H. Pakarzadeh, "Electron Raman scattering in single and multilayered spherical quantum dots: Effects of hydrogenic impurity and geometrical size," *Physics Letters A*, vol. 377, no. 34-36, pp. 2164-2171, Noviembre 2013.
- [50] H. C. Liu et al., "Intersubband Raman Laser," *Applied Physics*, vol. 78, no. 23, Mayo 2001.
- [51] G. Sun, J. B. Khurgin, L. Friedman, and R. A. Soref, "Tunable intersubband Raman laser in GaAs/AlGaAs multiple quantum wells," *J. Opt. Soc. Am*, vol. 15, no. 2, pp. 648-651, Febrero 1998.

- [52] J. B. Khurgin, G. Sun, R. A. Friedman, and J. Soref, "Comparative analysis of optically pumped intersubband lasers and intersubband Raman oscillators," *Journal of Applied Physics*, vol. 78, no. 12, p. 7398, Agosto 1995.
- [53] K. Ding and C. Z. Ning, "Fabrication challenges of electrical injection metallic cavity semiconductor nanolasers," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 28, no. 12, p. 124002, Noviembre 2013.
- [54] Maximilian Zapf, Carsten Ronning, and Robert Röder, "High temperature limit of semiconductor nanowire lasers," *Applied Physics Letters*, vol. 110, no. 17, Abril 2017.
- [55] Robert Röder and Ronning Carsten, "Review on the dynamics of semiconductor nanowire lasers," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 33, no. 3, Febrero 2018.
- [56] Ricardo Betancourt Riera, Estudio de la Dispersión Raman en sistemas Nanoestructurados, 2004, Tesis.
- [57] J. M. Luttinger and W. Kohn, "Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields," *Physical Review*, vol. 97, no. 4, pp. 869-883, Octubre 1954.
- [58] A. K. Ganguly and J. L. Birman, "Theory of lattice Raman scattering in insulators," *Phys. Rev.*, vol. 162, no. 3, pp. 806-816, Octubre 1967.
- [59] M. Cardona and Peter Y. Yu, *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*, 4th ed. Berlin: Springer, 1996.
- [60] Foresman and A. Fish, *Exploring chemistry with electronic structure methods*, 2nd ed. Pittsburgh: Gaussian, Inc., 1993.
- [61] P. V. Pavplov, "“Física del estado sólido”," 1987.
- [62] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices.*: Clarendon Press., 1954.
- [63] M. Born and J. R. Oppenheimer, "“Zur quantentheorie der molekeln”," no. 84, 1927.
- [64] Bernard Diu, Franck Laloë Claude Cohen-Tannoudji, "Quantum Mechanics volumen 1," 2005.
- [65] Ira N Levine, "“Quantum Chemistry”," 2000.
- [66] E. O. Kane, "Band structure of indium antimonide," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 1, no. 4, pp. 249-261, Enero 1957.

- [67] J. M. Luttinger, "Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: general theory," *Phys. Rev.*, vol. 102, no. 4, pp. 1030-1041, Mayo 1956.
- [68] G. Bastard, "Wave mechanics applied to heterostructures," 1988.
- [69] Per-Olov Löwdin, "A note on the quantum-mechanical perturbation theory," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 19, no. 11, pp. 1396-1401, Julio 1951.
- [70] E. O. Kane, "The $k \cdot p$ Method," in *Semiconductors and Semimetals*, R. K. Willardson and Albert C. Beer, Eds.: Elsevier, 1966, ch. 3, pp. 75-100.
- [71] E. O. Kane, "Band structure of narrow gap semiconductors," *Physics and Applications. Lecture Notes in Physics.*, vol. 133, pp. 13-31, 1980.
- [72] J. L. Movilla Rosell, Confinamiento nanoscópico en estructuras semiconductoras cero-dimensionales, 2007, Tesis, Universitat Jaume I, España.
- [73] A. S. Davidov, *Teoría del sólido*. URSS: Mir, 1981.
- [74] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mecánica cuántica teoría no relativista*. Barcelona-Buenos Aires-México: Reverté, 1969.
- [75] A.S. Davidov, *Quantum Mechanics*, Instituto del libro, Ed. La Habana: Revolucionaria, 1969.
- [76] E. L. Ivchenko, I. G. Lang, and S. T. Pavlov, "Theory of resonance secondary luminescence of semiconductors," *Fiz, Tved. Tela.*, 1977.
- [77] P. M. Chamberlain, C. Trallero-Giner, and M. Cardona, "Theory of one phonon resonant Raman scattering in semiconductor microcristalites," no. 45, 1992.
- [78] F. Comas and C. Trallero-Giner, "Polar optical oscillations of layered semiconductor structures in the long-wavelength limit," *Physica B*, vol. 192, no. 4, pp. 394-402, Diciembre 1993.
- [79] G. Bastard, "Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation," no. 25, 1982.
- [80] Antonio Jáuregui Díaz y Angelina Uribe. Araujo, *Funciones Especiales*. Hermosillo, Sonora., México.: Universidad de Sonora., 2006.
- [81] George B. Arfken y Hans J. Weber, "Mathematical Methods for Physicist," 2005.

- [82] A. N. Tikhonov and A. A. Samarskii, *Equations of mathematical physics*. New York: Dover Publications, 1990.
- [83] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York.: Dover Publications., 1972.
- [84] Re. Betancourt-Riera, Ri. Betancourt-Riera, J. M. Nieto Jalil, and R. Riera, "Electron Raman scattering in semiconductor quantum well wire of cylindrical ring geometry," *Chinese Physics B*, vol. 24, no. 11, octubre 2015.
- [85] L.A. Ferrer Moreno, Ri Betancourt-Riera , Re Betancourt Riera , and R. Riera , "Electron Raman scattering in semiconductor step-quantum well," *Physica B*, vol. 477, pp. 87-93, Noviembre 2015.
- [86] Ri. Betancourt-Riera, R. Riera, R. Rosas, and J. M. Nieto, "Electron Raman scattering in asymmetrical multiple quantum wells system: Fröhlich interaction," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 40, pp. 785-794, Febrero 2008.
- [87] M. Munguía-Rodríguez, Ri. Betancourt-Riera, Re. Betancourt-Riera, R. Riera, and J.M. Nieto Jalil, "Electron states and electron Raman scattering in semiconductor double cylindrical quantum well wire," *Chin. Phys. B* , vol. 25, no. 11, septiembre 2016.
- [88] Ri. Betancourt-Riera, Re. Betancourt-Riera, and M. Munguía-Rodríguez, "Electron states and electron Raman scattering in a semiconductor step-quantum well wire," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 515, pp. 34-42, Junio 2017.

