



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"Estudio de propiedades electrónicas y ópticas
de puntos cuánticos autoensamblados"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE
MATERIALES)

PRESENTA:
M.C. GABRIEL LINARES GARCÍA

ASESORA:
DRA. LILIA MEZA MONTES

NOVIEMBRE 2016

©2016 - Gabriel Linares García

Derechos Reservados

Agradecimientos

Quiero agradecer a la Dra. Lilia Meza Montes por su apoyo y correcciones aportadas a lo largo de la realización de esta tesis, y de igual forma al Dr. Eric Stinaff de la Universidad de Ohio (EE.UU.) por su apoyo y colaboración.

A mis sinodales, los doctores Jesús Arriaga Rodríguez, Ana Lilia González Ronquillo, J. Miguel Gracia y Jiménez y Francisco Mireles Higuera el por las correcciones y observaciones aportadas para el mejoramiento de este trabajo de tesis.

También quiero agradecer al Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por la formación que me ha otorgado a lo largo de todos mis estudios profesionales.

A la Universidad de Ohio por toda las facilidades otorgadas para la realización de una estancia de investigación por el lapso de un año, durante la cual se realizaron varios experimentos, parte fundamental de este trabajo. Y a la Universidad de Arkansas por la muestras proporcionadas, particularmente al Dr. Morgan Ware.

Este trabajo fue apoyado además por proyectos CONACyT y ViEP-BUAP.

Finalmente, pero no menos importante, a mi familia, especialmente a mi hermano por el apoyo otorgado, así como a mis amigos por su valioso tiempo compartido y comentarios para el mejoramiento de esta tesis.

Dedicado a ...

Mis padres, especialmente a mi mamá, por impulsarme hasta el último momento a superarme y enseñarme a vivir plenamente.

Estudio de propiedades electrónicas y ópticas de puntos cuánticos autoensamblados

Resumen

Se presenta un estudio de las propiedades electrónicas y ópticas de puntos cuánticos autoensamblados de forma piramidal y de anillo, para sistemas InAs/GaAs o GaN/AlN. Las propiedades electrónicas de puntos cuánticos fueron determinadas resolviendo la ecuación de Schrödinger, en el marco de la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de múltiples bandas incluyendo efectos físicos como campo de deformación, piezoeléctrico y eléctrico externo, además de gradiente de concentración, según el sistema estudiado. El sistema de ecuaciones parciales fue resuelto numéricamente usando elementos finitos. Las funciones de onda numéricas fueron utilizadas para el estudio de propiedades ópticas usando la regla de oro de Fermi, con la finalidad de obtener un espectro de fotoluminiscencia teórico. En particular, se hace la comparación con espectros experimentales de anillos cuánticos de InAs/GaAs que fueron obtenidos mediante microfotoluminiscencia. Así mismo se realizan cálculos del tiempo de vida media de excitones neutros, considerando interacciones entre electrones y huecos mediante las integrales directa y de intercambio-correlación de Coulomb. Se observa que los campos de deformación y piezoeléctrico modifican fuertemente los niveles de energía de los portadores y que, en menor medida, son afectados por el gradiente de indio y el campo eléctrico, éstos tienen efecto predominante sobre la distribución de los portadores de carga y las probabilidades de transición. Se estudia el efecto del tamaño, capa de mojado y campo eléctrico externo en el espectro teórico de fotoluminiscencia en puntos cuánticos piramidales, obteniendo resultados similares con resultados reportados, tanto teórica como experimentalmente. Los resultados experimentales y teóricos de espectros de fotoluminiscencia y tiempo de vida media de excitones en anillos cuánticos de InAs/GaAs presentan buena concordancia.

Study of electronic and optical properties of self-assembled quantum dots

Abstract

Theoretical and experimental studies of the electronic and optical properties of self-assembled quantum dots, in pyramidal and ring shapes composed of InAs/GaAs or GaN/AlN are presented. The electronic properties were determined solving the Schrödinger equation, within the framework of multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory. Physical effects such as strain and piezoelectric fields, concentration gradient and external electric field, were included in the model, and solution was obtained by finite elements. Numerical wave functions were used to study the optical properties using Fermi's Golden Rule, in order to obtain theoretical photoluminescence spectra. In particular, experimental spectra of InAs/GaAs quantum rings were determined by microphotoluminescence and compared with theoretical results. Likewise, calculations of neutral-exciton lifetimes were done, considering interactions between electron and hole, such as Coulomb direct and exchange correlation. It is noted that deformation and piezoelectric fields strongly modify the energy levels of carriers, which to a lesser extent are affected by the indium gradient and electric field. The latter ones have predominant effect on the distribution of carriers and their transition probabilities. Effects of size, wetting layer and external electric field in the theoretical photoluminescence spectrum of pyramidal quantum dots are also studied, good agreement is found with reported, both theoretical and experimentally results. As for photoluminescence spectra and exciton lifetime of InAs/GaAs quantum rings, good concordance is obtained.

Publicaciones

- Gabriel Linares-García, Lilia Meza-Montes, Eric Stinaff, S. M. Alsolamy, M. E. Ware, Y. I. Mazur, Z. M. Wang, J. Lee y G. J. Salamo, “Optical properties of a quantum dot-ring system grown using droplet epitaxy”, *Nano Research Letter*, **11**, 309, (2016).

Participación en eventos

- *Study of optical and electronic properties of self assembled InAs/GaAs quantum rings*, Gabriel Linares García, Samar Alsolamy, Morgan Ware, Yuriy Mazur, Zhiming Wang, Jihoon Lee, Greg Salamo, Eric Stinaff, Lilia Meza Montes, American Physics Society March Meeting, Baltimore EEUU, 18 al 22 de Marzo de 2013, presentación oral.
- *Study of optical and electronic properties of self assembled InAs/GaAs quantum rings*, Gabriel Linares García, Samar Alsolamy, Morgan Ware, Yuriy Mazur, Zhiming Wang, Jihoon Lee, Greg Salamo, Eric Stinaff, Lilia Meza Montes, Canadian-American-Mexican (CAM) Graduate Student Physics Conference, Waterloo Canada, 15 al 18 de agosto de 2013, presentación oral.
- *Estudio de propiedades electrónicas y ópticas de puntos cuánticos autoensamblados de forma piramidal*, Gabriel Linares García, Samar Alsolamy, Morgan Ware, Yuriy Mazur, Zhiming Wang, Jihoon Lee, Greg Salamo, Eric Stinaff, Lilia Meza Montes, LVI Congreso Nacional de Física, San Luis Potosí México, 28 de Octubre al 1 de Noviembre de 2013, presentación oral.
- *Study of optical properties of InAs/GaAs quantum rings in the framework of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory*, Gabriel Linares García, Samar Alsolamy, Morgan Ware, Yuriy Mazur, Zhiming Wang, Jihoon Lee, Greg Salamo, Eric Stinaff, Lilia Meza Montes, International Conference in Physics of Semiconductors (ICPS), Austin Texas, 10 al 15 de agosto de 2014, poster.
- *Lifetime calculations in self-assembled quantum dots in the framework of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory*, Gabriel Linares García, Samar Alsolamy, Morgan Ware, Yuriy Mazur, Zhiming Wang, Jihoon Lee, Greg Salamo, Eric Stinaff, Lilia Meza Montes, 8th. Photodynamics, Oaxaca México, 27 al 31 de Octubre de 2014, poster.

Índice general

1. Conceptos generales	1
1.1. La nanotecnología	1
1.1.1. De tres a cero dimensiones	1
1.2. Materiales que conforman los Puntos Cuánticos	3
1.2.1. Red recíproca	4
1.2.2. Diagrama de bandas	4
1.3. Métodos de crecimiento	6
1.3.1. Modo Stransky-Krastanov	8
1.3.2. Crecimiento por goteo	9
1.3.3. Autoensamblaje y distribución	11
1.4. Confinamiento cuántico	12
1.4.1. Heterouniones	12
1.4.2. Estados confinados	12
2. Tensor de deformación	15
2.1. Campo de deformación	15
2.1.1. Ley de Hooke para cristales	16
2.1.2. Notación matricial de los coeficientes de elasticidad	17
2.2. Modelo general de la deformación en PC	18
2.2.1. Modelo del tensor de deformación en PCA en forma piramidal	22
2.3. La deformación en el hamiltoniano	24
3. Estados Electrónicos (Teoría)	27
3.1. Ecuación de Schrödinger	27
3.1.1. Teorema de Bloch	28
3.2. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de una banda	28
3.3. Modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de múltiples bandas	30
3.3.1. Semiconductores tipo blenda de zinc	32
3.3.2. Semiconductores tipo wurtzita	36
3.3.3. Hamiltoniano de 4 bandas para InAs/GaAs	44
3.4. Esquema general de la solución numérica	45

4. Fotoluminiscencia	47
4.1. Interacción de la luz con la materia	47
4.1.1. Emisión y absorción de fotones por átomos	48
4.1.2. Cuantización de la luz	49
4.2. Excitón de Wannier	50
4.3. Fuerza del oscilador y tiempo de vida media	53
4.4. Regla de oro de Fermi	54
4.5. Arreglos experimentales	55
4.5.1. Arreglo experimental de microfotoluminiscencia	56
4.5.2. Arreglo de microfotoluminiscencia variando ángulo de incidencia	59
4.5.3. Arreglo de medición de tiempo de vida media de excitones neutros	60
5. Resultados	63
5.1. Aspectos generales del cálculo	63
5.2. PC de InAs/GaAs	64
5.3. PC de GaN/AlN	74
5.4. Anillos cuánticos de InAs/GaAs	82
5.5. Resultados experimentales	87
5.5.1. Microfotoluminiscencia de anillos cuánticos de InAs/GaAs	87
5.5.2. Incidencia oblicua y normal	89
5.5.3. Variación con la potencia	91
5.5.4. Cambiando ángulo de luz polarizada	93
5.5.5. Tiempo de vida media de excitones neutros	93
5.6. Comparación teoría y experimento	95
6. Conclusiones y perspectivas	101
A. Deformación	105
B. Función característica	109
C. Elementos finitos	115
D. Cálculo de la energía de una OEM	117
Bibliografía	119

Capítulo 1

Conceptos generales

En este primer capítulo estableceremos las bases teóricas para la descripción de las nanoestructuras estudiadas, sus principales características, posibles aplicaciones así como algunas técnicas de crecimiento. También se describirán las propiedades fundamentales de los materiales que componen las nanoestructuras, finalizando con el estudio de heterouniones creadas en los sistemas y valores de algunos parámetros que serán utilizados en el cálculo de sus propiedades electrónicas y ópticas como se verá posteriormente.

1.1. La nanotecnología

En la actualidad la tendencia a la miniaturización de algunos dispositivos, sobre todo en el área de la física y electrónica, ha conllevado al estudio, análisis y aplicación de la nanotecnología, la cual está descrita por la mecánica cuántica. Aunque la mecánica cuántica empezó con la descripción del movimiento de electrones en el átomo, se ha visto que también debe ser aplicada a escala nanométrica, y es precisamente en esta escala en donde recientemente se ha tenido un mayor auge en la investigación de las propiedades de los materiales, pues como se ha descubierto, cada vez que se reduce una de las tres dimensiones en un material, se presentan nuevos fenómenos con un gran potencial de aplicaciones, una vez que se hayan comprendido sus causas para poder así controlar tales efectos.

1.1.1. De tres a cero dimensiones

Dependiendo del número de dimensiones macroscópicas, los sistemas reciben diferentes denominaciones. Un sistema cuyas tres dimensiones son macroscópicas se denomina material

en bulto (3D) y la energía por ejemplo, es una magnitud continua. Un material con solo dos, se denomina pozo cuántico (2D) mientras que si únicamente posee una dimensión macroscópica, recibe el nombre de hilo cuántico (1D); la energía de estos sistemas consta de uno o dos términos, respectivamente, que están cuantizados. Finalmente un punto cuántico (0D) está conformado por un material cuyas tres dimensiones no son macroscópicas por lo que presenta estados cuantizados de energía y su tamaño es menor a una centena de nanómetros

Como se mencionó anteriormente, la disminución de alguna de las tres direcciones espaciales en los materiales modifica sustancialmente sus propiedades físicas; por ejemplo, al ser expuesto a una perturbación, ya sea un fotón, campo eléctrico, campo magnético, etc., la respuesta de un material en bulto (3D) será muy distinta a la respuesta de este mismo material en 0D. Estos cambios se deben principalmente a dos aspectos: el primero está relacionado con los valores de energía que son accesibles al sistema, y el segundo con la densidad de estados del sistema antes de ser perturbado, como lo veremos más adelante. La Figura 1.1 muestra la densidad de estados para materiales de distinta dimensión [1]. Como se observa, al ir reduciendo las dimensiones del sistema la densidad de estados va cambiando, desde un continuo de estados para el sistema en bulto o 3D hasta niveles discretos de energía para un punto cuántico.

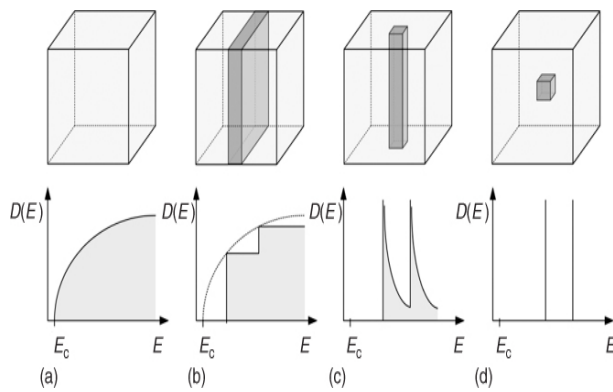


Figura 1.1: Densidad de estados en (a) 3D, (b) 2D, (c) 1D y (d) 0D [2].

Teniendo en cuenta lo anterior, los puntos cuánticos (PC) son sistemas nanoestructurados cero dimensionales cuya principal característica es el confinamiento de los portadores [3, 4], es decir, tanto electrones como huecos pueden poseer solo ciertos niveles de energía, característica por la cual se les da el sobrenombre de “átomos artificiales”. Un

análisis completo de sus propiedades puede encontrarse en [5].

Aunque apenas en el siglo pasado se ha empezado a entender estos sistemas, su aplicación se remonta a la edad de los griegos, quienes añadían distintos materiales en los vidrios para dar distintos colores, los cuales son un ejemplo de PC coloidales, es decir, aquellos que se encuentran suspendidos en un coloide que es solidificado posteriormente (en el caso del vidrio). Otro tipo de PC, son aquellos que se encuentra embebidos en un material distinto, denominado material matriz (como los estudiados en este trabajo). Existe otro tipo de PC formados por confinamiento espacial y/o electrostático en gases bidimensionales de electrones, los denominados 2DEG (*two-dimensional electron gas*) [6]. En principio los PC pueden ser de cualquier material, sin embargo, entre los más utilizados para su elaboración están los materiales semiconductores, ya que presentan posibles aplicaciones en sistemas electrónicos y ópticos, sobre todo en la miniaturización de dispositivos y en el uso del espín del electrón (espintrónica). Los PC coloidales generalmente se emplean en medicina [7].

1.2. Materiales que conforman los Puntos Cuánticos

Hay cuatro materiales que se utilizan frecuentemente en el crecimiento de PCs, debido a que presentan mayores posibilidades de aplicaciones y son relativamente fácil de crecer, y por ello son los más estudiados. El arseniuro de indio (InAs) se utiliza para crecer PCs embebidos en una matriz de arseniuro de galio (GaAs). El otro sistema es de puntos de nitruro de galio (GaN) embebidos en nitruro de aluminio (AlN) (de ahora en adelante denotados simplemente como InAs/GaAs y GaN/AlN, respectivamente). Ambos sistemas presentan características similares: son semiconductores de banda directa [8], y poseen estructura cristalina blenda de zinc y wurtzita, respectivamente.

A continuación se describirán brevemente algunas de sus principales características y ventajas que presentan estos materiales en la elaboración de los PCs. Ambos materiales que conforman al sistema InAs/GaAs, poseen una estructura cristalina blenda de zinc como se observa en la Figura 1.2a, la cual tiene una geometría cúbica, con constantes de red de 6.058 Å y 5.653 Å, respectivamente [9]. Mientras que los compuestos GaN y AlN presentan una estructura wurtzita con simetría hexagonal, que presenta dos ejes principales c y a , como se observa en la Figura 1.2b. Esta disposición geométrica confiere propiedades particulares, como la piezoelectricidad (efecto descrito más adelante). Las constantes de red para el GaN son $a = 3.18$ Å y $c = 5.18$ Å, mientras que para AlN son $a = 3.11$ Å y $c = 4.98$ Å.

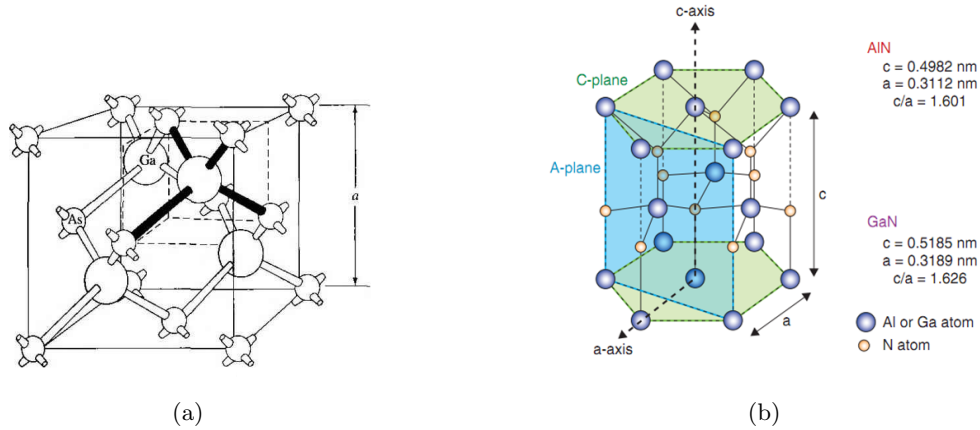


Figura 1.2: (a) Estructura blenda de zinc [10], (b) estructura wurtzita [11].

1.2.1. Red recíproca

Como se mencionó en la sección previa, los diferentes materiales presentan una estructura cristalina particular, que depende de la fuerza de los enlaces, así como de los radios atómicos. Asociada a cada estructura existe una red recíproca, a partir de la cual se define la denominada estructura de bandas. La red recíproca es el conjunto de todos los vectores de onda \mathbf{k} que conducen a ondas planas con la periodicidad de una red de Bravais (o estructura cristalina) dada [12, 13]. La red recíproca nos da información muy valiosa, pues nos indica hacia qué dirección de la red real los electrones pueden moverse con menor energía y que corresponden a puntos de más alta simetría en la primera zona de Brillouin (ZB). En las Figuras 1.3a y 1.3b se muestra la primera ZB de las estructuras blenda de zinc y wurzita, respectivamente, materiales que conforman a los PC, donde los puntos Γ , Δ , Σ , etc, tienen su correspondencia con distintas direcciones en la red real. El punto de más alta simetría es Γ , donde $\mathbf{k} = 0$, es un punto importante pues la diferencia en energía entre la banda de conducción y de valencia con respecto a \mathbf{k} en este punto, nos indica si un material es de banda directa o indirecta.

1.2.2. Diagrama de bandas

A lo largo de las diferentes direcciones en la primera zona de Brillouin, se puede obtener un diagrama de bandas, el cual tiene su origen en el teorema de Bloch (el cual se describe un poco más en el Capítulo 3) [14], que permite describir la función de onda y energía de las partículas en función del vector de onda \mathbf{k} , es decir, la periodicidad del potencial experimen-

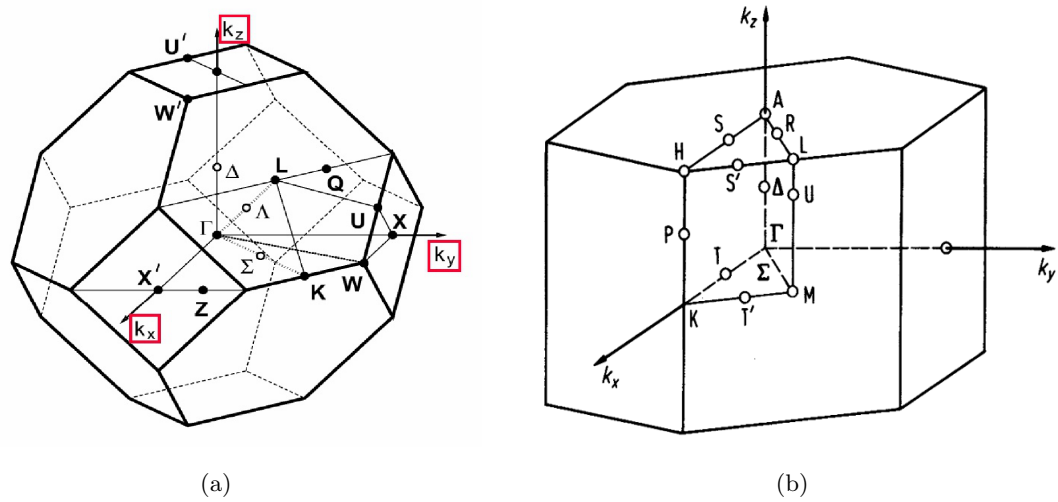


Figura 1.3: Primera zona de Brillouin para las estructuras (a) blenda de zinc [15], (b) wurtzita [16].

tado por la partícula depende de la dirección en la cual se propaga (más apropiadamente el paquete de ondas de la partícula). Así se puede obtener el diagrama de bandas [17], el cual depende de las diferentes direcciones. Las Figuras 1.4 y 1.5 muestran los diagramas de bandas cerca de $E = E(\mathbf{k})$ para InAs, GaAs y GaN, AlN, respectivamente, los cuales surgen al graficar la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ a lo largo de las direcciones de alta simetría en la primera zona de Brillouin. Cabe destacar que estos materiales son denominados materiales de banda directa, esto es debido a que el máximo en la banda de valencia (generalmente se toma este punto con energía igual a cero) coincide con el mínimo de la banda de conducción en el mismo valor de \mathbf{k} , es decir, en el punto Γ . Es importante notar que en este punto existen dos o más bandas cercanas en el máximo de la banda de valencia, estas bandas son denotadas como banda de huecos pesados hh , banda de huecos ligeros lh , siendo la única diferencia entre los huecos ligeros y pesados sus masas efectivas y momento angular total, y por último la banda de huecos separados, con una diferencia de energía Δ . Aunque el diagrama presenta múltiples bandas, en la práctica generalmente se consideran una banda de conducción y tres bandas de valencia, ya que éstas describen la mayoría de las propiedades de los materiales.

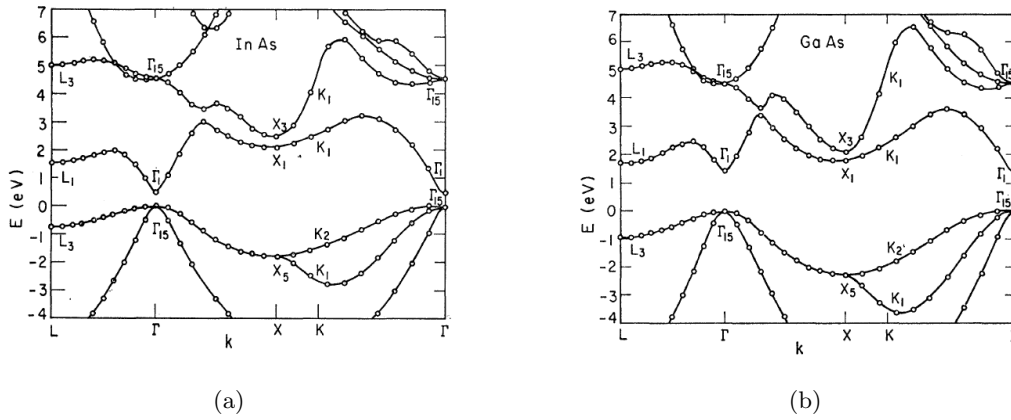


Figura 1.4: Diagrama de bandas de (a) InAs, (b) GaAs obtenidas de [18].

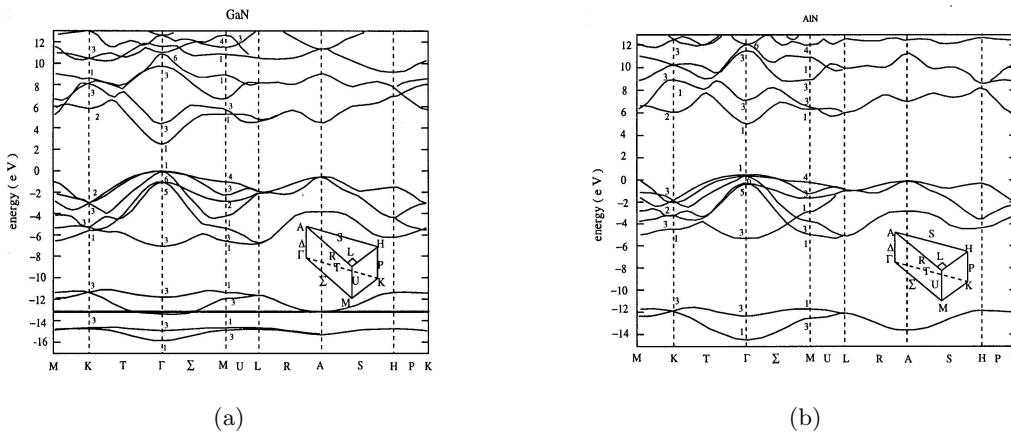


Figura 1.5: Diagrama de bandas de (a) GaN, (b) AlN obtenidas de [19].

1.3. Métodos de crecimiento

Descritas algunas de las principales características de los materiales que conforman a los puntos cuánticos, ahora se estudiarán sus procesos de formación.

Existen muchas técnicas de crecimiento, sin embargo, todas se pueden agrupar en dos técnicas principales: por medios físicos o químicos. La elección de uno u otro depende de la aplicación que se desee para los PC, por ejemplo, para obtener PC coloidales es mejor un método químico, en contraparte, si se requieren PC sobre un sustrato es necesario utilizar métodos físicos. Dentro de estos últimos existen varias técnicas como lo son: depósito en fase

vapor (CVD, por sus siglas en inglés [20]), crecimiento epitaxial por goteo [21,22] y epitaxia de haces moleculares (MBE, por sus siglas en inglés) [23], esta última es la más empleada, ya que se pueden crecer PC con una mayor uniformidad en tamaño y espaciamiento, pero tiene la desventaja de ser muy sofisticada y costosa. Los métodos de CVD, MBE y epitaxia por gota son ejemplo de heteroepitaxia, la base de crecimiento de las nanoestructuras.

En heteroepitaxia existen tres modos de crecimiento, que dependen del balance detallado de energías entre la superficie del material depositado, el material a depositar, y la energía de deformación. Para materiales con constante de red y estructura cristalina muy similares los modos de crecimiento más usuales son el Frank-Van der-Merve (FVdM) o Volmer Weber (VW), el crecimiento por alguno de estos modos depende de si la suma de la energía de superficie (α_2) y de la energía de interfase (β_{12}) es menor o mayor que la energía del sustrato (α_1). El método FVdM es observado en sistemas con $\alpha_2 + \beta_{12} < \alpha_1$, mientras que el modo VW ocurre cuando $\alpha_2 + \beta_{12} > \alpha_1$. El modo de crecimiento Stransky-Krastanov [24,25], es aquel en que se crece una capa altamente deformada sobre un sustrato hasta un espesor crítico, en el que la energía elástica es minimizada con la creación “espontánea” de nanoislas [26], conocida como auto-ensamblaje; sin embargo, no todo el material es absorbido por estas nanoislas y una capa delgada conocida como capa de mojado permanece sobre el sustrato, como se observa en la Figura 1.6. Posterior al crecimiento de las nanoislas es depositado un material sobre éstas, generalmente el mismo del sustrato, para garantizar el confinamiento de los portadores. Sin embargo, en el método de crecimiento por goteo, generalmente no se cubren las nanoislas. Los modos de crecimiento SK, VW, así como el método de epitaxia por gota son algunos de los mecanismos para obtener los denominados puntos cuánticos autoensamblados (PCA) [26–28].

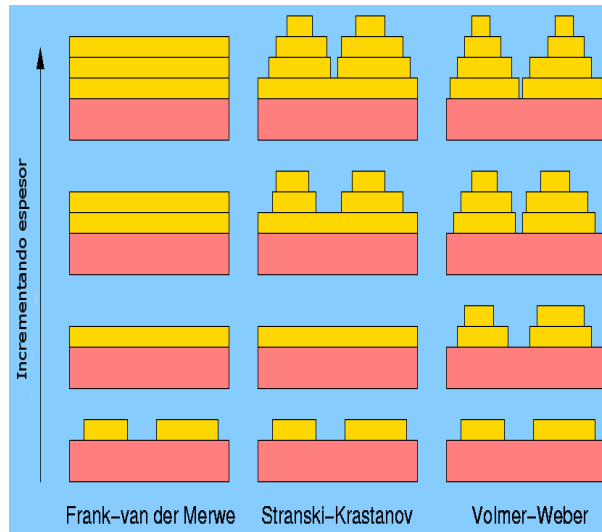


Figura 1.6: Modos de crecimiento por heteroepitaxia [29].

Particularmente este trabajo se enfoca en PCA de materiales semiconductores crecidos por MBE con el modo Stransky-Krastanov y a través de epitaxia de gota, en particular PCA de InAs/GaAs [30] y GaN/AlN [31,32], pues se ha observado que estos materiales favorecen el crecimiento de los puntos cuánticos en una forma más homogénea, debido a la pequeña diferencia en sus constantes de red, además de presentar una energía de confinamiento adecuada para posibles aplicaciones. En las siguientes secciones se dará una idea general de los métodos de crecimiento empleados para la elaboración de las nanoestructuras estudiadas aquí.

1.3.1. Modo Stransky-Krastanov

Este modo de crecimiento epitaxial, se puede obtener por medio de varias técnicas como se mencionó previamente, sin embargo, debido a que los PCA con la geometría y dimensiones estudiados aquí son crecidos generalmente por epitaxia de haces moleculares, a continuación se describirá ésta brevemente. La técnica de MBE consiste en depositar sobre un sustrato una capa de átomos en fase gaseosa, generalmente del material matriz [33]. Como se muestra en la Figura 1.7, un haz de átomos es depositado hasta un espesor aproximado de $10 \mu\text{m}$ para formar la llamada capa de amortiguamiento, posteriormente se aplica una segunda capa del material matriz de aproximadamente 10 nm con mejor cristalinidad, e

inmediatamente se deposita el material que conformará al punto cuántico. Debido a que son materiales con igual estructura cristalina, pero diferente constante de red (precisamente las condiciones para el modo Stransky-Krastanov), se provoca un acumulamiento de energía elástica y, para disminuir ésta, el material crea cúmulos. Este proceso de disminución de energía y la creación “espontánea” de los PC es lo que les da el nombre de puntos cuánticos autoensamblados. Si bien es cierto que el proceso de autoensamblaje está determinado por las energías de superficie, de interfase y superficie, el proceso exacto por el cual se crean los PC aún no es del todo claro. Es importante aclarar que la creación de los cúmulos es favorecida por las altas temperaturas de crecimiento, pues como se dijo, los materiales se depositan en fase gaseosa. También es importante recalcar que no todo el material depositado es agregado a las nanoislas, ya que una parte constituye la capa de mojado [34], la cual es importante considerar pues se trata de una nanoestructura 2D adicional que modifica ligeramente algunas propiedades de los PCA.

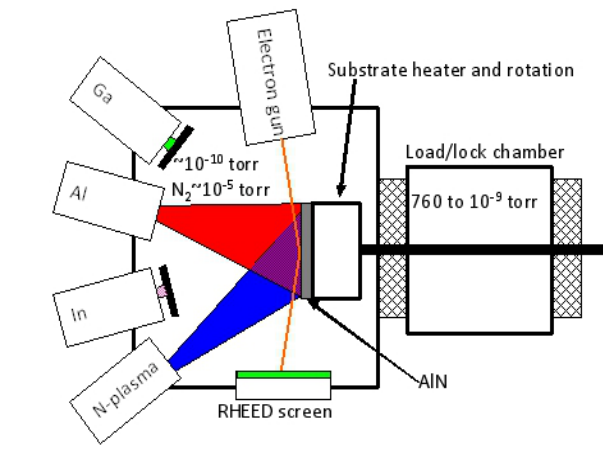


Figura 1.7: Diagrama esquemático del sistema de crecimiento de PCs por MBE [35].

1.3.2. Crecimiento por goteo

Este tipo de crecimiento se basa en el sistema MBE, pero a diferencia de éste, el material es depositado en forma líquida, sin embargo, tiene la desventaja de originar PC distribuidos en manera menos uniforme, en comparación con el método de MBE. Además se llegan a obtener PCA del orden de cientos de nanómetros. Este sistema consiste en depositar pequeñas gotas de indio sobre un sustrato de GaAs [36], el cual generalmente es crecido por

el método de MBE (previamente), la muestra se encuentra en una atmósfera de arsénico que reacciona químicamente con la gota de indio para obtener las nanoislas de InAs, como se observa en la Figura 1.8. En esta tesis se presentará el estudio experimental y teórico de muestras de PCA crecidas por epitaxia por gota, las cuales fueron obtenidas por el grupo conformado por M. E. Ware, Y. I. Mazur, Z. Wang, J. Lee y G. J. Salamo del Instituto para la Nanociencia e Ingeniería de la Universidad de Arkansas, Fayetteville, Arkansas.

Las muestras fueron obtenidas con las siguientes condiciones: Después de que las gotas de indio fueron depositadas y reaccionaron con el arsénico de la “atmósfera”, para mejorar la cristalización de los PCA se hace un recocido de la muestra a 350°C por 12 s con una presión de $\sim 0.8 \times 10^{-6}$ Torr, subiéndola gradualmente hasta un valor de $\sim 7.0 \times 10^{-6}$ Torr y finalmente terminando con otro recocido por 120 s [37, 38].

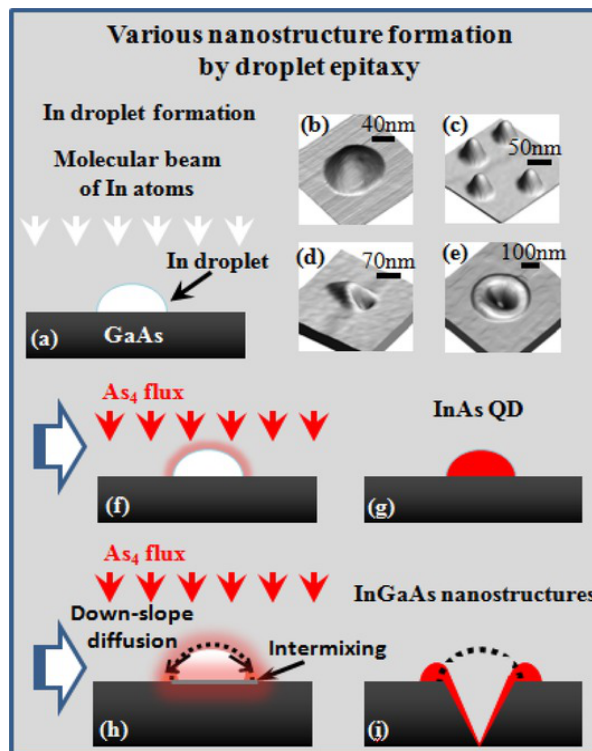


Figura 1.8: Esquema de la formación de PC por el sistema de epitaxia por goteo [39].

La microgota de indio depositada sobre el sustrato de GaAs empieza a reaccionar creando dos cúmulos de material en los extremos y entre ellos un hueco, del cual es “extraído” parte del material que conforma a los dos puntos, por lo que con este tipo de técnica

se obtienen puntos cuánticos en los que se presenta una difusión de galio, pues al ser de radio atómico más pequeño favorece la difusión intersticial, lo que genera un gradiente de concentración de indio. Se ha reportado que galio e indio poseen longitudes de difusión grandes [40, 41], a aproximadamente 550° C es del orden de varios micrómetros.

1.3.3. Autoensamblaje y distribución

Los métodos de crecimiento mencionados anteriormente así como las diferentes condiciones de crecimiento [42, 43], la temperatura del sustrato, velocidad de depósito, presión de los gases y el grado cristalino de los materiales en el PCA, entre otros factores, determinan la geometría, dimensiones y distribución espacial; sin embargo, el proceso de auto-ensamblaje [44, 45] que da origen a estos sistemas sigue en debate. Como se mencionó al inicio de la sección 1.3, el modo más usado para crecer puntos cuánticos es el modo Stranski-Krastanov en el cual, para una sola nanoisla la estabilidad de la misma está determinada por la competencia entre la energía libre de la superficie y la relajación elástica de la deformación. Daruka y Barabasi [46] calcularon cómo una cantidad de material se distribuye por sí mismo en un sustrato con diferente constante de red, supusieron que los átomos pueden ocupar tres “fases”: la capa de mojado, nanoislas “pequeñas” y grandes nanoislas “maduras”. La energía libre por átomo $E_p(x)$ de las nanoislas pequeñas depende del tamaño x de la nanoisla, correspondiendo $x \rightarrow \infty$ al tamaño de las nanoislas maduras. El equilibrio entre estas tres regiones es obtenido al minimizar la energía libre por átomo del sistema completo (un estudio más detallado de la física de formación se encuentra en [47, 48]).

El proceso de formación establecido por las diferencias entre los materiales que conforman a los PC así como las condiciones de crecimiento, además de determinar la geometría y dimensiones de los PC, también establecen la forma de la distribución tanto en tamaño como en espacio. Específicamente los PC crecidos con el modo Stransky-Krastanov presentan una mejor homogeneidad espacial, así como en promedio un menor tamaño en los PC [49] comparado, por ejemplo, con PC crecidos con epitaxia por gota [50]. Esto es importante tenerlo en consideración, por que a partir de esta distribución espacial se pueden establecer algunos parámetros teóricos, como lo es la periodicidad del sistema utilizada para el cálculo de sus propiedades.

1.4. Confinamiento cuántico

1.4.1. Heterouniones

Teniendo la descripción general de un PC así como su proceso de formación, ahora se pasará a la descripción y análisis de la característica principal de los mismos, el confinamiento cuántico. Es preciso conocer adecuadamente los niveles de energía de los portadores dentro de los puntos cuánticos, para ello se debe de analizar cómo estos niveles se modifican al estar en contacto dos materiales semiconductores [33, 51–53], pues ahora comparten un mismo sistema de referencia respecto a la energía, esto es, los materiales al estar en contacto generan una heterounión, con un nivel de Fermi en común.

Como se muestra en la Figura 1.9 existen tres tipos de heterouniones semiconductoras dependiendo de los materiales, su ancho de banda prohibida y de su nivel de Fermi. La Figura 1.9(a) muestra el alineamiento de bandas más habitual en semiconductores, que se presenta en los sistemas InAs/GaAs y GaN/AlN. El corrimiento o desviación de los máximos en la banda de valencia dependerá del nivel de Fermi de los materiales involucrados. Así, por ejemplo, para InAs/GaAs el corrimiento de la banda de valencia de InAs con respecto al máximo de la banda de valencia del GaAs es $\Delta E_v = 0.17 eV$ [51] (en algunos se reporta $0.253 eV$, ver Grudmann [54]), mientras que para el GaN/AlN, el corrimiento es $\Delta E_v = 0.5 eV$ [19]. Sin embargo, el valor de ΔE_v varía ligeramente según el método de medición y/o cálculo. Además, estos valores son reportados para materiales en bulto, pero en puntos cuánticos este alineamiento es modificado principalmente por el potencial de deformación que surge al momento de crecer los mismos. Sin embargo, por la dificultad de medir el cambio de esta cantidad en nanoestructuras, los valores de ΔE_v antes mencionados fueron utilizados en éste y otros trabajos para el cálculo de sus propiedades.

1.4.2. Estados confinados

Los materiales que conforman a los PCA determinan la energía necesaria para que los electrones realicen la transición de la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un hueco en la banda de valencia, este par electrón-hueco es denominado excitón [56] como se muestra en la Figura 1.9d, el cual se definirá más apropiadamente en el capítulo 4. Los PCA se pueden modelar como cajas de potencial, donde los portadores se confinan en las 3 direcciones espaciales, por lo que los niveles de energía de los portadores están cuantizados.

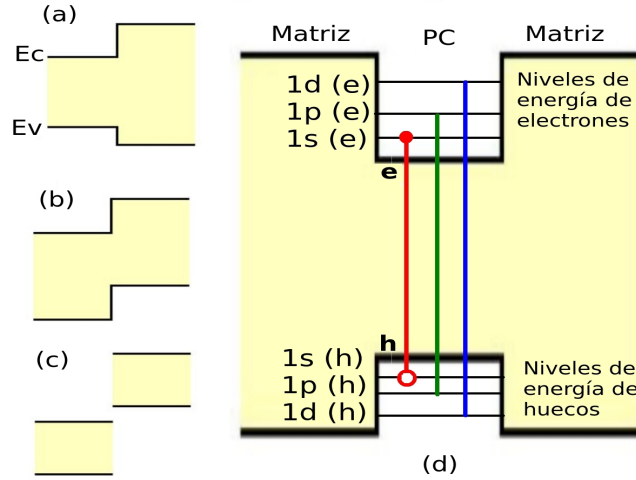


Figura 1.9: Tipo de alineaciones de bandas de energía entre semiconductores en bulto (a) horcajadas o tipo I, (b) escalonada o tipo II, (c) de ruptura o tipo III, (d) diagrama de heterouniones en un PC [55].

Dependiendo del tamaño y de la energía de enlace entre el par electrón-hueco [57], los PCA presenta tres regímenes, los cuales surgen de comparar el radio efectivo R del PCA con el radio de Bohr de electrones (a_B^e) y huecos (a_B^h) en el bulto. La relación $a_B^e > a_B^h$: $R > a_B^e$, define el régimen de confinamiento débil y conduce al movimiento del centro de masa de excitones, mientras la energía de enlace del excitón B_x es principalmente debida a la interacción de Coulomb. Por otro lado $a_B^e \geq R \geq a_B^h$ establece el régimen de confinamiento intermedio, en el cual la energía del electrón es cuantizada, pero la del hueco no, en este caso, el confinamiento cuántico y la interacción de Coulomb tienen influencia comparable en B_x . Finalmente, $a_B^h > R$ determina el confinamiento fuerte donde la energía de ambos portadores de carga está cuantizada y B_x es fuertemente incrementada por el confinamiento estructural [58]. Recordemos que el radio de Bohr está dado por la ecuación

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.052919 \text{ nm}, \quad (1.1)$$

mientras que el radio efectivo y masa efectiva del excitón están dados por

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}, \quad (1.2)$$

parámetros que serán utilizados posteriormente. La Tabla 1.1 muestra los radios efectivos de los materiales en bulto, al ser comparados con los radios promedios de las nanoestructuras

permiten determinar el tipo de régimen de confinamiento. En este caso la nanoestructura con mayor tamaño es el sistema de anillos cuánticos con dos puntos cuánticos (de InAs/GaAs), cada uno de éstos con un tamaño máximo de 50 nm de radio en el plano xy , y altura máxima de 20 nm, por lo que al comparar estas dimensiones con el radio efectivo del excitón, se determina que se encuentra en confinamiento fuerte.

Para el sistema GaN/AlN, la Tabla 1.1 muestra el radio máximo del excitón es de 3.05 nm. Las estructuras estudiadas aquí tienen una altura máxima de 4.1 nm, sin embargo, las dimensiones de confinamiento efectivo de los portadores son cercanas a 3.05 nm, por lo que también se puede considerar que se encuentran dentro del régimen de confinamiento fuerte.

Material	$a_B^{e,z}$ (nm)	$a_B^{e,xy}$ (nm)	$a_B^{hh,z}$ (nm)	$a_B^{hh,xy}$ (nm)	ϵ_r	a_B (nm)	Eg (eV)
InAs	34.97		23.58	22.98	15.2	57.95	0.41
GaAs	9.94		17.54	5.90	12.5	27.49	1.519
GaN	2.75 ^(a)	3.05 ^(a)			10.4 ^(b)		3.5
AlN	1.36 ^(a)	1.79 ^(a)			8.5 ^(b) \pm 0.2		6.3

Tabla 1.1: Parámetros utilizados en este trabajo, obtenidos de [54], excepto: (a) [59], (b) [19].

Capítulo 2

Tensor de deformación

En este capítulo se hará una breve descripción del campo de deformación, así como la descripción de la teoría para su cálculo en los diferentes sistemas y geometrías de los puntos cuánticos. La deformación en las redes cristalinas que componen a los puntos cuánticos es importante para determinar en forma precisa las energías de los portadores. Se describirá brevemente el cálculo necesario para obtener el campo de deformación con diferentes geometrías y se presenta un ejemplo de cómo incluirlo en el hamiltoniano de los portadores.

2.1. Campo de deformación

Como se mencionó en el primer capítulo, el proceso de auto-ensamblaje de puntos cuánticos es consecuencia de procesos de minimización de energía elástica, causada por la diferencia entre las constantes de red de los dos materiales. Es importante calcular el campo de deformación o simplemente deformación ya que, como se verá más adelante, ésta modifica significativamente los niveles de energía de los portadores en las estructuras cuánticas (como se ha reportado para pozos en [60] y en puntos cuánticos [61]).

La deformación en la nanoestructura es el resultado de la desviación con respecto a la posición de equilibrio de los átomos en el bulto, es decir, cada átomo se desplaza ligeramente de su posición de equilibrio en la red cristalina [33]. El conjunto de las pequeñas desviaciones definen la deformación (ver Apéndice A), las cuales pueden ocurrir hacia cualquier dirección, por lo que matemáticamente el campo de deformación es un tensor de orden 2.

Cabe recalcar que cada uno de los sistemas estudiados presenta una distribución

de deformación particular, esto debido en primera instancia a la estructura cristalina de los materiales empleados en su elaboración así como también a la geometría y dimensiones que los puntos cuánticos presentan, que están influenciadas a su vez por las condiciones de crecimiento.

2.1.1. Ley de Hooke para cristales

Con lo anteriormente dicho, se ha establecido que los PC presentan una estructura cristalina de corto alcance, ya que la diferencia entre los materiales que conforman a los PC impide obtener una estructura cristalina sin defectos. Sin embargo, se considera que los defectos en la red cristalina son pequeños, por lo que el estudio de la deformación en tales nanoestructuras, se basa en la ley de Hooke de cristales, con la cual se define la deformación axial (a lo largo de una línea de un sólido), que es la relación entre el tensor de deformación ε y el tensor de tensión (o esfuerzo) σ dada por

$$\varepsilon = s\sigma, \quad (2.1)$$

donde s es el coeficiente de deformación elástica. La ley de Hooke se puede escribir de forma diferente como

$$\sigma = c\varepsilon, \quad (2.2)$$

en la cual c es el coeficiente de rigidez elástica (o constante elástica).

En un cristal al que se le aplica una tensión arbitraria y homogénea, σ_{ij} es tal que la deformación uniforme en cada componente ε_{ij} está relacionada linealmente con todas las componentes de la tensión, por ejemplo:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} = & s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} + s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122} \\ & \sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para las otras 8 componentes ε_{ij} del tensor de orden 2 hay ecuaciones similares. Por lo tanto, la ley de Hooke en la forma general se puede escribir como:

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}. \quad (2.4)$$

La expresión (2.4) representa un conjunto de 9 ecuaciones, las cuales generalmente tienen 9 términos del lado derecho (similar a 2.3). Consecuentemente hay 81 términos s_{ijkl} en total;

inversamente, se puede expresar la tensión en función de la deformación como en la ecuación (2.2). Entonces la forma general es

$$\sigma_{kl} = c_{klmn}\varepsilon_{mn}, \tag{2.5}$$

donde c_{klmn} son los coeficientes de rigidez elástica en cada una de las direcciones del cristal x , y , y z , con sus combinaciones y permutaciones.

2.1.2. Notación matricial de los coeficientes de elasticidad

Los coeficientes de elasticidad s_{ijkl} y c_{klmn} de las ecuaciones (2.4) y (2.5) pueden ser escritos convenientemente por dos subíndices en lugar de cuatro como en la Tabla 2.1.

Símbolos de tensor	11	22	33	23 32	31 13	12 21
Símbolo correspondiente en la matriz	1	2	3	4	5	6

Tabla 2.1: Notación Matricial de los Tensores.

Además se introducen los factores de 2 y 4 como sigue

$$s_{ijkl} = s_{mn} \text{ cuando } m \text{ y } n \text{ son igual a } 1, 2 \text{ o } 3.$$

$$2s_{ijkl} = s_{mn} \text{ cuando solo } m \text{ o } n \text{ es igual a } 4, 5 \text{ o } 6.$$

$$4s_{ijkl} = s_{mn} \text{ cuando } m \text{ y } n \text{ son simultáneamente iguales a } 4, 5 \text{ o } 6.$$

Con la notación matricial establecida, la ecuación (2.3) se escribe como

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + s_{16}\sigma_6, \quad \text{o bien} \quad \varepsilon_1 = s_{1j}\sigma_j. \tag{2.6}$$

Consecuentemente las nueve ecuaciones de (2.4) pueden ser escritas brevemente

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6). \tag{2.7}$$

Por analogía, (2.5) toma la forma

$$\sigma_j = c_{jk}\varepsilon_k \quad (j, k = 1, 2, \dots, 6). \tag{2.8}$$

En notación matricial el número de coeficientes de deformación elástica y coeficiente de rigidez elástica es 36 y, como $s_{ij} = s_{ji}$ y $c_{ij} = c_{ji}$, el número de coeficientes independientes generalmente llega a ser 21.

Las matrices s_{ij} y c_{jk} son mutuamente inversas, es decir $s_{ij}c_{jk} = c_{ij}s_{jk} = \delta_{ik}$, donde δ_{ik} es la matriz unidad. Por ejemplo para un sistema cristalino cúbico se tiene:

$$\begin{aligned} s_{11} &= \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}, \\ s_{12} &= \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}, \\ s_{44} &= \frac{1}{c_{44}}. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Estos coeficientes pueden ser expresados a través de las constantes de Lamé λ y μ (no se muestra la equivalencia) donde

$$\lambda = c_{12}, \quad \mu = c_{44} = 1/s_{44}, \quad \lambda + 2\mu = c_{11}. \tag{2.10}$$

Las constantes de Lamé son constantes elásticas que caracterizan por completo el comportamiento elástico de un sólido isótropo para pequeñas deformaciones, μ es comúnmente referido como el módulo de cizalla y λ está relacionado con la razón de Poisson [63].

2.2. Modelo general de la deformación en PC

Con las ideas básicas establecidas, ahora se describirá la teoría para el cálculo del campo de deformación en los PC, el cual es causado principalmente por el acumulamiento de energía elástica debida a la diferencia entre las constantes de red del PC y la matriz, que se caracteriza por el desajuste de la red cristalina ε_0 dado por

$$\varepsilon_0 = \frac{a_M - a_{PC}}{a_{PC}}. \tag{2.11}$$

donde a_M y a_{PC} son las constantes de red del material de la matriz y del punto cuántico, respectivamente. En el sistema InAs/GaAs, este desajuste es del 6.7% mientras que en GaN/AlN es del 2.4%.

El material del PC tiene una constante de red mayor, comparada con el material que constituye a la matriz, lo que causa un efecto de compresión en el PC que tiende a desplazar a los átomos de la matriz fuera de sus posiciones de equilibrio. A partir de este campo de desplazamiento se pueden determinar los elementos del tensor de deformación mediante la ecuación (A.9).

En general, los métodos para determinar la deformación se clasifican en dos categorías: los modelos de elasticidad en el continuo y los modelos atomísticos [64]. En el primer caso, el cual se utilizó en este trabajo, se supone que la matriz y el PC forman un medio continuo, mientras que en los modelos atomísticos la energía elástica total es calculada usando potenciales que describen la contracción y flexión de los enlaces atómicos.

Los cálculos presentados están basados en el modelo desarrollado por Andreev *et al.* [59], aplicable a PC con alta simetría. Este método tiene su base en el modelo de la inclusión, además considera un arreglo periódico tridimensional de PC, permitiendo entonces expandir el tensor de deformación en una serie de Fourier y realizar el cálculo de manera relativamente simple en el espacio de Fourier para, posteriormente con la transformada inversa, obtener los valores de la deformación en el espacio real.

El modelo de inclusión [65] supone un corte imaginario de forma arbitraria denominado inclusión en una región del material matriz (Fig. 2.1 (a)), en nuestro caso la inclusión corresponde a la geometría del punto cuántico. Una vez que la inclusión se encuentra aislada se supone que ésta cambia de volumen, expandiéndose como se muestra en la Figura 2.1 (b) pues ya no tiene fuerzas externas que la mantengan en su forma original como cuando estaba contenida en la matriz. Para poder regresar la inclusión a su forma original y así determinar las fuerzas de deformación y esfuerzo (Fig. 2.1 (c)), se aplica una fuerza de tracción (T) sobre la superficie de la inclusión creando una compresión, de forma tal que la deformación aplicada a la inclusión es igual, pero en dirección opuesta a la deformación original experimentada por el material dentro de la matriz (Fig. 2.1 (d)).

A continuación se hará una descripción matemática breve del proceso general para encontrar la distribución de la deformación del PCA siguiendo el modelo desarrollado por Andreev *et al.* Con la finalidad de mantener un análisis sencillo, se considera el caso en el que el PC y la matriz tienen constantes elásticas iguales (pero distinta constante de red, ver Tabla 3.2 y 3.3). Si se consideran constantes elásticas diferentes, el cálculo resulta más complejo [59].

El vector de desplazamiento en una estructura conteniendo un solo PC puede ser expresado como la convolución del tensor de Green $G_{ln}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (en este caso corresponde a la solución de la ecuación parcial homogénea del desplazamiento debido a una fuerza puntual aplicada a lo largo de una dirección y normal a la superficie) y las fuerzas dF_n ejercidas

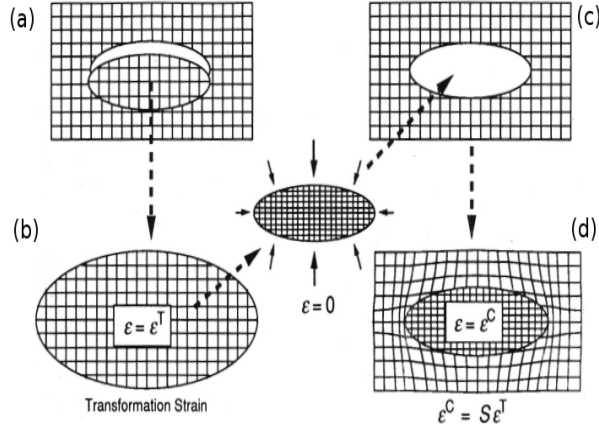


Figura 2.1: Método de Inclusión de Eshelby. (a) Selección de la inclusión, (b) expansión, (c) forma que debe tomar la inclusión, (d) inclusión bajo tracción y esfuerzo [66].

sobre la superficie Ω del PC.

$$u_i^d(\mathbf{r}) = u_i^{(T)}(\mathbf{r}) + \int_{\Omega'} G_{ln}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dF_{\Omega}(\mathbf{r}'), \quad (2.12)$$

donde los índices $i = 1, 2, 3$ denotan las 3 direcciones espaciales y $u_i^{(T)}$ es el desplazamiento correspondiente a la deformación inicial debida a la tracción T. El superíndice d indica que la expresión se refiere a un solo PC. Si las constantes elásticas del PC y de la matriz son iguales, como se asume en este caso, el tensor de Green satisface $G_{ln}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{ln}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, además considerando un medio elástico anisotrópico e infinito, el tensor de Green es la solución de la ecuación

$$\lambda_{iklm} \frac{\partial G_{ln}(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r}) \delta_{in}, \quad (2.13)$$

con la condición de frontera $G_{ln}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. En la ecuación (2.13), $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ es un vector en el espacio real y λ_{iklm} es el tensor del módulo elástico. Aquí y en adelante se usará la regla usual para la sumatoria para índices repetidos. Para resolver la ecuación (2.13) y encontrar $G_{ln}(\mathbf{r})$ se hace uso de la transformada de Fourier. Aplicando la transformada de Fourier a la ecuación (2.13) se obtiene la siguiente ecuación lineal

$$\lambda_{iklm} \xi_k \xi_m \tilde{G}_{ln}(\xi) = \frac{\delta_{ln}}{(2\pi)^3}. \quad (2.14)$$

El método de inclusión propuesto por Eshelby antes descrito es usado para encontrar la deformación en la nanoestructura. El vector de desplazamiento en una estructura conteniendo

un solo PC (ecuación 2.12) puede ser expresado como la convolución del tensor de Green $G_{in}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y las fuerzas ejercidas sobre la superficie del PC

$$u_i^d(\mathbf{r}) = u_i^{(T)}\chi_{PC}(\mathbf{r}) + \int_{\Omega'} G_{ln}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\sigma_{nk}^T dS'_k, \quad (2.15)$$

donde $\chi_{PC}(\mathbf{r})$ es la función característica del PC, con un valor constante de uno dentro del PC y cero fuera; $\sigma_{nk}^T = \lambda_{nkpr}e_{pr}^T$ con σ_{nk}^T , e_{pr}^T , las componentes del tensor de esfuerzo y de deformación causado por el desplazamiento inicial $u_i^{(T)}$ debido al desajuste en la constante de red, respectivamente. Recordando que la deformación en función del desplazamiento es

$$e_{ij} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.16)$$

usando el teorema de Gauss para reescribir la ecuación (2.15) en términos de la deformación se obtiene

$$e_{ij}^s(\mathbf{r}) = e_{ij}^T\chi_{PC}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int_{PC} \left[\frac{\partial G_{ln}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial G_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right] \times \lambda_{nkpr}e_{pr}^T dV'. \quad (2.17)$$

y, aplicando las propiedades de Fourier sobre la derivada y el teorema de convolución, se obtiene lo siguiente

$$e_{ij}^{\tilde{s}} = e_{ij}^T\tilde{\chi}_{PC}(\xi) - \frac{(2\pi)^3}{2} \left\{ \xi_i \tilde{G}_{jn}(\xi) + \xi_j \tilde{G}_{in}(\xi) \right\} \times \lambda_{nkpr}\xi_k e_{pr}^T \tilde{\chi}_{PC}(\xi), \quad (2.18)$$

donde $\tilde{\chi}_{PC}(\xi)$ es la transformada de Fourier de la función característica (en el apéndice B se muestran las funciones ocupadas en este trabajo). La ecuación (2.18) da la expresión general de la transformada de Fourier del tensor de deformación de la estructura conteniendo un solo PC de geometría arbitraria. Ésta es la fórmula general válida para cristales con cualquier tipo de red cristalina.

El problema elástico presenta un comportamiento lineal, por lo que la deformación de un arreglo de PC es obtenido por la superposición de campos elásticos, con lo que obtenemos

$$e_{ij} = \sum_{n_1, n_2, n_3} e_{ij}^s(x_1 - n_1 d_1, x_2 - n_2 d_2, x_3 - n_3 d_3), \quad (2.19)$$

donde d_1, d_2, d_3 son los periodos espaciales del arreglo en las direcciones x, y, z respectivamente. Una condición adicional para e_{ij} surge del requerimiento de energía elástica mínima para un arreglo tridimensional, es decir, se asume que un solo PC se encuentra en el estado de mínima energía, por lo que el promedio de la deformación en un PC debe de ser cero, de la ecuación (2.19) se obtiene que los coeficientes de la expansión de la serie de Fourier de e_{ij} son igual a $[(2\pi)^3/(d_1 d_2 d_3)]\tilde{e}_{ij}^s(\xi_n)$ [59, 67].

2.2.1. Modelo del tensor de deformación en PCA en forma piramidal

En la sección previa se describió el proceso general para calcular la deformación en nanoestructuras con cualquier geometría, cuyo desarrollo más detallado se puede encontrar en [59, 67]. El modelo utilizado en tales referencias considera que los puntos presentan un arreglo periódico tridimensional cuyo periodo está dado por d_1 , d_2 y d_3 en las direcciones x , y y z , respectivamente. Como se ejemplifica en la Figura 2.2, cada bloque representa a un PCA contenido en una región del material matriz, donde las dimensiones del bloque son elegidas lo suficientemente grandes para que cada punto pueda considerarse aislado del resto (el espacio vacío entre los bloques solo sirve para visualizar mejor la periodicidad y no se toma en cuenta en el cálculo). Esto se observa mejor en anillos cuánticos donde no existe un periodicidad en 3D, si no en 2D, pero al elegir la periodicidad en z lo suficientemente grande, se desprecian las interacciones en la deformación en esta dirección.

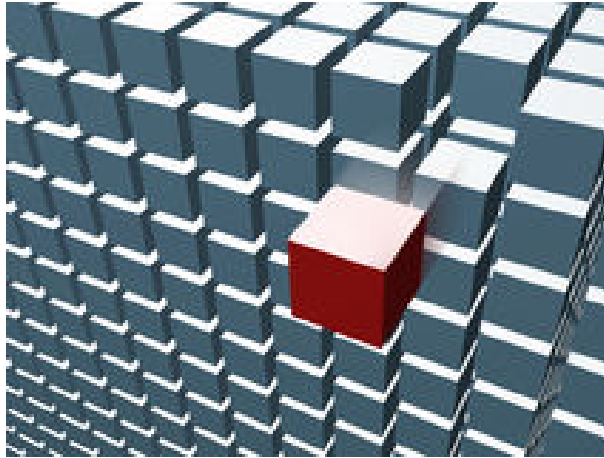


Figura 2.2: Esquema de un sistema periódico tridimensional [68].

Con todas las consideraciones previas, el campo de deformación se calcula con la serie de Fourier dada por

$$e_{ij}(\vec{r}) = \frac{(2\pi)^3}{d_1 d_2 d_3} \sum_{n_1 n_2 n_3} e_{ij}^{\sim s}(\xi_n) \exp(i\xi_n \cdot \vec{r}), \quad (2.20)$$

donde $\xi_n = 2\pi(n_1/d_1, n_2/d_2, n_3/d_3)$ es el vector en el espacio dual (o de Fourier), \vec{r} es el punto en el cual se desea evaluar la deformación. En la sumatoria se consideran todos los posibles valores comprendidos entre $-100 \leq n_1, n_2, n_3 \leq 100$ excepto en $n_1 = n_2 = n_3 = 0$

(excepto para anillos cuánticos), $e_{ij}^{\sim s}$ es el tensor de deformación en el espacio dual, el cual depende de la estructura cristalina de los materiales y de la geometría de la nanoestructura.

Para el caso de un sistema cristalino cúbico, como lo es el sistema InAs/GaAs, el tensor de deformación en el modelo anisotrópico está dado por

$$e_{ij}^{\sim s}(\xi) = \epsilon_0 \tilde{X}_{PC}(\xi) \left\{ \delta_{ij} - \frac{(C_{11} + 2C_{12})\xi_i\xi_j/\xi^2 \times \frac{1}{2} \left[\frac{1}{C_{44} + C_{an}\xi_i^2/\xi^2} + \frac{1}{C_{44} + C_{an}\xi_j^2/\xi^2} \right]}{1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{\xi_p^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_p^2}} \right\}, \quad (2.21)$$

donde C_{an} es la constante elástica en el modelo anisotrópico [67]. Para el sistema GaN/AlN (con sistema cristalino hexagonal) la deformación está dada por

$$e_{ij}^{\sim s}(\xi) = \tilde{X}_{PC}(\xi) \left\{ \varepsilon_a \delta_{ij} + \varepsilon_{ca} \delta_{i3} \delta_{j3} + \frac{RP - IS}{IQ - FP} \xi_i \xi_j + \frac{SF - RQ}{IQ - FP} \xi_3 \frac{\xi_i \delta_{j3} + \xi_j \delta_{i3}}{2} \right\}, \quad (2.22)$$

donde $\varepsilon_{ca} = \varepsilon_c - \varepsilon_a$ es la diferencia entre las constantes elásticas entre los ejes c y a de la red hexagonal [59]. Los elementos R, S, P, I, Q y F que describen la estructura wurtzita están dados en términos de las constantes elásticas para la red del mismo tipo, de forma que

$$\begin{aligned} R &= (3\alpha + 2\beta + \kappa)\varepsilon_a + (\alpha + \kappa)\varepsilon_{ca}, \\ S &= (\gamma + 3\kappa + 4\rho)\varepsilon_a + (2\beta + \gamma + \kappa + 4\rho)\varepsilon_{ca}, \\ P &= (C_{33} - 2C_{44} - C_{13})\xi_3^2 + C_{44}\xi^2, \\ I &= (C_{13} + C_{44})\xi_3^2, \\ Q &= (C_{33} - 2C_{13} - 4C_{44} + C_{11})\xi_3^2 + (C_{13} + 2C_{44} - C_{11})\xi^2, \\ F &= (C_{13} + 2C_{44} - C_{11})\xi_3^2 + C_{11}\xi^2, \end{aligned} \quad (2.23)$$

donde ξ es la variable en el espacio de Fourier, C_{11} , C_{12} , C_{44} son las constantes elásticas y $C_{an} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$ describe la parte anisotrópica del tensor con red cúbica (ecuación 2.21), mientras que para la estructura wurtzita (ecuación 2.22), las variables R, S, P, I, Q y F están en términos de las constantes elásticas como se muestra en las ecuaciones (2.23). Finalmente los parámetros $\alpha, \beta, \gamma, \kappa$ y ρ son funciones de las constantes elásticas según las

ecuaciones

$$\begin{aligned}\alpha &= C_{12}, \quad \beta = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \\ \gamma &= C_{33} - 2C_{13} - 4C_{44} + C_{11}, \\ \kappa &= C_{13} - C_{12}, \quad \rho = C_{44} + \frac{C_{12} - C_{11}}{2}.\end{aligned}\tag{2.24}$$

El límite isotrópico en cristales cúbicos ocurre con $C_{an} = 0$, mientras que en la estructura hexagonal cuando $\varepsilon_c = \varepsilon_a = \varepsilon_0$, y $\gamma = \rho = \kappa = 0$. En consecuencia las constantes elásticas coinciden con las constantes de Lamé isotrópicas $C_{12} = \lambda$ y $C_{44} = \mu$. Para ambos sistemas la deformación converge a una misma expresión dada por la ecuación

$$\tilde{e}_{ij}(\xi) = \epsilon_0 \tilde{X}_{PC}(\xi) \left\{ \delta_{ij} - \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + 2\mu} \frac{\xi_i \xi_j}{\xi^2} \right\},\tag{2.25}$$

donde $\tilde{X}_{PC}(\xi)$ es la función característica del punto cuántico, la cual contiene la información de la geometría del sistema. Esta función se define en el espacio recíproco de volumen V y geometría Ω como

$$\tilde{X}_{PC}(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega} e^{-i\xi \cdot \mathbf{r}} dV,\tag{2.26}$$

expresiones analíticas para todas las geometrías usadas en este trabajo se encuentran en el apéndice B.

Finalmente, la componente hidrostática está definida como $e_h = e_{ii}$ con $i=1,2,3$, calculando la transformada de Fourier inversa de la ecuación (2.25), siendo constante dentro del punto y cero fuera de éste, dada por

$$e_{ii} = \epsilon_0 \frac{4\mu}{\lambda + 2\mu} \tilde{X}_{PC}(r).\tag{2.27}$$

2.3. La deformación en el hamiltoniano

Bardeen y Shockley [69] estudiaron la variación de las bandas de conducción y valencia cerca del punto Γ , en función de la dilatación ($\Delta = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}$, también conocida como la componente hidrostática e_h), para un cristal cúbico sujeto a una deformación, en la aproximación de masa efectiva propuesta por Chuang [70]. Las energías se expanden en una serie de Taylor en potencias de una cantidad que caracteriza la intensidad de la deformación.

A primer orden el hamiltoniano resultante es

$$\left[-\hbar^2 \sum \alpha_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + E_{ho}(\epsilon) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (2.28)$$

donde el potencial de confinamiento está dado por

$$E_{ho}(E) = E_o + E_1\Delta, \quad (2.29)$$

E_o es la energía de confinamiento sin deformación, es decir, la barrera de potencial que tienen que superar los portadores, para el caso de los electrones corresponde al ancho de banda prohibida del material (cuando es de banda directa). El parámetro E_1 , comúnmente denotado por a_c (conocido como potencial de deformación) para el caso de la banda de conducción, ha sido ajustado para reproducir resultados experimentales de semiconductores.

De la ecuación (2.29) puede verse que la determinación de estados electrónicos requiere del conocimiento de la dilatación, la cual a su vez, depende del tensor deformación. Esta aproximación se generalizó a otras estructuras cristalinas y bandas. En particular, en el caso de un PCA embebido en una matriz, el modelo del hamiltoniano de masa efectiva en una banda propuesto por Andreev *et al.* [59] para electrones y huecos pesados en una estructura wurtzita está dado por

$$H_{elec}^{1 \times 1} = U_{c\bar{x}PC} + \frac{\hbar^2}{2} \left[\kappa_x \frac{1}{m_c} \kappa_x + \kappa_y \frac{1}{m_c} \kappa_y + \kappa_z \frac{1}{m_c} \kappa_z \right] + a_c(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) - \varphi, \quad (2.30)$$

y

$$H_{hueco}^{1 \times 1} = -U_{v\bar{x}PC} + (A_1 + A_3)\kappa_z^2 + (A_2 + A_4 - A_5)(\kappa_x^2 + \kappa_y^2) + (D_1 + D_3)e_{zz} + (D_2 + D_4 - D_5)(e_{xx} + e_{yy}) - \varphi, \quad (2.31)$$

donde U_c y U_v son las alturas de las barreras de potencial para los electrones y huecos de una heterounión sin deformación, φ es el potencial electrostático y los términos A_i y D_i son parámetros de los distintos materiales. En este modelo de hamiltoniano es necesario conocer las componentes de la deformación e_{xx} , e_{yy} y e_{zz} . En el capítulo siguiente se presentará el modelo general del hamiltoniano, pues en las ecuaciones (2.30) y (2.31) se consideran a los electrones y huecos independientes, es decir, no se contempla el acoplamiento entre bandas. por lo que se describirá brevemente la teoría del hamiltoniano usado para considerar tales efectos, incluyendo por supuesto la deformación, campo piezoeléctrico, gradiente de indio y campo eléctrico externo.

Capítulo 3

Estados Electrónicos (Teoría)

En este capítulo se hará una revisión de los conceptos generales indispensables para comprender los modelos físicos usados en el cálculo de las propiedades de los PCA. Empezando por una descripción breve de la ecuación de Schrödinger, base para el estudio de nanoestructuras, para después describir la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en el modelo de 1, 4 y 8 bandas que incluye diferentes términos, según sea el caso estudiado, como lo es la energía cinética de los portadores, la deformación y el campo piezoeléctrico presente en los PC.

3.1. Ecuación de Schrödinger

Para poder estudiar las nanoestructuras es vital comprender la ecuación que describe a las partículas a escala atómica y nanométrica, la cual fue propuesta por Edwin Schrödinger en 1925 y que describe el cambio del estado cuántico de un sistema en función del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi. \quad (3.1)$$

Sin embargo, si se considera que el potencial de confinamiento es independiente del tiempo, la ecuación de Schrödinger se puede escribir en forma estacionaria. A diferencia de una ecuación de movimiento clásica, la ecuación de Schrödinger [17] no describe la trayectoria de partículas, sino solamente permite obtener la probabilidad de encontrar una partícula en un espacio determinado con una energía propia.

Este trabajo de tesis está enfocado en el análisis de la distribución de los portadores en los PC y las correspondientes energías que poseen, con la finalidad de estudiar algunas propiedades electrónicas y ópticas. Para esto es necesario resolver la ecuación de Schrödinger

independiente del tiempo en un sistema no relativista de una sola partícula en un potencial $V(\mathbf{r})$, que tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Sin embargo, la dificultad de resolver esta ecuación en forma analítica exacta, ha dado origen a aproximaciones que se ha visto tienen una buena concordancia con datos experimentales, como lo es el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, el cual tiene sus bases en la teoría de perturbaciones (de mecánica cuántica) y que describiremos en las siguientes secciones.

3.1.1. Teorema de Bloch

Como se ha señalado, la ecuación de Schrödinger es la ecuación que describe las propiedades electrónicas a escala nanométrica, sin embargo, ésta sólo tiene solución analítica en casos muy particulares, como lo son pozos y barreras de potencial, así como también en el átomo de hidrógeno.

La solución al problema de un electrón en un sólido cristalino (asumiéndose infinito) fue propuesta por Felix Bloch, quien demostró que en un sistema periódico, como lo es una estructura cristalina, la solución de la ecuación de Schrödinger es una función $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ con la misma periodicidad del sistema multiplicada por una onda plana, para el caso de un sólido la periodicidad corresponde a la red cristalina [12]. Esta solución es establecida en el teorema de Bloch, que está descrito por

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde \mathbf{R} es un vector de la red cristalina, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ es una onda plana y \mathbf{k} el vector de onda definido en el espacio recíproco.

3.2. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de una banda

Como se vio en la sección previa, el teorema de Bloch permite encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger para un cristal infinito, sin embargo, los PC poseen estructura cristalina de corto alcance, por lo que es necesario recurrir a otras aproximaciones como la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para encontrar las funciones de onda y energías en estas nanoestructuras.

La teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ surge como un método empírico para determinar la estructura de bandas con una base de estados (generalmente se escoge una combinación lineal de estados atómicos). Este método puede ser extendido a sistemas no periódicos tales como cristales con impurezas y nanoestructuras al reemplazar el factor de fase de Bloch por una función envolvente [71, 72].

Este método surge de manera natural al considerar el teorema de Bloch cerca del punto $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$, ya que si nos alejamos del mismo, se incrementa el error en los cálculos. Partiendo de la ecuación de Schrödinger

$$H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.4)$$

donde n y \mathbf{k} son, índice discreto de cada banda y el vector de onda, respectivamente. A partir del teorema de Bloch [73] la solución se escribe como

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la misma periodicidad de la red (aquí se considera una celda unitaria, solo por simplicidad en el desarrollo).

Las funciones anteriores deben satisfacer las siguientes propiedades:

$$\langle \psi_{n\mathbf{k}} | \psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int dV \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'}\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (3.6)$$

$$\langle u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int d\Omega u_{n\mathbf{k}}^* u_{n'\mathbf{k}'} = \delta_{nn'} \frac{\Omega}{(2\pi)^3}, \quad (3.7)$$

donde V es el volumen del cristal y Ω el de la celda unitaria.

Como una primera aproximación se considera que el Hamiltoniano consiste únicamente de energía cinética y potencial

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre. Por lo que, al sustituir las ecuaciones (3.8) y (3.5) en (3.4) se obtiene

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Aplicando el operador momento en el primer término de la parte izquierda (3.9)

$$p^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \partial^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial r^2} = \hbar^2 k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}p^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

donde

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar \left[k_x \frac{\partial}{\partial x} + k_y \frac{\partial}{\partial y} + k_z \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (3.11)$$

por lo que

$$H = H_0 + H_k, \quad \text{con} \quad H_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m_0}. \quad (3.12)$$

3.3. Modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de múltiples bandas

Como se mencionó, es recomendable realizar el cálculo para $\mathbf{k} \rightarrow 0$, es decir, cerca del punto Γ , donde hay mayor simetría y ocurre la mínima separación de energía entre la banda de conducción vacía y las bandas de valencia ocupadas (para semiconductores de banda directa como es el caso presentado aquí), cuyas funciones de onda son denotadas por $|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ (que tienen su correspondencia con estados atómicos S, px, py y pz, respectivamente), las cuales se asocian directamente o por medio de una combinación lineal a los estados de electrones, huecos pesados, huecos ligeros y la banda de huecos separados (*split-off*), respectivamente.

El desarrollo mostrado previamente es el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ denominado “de una banda”, en donde únicamente se pueden obtener las energías y funciones de onda de manera independiente de una partícula, ya sea electrones o huecos.

Si se consideran las interacciones de electrones con huecos ligeros, pesados y la banda dividida de huecos, es necesario recordar que la única forma en la que los electrones y huecos interactúan en el medio, es a través de su momento angular total \mathbf{J} , donde $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma}$. Con estas consideraciones Kane propuso que, cuando el acoplamiento del espín-órbita es distinto de cero, en compuestos III-V (como en este caso), es deseable tener una base de estados con $\mathbf{k} = 0$, en la cual este término de espín-órbita ya está diagonalizado. En lugar de usar las 8 funciones de Bloch en el borde de las bandas $|S \uparrow\rangle, |X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$, es mejor formar combinaciones lineales de estas funciones, las cuales deben de ser tales que son funciones propias del momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma}$ y su proyección J_z a lo largo del eje z . Para el borde de la banda de conducción (S), la adición de $L = 0$ y $\sigma = 1/2$ da $J = 1/2$ (simetría Γ_{6C} Fig. 3.1b), para los bordes de banda de valencia (P), sumando $L = 1$ y $\sigma = \pm 1/2$ da $J = 3/2$ o $J = 1/2$. En compuestos III-V el cuádruplete $J = 3/2$, siempre posee más energía que el doblete $J = 1/2$. El cuádruplete corresponde a la simetría Γ_{8V} y el doblete a Γ_{7V} como se aprecia en la Figura 3.1b, separados por un intervalo de energía Δ_0 [74].

En la Figura 3.1a se aprecia la simetría en el modelo de 4 bandas para la estructura blenda de zinc. Es interesante notar que en este modelo se usa la notación $\Gamma_{1C}, \Gamma_{15V}$, en lugar de $\Gamma_{6C}, \Gamma_{7V}, \Gamma_{8V}$, para ocho bandas, debido a que la inclusión del espín rompe la simetría por lo que cambia el grupo puntual.

Tomando todas estas consideraciones, en la Tabla 3.1 se muestran las funciones de onda base en los bordes Γ_{6C}, Γ_{7V} y Γ_{8V} usados por Kane. Notar que en cada borde el estado es doblemente degenerado y corresponde a dos posibles valores de m_J , los cuales son los eigenvalores de $|J_z\rangle$.

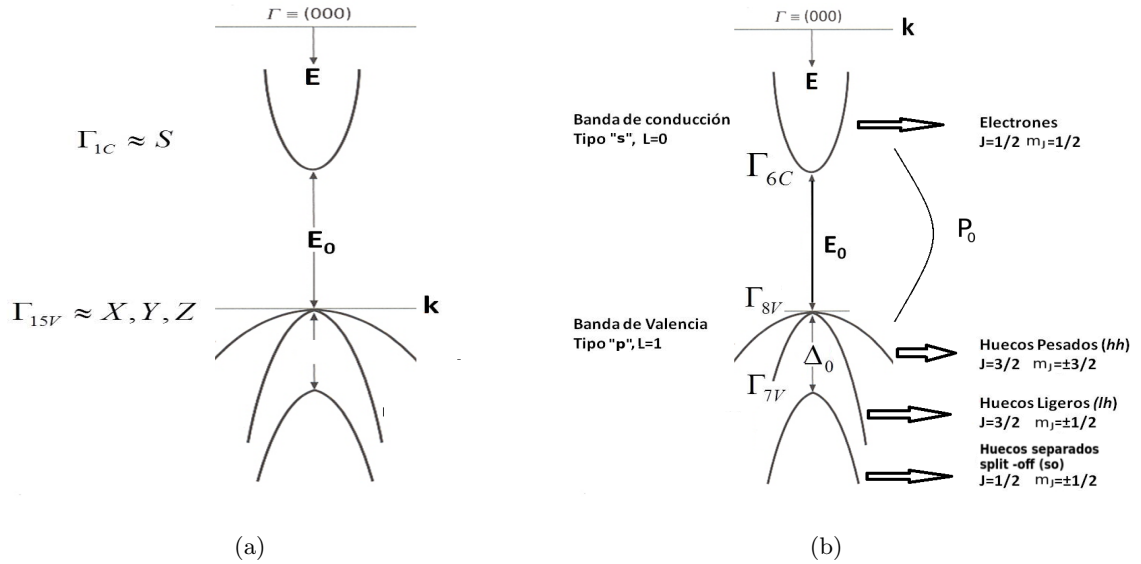


Figura 3.1: Esquema general del diagrama de bandas para blenda de zinc, en el modelo de (a) 4 bandas, (b) 8 bandas [71].

u_i	$ J, m_J\rangle$	ψ_{J, m_J}	$\varepsilon_i(\mathbf{k} = 0)$
u_1	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$i S \uparrow\rangle$	0
u_3	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow\rangle$	$-E_0$
u_5	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$	$-E_0$
u_7	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \uparrow\rangle$	$-E_0 - \Delta_0$
u_2	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$	$i S \downarrow\rangle$	0
u_4	$ \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow\rangle$	$-E_0$
u_6	$ \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$	$-E_0$
u_8	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \downarrow\rangle$	$-E_0 - \Delta_0$

Tabla 3.1: Partes periódicas de las funciones de Bloch de los estados base. Las notaciones J, m_J etiquetan los eigenvalores de los operadores J y J_z , respectivamente.

3.3.1. Semiconductores tipo blenda de zinc

Con lo explicado anteriormente, se tienen las bases para formular el Hamiltoniano en cada estructura. Para más detalles de cada término del Hamiltoniano consultar las referencias [70, 71]. Recordando que los eigenvalores del Hamiltoniano H_0 , que surgen de hacer $\mathbf{k} = 0$, son los valores de la energía en el máximo y mínimo de la banda de valencia y conducción, respectivamente, en la notación *bra-ket* están dados por

$$\left\langle \left(-\sqrt{\frac{2}{3}}Z + \frac{1}{\sqrt{6}}(X + iY) \right) \middle| H_0 \middle| \left(-\sqrt{\frac{2}{3}}Z + \frac{1}{\sqrt{6}}(X + iY) \right) \right\rangle = E_v, \quad \langle S | H_0 | S \rangle = E_c. \quad (3.13)$$

donde, en forma general, esta notación equivale a

$$\langle u_{n\mathbf{k}} | A | u_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int d\Omega u_{n\mathbf{k}}^* A u_{n'\mathbf{k}'}. \quad (3.14)$$

El único elemento de matriz que describe el acoplamiento entre bandas que corresponde al término $\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}/m_0$ pues incluye el momento de la partícula, Por lo que, obtenida la nueva base, así como sus eigenvalores en los bordes de las bandas de valencia y conducción (ver Tabla 3.1), ahora es posible obtener el Hamiltoniano completo de 8 bandas para la estructura blenda de zinc [75, 76] incluyendo las interacciones entre las diferentes bandas.

Es importante notar que en la aproximación de la función envolvente, es posible adecuar la teoría al caso de nanoestructuras compuestas de varios materiales. La presencia de interfaces y fronteras genera un potencial adicional que acopla estados del bulto, por lo que podemos usar éstos como una base. Construyendo la función de onda como una suma de estos estados del bulto, se obtiene una ecuación para cada coeficiente (conocida como función envolvente) de esta expansión en la que el operador de energía del bulto se sustituye $\mathbf{k} = -i\nabla$. Se asume esta envolvente como la función de onda del sistema [72, 74, 77, 78]

Otro parámetro que es importante definir es el elemento de matriz intrabanda del operador momento P_0 , el cual toma en cuenta las interacciones entre las diferentes bandas por medio del momento angular \mathbf{J} , dado por Kane como [74]

$$P_0 = \int -i \frac{\hbar}{m_0} S p_x X = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle, \quad (3.15)$$

conocido también como parámetro de Kane, y todos los otros elementos de matriz desaparecen por simetría.

Finalmente, el Hamiltoniano bajo la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en el modelo de 8 bandas para puntos cuánticos autoensamblados hechos de materiales con estructura blenda de zinc, como lo son InAs/GaAs (ver también [61]), considerando la interacción entre bandas (ver [74]) y la energía cinética, está dado por

$$H_k = \begin{bmatrix} A & 0 & V^* & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^* \\ 0 & A & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^* & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\ V & -\sqrt{2}U & -P+Q & -S^* & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V & -S & -P+Q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ \sqrt{3}V^* & 0 & R^* & 0 & -P-Q & S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R^* \\ -\sqrt{2}U & -V^* & 0 & R^* & S & -P+Q & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \\ -U & \sqrt{2}V^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q & -P-\Delta & 0 \\ \sqrt{2}V & U & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & -P-\Delta \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

donde

$$\begin{aligned}
A &= E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2), \\
P &= -E_v - \gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2), \\
Q &= -\gamma_2 \frac{\hbar^2}{2m_0}(\partial_x^2 + \partial_y^2 - 2\partial_z^2), \\
R &= \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0}[\gamma_2(\partial_x^2 - \partial_y^2) - 2i\gamma_3\partial_x\partial_y], \\
S &= -\sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0}\partial_z(\partial_x - i\partial_y), \\
U &= -\frac{i}{\sqrt{3}}P_0\partial_z, \\
V &= -\frac{i}{\sqrt{6}}P_0(\partial_x - i\partial_y),
\end{aligned} \tag{3.17}$$

P_0 es el acoplamiento entre la banda de conducción y de valencia (ver Fig. 3.1b), E_c y E_v son las energías de los bordes de las bandas de conducción y valencia sin deformación, respectivamente, y Δ_0 es la diferencia entre la banda de huecos pesados y ligeros y la banda de huecos separados. Notar que se ha introducido $\mathbf{k} = -i\nabla$, debido a que estamos considerando \mathbf{k} cerca de los bordes de las bandas, donde \mathbf{k} es pequeño.

Los parámetros γ_i son los parámetros modificados de Luttinger definidos en términos de los parámetros usuales (γ_i^L) como

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g + \Delta}, \\
\gamma_2 &= \gamma_2^L - \frac{1}{2} \frac{E_p}{3E_g + \Delta}, \\
\gamma_3 &= \gamma_3^L - \frac{1}{2} \frac{E_p}{3E_g + \Delta},
\end{aligned} \tag{3.18}$$

donde $E_g = E_c - E_v$ es el ancho de banda prohibida y E_p está definido como $E_p = 2m_0P_0^2/\hbar^2$. Las componentes de la deformación e_{ij} entran a través de la siguiente matriz, conocida como matriz de deformación H_s , la cual incluye el acoplamiento entre las diferentes bandas [75]

$$H_s = \begin{bmatrix} a_c e & 0 & -v^* & 0 & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}v^* \\ 0 & a_c e & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^* & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\ -v & \sqrt{2}u & -p+q & -s^* & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q \\ 0 & \sqrt{3}v & -s & -p-q & 0 & r & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s \\ -\sqrt{3}v^* & 0 & r^* & 0 & -p-q & s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r^* \\ \sqrt{2}u & v^* & 0 & r^* & s & -p+q & \sqrt{2}q & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* \\ u & -\sqrt{2}v^* & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q & -a_v e & 0 \\ -\sqrt{2}v & -u & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -a_v e \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

donde

$$\begin{aligned} p &= a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}), \\ q &= b[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy})], \\ r &= \frac{\sqrt{3}}{2}b(e_{xx} + e_{yy}) - ide_{xy}, \\ s &= -d(e_{xz} - ie_{yz}), \\ u &= \frac{-i}{\sqrt{3}}P_0 \sum_j e_{zj} \partial_j, \\ v &= -\frac{i}{\sqrt{6}}P_0 \sum_j (e_{xj} - ie_{yj}) \partial_j, \end{aligned} \quad (3.20)$$

y los parámetros de los materiales utilizados en ambas matrices que constituyen al hamiltoniano están dados en la Tabla 3.2.

Finalmente se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales dado por $(H_k + H_s)\psi = E\psi$ obtenido en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de 8 bandas, mismo que es resuelto en el programa COM-SOL.

Parámetro	InAs	GaAs	Parámetro	InAs	GaAs
E_g	0.4 eV	1.5 eV	a_v	0.66 eV	0.7 eV
γ_1^L	19.67	6.85	b	-1.8 eV	-2.0 eV
γ_2^L	8.37	2.1	d	-3.6 eV	-5.4 eV
γ_3^L	9.29	2.9	ϵ_R	15.5	15.5
Δ	0.38 eV	0.33 eV	$C_{11}(a)$	0.083 GPa.	0.118 GPa.
E_p	22.2 eV	25.7 eV	$C_{12}(a)$	0.045 GPa.	0.054 GPa.
a_c	-6.66 eV	-9.3 eV	$C_{44}(a)$	0.040 GPa.	0.059 GPa.

Tabla 3.2: Parámetros de los materiales, obtenidos de [75], (a) de [67].

3.3.2. Semiconductores tipo wurtzita

En la sección previa se describió a grandes rasgos el procedimiento general para obtener el hamiltoniano total para el sistema cúbico de InAs/GaAs, por lo que ahora se hará una descripción similar del procedimiento para obtener el hamiltoniano en el modelo de 8 bandas para semiconductores con estructura wurtzita [70].

Se inicia estableciendo un conjunto base de funciones, las cuales describan apropiadamente las interacciones entre las bandas de conducción y valencia. Este conjunto de ocho funciones fueron propuestas por Chuang *et. al.*, y están dadas por

$$\begin{aligned}
|iS \uparrow\rangle, \quad u_1 &= \left| \frac{(X + iY)}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle, \quad u_2 = \left| \frac{(X - iY)}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle, \quad u_3 = |Z \uparrow\rangle, \\
|iS \downarrow\rangle, \quad u_4 &= \left| \frac{(X + iY)}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle, \quad u_5 = \left| \frac{(X - iY)}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle, \quad u_6 = |Z \downarrow\rangle,
\end{aligned} \tag{3.21}$$

donde las funciones $|iS \uparrow\rangle$ y $|iS \downarrow\rangle$ corresponden a la banda de conducción y las demás funciones a la banda de valencia. Similarmente, como en el caso de cristales con estructura blenda de zinc, los parámetros que asocian los elementos intrabanda de la matriz de momentos son los parámetros de Kane [74]. Sin embargo, debido a la simetría de la wurtzita existen 2 parámetros de Kane, uno sobre el plano xy y otro en la dirección z , denotados como P_{\parallel} y P_{\perp} , respectivamente, los cuales cumplen que

$$P_{\parallel} = \langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle, \tag{3.22}$$

$$P_{\perp} = \langle S | p_z | Z \rangle. \tag{3.23}$$

Por ejemplo, al considerar los dos primeros elementos de la ecuación (3.21) y sustituirlos adecuadamente en la ecuación (3.15), tenemos la siguiente relación:

$$\left\langle iS \uparrow | H | \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} P_{\parallel} k_{+}, \quad (3.24)$$

donde

$$k_{\pm} = (k_x \pm k_y). \quad (3.25)$$

De igual forma al combinar en el punto Γ para una de las funciones base tenemos los respectivos elementos de matriz dados por

$$\begin{aligned} \langle S | H_0 | S \rangle &= E_c, \\ \langle X | H_0 | X \rangle &= \langle Y | H_0 | Y \rangle = E_v + \Delta_1, \\ \langle Z | H_0 | Z \rangle &= E_v, \\ \langle X | H_{sz} | Y \rangle &= -i\Delta_2, \\ \langle Y | H_{sx} | Z \rangle &= \langle Z | H_{sy} | X \rangle = -i\Delta_3, \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde Δ_1 , Δ_2 y Δ_3 son las diferencias en energía entre la banda de valencia y la banda del acoplamiento del espín (similar a Δ_0 para blenda de zinc), pero aquí existen 3 términos debido a la diferente simetría.

Por lo que utilizando las ecuaciones (3.22), (3.23) y (3.26), se obtiene la matriz de la ecuación (3.33) en la cual los elementos de la diagonal contienen los niveles de energía de electrones y huecos exactamente en el punto Γ . Ahora, para determinar los valores de P_{\parallel} y P_{\perp} hay que encontrar los eigenvalores de la ecuación (3.33), haciendo que

$$\begin{aligned} 0 = \det(H_{8 \times 8} - EI_{8 \times 8}) &= \{ -(E_c - E')(E_v + \Delta_1 + \Delta_2 - E') \\ &\quad \times [(E_v + \Delta_1 - \Delta_2 - E')(E_v - E') - 2\Delta_3^2] \\ &\quad + [(E_v + \Delta_1 - E')(E_v - E') - \Delta_3^2] P_{\perp}^2 (k_x^2 + k_y^2) \\ &\quad + (E_v + \Delta_1 + \Delta_2 - E')(E_v + \Delta_1 - \Delta_2 - E') P_{\parallel}^2 k_z^2 \}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde $E' = E - (\hbar^2 k^2 / 2m_0)$. Para valores pequeños de \mathbf{k} , es decir, cerca del borde de la banda de conducción se encuentra la relación de dispersión de la banda de conducción a

partir de la ecuación (3.27) dada por

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_g(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + \Delta_2) - \Delta_3^2}{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2} P_{\perp}^2 (k_x^2 + k_y^2) + \frac{(E_g + 2\Delta_2)}{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2} P_{\parallel}^2 k_z^2. \quad (3.28)$$

Para determinar P_{\parallel} y P_{\perp} se puede escribir la relación de dispersión en términos de las masas efectivas longitudinal y transversal como

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^{\perp}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^{\parallel}}, \quad (3.29)$$

con la ventaja de que las masas efectivas se pueden determinar experimentalmente. Igualando los términos que contienen $k_x^2 + k_y^2$ y k_z^2 de la ecuación (3.28) ($k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$) con los de la ecuación (3.29) se despejan los términos de P_{\parallel} y P_{\perp} , con lo que finalmente se tiene:

$$P_{\parallel}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{m_0}{m_e^{\parallel}} - 1 \right) \frac{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2}{E_g + 2\Delta_2}, \quad (3.30)$$

$$P_{\perp}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{m_0}{m_e^{\perp}} - 1 \right) \frac{E_g(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2}{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + \Delta_2) - \Delta_3^2}. \quad (3.31)$$

Esto permite escribir el hamiltoniano en el punto Γ para el modelo de ocho bandas dado por la ecuación (3.33, pág. 39), y considerando las interacciones fuera del punto Γ , con los parámetros obtenidos y siguiendo el procedimiento descrito en [70] se obtiene el Hamiltoniano completo en el modelo de 8 bandas como

$$H = \begin{bmatrix} E_g & \frac{P_{\perp} k_{+}}{\sqrt{2}} & \frac{P_{\perp} k_{-}}{\sqrt{2}} & P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{P_{\perp} k_{-}}{\sqrt{2}} & F - \varphi & K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{P_{\perp} k_{+}}{\sqrt{2}} & K & F - \varphi & H & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ P_{\parallel} k_z & -H & H^* & \lambda - \varphi & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_g & \frac{P_{\perp} k_{+}}{\sqrt{2}} & \frac{P_{\perp} k_{-}}{\sqrt{2}} & P_{\parallel} k_z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{P_{\perp} k_{-}}{\sqrt{2}} & F - \varphi & K^* & -H^* \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & \frac{P_{\perp} k_{+}}{\sqrt{2}} & K & F - \varphi & H \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & P_{\parallel} k_z & -H & H^* & \lambda - \varphi \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

$$H_{8 \times 8} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \begin{bmatrix} E_c & \frac{k_+ P_\perp}{\sqrt{2}} & \frac{k_- P_\perp}{\sqrt{2}} & k_z P_\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{k_- P_\perp}{\sqrt{2}} & E_v + \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{k_+ P_\perp}{\sqrt{2}} & 0 & E_v + \Delta_1 - \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ k_z P_\parallel & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_c & \frac{k_- P_\perp}{\sqrt{2}} & \frac{k_+ P_\perp}{\sqrt{2}} & k_z P_\parallel \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{k_+ P_\perp}{\sqrt{2}} & E_v + \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{k_- P_\perp}{\sqrt{2}} & 0 & E_v + \Delta_1 - \Delta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & \frac{k_+ P_\perp}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & E_v \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

donde φ es el campo piezoeléctrico presente en materiales con estructura wurtzita, el cual describiremos en la siguiente sección. Los demás parámetros están dados por

$$\begin{aligned}
F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, \\
G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta, \\
\lambda &= \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)] + \lambda_e, \\
\lambda_e &= D_1 e_{zz} + D_2 (e_{xx} + e_{yy}), \\
\theta &= \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_3 k_z^2 + A_4 (k_x^2 + k_y^2)] + \theta_e, \\
\theta_e &= D_3 e_{zz} + D_4 (e_{xx} + e_{yy}), \\
K &= \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2 + D_5 e_+, \\
H &= \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 (k_x + ik_y) k_z + D_6 e_{z+}, \\
\Delta &= \sqrt{2} \Delta_3,
\end{aligned} \tag{3.34}$$

donde

$$\begin{aligned}
e_{\pm} &= e_{xx} \pm 2ie_{xy} - e_{yy}, \\
e_{z\pm} &= e_{zx} \pm ie_{yz}.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Los parámetros A_i son los parámetros de la estructura de bandas en el modelo de Pikus-Bir definidos como

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m_0} A_1 &= L_2, & \frac{\hbar^2}{2m_0} A_2 &= M_3, & \frac{\hbar^2}{2m_0} A_3 &= M_2 - L_2 \\
\frac{\hbar^2}{2m_0} A_4 &= \frac{L_1 + M_1}{2} - M_3, & \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 &= \frac{N_1}{2}, & \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 &= \frac{N_2}{\sqrt{2}}.
\end{aligned} \tag{3.36}$$

donde los parámetros L_i , M_i , N_i están dados en [70]. Además, los componentes de la deformación e_{ij} se introdujeron en los términos de las ecuaciones (3.35) por medio de los potenciales de deformación $D_1, D_2 \dots D_6$, estos últimos determinados experimentalmente.

El hamiltoniano de la ecuación (3.32) es usado para obtener las funciones de onda de los portadores, sin embargo, para tener una idea aproximada de los valores de energía que poseen, es conveniente calcular los eigenvalores de éste en el punto Γ incluyendo la deformación y campo piezoeléctrico, por lo que no es necesario considerar el modelo de 8 bandas pues se presentan estados degenerados en el punto Γ . Con las consideraciones anteriores se obtiene el Hamiltoniano dado por

$$H = \begin{bmatrix} E_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{22} & (E_{23})^* & -(E_{24})^* \\ 0 & E_{23} & E_{22} & E_{24} \\ 0 & -E_{24} & (E_{24})^* & E_{44} \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

donde cada uno de los elementos está dado por

$$\begin{aligned} E_{11} &= E_g + a_c(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) - \varphi + \varphi_{ext}, \\ E_{22} &= -U_c + (D_2 + D_4)(e_{xx} + e_{yy}) + (D_1 + D_3)e_{zz} - \varphi + \varphi_{ext}, \\ E_{23} &= D_5(e_{xx} - e_{yy} - 2ie_{xy}), \\ E_{24} &= -D_6(e_{xz} - i * e_{yz}), \\ E_{44} &= \Delta_1 + U_v + D_2(e_{xx} + e_{yy}) + D_1e_{zz} + \varphi_{ext}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde U_c y U_v son las barreras de potencial en la banda de conducción y valencia, respectivamente, $U_c = E_g(M) - E_g(PC)$, es decir el ancho de la banda prohibida del material de la matriz(M) menos el del punto cuántico(PC), $U_v = E_v(PC) - E_v(M)$, donde se tomó como cero el nivel de energía de $E_v(PC)$. Los elementos e_{ij} son las componentes de la deformación, φ_{ext} es un campo eléctrico constante externo (el cual en la mayoría de los casos es cero, a menos que se indique lo contrario) y los demás parámetros están dados en la Tabla 3.3.

Campo Piezoeléctrico

El último paso para obtener el hamiltoniano a resolver es la inclusión del campo piezoeléctrico, de vital importancia en los sistemas con estructura wurtzita, ya que en materiales con esta estructura cristalina este potencial es del orden de 1 eV. Este campo es debido precisamente a la red hexagonal, ya que al presentar una constante de red mayor en el eje c hay un desbalance de cargas a lo largo de este eje, en comparación con el eje a , es decir, se crea un dipolo eléctrico originando un momento dipolar y el respectivo campo

eléctrico [8]. El cálculo de la deformación en la ecuación (2.22), así como el del campo piezoeléctrico se realizaron con la transformada de Fourier, ecuación (2.20), donde ahora se calcula la transformada del potencial piezoeléctrico.

La expresión del campo piezoeléctrico es derivada de la ecuación de Maxwell $\text{div}\mathbf{D} = 0$ para el campo de desplazamiento \mathbf{D} , definido en términos de la función dieléctrica ϵ_r como

$$\mathbf{D} = \epsilon_r \mathbf{E} + 4\pi(\mathbf{P}_{\text{deformación}} + \mathbf{P}_{\text{espontánea}}), \quad (3.39)$$

donde la polarización inducida por la deformación depende del tensor de deformación e_{kl} como

$$P_i^{\text{deformación}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{i,kl} e_{kl} = \epsilon_{i,kl}^M e_{kl} + \delta\epsilon_{i,kl} X_{PC} e_{kl}, \quad (3.40)$$

donde $\epsilon_{i,kl}^M$ y $\epsilon_{i,kl}^{PC}$ son las constantes piezoeléctricas del material correspondiente a la matriz y al punto cuántico, respectivamente, y $\delta\epsilon_{i,kl} = \epsilon_{i,kl}^{PC} - \epsilon_{i,kl}^M$. La contribución de la polarización espontánea está localizada a lo largo del eje c y es definida como

$$\mathbf{P}_{\text{espontánea}}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_{\text{espontánea}}^M + [\mathbf{P}_{\text{espontánea}}^{PC} - \mathbf{P}_{\text{espontánea}}^M] \chi_{PC}(\mathbf{r}). \quad (3.41)$$

Al tomar la transformada de Fourier de la ecuación de Maxwell $\text{div}\mathbf{D} = 0$ con \mathbf{D} definida en la ecuación (3.39) se encuentra la transformada de Fourier del campo piezoeléctrico interconstruido $\tilde{\mathbf{E}}$ con componente

$$\tilde{E}_i = -\frac{4\pi\xi_i\xi_l}{\epsilon_r\xi^2} [\tilde{P}_l^{\text{espontánea}} + \tilde{P}_l^{\text{deformación}}]. \quad (3.42)$$

Además es importante considerar que el campo promedio por celda unitaria es cero. Finalmente la transformada de Fourier del potencial electrostático φ está en función del campo eléctrico como $\tilde{\varphi} = -i\tilde{E}_i/\xi_i$, entonces está compuesta por varias contribuciones

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi} &= \tilde{\varphi}^{\text{espontánea}} + \tilde{\varphi}^{\text{deformación}} + \tilde{\varphi}^{\delta\epsilon}, \\ \tilde{\varphi}^{\text{espontánea}} &= -i\frac{4\pi}{\epsilon_r\xi^2} (P_{\text{espontánea}}^{PC} - P_{\text{espontánea}}^M) \tilde{X}_{PC}(\xi), \\ \tilde{\varphi}^{\text{deformación}} &= -i\frac{4\pi}{\epsilon_r\xi^2} [2(\xi_1\tilde{e}_{13} + \xi_2\tilde{e}_{23})\epsilon_{15} + \xi_3\epsilon_{31}(\tilde{e}_{11} + \tilde{e}_{22}) + \xi_3\epsilon_{33}\tilde{e}_{33}], \\ \tilde{\varphi}^{\delta\epsilon} &= -i\frac{4\pi}{\epsilon_r\xi^2} [2(\xi_1\tilde{e}_{13}^x + \xi_2\tilde{e}_{23}^x)(\delta\epsilon)_{15} + \xi_3(\delta\epsilon)_{31}(\tilde{e}_{11}^x + \tilde{e}_{22}^x) + \xi_3(\delta\epsilon)_{33}\tilde{e}_{33}^x], \end{aligned} \quad (3.43)$$

donde $\tilde{\varphi}^{\delta\epsilon}$ es el campo debido a las constantes piezoeléctricas de cada material, y \tilde{e}_{ij}^X denota la transformada de Fourier del producto $X_{PC}e_{ij}$, que corresponde a la función característica y la deformación elástica en la estructura, la cual se calcula usando el teorema de convolución

$$\tilde{e}_{ij}^x(\xi) = \sum_{\xi} X_{PC}(\xi - \tilde{\xi})\tilde{e}_{ij}(\tilde{\xi}). \quad (3.44)$$

Ahora tenemos todos los componentes del Hamiltoniano: la energía cinética de los portadores, el campo de deformación y el campo piezoeléctrico. Todos los parámetros necesarios para evaluar el Hamiltoniano de la ecuación (3.32) se encuentran en la Tabla 3.3. Es importante mencionar que un campo eléctrico externo y constante φ_{ext} se puede introducir en el Hamiltoniano por medio de un término en función de la dirección x , y o z en la diagonal, como se reporta en [79]. En el capítulo 5 se mostrará el efecto que tiene tal campo eléctrico sobre los portadores.

Parámetro	GaN	AlN	Parámetro	GaN	AlN
E_g , eV	3.5	6.3	m_{\perp}/m_0	0.20	0.33
Δ_1 , eV	0.022	-0.104	m_{\parallel}/m_0	0.18	0.25
Δ_2 , eV	0.005	0.004	a_c , eV	-4.08	-4.08
Δ_3	0.005	0.004	C_{11} , GPa	367	396
A_1	-7.24	-4.17	C_{12} , GPa	135	137
A_2	-0.51	-0.58	C_{13} , GPa	103	108
A_3	-6.73	3.68	C_{33} , GPa	405	373
A_4	-3.36	-2.17	C_{44} , GPa	95	116
A_5	-3.35	-2.27	a , Å	3.189	3.112
A_6	-4.72	-2.21	c , Å	5.185	4.982
D_1 , eV	0.7	0.7	ϵ_{15} , C/m^2	-0.49	-0.6
D_2 , eV	2.1	2.1	ϵ_{31} , C/m^2	-0.49	-0.6
D_3 , eV	1.4	1.4	ϵ_{33} , C/m^2	0.73	1.46
D_4 , eV	-0.7	-0.7	$P_{\text{espontánea}}$, C/m^2	-0.029	-0.081
D_5 , eV	-0.7	-0.7	ϵ	9.6	9.6
D_6 , eV	1.4	1.4			

Tabla 3.3: Parámetros de los materiales tipo wurtzita empleados en este trabajo, obtenidos de [67].

3.3.3. Hamiltoniano de 4 bandas para InAs/GaAs

Con la finalidad de obtener una mejor comparación entre los sistemas de PCA de InAs/GaAs (es decir sus diferentes geometrías), se usó el hamiltoniano de 4 bandas para calcular las funciones de onda con sus correspondientes energías, pues no se considera el efecto del espín, tanto en los resultados teóricos como experimentales. El hamiltoniano de 4 bandas para estos sistemas surge como un submatriz del modelo de 8 bandas, y está dado por

$$H = \begin{bmatrix} A & V^* & \sqrt{3}V & -U \\ V & -P + Q & R & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ \sqrt{3}V^* & R^* & -P - Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ -U & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S & -P - \Delta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_c e & -v^* & -\sqrt{3}v & u \\ -v & -p + q & r & \sqrt{\frac{3}{2}}s \\ -\sqrt{3}v^* & r^* & -p - q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* \\ u & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s & -a_v e \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

De igual forma que en la ecuación (3.37) y con la finalidad de tener el valor cercano a la energía de los portadores en el punto Γ , la ecuación (3.45) se reduce a lo siguiente

$$\begin{bmatrix} Ae & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -Pe + Qe & Re & \sqrt{\frac{3}{2}}Se \\ 0 & Re^* & -Pe - Qe & \frac{1}{\sqrt{2}}Se^* \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}Se^* & \frac{1}{\sqrt{2}}Se & -Pe - \Delta \end{bmatrix}, \quad (3.46)$$

cada uno de los elementos está dada por

$$\begin{aligned} Ae &= E_c + a_c(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}), \\ Pe &= E_v + a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}), \\ Qe &= b(e_{zz} + \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy})), \\ Re &= \frac{\sqrt{3}}{2}b(e_{xx} - e_{yy}) - ide_{xy}, \\ Se &= -d(e_{xz} - ie_{yz}), \end{aligned} \quad (3.47)$$

donde E_c y E_v son las barreras y pozos de potencial correspondientes para electrones y huecos en el punto cuántico, los elementos e_{ij} son las componentes de la deformación y todos las demás constantes se encuentran en la Tabla 3.2.

3.4. Esquema general de la solución numérica

Finalmente se resuelve el sistema $H\psi = E\psi$ con $H = H_k + H_s$ dado por la ecuaciones (3.45) y (3.32) para el caso de InAs/GaAs y GaN/AlN, respectivamente. Note que ψ consta de 4 u 8 envolventes (según sea el caso) que corresponden a los portadores en las distintas bandas. A continuación se describen las principales consideraciones utilizadas para resolver los sistemas en el programa:

- El *software* COMSOL, el cual resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales por medio de elementos finitos (ver Apéndice C), es empleado para la solución numérica. El programa cuenta con la opción de resolver un sistema de ecuaciones con n incógnitas. Los resultados que arroja COMSOL son los eigenvectores que en este caso son las funciones envolventes, las cuales están dadas por

$$\psi = \sum F_p |n_p\rangle \quad (3.48)$$

donde F_p represente una constante y n_p representa cada uno de los estados de los portadores p junto con los eigenvalores o valores de la energía. Estos resultados numéricos son utilizados para obtener algunas de las propiedades ópticas como veremos más adelante.

- Para obtener una solución físicamente aceptable y con una buena precisión, se escoge un mallado (puntos en los que es resuelto el sistema de ecuaciones) lo suficientemente grande para asegurar que hay una correcta convergencia en los eigenvalores y sus correspondientes eigenvectores. El mallado depende de las dimensiones de la nanoestructura y de la geometría pues en regiones con curvas muy pronunciadas, el programa genera en forma automática un mayor número de puntos de malla y del número de incógnitas a resolver, en promedio para sistemas con 4 incógnitas se usó un mallado de 80000 elementos y para los sistemas con 8 incógnitas de 45000 elementos.
- Las condiciones de frontera establecidas para la resolución de las funciones de onda de los portadores en los PC, fueron las siguientes:
- Las fronteras interiores, es decir aquellas establecidas entre el punto cuántico y la matriz fueron consideradas como fronteras continuas.

- Las fronteras exteriores, las cuales delimitan las dimensiones de la región donde se encuentra el PC y el material matriz dada por la periodicidad del sistema, fueron establecidas como condiciones de Dirichlet, las cuales establecen que la función de onda es cero en éstas. Se eligieron estas condiciones pues se observó que las dimensiones de la caja de cálculo son lo suficientemente grandes para que la función de onda de los estados confinados decaiga fuera del punto sin efecto en las fronteras. Se utilizaron varios tamaños de caja hasta encontrar el adecuado que permita un balance entre el número de puntos en la malla en el que se calcularon las envolventes y, por otro lado, que los eigenvalores convergieran hasta la quinta cifra decimal. Además físicamente es posible estudiar experimentalmente un PC aislado como se verá en el siguiente capítulo, sobre todo en anillos cuánticos, por lo que las condiciones de Dirichlet en estas fronteras son las adecuadas.

Capítulo 4

Fotoluminiscencia

Este capítulo está dedicado al estudio de la interacción de la luz con la materia, del cual surge la teoría y modelos necesarios para poder describir algunas propiedades ópticas como la absorción y emisión de luz. Para el desarrollo de esta teoría es necesario tratar a la luz como una onda electromagnética y en algunas ocasiones como fotones, bajo esta última concepción surge el concepto de excitón. Adicionalmente se definirán los conceptos de tiempo de vida medio y probabilidad de transición de portadores usando la Regla de oro de Fermi. Finalmente, se describirán los diferentes arreglos experimentales de fotoluminiscencia utilizados para la caracterización de anillos cuánticos.

4.1. Interacción de la luz con la materia

Para poder estudiar los procesos de emisión de luz, los cuales están relacionados con los niveles de energía en que los electrones pueden estar en los diferentes niveles atómicos, la fotoluminiscencia es la técnica más ampliamente usada pues es de fácil implementación y proporciona información sobre los niveles de energía relacionados con las transiciones más probables. La luminiscencia no puede ser descrita fácilmente por parámetros macroscópicos ya que la emisión espontánea es un proceso fundamentalmente cuántico. Se abordará una descripción breve del modelo físico en el que una onda electromagnética es absorbida y emitida por un átomo, pues se ha visto que este modelo atómico puede ser utilizado en puntos cuánticos, debido a que ambos sistemas poseen niveles discretos de energía.

4.1.1. Emisión y absorción de fotones por átomos

Los procesos de emisión y absorción en los átomos ocurren entre los niveles discretos de energía. El proceso de absorción ocurre cuando una onda electromagnética (OEM) incide sobre el átomo provocando que electrones en niveles inferiores de energía adquieran energía de la OEM y ocupen niveles superiores. En el proceso de emisión el electrón en niveles superiores decae a niveles inferiores, pues no está en un estado estable, emitiendo energía en forma de OEM.

El modelo empleado para describir tales procesos, es el modelo semi-cuántico, en el cual la OEM tiene energía cuantizada, a este cuanto se le denomina fotón y se le asocia una longitud de onda.

Para comprender mejor estos procesos es necesario hacer una breve descripción matemática de ellos, comenzando con la interacción de un electrón con un campo electromagnético, la cual está descrita por un Hamiltoniano [80, 81] dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

que contiene el término de interacción:

$$\begin{aligned} H_{int} &= \frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}, \\ &= \frac{e}{mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde e , c , m son constantes fundamentales correspondiente a la carga del electrón, velocidad de la luz en el vacío y masa del electrón libre, respectivamente, \mathbf{p} es el momento y \mathbf{A} es el potencial vectorial que se asume como una perturbación dependiente del tiempo que potencialmente puede conducir transiciones entre los estados atómicos. En la ecuación 4.1 usualmente se desprecia el término proporcional a \mathbf{A}^2 , el cual describe el esparcimiento de los fotones suponiendo que es pequeño comparado con el término lineal

$$\nu = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}. \quad (4.3)$$

Para continuar con el análisis es necesario considerar parte de la teoría clásica electromagnética, con la cual se permite que el campo \mathbf{A} tenga una frecuencia ω y su correspondiente vector de onda \mathbf{k} (de hecho, un campo arbitrario podría ser una combinación lineal de muchas frecuencias, direcciones de propagación y polarizaciones)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 2\mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (4.4)$$

donde \mathbf{A}_0 es un vector real y se ha introducido el factor de 2 por la conveniencia de dividir el coseno en dos exponenciales.

Ahora es necesario cuantizar el campo electromagnético en fotones [82] para satisfacer la ecuación de Plank $E = \hbar\omega$ y poder escribir \mathbf{A} en términos del número de fotones del campo electromagnético (con frecuencia ω y vector de onda \mathbf{k}) para finalmente obtener la energía del campo representado por \mathbf{A} . Recordando que la energía dentro de un volumen V es (ver apéndice D)

$$E = \frac{2\varepsilon_0\omega^2}{c^2}V|A_0|^2 = N\hbar\omega, \quad (4.5)$$

donde ε_0 , \hbar son las constantes de permitividad eléctrica del vacío y Plank, respectivamente, con esto se puede escribir \mathbf{A} en términos del número N de fotones

$$|A_0|^2 = N\hbar\omega \frac{c^2}{2\varepsilon_0\omega^2V} = \frac{N\hbar c^2}{2\omega\varepsilon_0V}$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{N\hbar c^2}{2\omega\varepsilon_0V} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{e}}(2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)), \quad (4.6)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{N\hbar c^2}{2\omega\varepsilon_0V} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{e}}(e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}),$$

donde se ha introducido el vector unitario $\hat{\mathbf{e}}$ para indicar la dirección (vector de polarización) del potencial vectorial. Ahora se tiene una perturbación dependiente del tiempo que puede inducir transiciones radiativas, el exponente con término ω positivo indica la emisión estimulada y el negativo la absorción de un cuanto de OEM.

4.1.2. Cuantización de la luz

En el caso de emisión espontánea, es decir, cuando no hay perturbación que provoque el decaimiento energético de los electrones, es necesario ir más allá de la teoría clásica electromagnética y cuantizar, además del campo electromagnético (EM) [81, 83] la energía de éste, de modo que los términos en la perturbación $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, ecuación (4.6) describirán la emisión o absorción de un fotón de energía $\hbar\omega$, por lo que se considera que el número de fotones en el campo EM es el mismo que n osciladores armónicos con energías “adecuadas”. Esencialmente, se postula que el vacío puede contener un infinito número de osciladores armónicos, uno para cada vector de onda (o frecuencia) de la luz.

Por lo que ahora es necesario ir del oscilador clásico al oscilador cuántico, en el cual el estado base del campo no tiene energía cero y, por lo tanto, la perturbación nunca es

cero. Asumiendo el cambio $N \rightarrow N+1$ en el término que crea un fotón (emisión) en analogía con el operador de creación a^\dagger en el Hamiltoniano [73, 82], con este cambio la perturbación puede escribirse como:

$$\mathbf{A}(r, t) = \left[\frac{\hbar c^2}{2\omega\varepsilon_0 V} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{\epsilon}(\sqrt{N}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \sqrt{N+1}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}), \quad (4.7)$$

recordando que el exponente negativo corresponde a la emisión y el positivo a la absorción de un fotón, donde se ha considerado N como un operador el cual crea o destruye un fotón, elevando o bajando la energía de un solo oscilador armónico en el vacío. Ahora, cuando no se aplica campo ($N = 0$)

$$\nu_{N=0} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{e}{mc} \left[\frac{\hbar c^2}{2\omega\varepsilon_0 V} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p}. \quad (4.8)$$

es decir, existe emisión aún sin perturbación.

Cabe destacar que el postulado propuesto, de que el vacío posee un infinito número de osciladores correspondientes a los diferentes modos de la OEM y la cuantización de estos osciladores trae como consecuencia que el estado base de la densidad de energía de la OEM no es cero, por lo que el vacío es entonces responsable del decaimiento espontáneo de estados excitados en los átomos a través de la emisión de fotones.

4.2. Excitón de Wannier

Aunque en las secciones anteriores se ha descrito la interacción de una onda electromagnética con electrones para describir los procesos de absorción y emisión en átomos, en la mayoría de las referencias [14, 26, 73, 84], entre otras, se propone que este mismo modelo es aplicable a puntos cuánticos, pues la longitud de onda utilizada para el estudio de los PC está en el rango de $\lambda = 380$ nm a 1000 nm, la cual es muy grande comparada con las dimensiones de confinamiento de las nanoestructuras. Además se introduce la aproximación conocida como *Aproximación del Dipolo Eléctrico* o aproximación dipolar [81, 85], la cual corresponde a considerar $\exp(\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \approx 1$. Aunque a diferencia de los átomos, los niveles de energía ahora considerados son los niveles de las bandas de energía en los semiconductores que conforman a los PC.

Existen dos tipos de emisión, la emisión espontánea y la emisión estimulada [85], en esta última, la emisión de un fotón es provocada por una perturbación generada por

otro fotón, con lo que resultan dos fotones emitidos con el mismo vector de onda, vector de polarización y dirección de propagación.

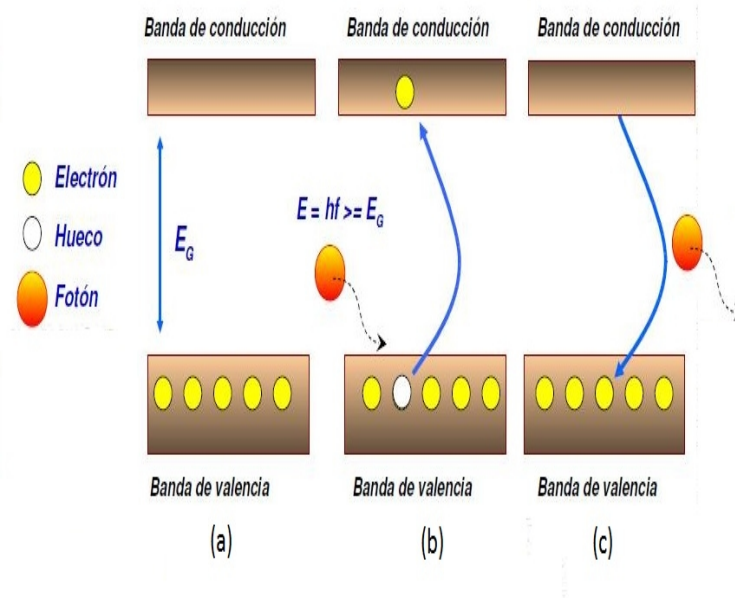


Figura 4.1: Diagrama de transiciones interbanda en semiconductores en bulto a) semiconductor en estado base, b) proceso de absorción, c) proceso de emisión [87].

Con lo anterior, en la teoría de bandas de energía de un sólido cristalino, un excitón de Wannier-Mott [12] es una cuasi-partícula que se forma durante la excitación de los electrones en el cristal (ver Fig. 4.1b), cuando un electrón es transferido de la banda de valencia a la banda de conducción [86]. En esta situación, los estados de la banda de valencia son desocupados y es posible considerar, si se desprecia la interacción de Coulomb entre los electrones, que el electrón de la banda de conducción queda ligado a un hueco de la banda de valencia a través de una interacción de Coulomb [57]. En este modelo el hueco tiene asociada una carga positiva y una masa efectiva. El estado queda caracterizado físicamente por un electrón y un hueco orbitando uno alrededor del otro, y que puede propagarse por el cristal. La energía de ligadura de estos excitones es menor que el ancho de la banda prohibida y su radio es, por tanto, mayor que el parámetro de la red. Esto implica que la dinámica del excitón es equivalente a la de un par de cargas de signos opuestos moviéndose en un material de cierta constante dieléctrica [88]. Sin embargo, para las nanoestructuras la energía del excitón depende de los niveles de energía, es decir, en los puntos cuánticos -a

diferencia del material en bulto- el excitón solo puede tener ciertos niveles de energía como se observa en la Figura 4.2, donde se muestran los niveles discretos en las transiciones entre la banda de valencia y de conducción en un PC.

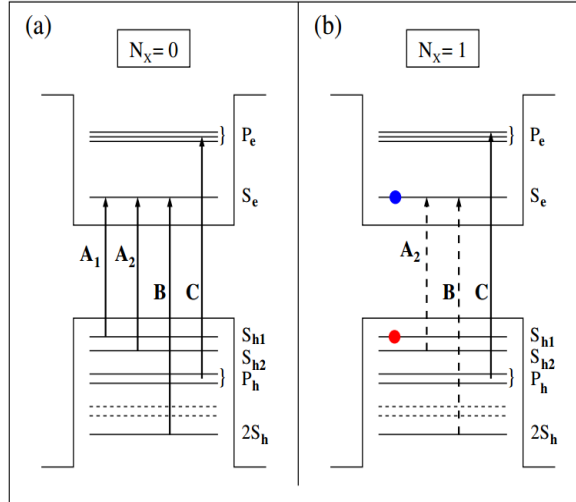


Figura 4.2: Diagrama esquemático de las transiciones interbanda en un punto cuántico dependientes del número de excitones N_x , los niveles del electrón y hueco se indican con líneas horizontales y las transiciones de absorción interbanda son denotados por líneas verticales. a) con $N_x=0$, b) con $N_x=1$. Notar que en (b) la transición A_1 es prohibida, mientras que las transiciones A_2 y B son atenuadas (líneas verticales discontinuas) [93].

Existen algunos otros tipos de excitones, por ejemplo, los excitones Frenkel [86], así como una gran variedad de subtipos, como los excitones cargados positiva y negativamente, denotados por X^{1+} y X^{1-} , respectivamente; biexcitones neutros $2X^0$, biexcitones cargados, triexcitones, etc. [89,90] (ver Fig. 4.3a). Sin embargo, en este trabajo está centrado en excitones neutros “brillantes” denotados por X^0 emitidos espontáneamente. El término brillante hace referencia a excitones ópticamente activos [91, 92], en los cuales electrón y hueco tienen espín diferente, mientras que para los excitones “oscuros”, electrón y el hueco presentan espín igual (ver Fig. 4.3b) y cuya recombinación conlleva a una diferencia en el momento angular ± 2 , la cual no puede ser llevada a cabo con una transición de dipolo eléctrico [26], violando la regla de selección del momento angular total $\Delta J = 0, \pm 1$.

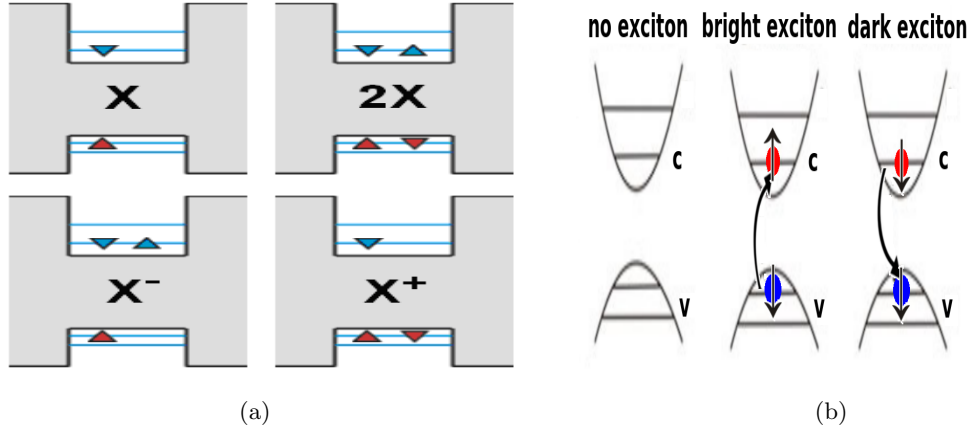


Figura 4.3: (a) Diferentes tipos de excitones en PC [87], (b) Excitón brillante y oscuro [94].

4.3. Fuerza del oscilador y tiempo de vida media

Ahora se describirán algunos parámetros que nos permiten obtener en forma numérica el tiempo de vida medio de excitones neutros. Comenzando con la fuerza del oscilador descrito bajo la aproximación dipolar, en la cual se considera al PC como un sistema de dos niveles, con el estado base y el estado excitado denotados por $|i\rangle = \psi_{ini}(\mathbf{r})$, con $H_0|i\rangle = E_i|i\rangle$ y $|f\rangle = \psi_{fin}(\mathbf{r})$, con $H_0|f\rangle = E_f|f\rangle$. Por simplicidad se considera la interacción con un solo fotón y que la transición es en modo cuasi o resonante $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$.

Con las aproximaciones mencionadas, la fuerza del oscilador f_o está definida como [95]

$$f_o = \frac{2\hbar^2}{mE_{exc}} \sum_{\alpha} \left| \int_V d\mathbf{r} \psi_e^*(\mathbf{r})(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}) \psi_h^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \right|^2. \quad (4.9)$$

la cual describe la fracción del oscilador que es acoplada al campo electromagnético para un estado electrónico ψ_e . En la ecuación (4.9) ϵ es la polarización de la luz incidente, $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$ es el operador del vector de onda, α denota las diferentes funciones de onda de los huecos correspondientes al mismo nivel degenerado y E_{exc} es la energía de enlace del excitón bajo el modelo de confinamiento fuerte en el cual los efectos de la energía cinética son más importantes que los efectos de intercambio y correlación [95,96] de modo que

$$E_{exc} = E_{e,j} - E_{h,i} - J_{ji}^{eh} + K_{ji}^{eh} \delta_{SO}, \quad (4.10)$$

donde los índices i, j etiquetan los estados de huecos y electrones, J y K son las energías

de interacción e intercambio, [96–100] definidas como

$$J = E_{ji}^{eh} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \int \frac{|\psi_j^e(\mathbf{r}_e)|^2 |\psi_i^h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h, \quad (4.11)$$

$$K = E_{ji}^x = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \int \frac{\psi_j(\mathbf{r}_e)^* \psi_i(\mathbf{r}_h)^* \psi_j(\mathbf{r}_e) \psi_i(\mathbf{r}_h)}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h. \quad (4.12)$$

donde $\psi(\mathbf{r}_P)$ corresponde a la función de onda del portador P , con $P = e, h$. Finalmente se obtiene la expresión para calcular el tiempo de vida media τ de excitones neutros [52, 95, 101–103] con la ecuación

$$\tau = \frac{2\pi\epsilon_0 m_0 c^3 \hbar^2}{n e^2 E_{exc}^2 f} = 2.3045 \times 10^{-8} \frac{1}{n E_{exc}^2 f} [s], \quad (4.13)$$

donde n es el índice de refracción del material en bulto, E_{exc} es la energía de excitación y los demás parámetros son constantes fundamentales. En este trabajo se uso $n_{GaN} = 2.29$ [103] y $n_{InAs} = 3.714$ (a 1.50eV) [104].

4.4. Regla de oro de Fermi

En esta sección se describirá cómo obtener la razón de probabilidad de transición de un electrón de la banda de conducción a la banda de valencia en puntos cuánticos, la cual es calculada con la regla de oro de Fermi, que si bien se desarrolló para describir la no homogeneidad en las líneas de emisión de los espectros de gases, la teoría se ha extendido a nanoestructuras. Aquí solo se desarrollará la formulación en forma breve, en las referencias [73, 105] se encuentra un desarrollo más elaborado. La Regla de oro de Fermi para estados cuantizados [1, 14, 106–108] permite conocer la probabilidad de transición por unidad de tiempo entre estados, dada por

$$\Gamma_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{fin} | W_{ab} | \psi_{ini} \rangle|^2 \delta(\omega_{if} - \omega), \quad (4.14)$$

donde ψ_{ini} y ψ_{fin} son los estados inicial y final, respectivamente, y $|\langle \psi_{ini} | W_{ab} | \psi_{fin} \rangle|$ es conocida como un elemento de matriz donde W_{ab} es la perturbación del sistema, $\delta(\omega_{if} - \omega)$ está asociada a la conservación de la energía.

La probabilidad por unidad de tiempo de que un electrón inicialmente en el estado $|\psi_{ini}\rangle$ sea transferido al estado final $|\psi_{fin}\rangle$ con emisión de un fotón de energía $\hbar\omega$, se obtiene substituyendo en el elemento de matriz de la ecuación (4.14) asumiendo una perturbación de

una OEM con polarización \mathbf{p} y vector de polarización ϵ

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega\epsilon_0 V}} \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_{\mathbf{k}}), \quad (4.15)$$

con una expresión similar para la absorción. Suponiendo la aproximación dipolar, donde se asume que la longitud de onda de la radiación es mayor que el radio de Bohr, o en este caso mayor que el radio de Bohr del material, entonces se puede reemplazar $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ por $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, donde \mathbf{R} es la posición del centro de masa del átomo. Este factor es ahora una simple constante en lugar de contener la posición del electrón. Asumiendo así que el centro de masa de un átomo es $R = 0$, por lo que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$ se tiene finalmente:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega\epsilon_0 V}} \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* \cdot \mathbf{d} | i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_{\mathbf{k}}). \quad (4.16)$$

donde \mathbf{d} es el momento dipolar, en la ecuación (4.16) se ha hecho uso de la relación entre momento \mathbf{p} y la posición \mathbf{r} dada por la expresión [14]

$$\langle f | \mathbf{p} | i \rangle = \frac{im}{\hbar} \langle f | [H_0, \mathbf{r}] | i \rangle = \frac{im}{\hbar} (E_f - E_i) \langle f | \mathbf{r} | i \rangle = im\omega \langle f | \mathbf{r} | i \rangle \quad (4.17)$$

La descripción anterior de pasar de un estado inicial $\langle i |$ a uno final $| f \rangle$ con la emisión de un fotón de vector de onda \mathbf{k} y vector de propagación \mathbf{r} , es conocida como emisión espontánea. En el siguiente capítulo se establecerá la relación con resultados experimentales.

4.5. Arreglos experimentales

Con las bases teóricas ya establecidas, en las próximas secciones se describirán los arreglos experimentales para la medición de los espectros de microfotoluminiscencia (μFL) (fotoluminiscencia en una área reducida) y tiempo de vida media de excitones neutros de anillos cuánticos de InAs/GaAs. Se comenzará con la descripción del arreglo para la medición de microfotoluminiscencia, para la cual también se varía el ángulo de incidencia de luz linealmente polarizada y, finalmente, se mostrará el arreglo para la medición del tiempo de vida media.

Las consideraciones bajo las cuales se obtuvieron las mediciones fueron las siguientes: todos los espectros fueron obtenidos con un espectrómetro TriVista modelo 555, el cual puede operar desde 185 nm a 2200 nm con una máxima resolución de 4 picómetros a

500 nm [109]. Este espectrómetro puede operar en el modo de una o tres etapas, en ambos casos la señal de la luz emitida es colectada por una cámara CCD (*Charge Coupled Device*). El modo de una etapa es utilizado para señales poco intensas, con la desventaja que se pierde parte de la resolución espectral, por el contrario en el modo de tres etapas se alcanza la mejor resolución, pero es necesario una mayor intensidad en la señal que se adquiere. Todos los espectros que se presentan en el capítulo 5 fueron obtenidos en el modo de una etapa a 7.5 K a menos que se indique lo contrario, pero bajo diferentes condiciones de longitud de onda del láser de excitación (λ_e), potencia del láser (P) así como de tiempo de integración (T_i), que es el tiempo en el que el CDD recolecta fotones provenientes de la muestra, la cual está colocada en un criostato óptico enfriado por un flujo constante de helio gaseoso a 4 K; dependiendo de la cantidad de éste se puede controlar la temperatura y, para evitar la generación de fonones, la muestra se mantuvo a 7.5 K.

4.5.1. Arreglo experimental de microfotoluminiscencia

Este arreglo experimental se utilizó en la obtención de los espectros de microfotoluminiscencia para investigar las características generales de estos sistemas, las cuales se detallarán en el siguiente capítulo. Este arreglo presenta dos variantes: Incidencia oblicua e incidencia normal (ver Figs. 4.4 y 4.5). En la incidencia normal, el láser incide sobre la muestra a 90° , mientras que en la incidencia oblicua incide en un ángulo aproximado de 45° como se puede observar en la Figura 4.4. A continuación se describirán brevemente ambas configuraciones.

Configuración oblicua: es la configuración más sencilla de implementar, en ésta el láser excita a la muestra en un ángulo aproximado de 45° . Los fotones emitidos por la muestra son desviados por un divisor de haz al 50 %, una fracción es desviada a un detector, el cual proporciona una imagen, lo que nos permite asegurar que la muestra está fija, pues las vibraciones hacen que el enfoque sobre la muestra se pierda. La otra parte es enviada directamente al espectrómetro, que descompone la luz en sus diferentes longitudes de onda a través de rejillas de dispersión para ser recolectadas por el CCD, cuyos datos obtenidos son recolectados por la computadora.

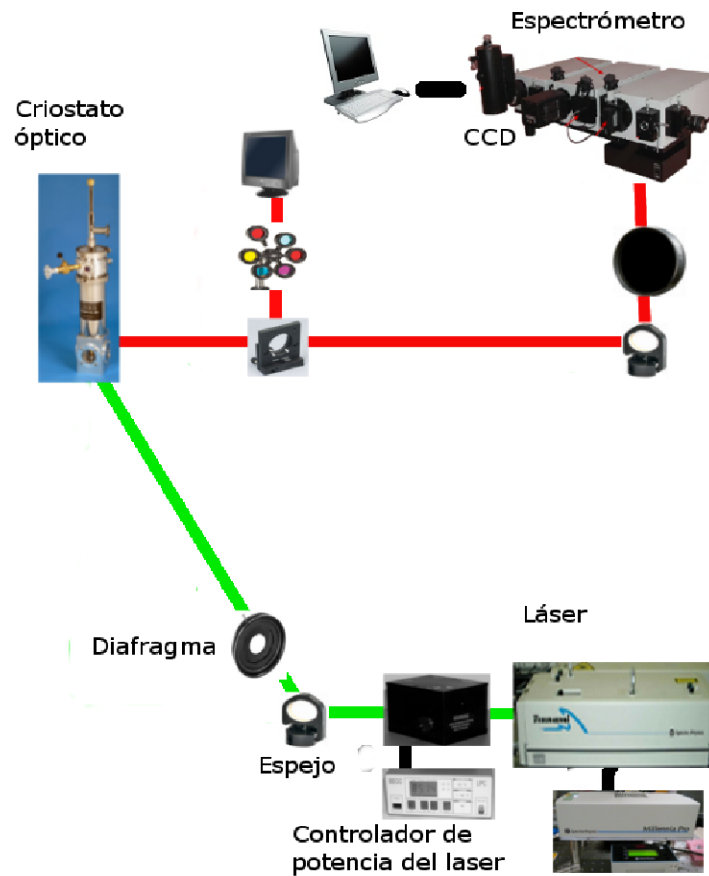


Figura 4.4: Esquema experimental para la obtención de espectros de fotoluminiscencia en la configuración a incidencia oblicua.

Configuración normal: básicamente es igual al caso anterior, con la modificación que el láser es desviado por un divisor de haz antes de excitar la muestra con la finalidad de que incida en un plano perpendicular. En esta configuración parte del láser de excitación es reflejado, por lo que es colocado un filtro para evitar que pase al detector.

La elección de un tipo de incidencia depende de lo que se desee observar, pues a incidencia normal es posible obtener algunos nuevos picos en el espectro, los cuales son debidos a la excitación de estados sobre el plano xy , mientras a incidencia oblicua se podría pensar que ninguna dirección es favorecida por el láser de excitación.

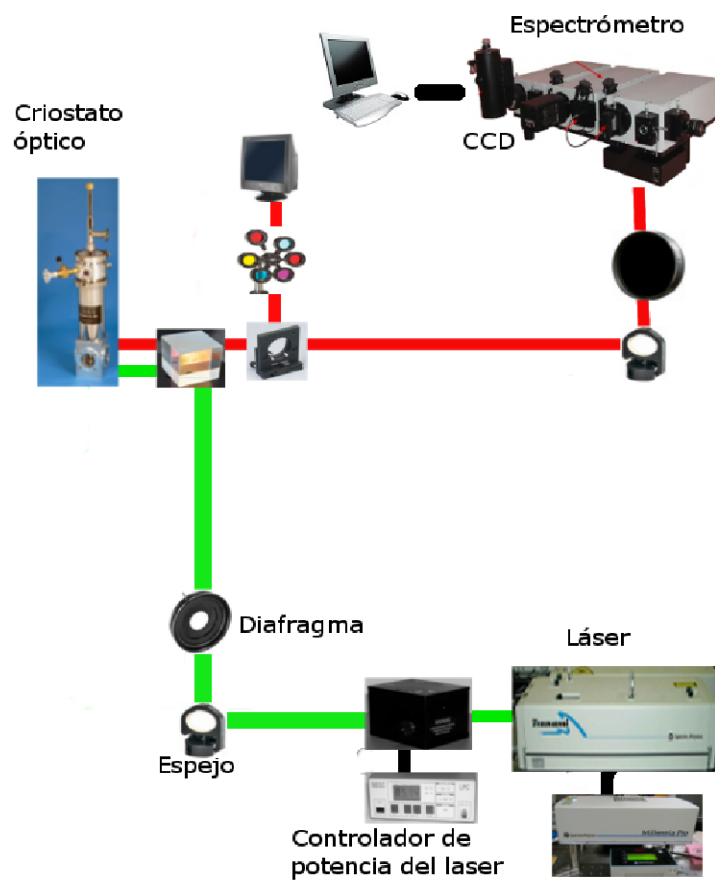


Figura 4.5: Esquema experimental para la obtención de espectros de fotoluminiscencia en la configuración a incidencia normal.

4.5.2. Arreglo de microfotoluminiscencia variando ángulo de incidencia

Antes de describir este arreglo experimental es conveniente explicar cómo se obtiene luz linealmente polarizada en diferentes orientaciones o ángulos. Como se muestra en la Figura 4.6 [110], una fuente de luz lineal (en nuestro caso el láser) atraviesa un retardador variable de longitud de onda, dependiendo del retardo se obtiene luz con polarización circular o elíptica (con diferente relación en los ejes a y b), ésta atraviesa un retardador fijo de un cuarto de onda, con lo que se obtiene nuevamente luz linealmente polarizada pero en la cual es posible cambiar su ángulo, con respecto a la original, a través del control del porcentaje de retardo en la longitud de onda del primer retardador.

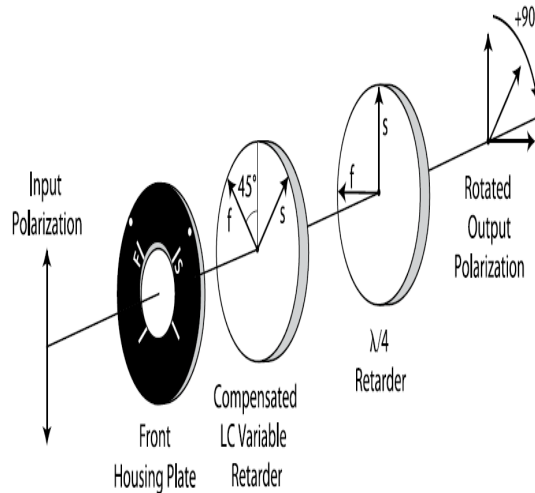


Figura 4.6: Utilización de retardadores de longitud de onda para obtener luz linealmente polarizada a varios ángulos de incidencia [110].

Esta variante del arreglo experimental solo se puede realizar en incidencia oblicua, pues los polarizadores colocados en el trayecto de la luz emitida por la muestra crearían interferencia con la señal proveniente de la misma (Fig. 4.7). Este arreglo se utilizó para determinar los cambios en la fotoluminiscencia al incidir luz linealmente polarizada con diferentes ángulos de incidencia, y si bien no se puede determinar el ángulo preciso con respecto a la muestra, si es posible observar algunos cambios en el espectro de emisión, los cuales se detallarán en el siguiente capítulo.

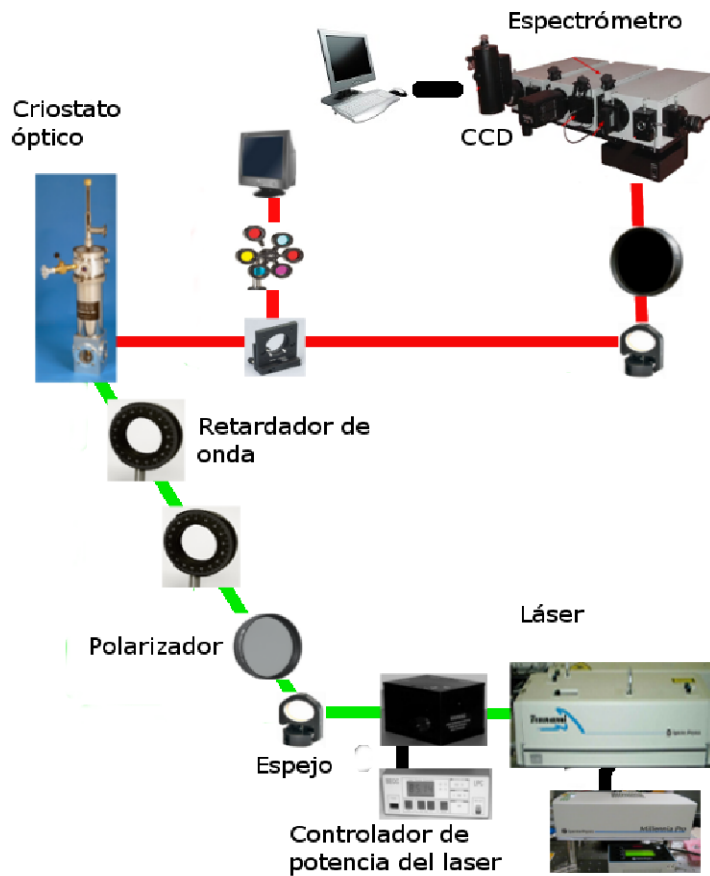


Figura 4.7: Esquema experimental para la medición de espectros de fotoluminiscencia variando el ángulo de incidencia de luz linealmente polarizada.

4.5.3. Arreglo de medición de tiempo de vida media de excitones neutros

Con respecto a la configuración para la medición del tiempo de vida media de excitones neutros, es importante mencionar que ésta no es una medición directa pues experimentalmente se mide una gran cantidad de diferencias en tiempo, entre la excitación de la muestra por el láser (en modo pulsante con duración de 100-150 fs [111, 112]) y la detección de fotones emitidos por la misma. Como se muestra en la Figura 4.8, la excitación es generada por el láser, al mismo tiempo el láser activa la señal para el generador de retardo, con la finalidad de que la señal de excitación y emisión dado por el fotodiodo de avalancha (APD por sus siglas en inglés) lleguen adecuadamente al TAC (*Time to Amplitud Converter*) cuya salida es un voltaje proporcional a la escala de tiempo asignada previamente (en este caso 12

ns). La señal de salida del TAC es analizada por el MCA (*Multichannel Analyzer*), el cual crea un histograma con el número de coincidencias, entre los fotones de excitación y los de emisión, versus su diferencia de tiempo (ahora manejado como voltaje), es decir, el TAC proporciona una salida diferente de cero si para los fotones enviados a la muestra se han detectado unos provenientes de la misma.

El MCA suma una coincidencia al histograma, el cual representa una función de probabilidad de que un fotón sea emitido a un cierto tiempo por la muestra, después que ésta haya sido excitada. Es decir, el MCA acumula el número de veces que algún fotón emitido por la muestra ha llegado al APD después de cierto tiempo de ser excitada la muestra. Finalmente, mediante el uso del programa PICO [113] se ajusta a funciones de distribución, en este caso fue a un modelo *Anisotropy [Reconvolution]*, el cual mostró el mejor ajuste al histograma, con lo que se obtiene el tiempo de vida promedio.

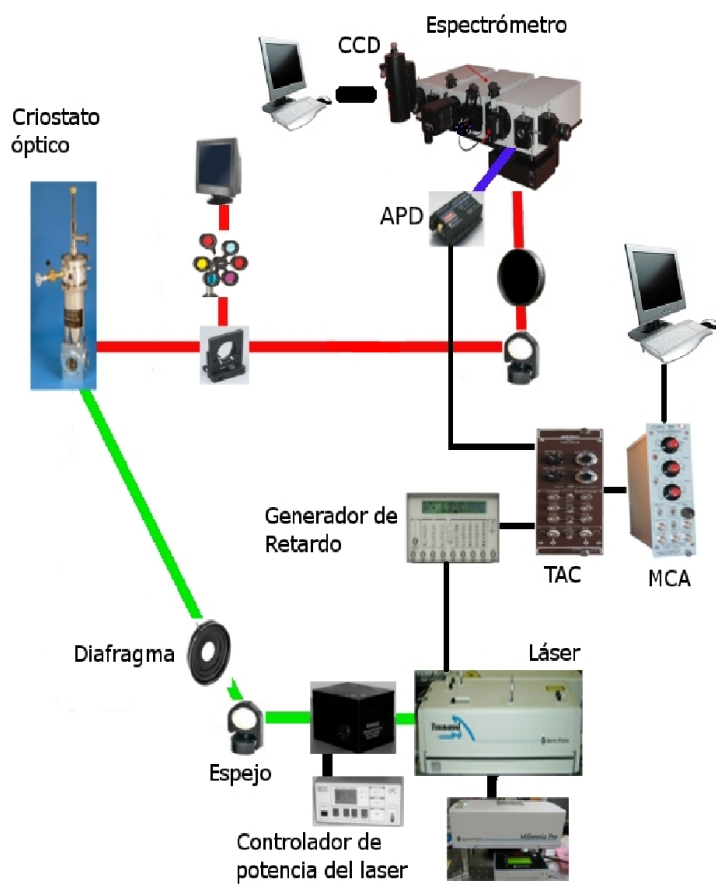


Figura 4.8: Esquema experimental para la obtención tiempos de vida media de excitones en la configuración de incidencia normal.

Capítulo 5

Resultados

En el capítulo se presentan los resultados obtenidos del estudio de las propiedades electrónicas y ópticas de puntos cuánticos autoensamblados de InAs/GaAs y GaN/AlN, para las diferentes geometrías estudiadas, bajo el marco de la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ en el modelo de 4 u 8 bandas incluyendo el efecto de la deformación, campo piezoeléctrico y gradiente de indio, según el sistema considerado. También se incluyen los resultados experimentales obtenidos para anillos cuánticos crecidos por epitaxia por gota y caracterizados por medio de μ FL. Se estudian aspectos como la emisión en función de la longitud de onda de excitación, variación con la potencia, incidencia de luz linealmente polarizada, así como tiempo de vida media de excitones neutros. Finalmente, se realiza una comparación entre datos teóricos y experimentales de la energía de emisión en función del vector de polarización y tiempo de vida media de excitones para este último sistema.

5.1. Aspectos generales del cálculo

Como primera sección se describirá el procedimiento seguido para la obtención de las funciones de onda de los portadores de los diferentes sistemas. Se calcularon -con programas desarrollados en MATLAB- las diferentes componentes de la deformación (ecuación 2.20), usando las ecuaciones (2.21) y (2.22) para el modelo anisotrópico y la ecuación (2.25) para el isotrópico, respectivamente, así como el campo piezoeléctrico para el sistema GaN/AlN con la ecuación (3.42). Para los anillos cuánticos se usó $-150 \leq n_1, n_2, n_3 \leq 150$, y en los demás casos los límites son ± 100 . Los parámetros de periodicidad d_1, d_2, d_3 dependen de cada sistema, pues no presentan la mismas dimensiones (se especifican en cada caso).

Una vez que los valores de la deformación y campo piezoeléctrico fueron obtenidos en un arreglo tridimensional, éstos se introducen como elementos del hamiltoniano correspondiente a la deformación, junto con los correspondientes parámetros asociados a cada material y, de igual forma, aquellos asociados al hamiltoniano de la parte cinética. El hamiltoniano total (ecuaciones 3.32 y 3.45) se introduce en el programa COMSOL, el cual resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales por medio del algoritmo de elementos finitos (ver Apéndice C). De acuerdo a la ecuación (3.48), el número de soluciones dependerá del número de bandas del modelo (4 u 8), pues cada una representa una nueva contribución. En la práctica notamos que sólo una de las soluciones contribuye preponderantemente por lo que, como es común, este término es el que se grafica y se atribuye al portador correspondiente. La solución obtenida es representada en 5 isosuperficies, número por defecto en COMSOL, de manera que a menos que se exprese lo contrario todas las imágenes presentadas, respecto a la función de onda o estrictamente la envolvente de portadores, están representadas en la manera antes mencionada. Para el cálculo de las propiedades ópticas, las funciones de onda obtenidas numéricamente fueron exportadas para calcular las probabilidades de transición en programas implementados en MATLAB. Finalmente, se obtienen las razones de probabilidad de transición por medio de la regla de oro de Fermi (ecuación 4.16) con los datos correspondientes en cada caso.

5.2. PC de InAs/GaAs

En esta sección se muestra el efecto del tamaño y geometría en PC piramidales cuadrangulares con dos sistemas, el primero bajo el modelo isotrópico, y el segundo formado por pirámides truncadas incluyendo el efecto de la capa de mojado, esta vez bajo el modelo anisotrópico. En ambos casos se mantiene fija la altura (h), variando únicamente la base (b) de las pirámides. La geometría utilizada para modelar PC de estas formas se basa en observaciones experimentales [114–117], en donde se ha observado que PCA de InAs/GaAs crecen con estas geometrías debido a su estructura blanda de zinc (ver Cap. 1). En la Figura 5.1a se muestra una imagen de un corte transversal de un PC y en la Figura 5.1b una vista horizontal, en ambos casos con geometría piramidal. Esta última depende de la técnica y condiciones de crecimiento, pues cabe recordar que con el método de epitaxia por gota se crecen anillos cuánticos, los cuales se describirán más adelante.

Para el primer caso estudiado se considera únicamente el efecto de la deformación,

considerando una periodicidad del sistema para el caso isotrópico de $d_x = d_y = d_z = 31$ nm y, en el caso anisotrópico, con $d_x = d_y = 31$ nm y $d_z = 30$ nm.

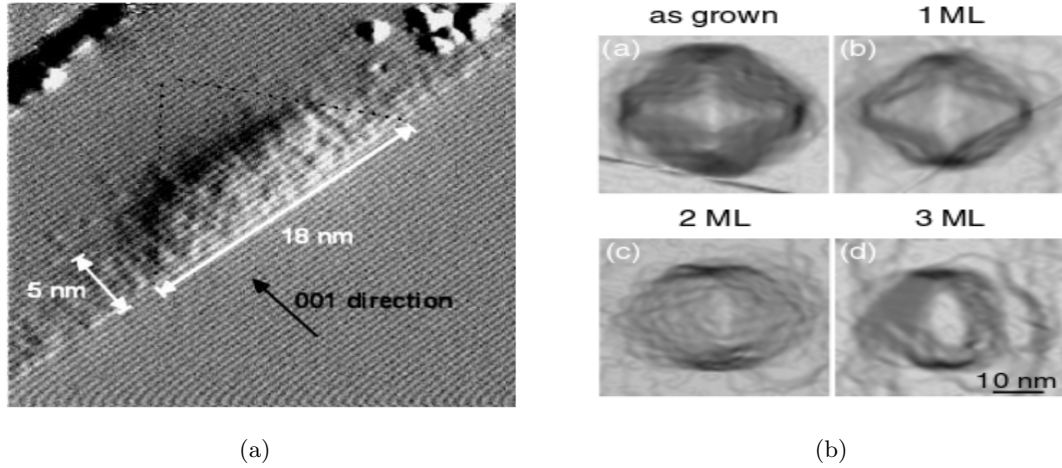


Figura 5.1: Imágenes de PCs de InAs/GaAs de forma piramidal y tamaño aproximado al usado en este trabajo. Obtenidas de a) [114], b) [117](modificada en forma de la original para mejor claridad).

La Figura 5.2a muestra la función envolvente correspondiente a electrones con una energía de 1.1 eV calculada en el programa COMSOL incluyendo campo de deformación. Las Figuras 5.2b 5.2c muestran las envolventes de huecos pesados (hh) y huecos ligeros(lh), con una energía ≈ 0.2 eV en ambos casos.

Los huecos pesados tienen mayor energía que los huecos ligeros (sobre todo fuera del punto Γ), lo que propicia que exista una mayor probabilidad de transición entre electrones y huecos pesados. Finalmente la Figura 5.2d muestra la envolvente correspondiente con la cuarta banda, es decir con la banda de huecos separados, ésta posee menor energía que los hh y lh, por lo que la probabilidad de recombinación de electrones con huecos de esta banda es despreciable. Por ello a partir de este momento solo se describirán las transiciones entre electrones y huecos pesados.

Bajo las consideraciones antes mencionadas, la Figura 5.3 (pág. 67) muestra la distribución de la densidad de probabilidad calculada bajo el modelo de 4 bandas, para los primeros 4 estados de electrones y huecos pesados en pirámides sin truncar, incluyendo el campo de deformación en el modelo isotrópico. Como se observa para los electrones, el primer estado e1 tiene una distribución espacial similar al estado “s” de los orbitales atómicos, los estados e2 y e3, presentan estados degenerados similares a los estados “p”

y el estado e_4 presenta una similitud al estado “d”. Por el contrario, los huecos (pesados y ligeros) muestran una distribución que depende del tamaño de la base, en contraparte con los electrones. Esto puede ser explicado por la distribución de la deformación pues se ha visto que los huecos están ligados a una deformación biaxial, la cual tiende a presentar un comportamiento menos suave que la deformación hidrostática, misma que determina primordialmente el estado de los electrones.

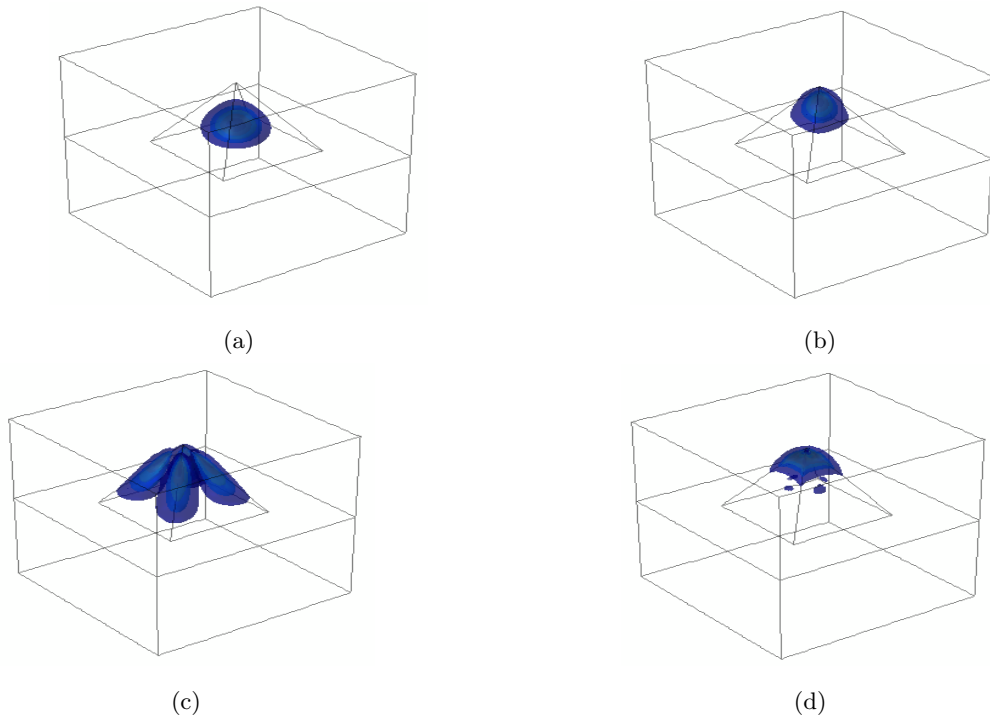


Figura 5.2: Funciones envolventes calculadas bajo el modelo de 4 bandas de PC de InAs/GaAs con geometría de pirámide sin truncar, con $b=10$ nm y $h=8$ nm (a) electrones, (b) huecos pesados, (c) electrones ligeros y (d) huecos separados.

La Figura 5.4 (pág. 68) muestra los perfiles de potenciales de confinamiento para PC de InAs/GaAs variando el ancho de la base, calculados con la ecuación (3.46). Como se observa, conforme el ancho se hace más grande el pozo de potencial para los huecos pesados (hh) es en realidad un doble pozo asimétrico donde el mínimo de energía de los hh coincide con el máximo de energía de los lh (denotado por una flecha). Para pirámides pequeñas, el pozo más ancho está cerca del ápice (en la Figura 5.4, se localiza a la derecha), por lo que la función de onda se localiza en esta región del PC (Fig. 5.4a) pues al tener un mayor espacio disponible se favorece la estabilidad de la función de onda en este pozo más ancho.

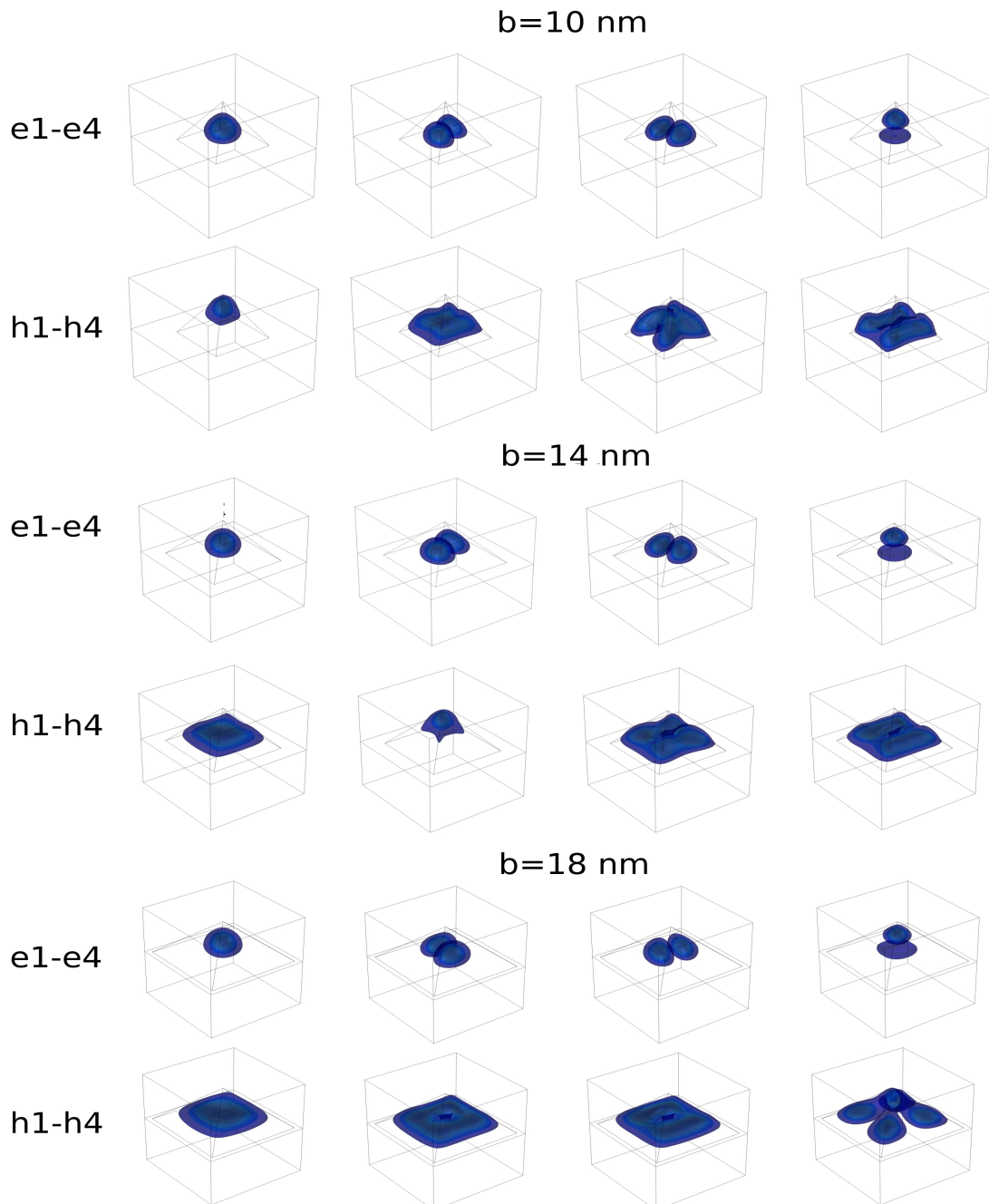


Figura 5.3: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 4 bandas para los primeros 4 estados de electrones (e) y huecos pesados (hh) en puntos cuánticos de InAs/GaAs con geometría de pirámide con base(b) de 10, 14 y 18 nm y altura(h) de 8 nm incluyendo deformación, calculada bajo el modelo isotrópico.

Al aumentar el tamaño de la base, el pozo cercano a ésta aumenta en ancho (Fig. 5.4c) y la función de onda se localizará ahora en éste. Un caso intermedio se aprecia en la Figura 5.4b. Este cambio en el ancho de los pozos se debe a que en PC pequeños la deformación se concentra en el ápice pues existe una mayor área de contacto interfacial con la matriz, al aumentar su volumen cerca de la base (recordar que tienen la misma altura) se incrementa el área interfacial en la base, por lo que la deformación aumenta ligeramente en ésta y se va reduciendo en el ápice, lo que provoca que el ancho de los pozos cambie favoreciendo así la localización de los huecos en los pozos más anchos.

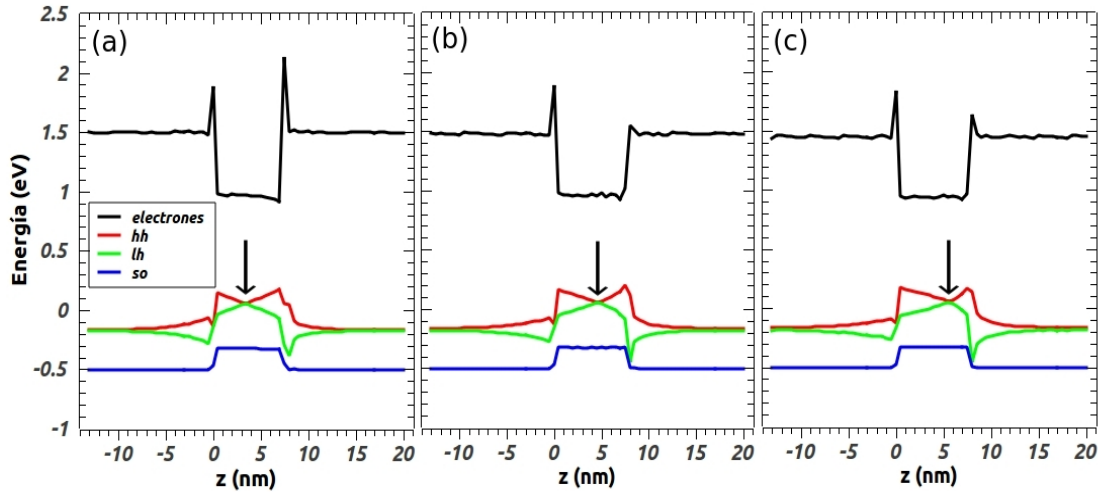


Figura 5.4: Perfiles de potenciales de confinamiento, en función de la altura z medida desde la base de la pirámide, en el punto Γ ($\mathbf{k} = 0$) bajo el modelo de 4 bandas (ecuación 3.46), en puntos cuánticos de InAs/GaAs con base de (a) 10, (b) 14 y (c) 18 nm, y altura (h) de 8 nm incluyendo deformación calculada bajo el modelo isotrópico. Es importante notar que el mínimo de energía de los hh coincide con el máximo de energía de los lh dentro del PC (indicado por la flecha).

La Figura 5.5 (pág. 69) muestra la distribución de la densidad de probabilidad calculada bajo el modelo de 4 bandas para los primeros 4 estados de electrones y huecos en pirámides truncadas, incluyendo el campo de deformación, ahora en el modelo anisotrópico más realista. Al igual que el caso anterior, la distribución de los electrones presenta similitudes con los estados atómicos y la distribución de los huecos pesados sigue presentando cambios en su forma al variar el tamaño, como se puede apreciar en el PC más pequeño, ésta presenta formas bastantes diferentes a los otros dos casos, debido a la distribución de la deformación.

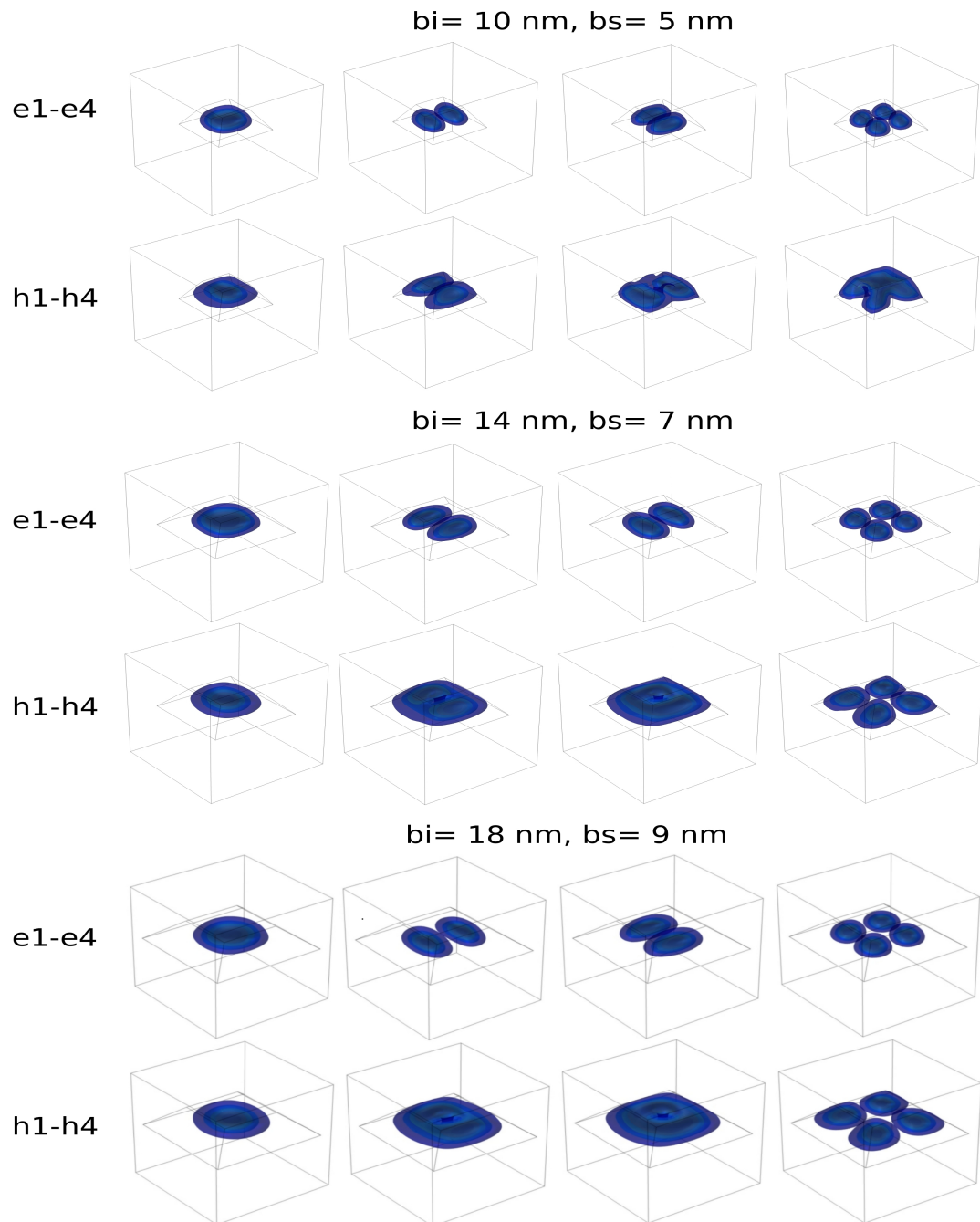


Figura 5.5: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 4 bandas para los primeros 4 estados de electrones y huecos pesados, en puntos cuánticos de InAs/GaAs con geometría de pirámide truncada con base inferior (b_i) y base superior (b_s) de 10 (5), 14 (7) y 18 (9) nm. Todos con altura de 4 nm, incluyendo deformación calculada bajo el modelo anisotrópico.

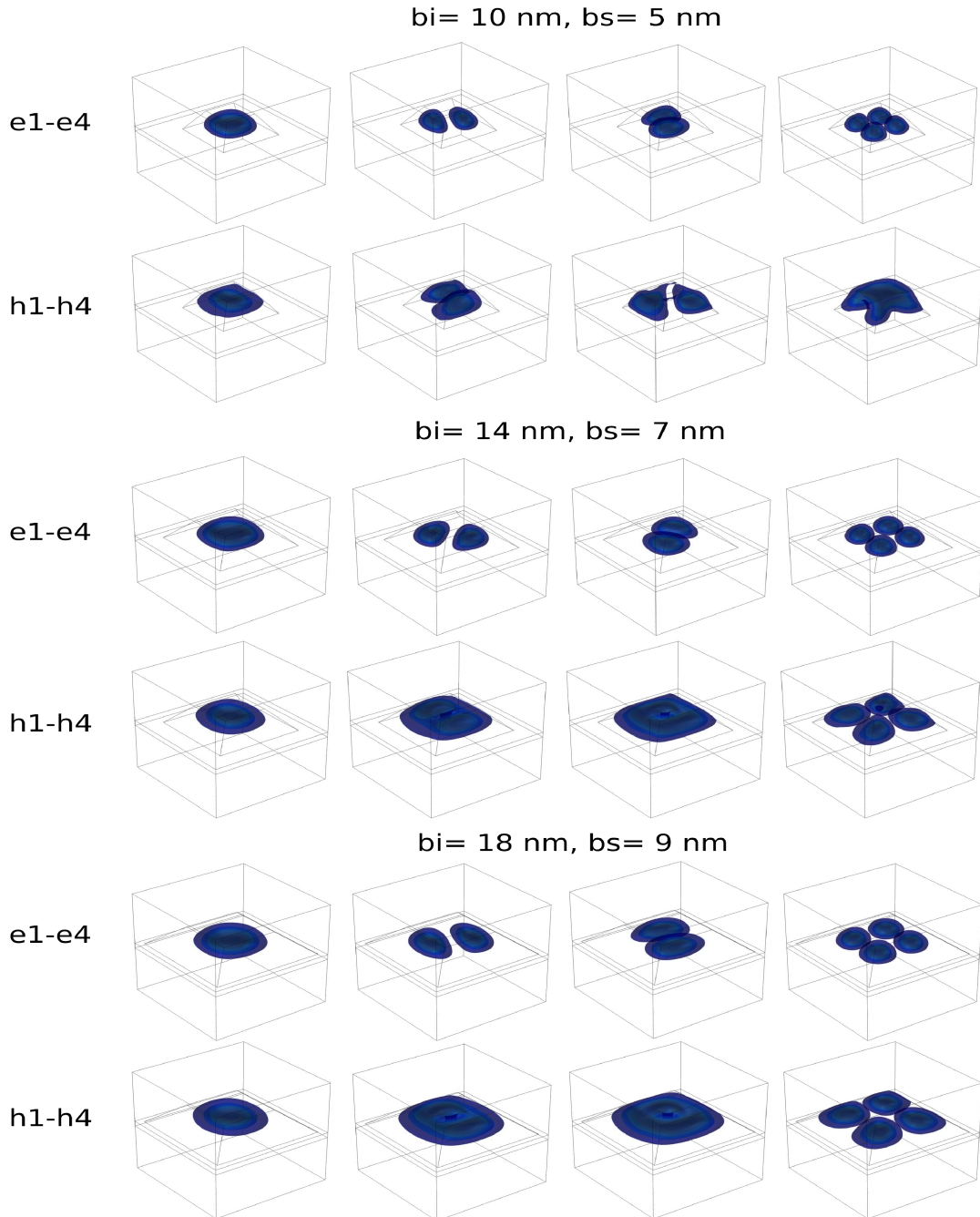


Figura 5.6: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 4 bandas para los primeros 4 estados de electrones y huecos pesados, en puntos cuánticos de InAs/GaAs con geometría de pirámide truncada con base inferior (b_i) y base superior (b_s) de 10 (5), 14 (7) y 18 (9) nm. Todos con altura de 4 nm y capa de mojado con espesor de 1 nm, incluyendo deformación calculada bajo el modelo anisotrópico.

La Figura 5.6 (pág. 70) muestra la distribución de la densidad de la probabilidad, similar al caso previo, excepto que esta vez se incluyó una capa de mojado de 1 nm de espesor. Se observa un comportamiento muy parecido al caso sin capa de mojado, solo se aprecian cambios pequeños en los estados de los huecos tanto en su distribución espacial como en la penetración en la capa de mojado. Sin embargo, como veremos enseguida, existen cambios también en los niveles de energía de ambos portadores.

Ahora se continúa el análisis calculando la razón de probabilidad de transición (o simplemente razón de transición), lo que nos permite observar el comportamiento de los niveles de energía usando la regla de oro de Fermi. Las Figs 5.7, 5.8 y 5.9 muestran la razón de probabilidad de transición entre los primeros 4 estados de electrones y huecos para los diferentes sistemas estudiados previamente (cada transición corresponde a una línea de diferente color), las cuales fueron obtenidas a partir de las funciones de onda presentadas en las Figs 5.3, 5.5 y 5.6, respectivamente.

Como se puede observar en la Figura 5.7a, en la cual se fija la altura de la pirámide y se varía la base, la transición con mayor probabilidad es la $e1 - h1$ (línea de color negro) con una longitud de onda (λ) de 1275 nm. De igual forma en la Figura 5.7c con $\lambda = 1410$ nm; sin embargo, en la Figura 5.7b la transición más probable es la $e1 - h2$ con $\lambda = 1290$ nm. Este comportamiento inusual se puede explicar observando la densidad de probabilidad (Fig. 5.3), pues las funciones de onda de los huecos son bastantes distintas en cada caso, en particular con PC de base de 14 nm las funciones de onda del estado $e1$ y $h2$ presentan un mayor traslape, pues ambas se localizan mayoritariamente en el ápice del PC, lo que da origen a una mayor probabilidad de transición como se observa (Fig. 5.7b). Las demás transiciones siguen un comportamiento similar en las tres geometrías, presentando ligeras diferencias debido nuevamente a las diferentes distribuciones espaciales de los estados. Algunas transiciones presentan probabilidades muy pequeñas por lo que no se aprecian en las gráficas.

En general se observa un corrimiento al rojo cuando el volumen total de los PC se incrementa, lo cual es de esperarse pues a mayor volumen es menor la energía de confinamiento y el potencial de deformación, lo que conlleva a una disminución en la energía de los portadores (principalmente de los electrones), pues estos son más susceptibles a cambios en la energía de confinamiento efectiva.

Por otra parte, las Figuras 5.8 y 5.9 muestran la probabilidad de transición para un PC con altura fija, sin y con capa de mojado, respectivamente. Se observa que todas

las transiciones presentan un comportamiento similar, únicamente difieren en energía, pues cuando se considera la capa de mojado ésta disminuye levemente, debido nuevamente al incremento del volumen total del PC. El hecho de que la transición más probable sea la $e1 - h4$ para el punto cuántico más pequeño en ambos casos, corresponde a que el estado $h4$ presenta un solo nodo así como una mayor extensión en el interior del PC que el estado $h1$, a diferencia del estado $h4$ para los PC con base de 14 y 18 nm, donde presenta 4 nodos.

Con todo lo anterior se puede concluir que al incrementar el volumen del PC, la energía de confinamiento disminuye. Además la geometría es importante, pues como se observa, la función de onda de los portadores (en especial la de los huecos) en PC piramidales cambia conforme las dimensiones del PC, mientras que en aquellos con forma de pirámide truncada el cambio es menor. Esto es debido probablemente a que el ápice de la pirámide crea distribuciones de deformación y potenciales de confinamiento que cambian rápido con las dimensiones del PC, lo que se refleja en la distribución de los portadores.

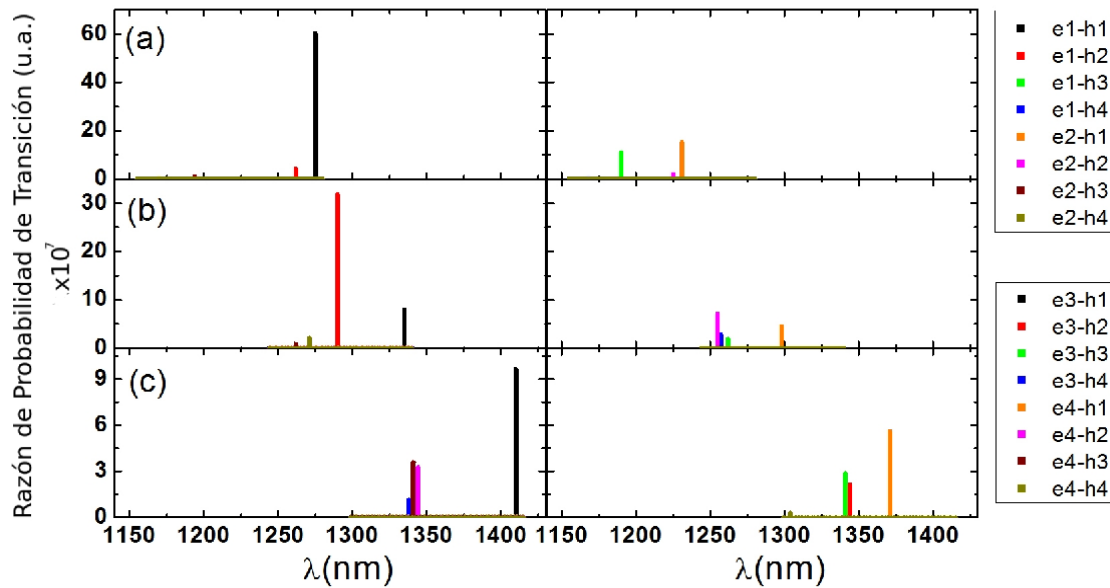


Figura 5.7: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de InAs/GaAs con geometría de pirámide, altura de 8 nm y base de: (a) 10 nm, (b) 14 nm y (c) 18 nm, bajo el modelo anisotrópico. Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

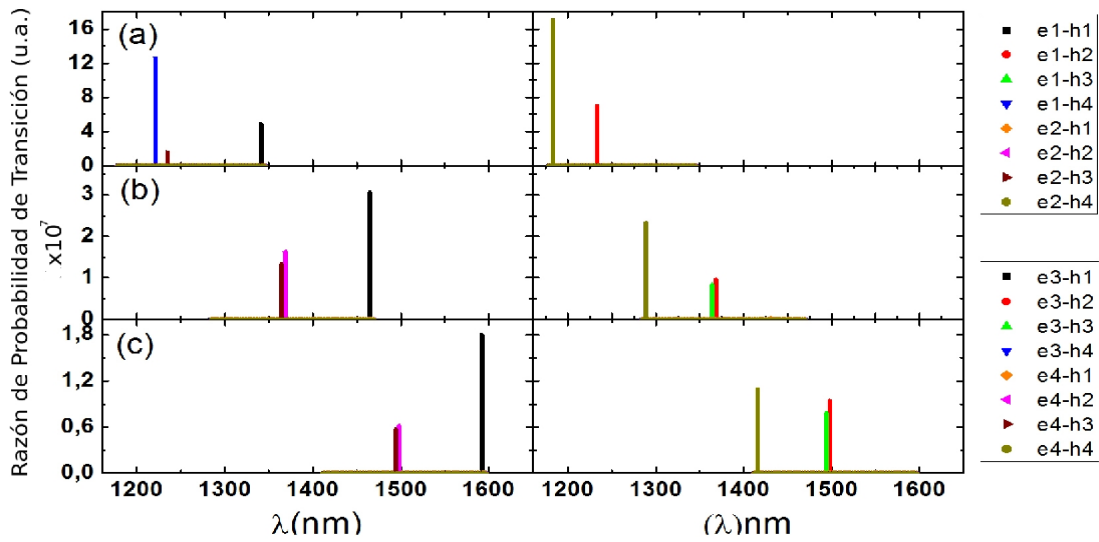


Figura 5.8: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de InAs/GaAs con geometría de pirámide truncada altura de 4 nm y base de: (a) 10 nm, (b) 14 nm y (c) 18 nm. Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

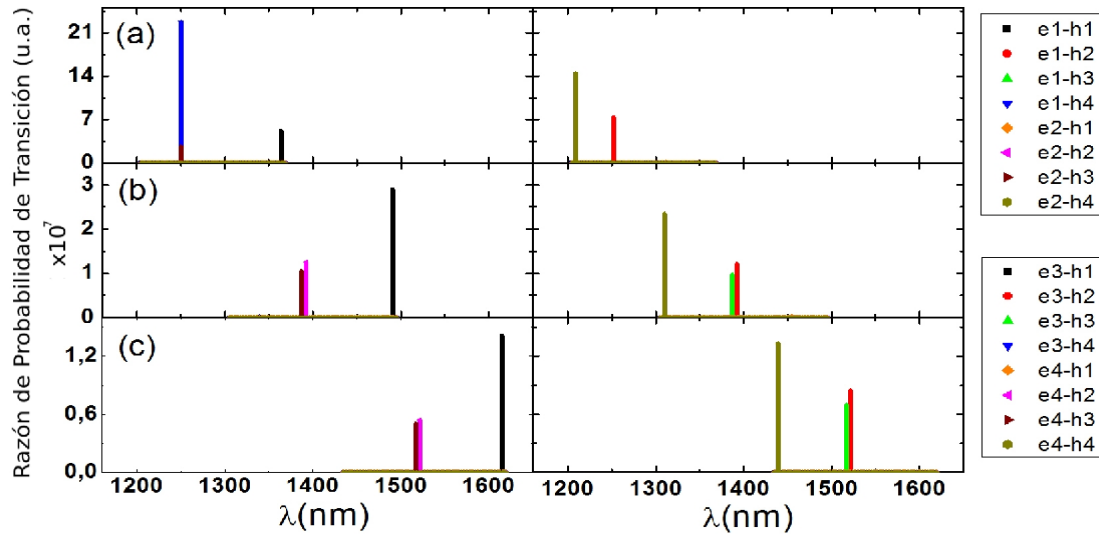


Figura 5.9: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de InAs/GaAs con geometría de pirámide truncada y capa de mojado de espesor de 1 nm, altura de 4 nm y base de: (a) 10 nm, (b) 14 nm y (c) 18 nm. Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

Las energías de transición, así como el comportamiento general de éstas, coinciden con resultados numéricos reportados en [54,118]. La primera referencia muestra la relación de la energía de transición en función del ancho de la base, en particular para una pirámide de InAs/GaAs sin truncar con base de 12 nm, altura de 6 nm y con capa de mojado de un nm, la energía de transición encontrada es de 1.05 eV ($\lambda=1180$ nm), la cual es muy cercana a la encontrada bajo el modelo propuesto aquí.

En la referencia [118] se realizó un estudio teórico de PC de InAs/GaAs de forma piramidal con base entre 10 y 20 nm, altura de 6 nm y capa de mojado de menos de 1 nm, con estos parámetros se encuentra una energía alrededor de 1.125 eV ($\lambda=1101$ nm) para PC con base de 13.6 nm. Esta energía de emisión es cercana a la encontrada con los cálculos presentados aquí (ver Figs. 5.7, 5.8, 5.9), considerando que no son exactamente las mismas dimensiones ni modelos utilizados para calcular la energía. El corrimiento al rojo al incrementar el tamaño de los puntos cuánticos en los espectros de emisión calculados, corresponden con la misma tendencia reportada en [119].

5.3. PC de GaN/AlN

Este sistema de puntos cuánticos presenta una geometría de pirámides hexagonales truncadas, al igual que en el caso anterior, esta geometría es la reportada experimentalmente [19,31,120] y se debe a la estructura wurtzita que ambos materiales (GaN y AlN) presentan. Las Figuras 5.10a y 5.10b presentan imágenes de PC de GaN/AlN, como se puede observar presentan una geometría piramidal hexagonal.

Para este sistema se estudiaron varios aspectos, como lo son: el efecto del tamaño, el efecto de un campo eléctrico (\mathbf{E}) homogéneo y constante a lo largo de las direcciones x y z , así como el efecto de la distancia de separación en las denominadas moléculas de puntos cuánticos (MPC), las cuales se constituyen por dos PCA muy cercanos. En este caso se consideró un acoplamiento a lo largo de la dirección de crecimiento, es decir a lo largo del eje z , este tipo de acoplamiento da origen a las denominadas MPC verticales.

Todos los cálculos presentados para estos sistemas se realizaron con modelo de 8 bandas incluyendo el efecto de la deformación (bajo el modelo anisotrópico) y campo piezoeléctrico, suponiendo un sistema con periodicidad $d_x = d_y = 25$ nm y $d_z = 12$ nm para los sistemas aislados y, para las MPC con, $d_x = d_y = d_z = 25$ nm.

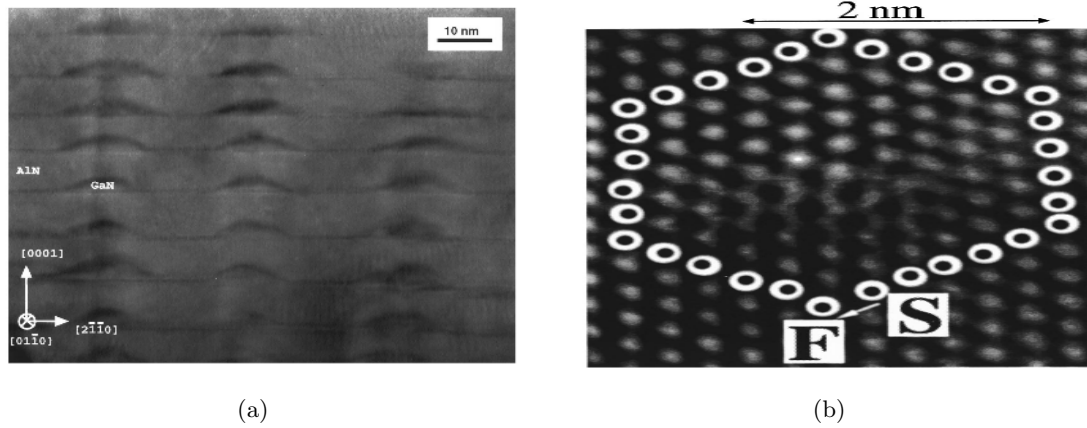


Figura 5.10: Imágenes de PCs de GaN/AlN de forma piramidal y tamaño aproximado al usado en este trabajo. Obtenidas de a) [31], b) [120].

Primero se describirá el caso en que se aplica un campo eléctrico constante variando la dirección y polaridad del campo. Se considera un campo positivo a lo largo del eje (según sea el caso x o z), con esto se obtiene que al aplicar el campo eléctrico los electrones son atraídos por él, en contraparte, los huecos son repelidos por éste (reportado en [121]), como se puede apreciar en las Figuras 5.11a y 5.11b, respectivamente (pág. 76). De igual forma ocurre si se aplica a lo largo de la dirección y pues al ser rotados en 60° ambas direcciones son equivalentes dada la simetría hexagonal, ya que el efecto de la anisotropía es despreciable.

En el caso en que el campo es aplicado en la dirección $\varphi_{ext} = -eE_z z$, la densidad de probabilidad no sufre un desplazamiento apreciable debido al gran confinamiento que se presenta a lo largo de esta dirección, causado por el campo piezoeléctrico como se puede observar en la Figura 5.12a (pág.76), en donde se muestra el potencial piezoeléctrico a lo largo del plano yz . Claramente el máximo del potencial se encuentra en la parte superior del PC de GaN mientras que el valor mínimo se encuentra en la base de la capa de mojado. Esto se refleja en el confinamiento efectivo de electrones y huecos, como se observa en la Figura 5.12b, donde los electrones estarán en el mínimo del potencial de confinamiento localizado en la parte superior del PC; por el contrario, los huecos se ubican donde éste tiene su máximo, (Fig. 5.12c), que se encuentra en la capa de mojado y parcialmente en la base del PC.

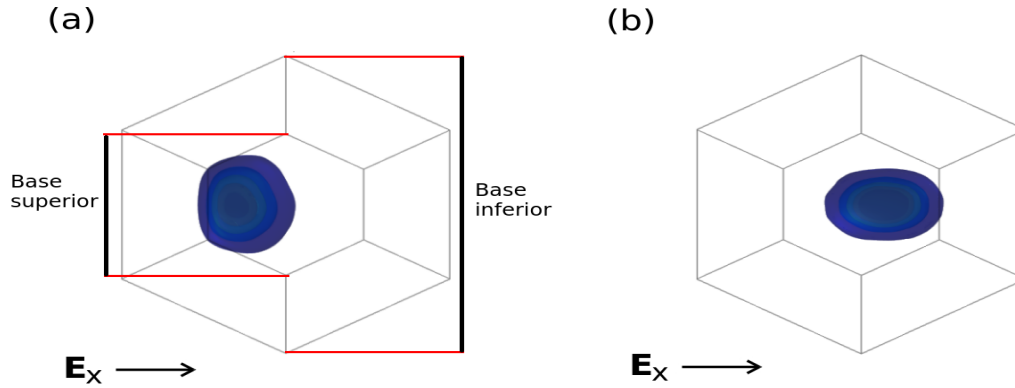


Figura 5.11: Vista en el plano xy de la distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 8 bandas para: (a) electrones y (b) huecos en PC de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada. Base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 4.1 nm, con una capa de mojado de espesor de 1 nm. Bajo el modelo anisotrópico incluyendo deformación y campo piezoeléctrico, se aplica un campo eléctrico en la dirección x de 150 kV/cm.

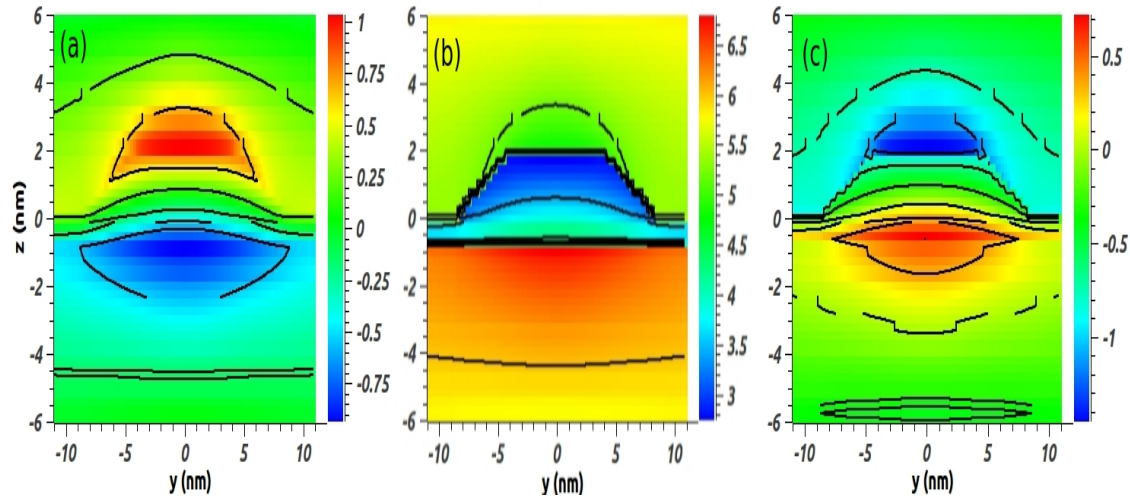


Figura 5.12: Vista en el plano yz de los potenciales de confinamiento calculados bajo el modelo de 4 bandas para PC de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada, base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 2 nm, con una capa de mojado de espesor de 1 nm. Calculados bajo el modelo anisotrópico (a) únicamente campo piezoeléctrico, (b) y (c) potenciales de confinamiento en el punto Γ (ecuación 3.37) para las bandas de conducción y valencia, respectivamente. La escala de la energía mostrada a la derecha está en eV

Comportamiento similar al descrito anteriormente se observó para puntos cuánticos con diferentes dimensiones, como se observa en la Figura 5.13 (pág. 78), la cual muestra la densidad de probabilidad para electrones y huecos en PC de GaN/AlN con altura de 2nm, con $\mathbf{E}=0$ y cuando es aplicado en la direcciones x y z con una magnitud de 150 kV/cm.

La Figura 5.14 (pág. 79) muestra la densidad de probabilidad bajo las mismas condiciones antes mencionadas (sin y con campo \mathbf{E} aplicado a lo largo de las direcciones x o z con una magnitud de 150 kV/cm), pero ahora aplicadas a un punto cuántico con altura de 4 nm, observándose una distribución espacial muy similar al caso previo aunque con lóbulos más extendidos como resultado del menor confinamiento. El efecto del tamaño se refleja en los niveles de energía como se verá posteriormente

Siguiendo con la metodología antes usada, ahora se analizará cómo se modifican los niveles de energía así como la razón de probabilidad de transición cuando \mathbf{E} es aplicado en las diferentes direcciones. Las Figuras 5.15, 5.16 y 5.17 (págs. 80 y 81) muestran las razones de transición de PC de GaN/AlN con altura de 2 nm, 3 nm y 4 nm, respectivamente, con campo eléctrico nulo y aplicado a lo largo del eje x o z . Se observa claramente que existe un corrimiento (con respecto a $\mathbf{E}=0$) a mayores longitudes de onda (λ) cuando el campo se aplica a lo largo del eje x ; por el contrario, hay un corrimiento a λ menores cuando éste es a lo largo del eje z , para los tres casos.

Este corrimiento en energía es debido a los efectos de \mathbf{E} en los potenciales de confinamiento, ya que el campo en x reduce (aumenta) la energía de confinamiento para electrones (huecos) en el eje negativo (positivo), como se muestra en las Figuras 5.18 (b) y (c), con respecto a $\mathbf{E}=0$. Esto provoca que la diferencia de energía entre electrón y hueco disminuya provocando tal corrimiento.

Si \mathbf{E} es aplicado a lo largo de z se incrementa la energía del electrón, como se observa en la Figura 5.18 (a) (pág. 81), apreciándose más cerca de la parte superior del PC ($z= 2$ nm), en los huecos no se aprecia cambio aparente en la zona de la base ($z=-1$ nm). Sin embargo, este ligero cambio en la energía aunado a un mayor efecto de confinamiento, es decir, una mayor localización de los portadores, tiene el resultado de aumentar la energía del excitón. El efecto del potencial de confinamiento es el cambio de la distribución espacial de $|\Psi(\mathbf{r})|^2$, lo que modifica la razón de probabilidad de transición entre electrón y hueco. Este mismo comportamiento se observa para los PC con $z= 3$ nm y $z= 4$ nm (no se muestra).

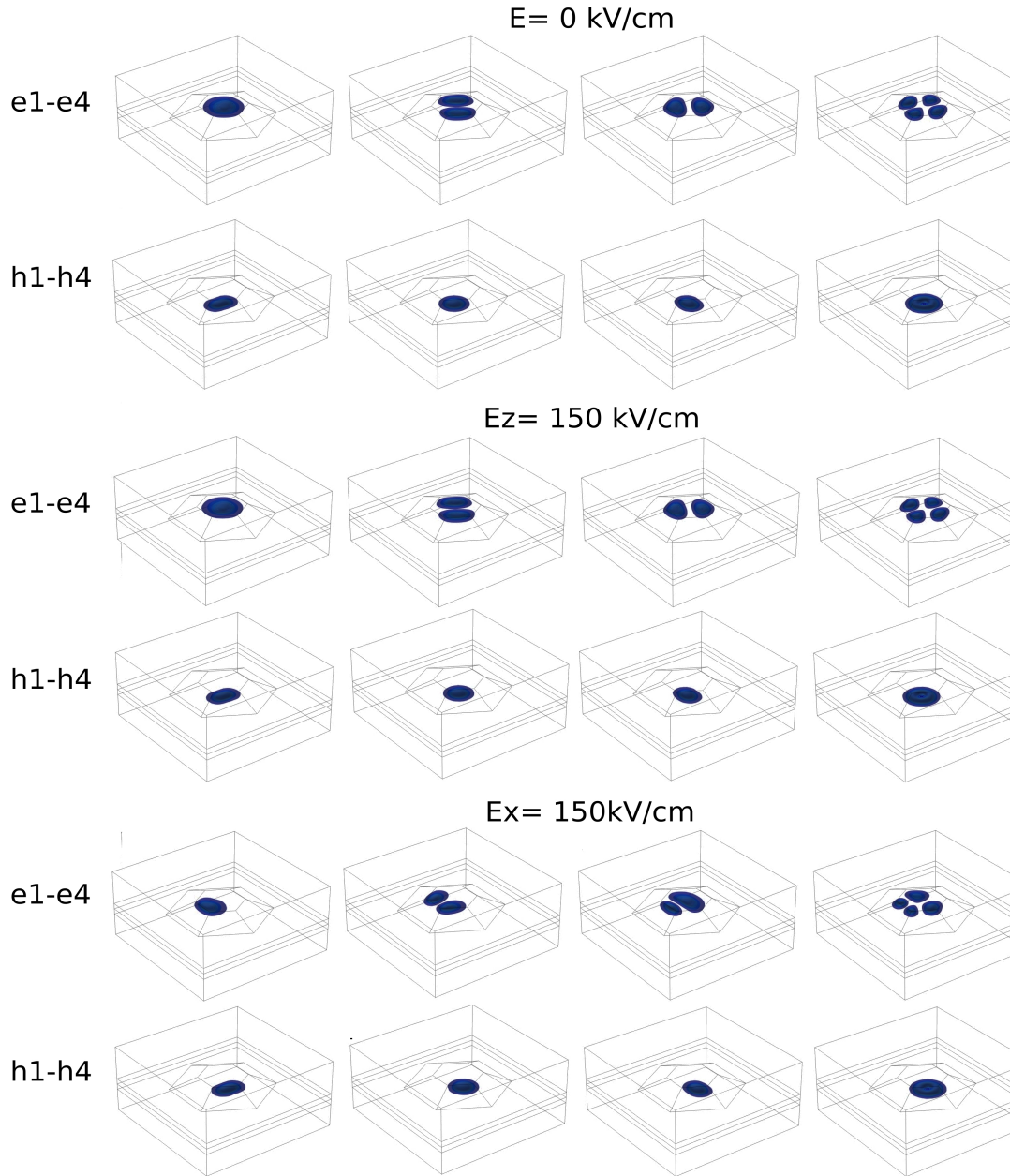


Figura 5.13: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 8 bandas para los primeros 4 estados de electrones y huecos, en puntos cuánticos de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 2 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm. Las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r})$ fueron calculadas bajo el modelo anisotrópico incluyendo deformación, campo piezoeléctrico. Sin campo eléctrico y, aplicado a lo largo de las direcciones z y x .

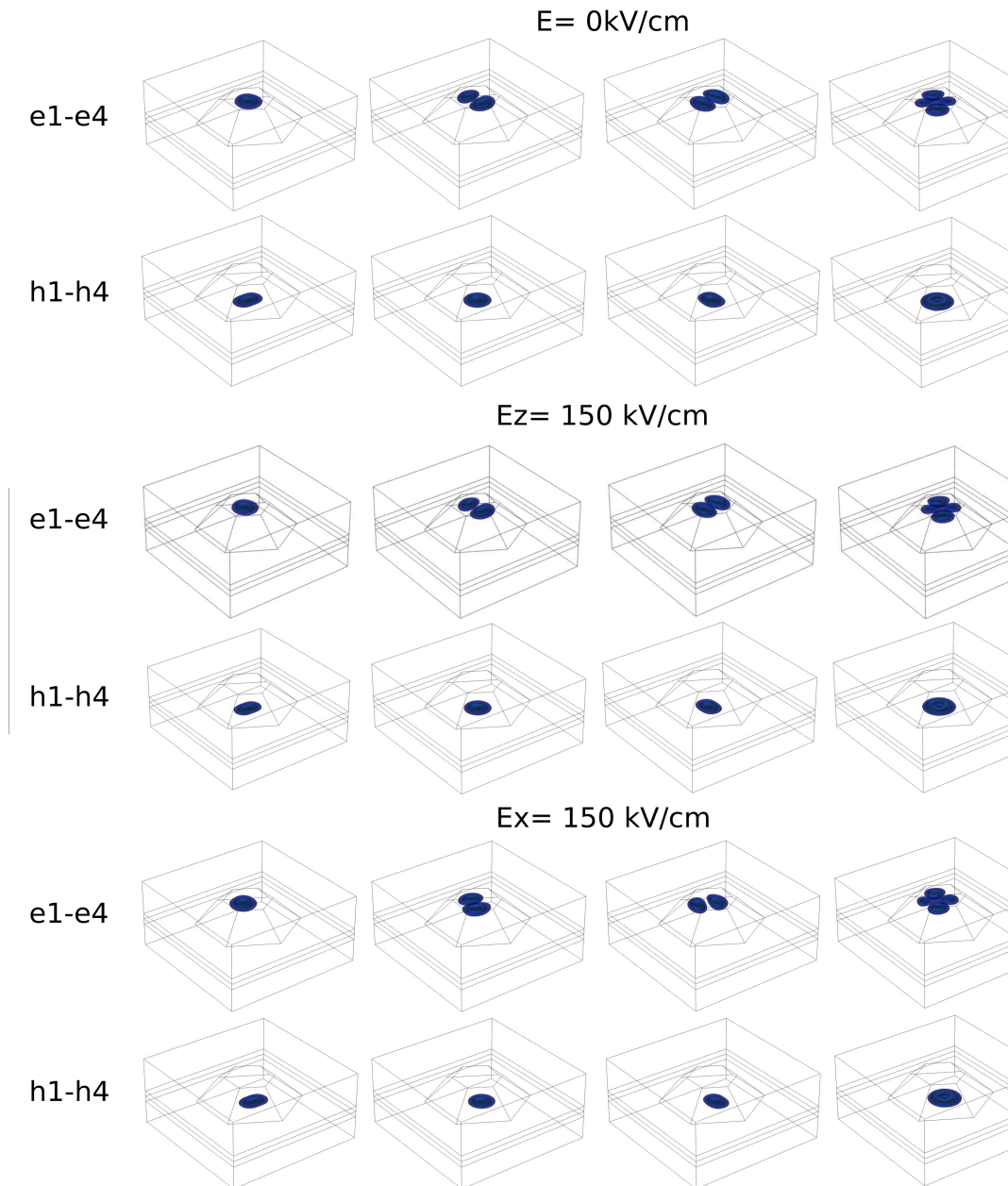


Figura 5.14: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ calculada bajo el modelo de 8 bandas para los primeros 4 estados de electrones y huecos, en puntos cuánticos de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 4.1 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm. Las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r})$ fueron calculadas bajo el modelo anisotrópico incluyendo deformación, campo piezoeléctrico. Sin campo eléctrico y, aplicado a lo largo de las direcciones z y x .

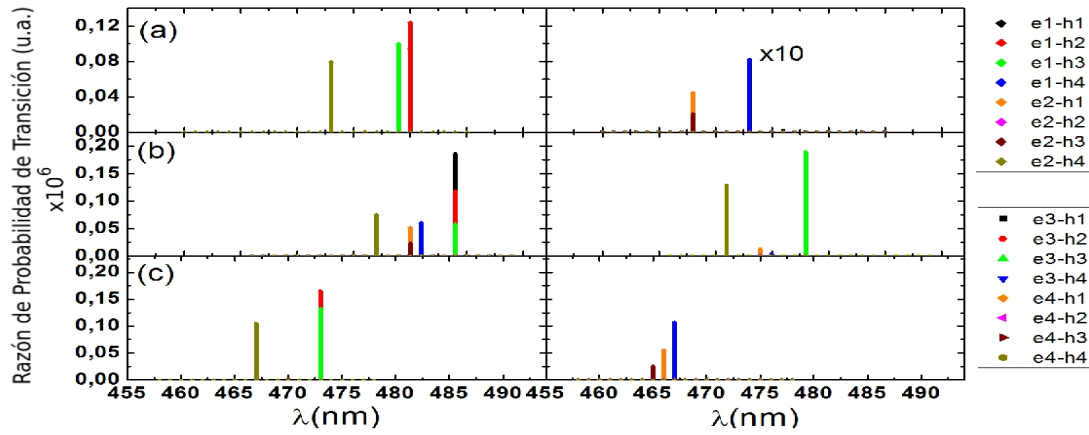


Figura 5.15: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 2 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm y campo eléctrico (a) 0 kV/cm, (b) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje x , (c) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje z . Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

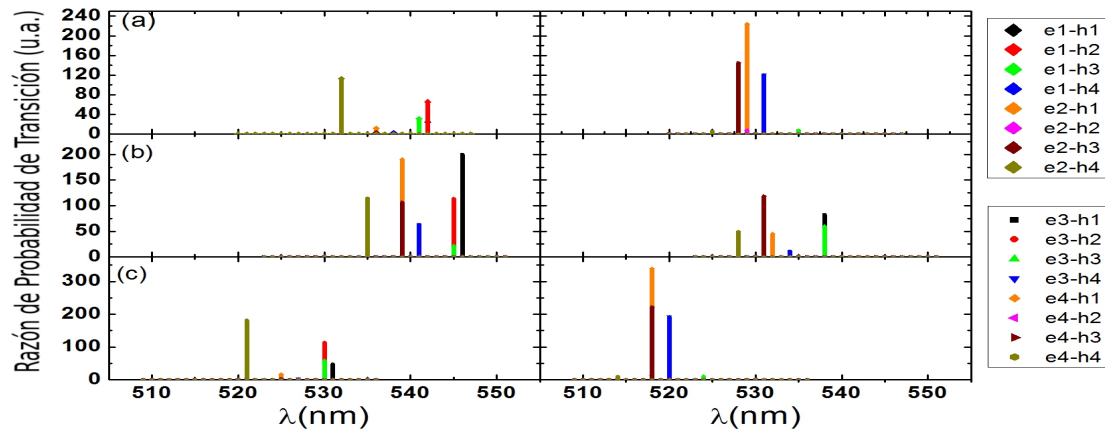


Figura 5.16: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 3 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm y campo eléctrico (a) 0 kV/cm, (b) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje x , (c) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje z . Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

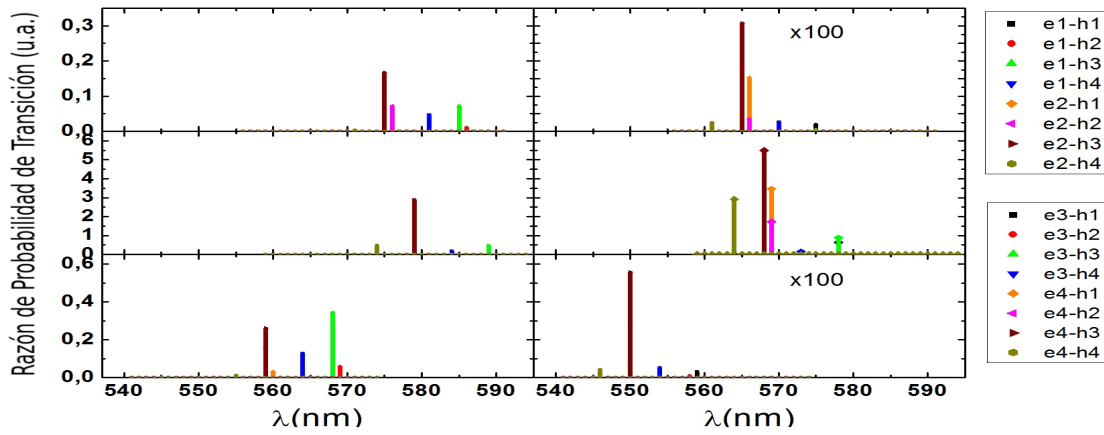


Figura 5.17: Razón de probabilidad de transición calculada usando la regla de oro de Fermi para PC de GaN/AlN con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 4.1 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm y campo eléctrico (a) 0 kV/cm, (b) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje x , (c) 150 kV/cm aplicado a lo largo del eje z . Las etiquetas superiores corresponden a las gráficas de la parte izquierda y las etiquetas inferiores a las de la derecha.

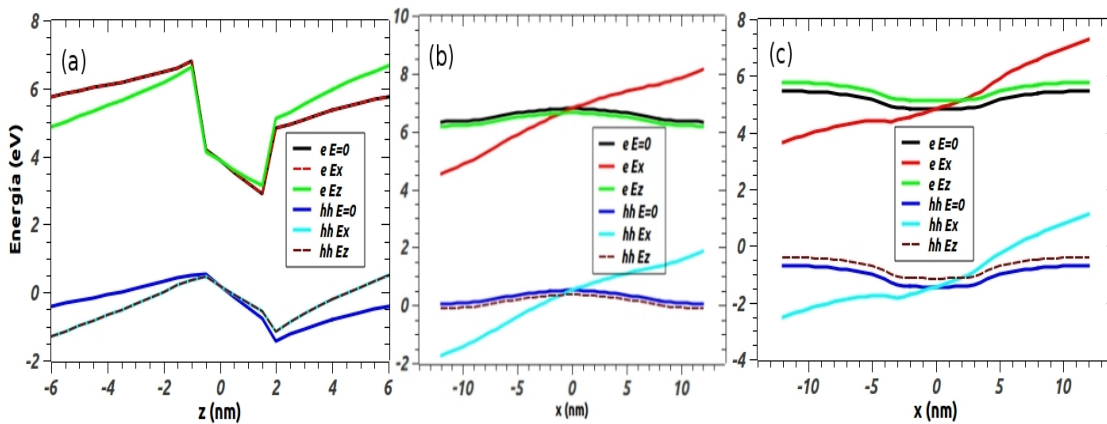


Figura 5.18: Potenciales de confinamiento para PC de GaN/AlN, calculados con modelo de 4 bandas en el punto Γ (ecuación 3.37), con geometría de pirámide hexagonal truncada con base inferior de 18 nm, base superior de 8 nm y altura de 2 nm, incluyendo una capa de mojado con espesor de 1 nm, con $\mathbf{E} = 0$ y $\mathbf{E} = 150$ kV/cm aplicado (a) a lo largo de la dirección [001], a lo largo de la dirección [100] con z (b) -1 nm, (c) 2 nm. Note que en (a) dos líneas se superponen.

5.4. Anillos cuánticos de InAs/GaAs

Este tipo de nanoestructuras [36, 122] fueron crecidas por el método de epitaxia por gota (ver Cap. 1) en la Universidad de Arkansas con la participación de M. Ware, Y. I. Mazur, Z. Wang, J. Lee y G. Salamo.

Las condiciones de crecimiento mencionadas en el Cap. 1 dieron lugar a nanoestructuras similares a las que se muestran en la Figura 5.19a, con una geometría compuesta por dos puntos cuánticos (PC1 y PC2) interconectados por un “anillo”. Con la finalidad de calcular las propiedades de estas nanoestructuras, se supuso que tales anillos se componen por dos PC en forma de cono truncado y un anillo que interconecta a ambos, cuyas dimensiones son las siguientes (tomadas lo más exacto posible de las medidas reportadas en [38]): El PC1 tiene un radio inferior $r_i=50$ nm, radio superior $r_s=22.5$ nm y altura $h=12.5$ nm, para el PC2 $r_i=50$ nm, $r_s=23.2$ nm y $h=10.5$ nm. La altura de los PC se midió desde la parte superior del anillo, cuya altura es de 6.5 nm, un radio exterior de 336 nm y radio interior en el eje x de 34 nm y en el eje y de 74 nm, como se muestra en la Figura 5.19b.

Las Figuras 5.19c y 5.19d muestran los perfiles de la altura en las dos principales direcciones sobre el plano, las cuales también sirvieron como referencia para estimar el tamaño usado en los cálculos.

Las funciones de onda de los portadores fueron calculadas en el modelo de 4 bandas, ya que el espín no es considerado, se incluyen además la deformación y el efecto del gradiente de indio. Es importante mencionar que la inclusión del efecto de la deformación, a diferencia de los casos previos, se realizó haciendo un promedio espacial ya que, debido al mayor tamaño que estos sistemas tienen en comparación a los demás estudiados en este trabajo, presentaron una muy lenta convergencia al incrementar el número de elementos de la sumatoria de Fourier (ecuación 2.20). Se realizaron múltiples cálculos con diferentes periodicidades d_1, d_2, d_3 y número de elementos n_1, n_2, n_3 . Se encontró que el comportamiento más suave del campo de deformación a través del anillo cuántico se obtuvo con los datos $d_1 = d_2 = d_3 = 900$ nm y $-150 \leq n_1, n_2, n_3 \leq 150$.

El efecto del gradiente de indio [123, 124] es considerado únicamente en estos sistemas, por su gran dimensión debido a la segregación de galio a través de toda la estructura, la cual es favorecida por las condiciones de crecimiento y la gran área intersticial [114]. Se consideró un gradiente lineal [125], de la forma $c = 0.56 + 1.5 \times 10^6 z$, donde c es la concentración de indio. La variación de indio es también incluida en los parámetros de los

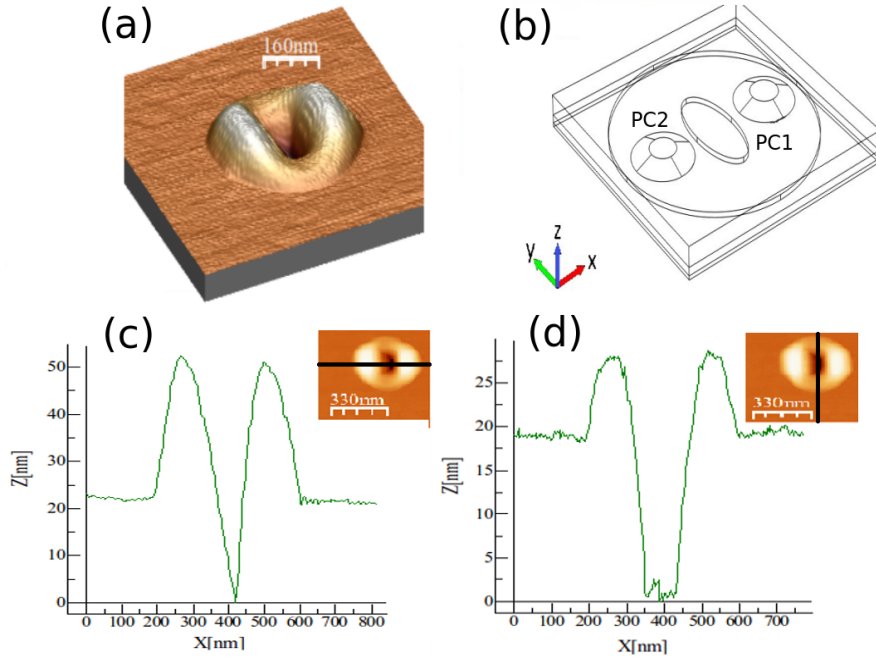


Figura 5.19: (a) Imagen de AMF de un anillo cuántico, (b) Modelo geométrico usado para el cálculo de propiedades, (c) y (d) Perfil de la altura de la nanoestructura a lo largo del plano [100] y [010], respectivamente. Imágenes (a), (c) y (d) proporcionadas amablemente por M. E. Ware *et al.*

potenciales de deformación asociados a la banda de valencia (a_v, b, d), en la banda de conducción a un potencial de deformación a_c , así como en el ancho de banda prohibida según la relación $E_g(z)(eV) = 1.518 - 1.580c + 0.475c^2$ [118]. El valor de a_v en función de c fue ajustado según la relación: $a_v = -0.220 - 0.780c$ para concordar con los valores de InAs y GaAs reportados en [75], pues la variación del mismo en función de c no se encontró en la referencias citadas anteriormente.

Con la finalidad de obtener un valor estimado de los potenciales experimentados por los electrones y huecos pesados dentro de los puntos cuánticos, se realizó el cálculo de los eigenvalores en el punto Γ con la ayuda de la ecuación (3.46), los cuales se muestran en las Figuras 5.20a y 5.20b para electrones, donde se observa un gradiente de potencial debido precisamente al gradiente de indio, y que provoca un potencial menor en la parte superior de los PC. Las Figuras, 5.20c y 5.20c muestran los potenciales de confinamiento de los huecos pesados, como se observa la energía de los huecos no es susceptible al gradiente

de indio. Los valores obtenidos son muy cercanos a los valores de energía de los portadores encontrados cuando se incluye la energía cinética; además, es de notar la diferente altura que presentan ambos PC, la cual también influye en la energía de emisión de excitón y en la probabilidad de transición, como se verá más adelante.

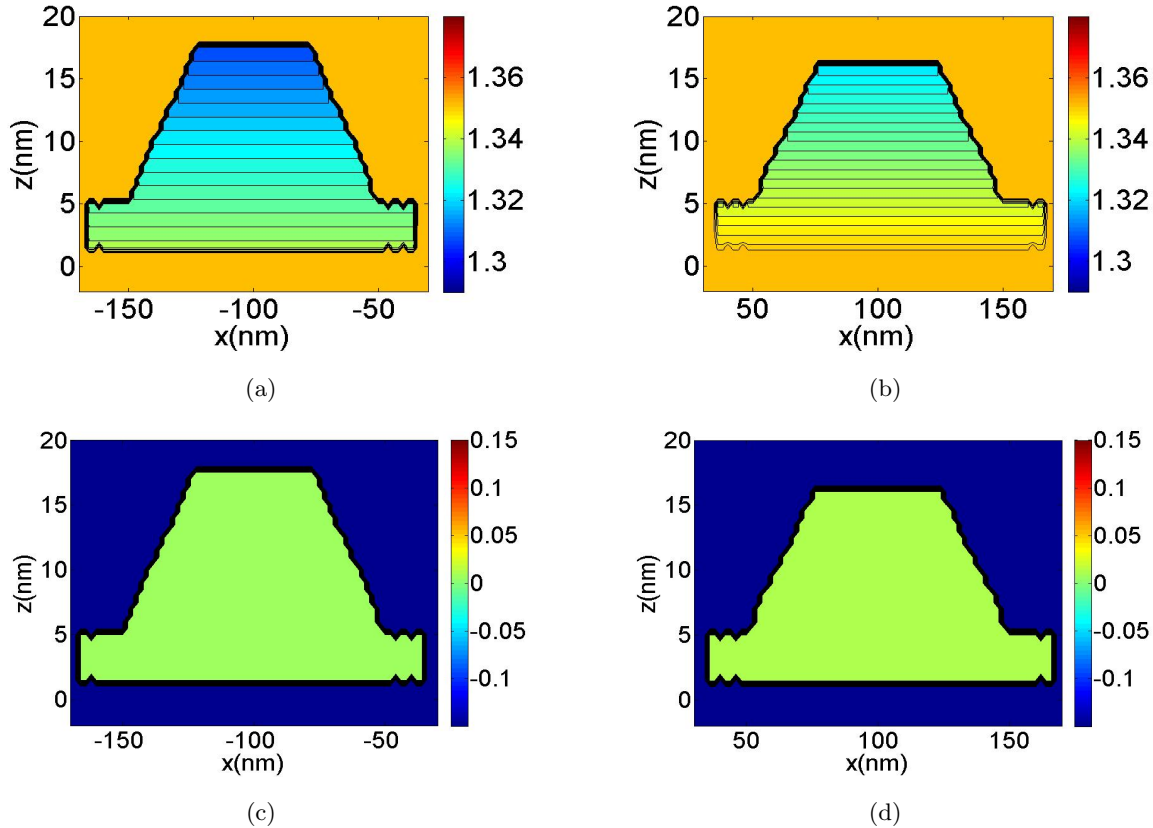


Figura 5.20: Eigenvalores en el punto Γ (usando la ecuación 3.46) incluyendo deformación y gradiente de indio para electrones en (a) PC2 , (b) PC1 y huecos pesados en (c) PC2 , (d) PC1 .

Las Figuras 5.21 y 5.22 (págs. 85 y 86) muestran las funciones de onda de electrones y huecos, respectivamente, para un AC incluyendo el efecto del gradiente de indio y considerando un promedio de las componentes de la deformación en los planos con $z = 1, 6, 11$ y 16 nm, cuyos valores se muestran en la Tabla 5.1 para los dos PC que conforman dicha estructura (para componentes no mostradas se obtuvo un promedio de cero). Es importante aclarar que para el cómputo de las funciones de onda, y con la finalidad de obtener un mejor relación con mediciones experimentales en que los AC no están embebidos

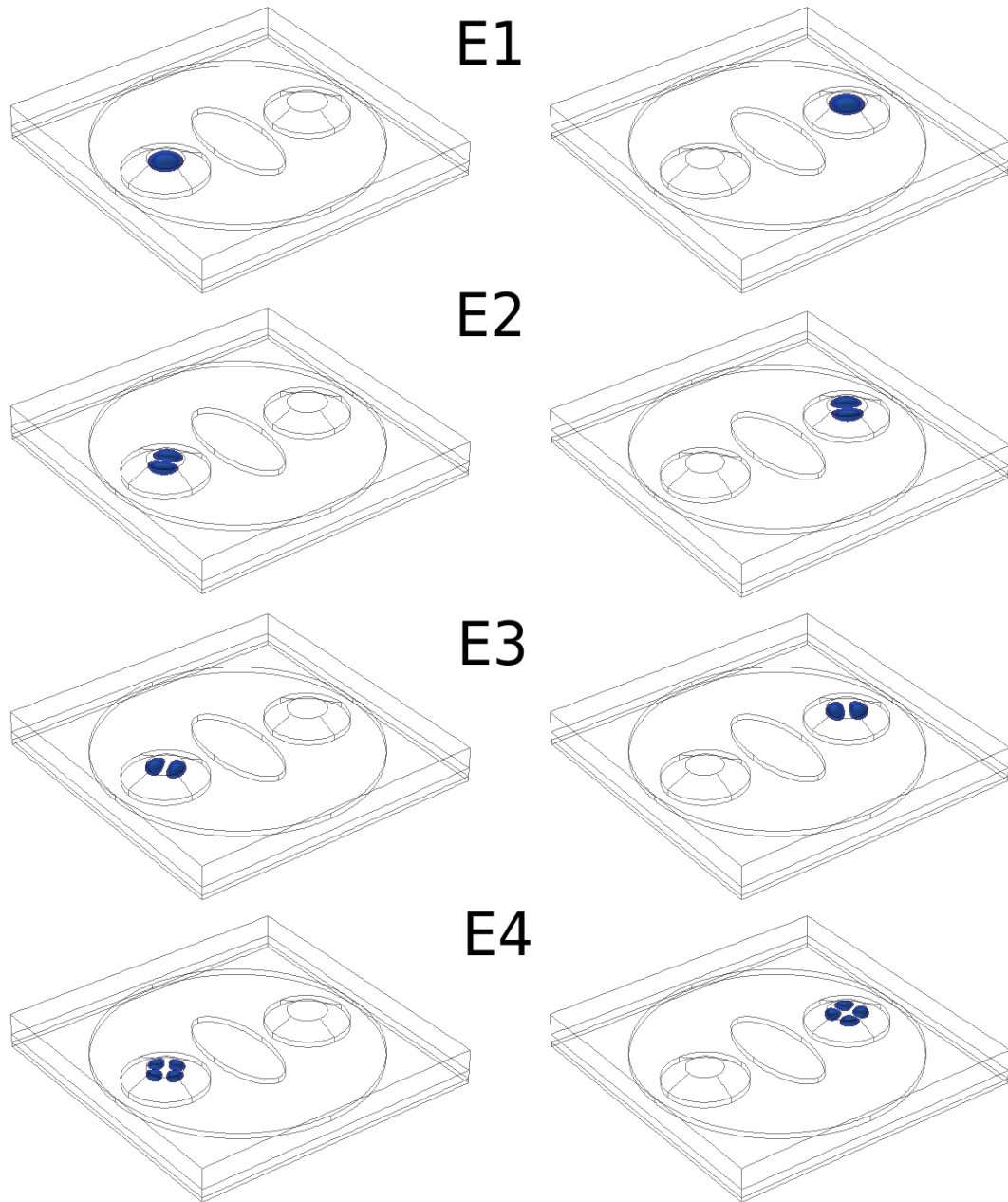


Figura 5.21: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ para los estados más bajos de electrones. La columna de la izquierda muestra $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ para los estados localizados en el PC2, mientras que la de la derecha los localizados en el PC1. Los valores de energía encontrados para los estados a izquierda y derecha, respectivamente, fueron: E1=1.3185 & 1.3321, E2= 1.3190 & 1.3325, E3= 1.3190 & 1.3325, y E4= 1.3197 & 1.3331, todos en eV.

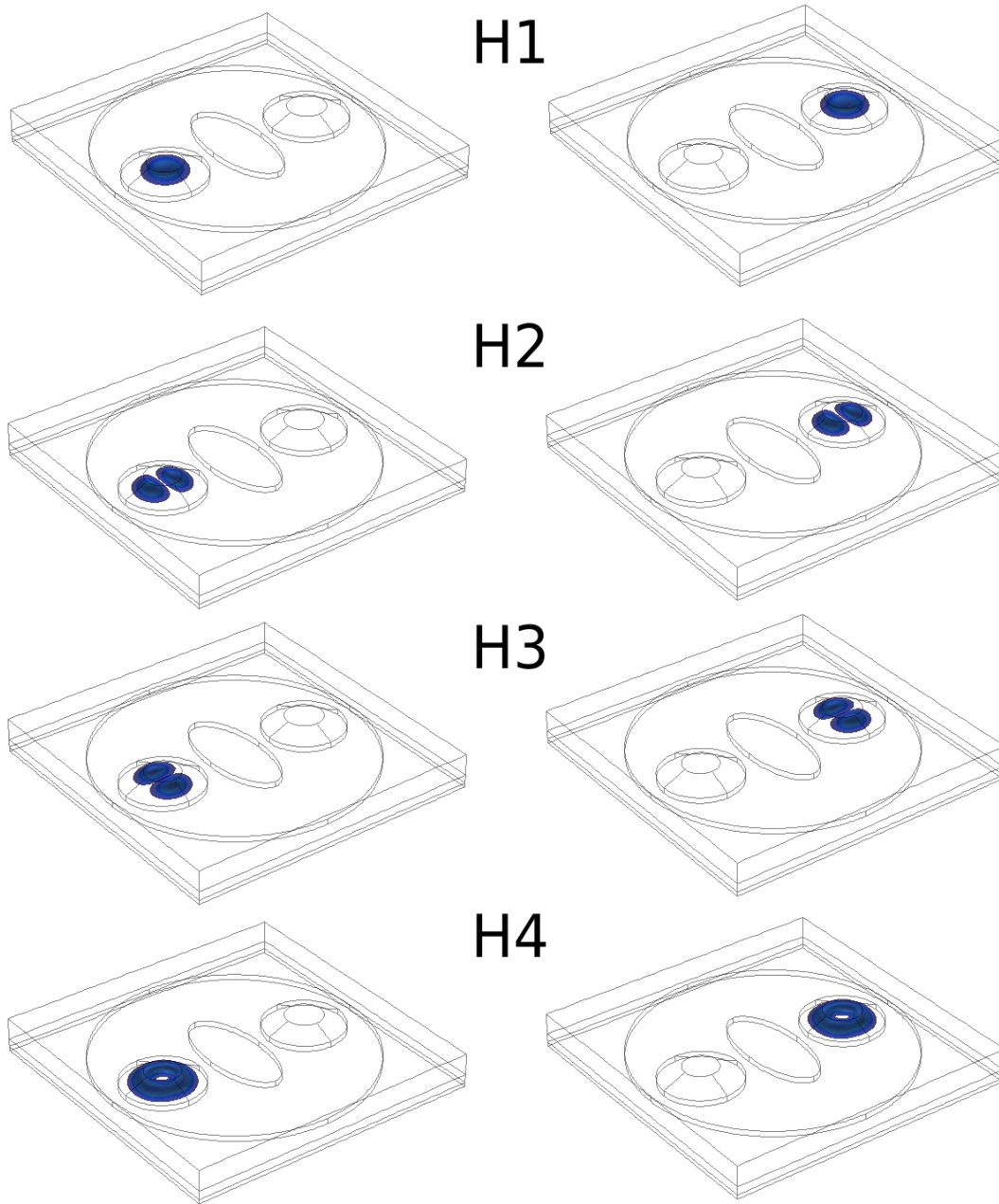


Figura 5.22: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ para los estados más altos de huecos. La columna de la izquierda muestra $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ para los estados localizados en el PC2, mientras que la de la derecha los localizados en el PC1. Los valores de energía encontrados para los estados a izquierda y derecha, respectivamente, fueron: H1=0.0125 eV & 0.0136, H2= 0.0106 & 0.0117, H3= 0.0106 & 0.0117, and H4= 0.0083 & 0.0095, todos en eV.

Tabla 5.1: Promedio de las componentes de deformación.

e_{ij}	PC1	PC2	Anillo
e_{11}	-0.0348953	-0.0369746	-0.0449516
e_{22}	-0.0366859	-0.0387921	-0.047021975
e_{33}	0.0130186	0.0136284	0.021034675

en una matriz, los anillos cuánticos fueron simulados con una capa de un material ficticio sobre los mismos, cuyo ancho de banda prohibida es muy grande, es decir, se supone un confinamiento debido a una barrera de potencial muy grande.

Las funciones de onda obtenidas son utilizadas para calcular las propiedades ópticas, sin embargo, antes de iniciar ese estudio y poder comparar los resultados teóricos y experimentales, es necesario hacer el análisis de los espectros de microfotoluminiscencia para poder hacer la comparación.

5.5. Resultados experimentales

A continuación se mostrarán los resultados experimentales obtenidos de AC, para su posterior comparación con los resultados teóricos derivados de la sección previa.

5.5.1. Microfotoluminiscencia de anillos cuánticos de InAs/GaAs

En esta sección se mostrarán los espectros de microfotoluminiscencia (μ FL) obtenidos de la muestra de anillos cuánticos analizada, los cuales fueron crecidos por el método de epitaxia por gota. Las mediciones se realizaron en diferentes AC de la muestra y, debido a que los tamaños de cada AC son desconocidos, tomaremos como promedio la geometría y dimensiones mostradas en la Figura 5.19 de [38]. Todos los espectros fueron obtenidos a 7.5 K en la configuración de una etapa, a menos que se indique lo contrario.

Para comprobar la luminiscencia de los puntos cuánticos, las Figuras 5.23a y 5.23b muestran los espectros de fotoluminiscencia para dos longitudes de onda del láser a incidencia normal, para un AC arbitrario de la muestra analizada, primero cuando el láser incide únicamente sobre el sustrato (línea azul), después se mueve la muestra de tal forma que un AC esté en la periferia del área del láser (línea roja) y, finalmente cuando un AC es colocado

en el centro de la zona donde incide el láser (línea negra). El pico en 843 nm corresponde a la emisión de la capa de mojado de GaAs, un pico poco intenso en 900 nm, el cual es asociado al anillo cuántico pues solo se observa cuando éste está en el centro del área del láser etiquetado como “AC en el centro” y, finalmente, dos picos también muy poco intensos en 950 nm y 956 nm aproximadamente, los cuales se deben a los PC individuales. También se pueden apreciar otros picos separados cada 25 nm aproximadamente, sin embargo, éstos no son asociados a la muestra si no al cambio de las rejillas de dispersión presentes en el sistema de medición. Por lo que ahora en adelante sólo se mostrará el espectro en el rango de emisión de los PC, pues es la zona de mayor interés. Con este análisis podemos confirmar que los picos presentes alrededor de 950 nm se deben exclusivamente a los PC.

Una vez determinado el intervalo de la longitud de onda de emisión de los AC, el siguiente paso es encontrar a qué longitud de onda de excitación se observa una mayor intensidad en la μ FL, para lo cual se realizaron las mediciones de espectros sobre un mismo AC a diferentes frecuencias del láser. Como se puede observar en la Figura 5.24, por encima de 810 nm prácticamente no hay emisión. Longitudes de onda menores no se probaron por limitaciones del equipo.

La disminución en la intensidad de la μ FL es debida a la menor energía que presentan los fotones asociados a la longitud de onda, pues no proporcionan suficiente energía para que los electrones realicen una transición a la banda de conducción, ya que la potencia del láser incidente se mantuvo constante en todos los casos. Resultados similares se reportan en [126, 127].

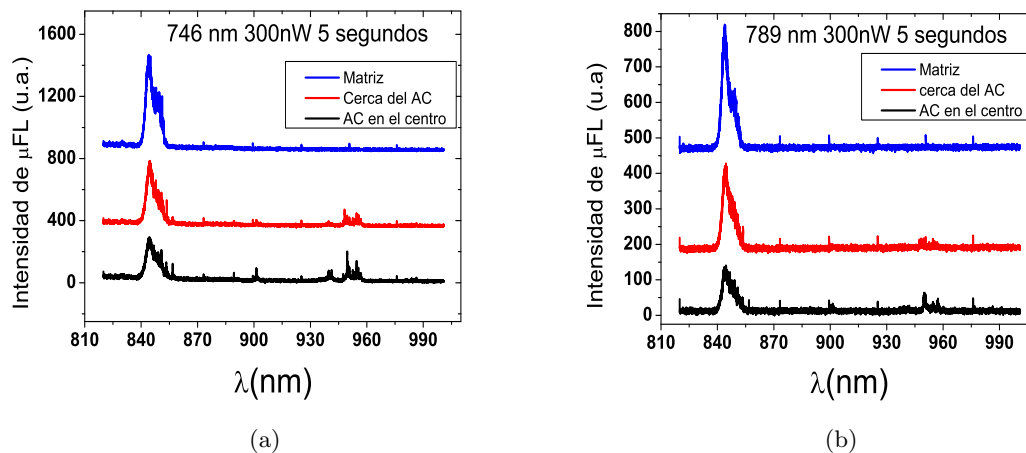


Figura 5.23: Espectros de μ FL con láser de excitación (a) a 746 nm, (b) a 789 nm.

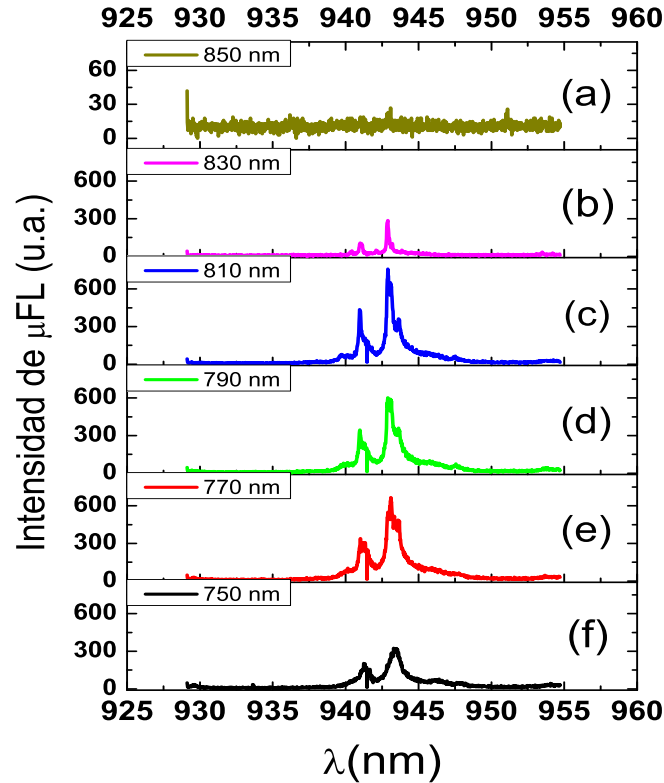


Figura 5.24: Espectros de μFL en AC cambiando la longitud de onda del láser a incidencia oblicua con una potencia de 100 nW, $T_i=90$ s a 7.5 K. Notar diferente escala en (a) por un factor de 10 veces menor.

5.5.2. Incidencia oblicua y normal

Hasta el momento los espectros mostrados fueron obtenidos bajo la condición de incidencia oblicua pues es la forma más sencilla de hacer una medición, pero como se mencionó anteriormente, también es posible obtenerlos a incidencia normal del láser. Con el fin de analizar la respuesta bajo estas condiciones, la Figura 5.25 muestra espectros de un mismo AC bajo incidencia oblicua (a) y normal (b), con diferentes longitudes de onda de excitación. Bajo incidencia normal se presentan múltiples picos en comparación con la oblicua, los cuales se pueden atribuir al cambio en el tamaño efectivo del área del láser [128, 129], de manera que al ir disminuyendo ésta aparecen nuevos picos, que se atribuyen a transiciones 2D de la capa de mojado y anillo cuántico. Otra posible explicación es atribuirlos a efectos de

interferencia, ya que en incidencia normal, el haz del láser incidente recorre una parte del mismo camino óptico que la luz emitida por la muestra.

Para el caso de incidencia oblicua se observa además una disminución en la intensidad al aumentar a longitudes de onda como se mostró anteriormente.

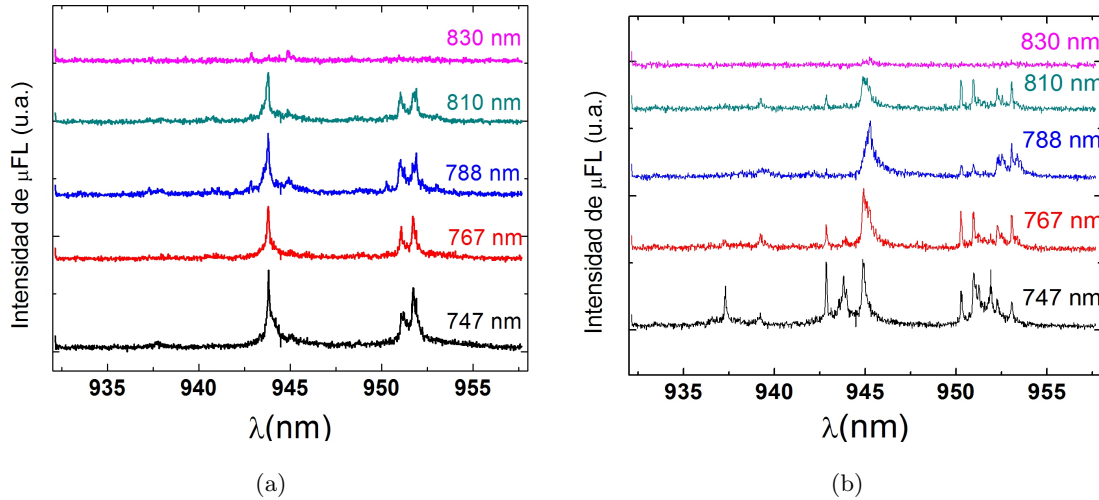


Figura 5.25: Espectro de μ FL variando la longitud de onda de excitación (λ_e) del láser con una potencia μ W, para 1 AC con $T_i=10$ s y 7.5 K (a) incidencia oblicua, (b) incidencia normal.

Una vez revisado los aspectos más generales de un espectro de emisión de un AC, el siguiente punto es determinar la uniformidad en tamaño y composición de las nanoestructuras en la muestra. Para esto debemos comparar los espectros de diferentes AC con la finalidad de determinar variaciones en la energía de emisión. Para analizar los espectros de diferentes anillos cuánticos, la Figura 5.26 muestra el histograma de los dos principales picos asociados a cada uno de los puntos cuánticos de los AC para 20 de éstos ubicados en la misma muestra: un pico centrado aproximadamente en a) 943 nm y b) 953 nm respectivamente. Los espectros fueron obtenidos bajo diferentes condiciones de medición (no se muestran los espectros individualmente), y es evidente que existe poca dispersión en cuanto a la energía de emisión, lo que sugiere que la gran parte de los AC crecidos presentan características similares, indicación de que todas estas nanoestructuras presentan dimensiones y composición similares.

Aunque aquí solo se analizaron 20 nanoestructuras, es importante mencionar que en todas las mediciones realizadas, sin importar las condiciones de excitación o medición, se

obtuvieron rangos de longitud de onda emisión similares, como se puede observar en todos los espectros que se muestran a lo largo de este trabajo.

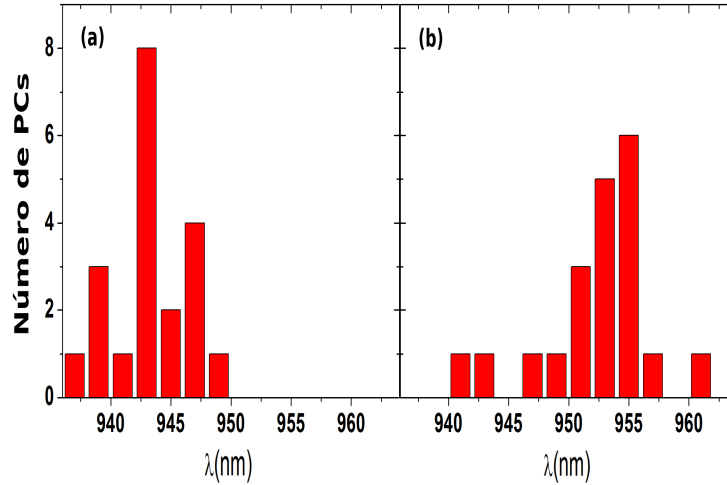


Figura 5.26: Histograma de los 2 picos principales obtenidos por fotoluminiscencia bajo diferentes circunstancias de medición, pero todos a 7.5 K, para 20 AC de la misma muestra. Para pico centrado en a) 943 nm y b) 953 nm aproximadamente.

5.5.3. Variación con la potencia

En esta sección se mostrará cómo afecta la potencia del láser incidente al espectro de fotoluminiscencia. En las Figuras 5.27a y 5.27b se muestra el espectro de emisión para un mismo anillo cuántico y, como se puede observar, al ir incrementando la potencia surge un nuevo pico alrededor 954 nm, cuando se incide el láser con 752 nm; sin embargo, no se observa este mismo comportamiento cuando el mismo AC es excitado con un láser de 796 nm, por el contrario, con esta longitud de onda se presenta un nuevo pico a longitud de onda menores (949 nm). El surgimiento de nuevos picos en función de la potencia en anillos cuánticos se ha sugerido, es debido a procesos de intercambio de energía [38], específicamente por tunelamiento de fotones excitados de los puntos cuánticos menores hacia los de mayor volumen debido al incremento de la probabilidad en la recombinación de los portadores localizados en los PC de menor tamaño, los cuales se transfieren a los de mayor tamaño por efecto túnel [130] emitiendo así a menores longitudes de onda.

Si bien es cierto que existen muchas evidencias que favorecen la idea anterior, no se

ha podido llegar a una explicación concluyente en este aspecto. Pues como se observa en las Figuras 5.28a y 5.28b, para este AC en particular no se observó ningún pico adicional. Como punto final sobre este estudio es importante notar que la potencia del láser de excitación es del orden de nW/cm^2 con la finalidad de favorecer solo transiciones del estado base y evitar transiciones de mayor energía.

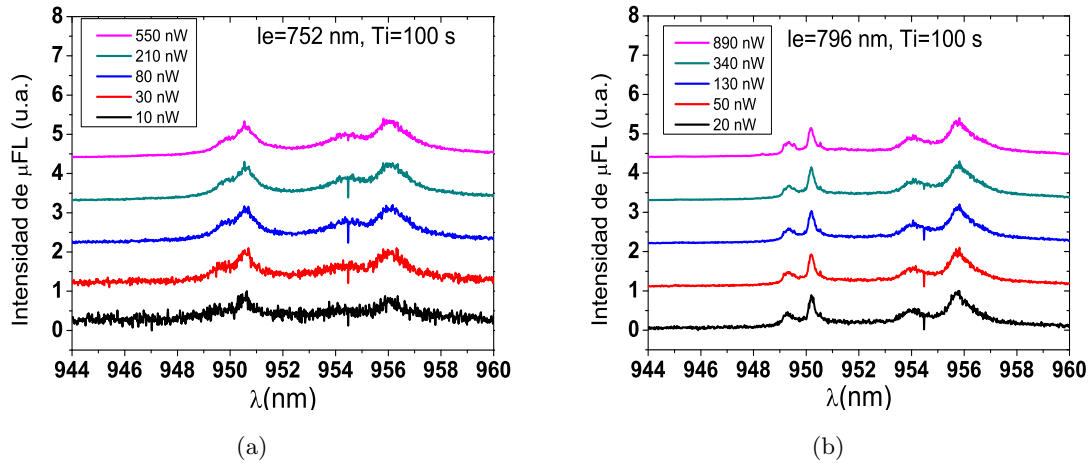


Figura 5.27: Espectros de μ FL (normalizados con respecto al espectro de mayor intensidad), variando la potencia del láser de excitación tomados a 7.5 K con $T_i=100$ s, para un AC etiquetado como AC1 (a) a 752 nm, (b) a 796 nm.

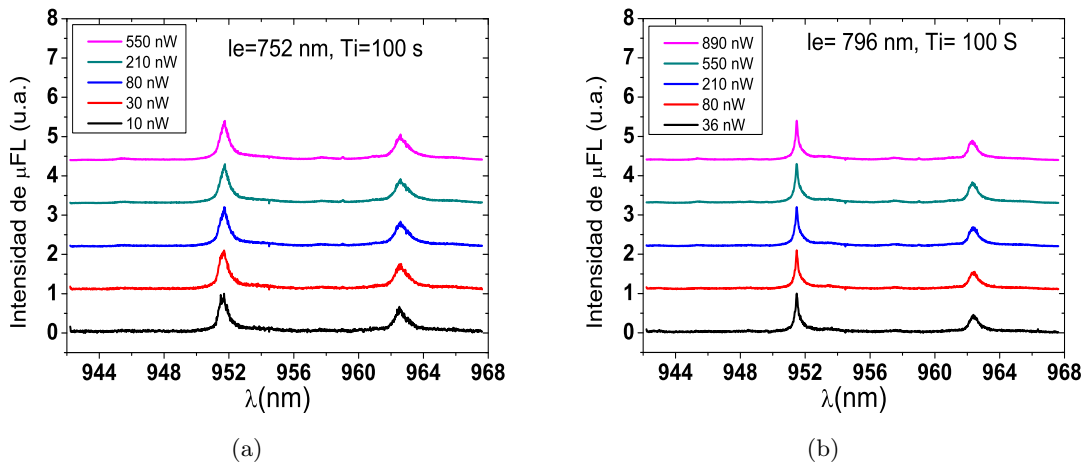


Figura 5.28: Espectros de μ FL (normalizados con respecto al espectro de mayor intensidad y desplazados para mayor claridad), variando la potencia del láser de excitación tomados a 7.5 K con $T_i=100$ s, para un AC etiquetado como AC2 (a) a 752 nm, (b) a 796 nm.

5.5.4. Cambiando ángulo de luz polarizada

Una vez comprobado que los AC de la muestra presentan homogeneidad, habiendo determinado la longitud de onda adecuada para favorecer la emisión de fotones en los anillos cuánticos y establecido que los picos en el espectro son atribuidos a los PC, estamos en condición de realizar estudios más específicos; en particular, este trabajo está enfocado a la descripción cuantitativa y cualitativa de parámetros que pudieran servir como medios de control en el confinamiento de los portadores como lo es el campo eléctrico (este efecto se estudió en puntos de Gan/AlN únicamente) y el vector de polarización del láser incidente. Con esta finalidad se realizaron mediciones de espectros de microfotoluminiscencia variando el ángulo del vector de polarización de luz linealmente polarizada, siguiendo el esquema presentado en la Figura 4.7, y la variación del ángulo de incidencia se detalla en la Figura 4.6. La Figura 5.29 muestra los espectros de fotoluminiscencia normalizados, bajo diferentes ángulos de incidencia y longitudes de excitación, donde las etiquetas de 0 a 1.0 corresponden a ángulos de rotación del vector de polarización de 0° y 180° respectivamente. Como se puede apreciar, existe un ligero decremento en la intensidad a ángulos cercanos a 90° (0.5). Esto implica que hay una orientación espacial de los portadores, que si bien es imposible de medir directamente, se verifica en los cálculos de probabilidad de emisión que se mostrarán más adelante.

5.5.5. Tiempo de vida media de excitones neutros

Como se mencionó, la medición del tiempo de vida media no es una medición directa, si no que se realizan una gran cantidad de mediciones con las cuales se genera un histograma de coincidencias contra un intervalo de tiempo determinado por el TAC (ver Fig. 4.8). El procedimiento es el siguiente: Antes de empezar la medición, se ajusta el láser en la modalidad pulsante, (con duración de 100-150 fs [111, 112]) asegurándose que se obtengan pulsos con duración lo más cortos posibles. Se toma entonces el espectro de un AC de la muestra para determinar con precisión la longitud de onda de emisión de cada uno de los PC, después se calibra el APD que detiene el conteo del tiempo del TAC cuando un fotón con la longitud de onda asociada al PC es detectada por el APD, de tal manera que, cuando el APD detecte un fotón con la longitud de onda especificada, se suma una nueva coincidencia hasta que el TAC inicie un nuevo ciclo, en nuestro caso cada 12 ns. Así se obtiene la imagen de la Figura 5.30, donde se muestra el histograma de coincidencias contra la amplitud del

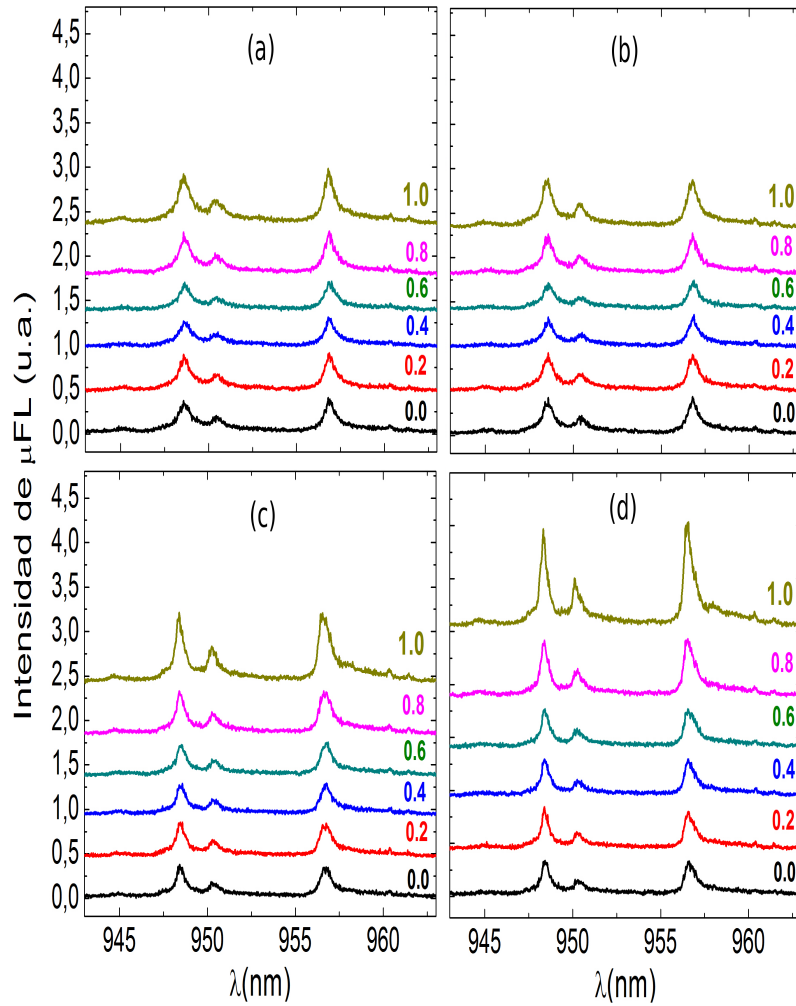


Figura 5.29: Espectros μ FL en AC cambiando la longitud de onda del láser de excitación (a) 750 nm, (b) 770 nm, (c) 790 nm, (d) 810 nm a incidencia oblicua con $1 \mu\text{W}$, $T_i=10 \text{ s}$, $T=7.5 \text{ K}$. Normalizados con respecto al espectro de mayor intensidad.

TAC, en los que existen cuatro picos separados uniformemente, los cuales implican que durante los 12 ns se sumaron cuatro coincidencias. El eje y de la Figura 5.30 representa el ciclo de tiempo proveniente del TAC (hay que recordar que el TAC le asocia a un intervalo de tiempo un voltaje o conteo arbitrario con una escala previamente determinada).

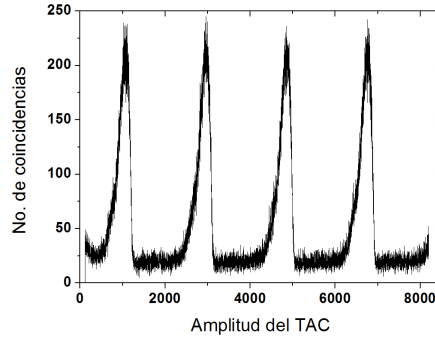


Figura 5.30: Señal proveniente del TAC para un PC en general.

El procedimiento antes descrito se realiza para cada uno de los PC de los 6 anillos mostrados; sin embargo, el análisis para el cálculo del tiempo de vida sólo se realiza a una parte de los datos obtenidos por el TAC (Fig. 5.30), específicamente a un ciclo, pues los demás son iguales. Finalmente, con ayuda del programa PICO Quant se realiza el ajuste utilizando el modelo anisotrópico-reconvolución, el cual presentó el mejor ajuste a las gráficas. Los tiempos determinados se muestran en la Figura 5.31

5.6. Comparación teoría y experimento

Para finalizar este capítulo se mostrará la comparación entre los datos obtenidos experimentalmente con aquellos obtenidos por medio de modelos matemáticos, que se describieron en el Cap. 4. La comparación se centrará en el tiempo de vida media de excitones neutros X^0 y en los espectros de emisión de anillos cuánticos, pues son las nanoestructuras que se analizaron experimentalmente.

Los datos encontrados para el tiempo de vida media de excitones y probabilidad de transición fueron calculados con las ecuaciones 4.13 y 4.16, respectivamente, donde las funciones de onda numéricas de electrones (ψ_e) y huecos (ψ_h) utilizadas son las mostradas en las Figuras 5.21 y 5.22, respectivamente.

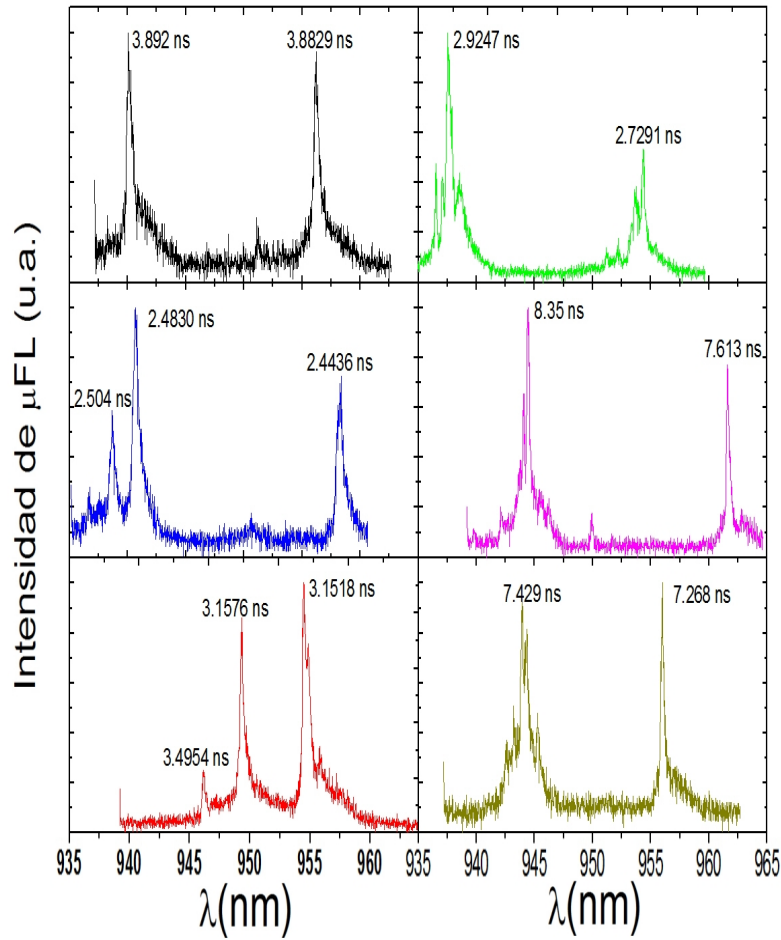


Figura 5.31: Espectros de μ FL tomado a seis AC arbitrarios en los cuales se muestra el tiempo de vida media asociados a cada uno de los PC. Tomados con $P=10 \mu\text{W}$, $T_i=1 \text{ s}$, $l_e=842 \text{ nm}$, a 7.5 K .

La razón de probabilidad de transición se calculó para los cuatro primeros estados de electrones y huecos para cada punto cuántico (con un total de 32 combinaciones entre estados). Sin embargo, la mayoría son despreciables en comparación con las más intensas, como lo muestra la Figura 5.32 la mayor probabilidad se da entre los estados e1-h1, e2-h2, etc., junto con su correspondiente energía de emisión, la cual se encuentra entre 935 nm y 940 nm para el PC2 (QD2 de la Figura 5.19) y entre 945 nm y 949 nm para el PC1. Esta razón de probabilidad está en función del ángulo del vector de polarización θ con respecto a una posición inicial (seleccionada arbitrariamente, pues físicamente es imposible determinar la orientación del PC) correspondiente a la dirección $[\bar{1}10]$. Como se puede observar a mayores ángulos la intensidad de la probabilidad de transición aumenta. Esto en principio es contradictorio a lo observado experimentalmente como se observa en las Figs 5.29 y 5.33, pues a 90° experimentalmente se observa un decremento en la intensidad, sin embargo, como es imposible determinar con precisión el ángulo inicial de forma experimental, lo relevante de este estudio es que efectivamente la probabilidad de transición es afectada por la orientación del vector de polarización, y las tendencias coinciden cualitativamente siguiendo un comportamiento sinusoidal aproximadamente.

Finalmente, con respecto a la energía de emisión encontrada teóricamente, ésta concuerda muy bien con los datos obtenidos experimentalmente como se puede observar en cualquier espectro; específicamente en la Fig 5.26 se muestra el rango de energías observado experimentalmente y ambos rangos concuerdan muy bien.

Para el cálculo del tiempo de vida media de excitones neutros, primero es necesario obtener la integral de Coulomb directa $J_{ij}^{e,h}$ (ver ecuación 4.11) para la que se obtuvieron valores de 9.5158×10^{-5} y 1.0148×10^{-4} eV para los puntos cuánticos 2 y 1 respectivamente. Estos valores son un orden de magnitud menor a los reportados en [75,96], sin embargo en las trabajos citados anteriormente se estudiaron sistemas más pequeños que los estudiadas aquí, por lo que la distancia entre portadores es menor, y por ello incrementa la interacción de Coulomb, a diferencia de los anillos cuánticos donde hay una mayor separación de los portadores, aunque con una mayor distribución espacial de su función de onda.

Por último, con respecto el tiempo de vida de excitones, se encontraron valores de 0.68 ns y 0.55 ns con una fuerza de oscilador asociada de $f_{QD1} = 5.6593$ y $f_{QD2} = 6.8104$ para los puntos cuánticos PC2 y PC1, respectivamente. El tiempo calculado es un orden de magnitud menor al obtenido experimentalmente (ver Fig. 5.31), esto debido probablemente

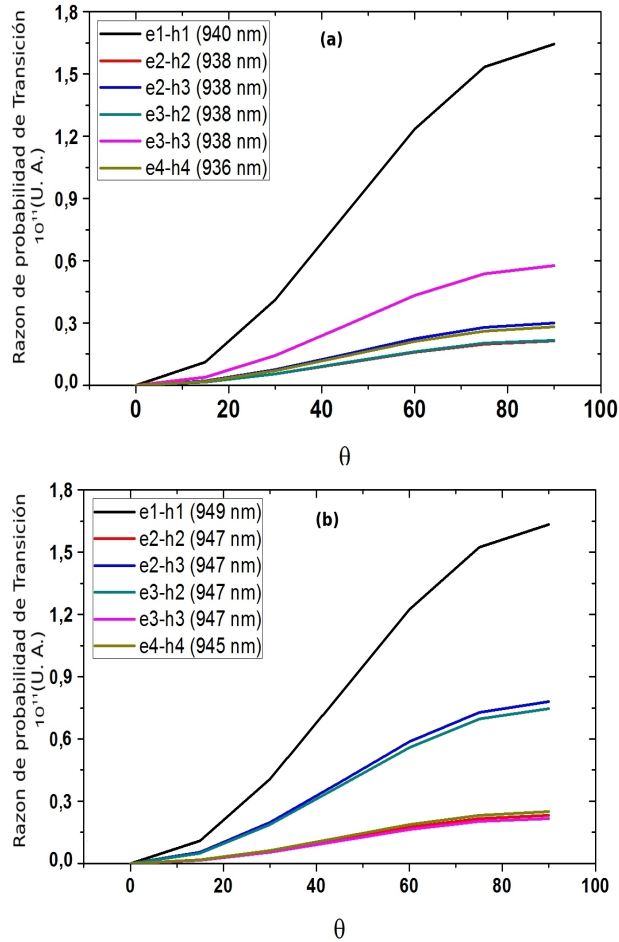


Figura 5.32: Razón de probabilidad de transición como función de la orientación del vector de polarización para el modelo del AC utilizado. El ángulo 0° corresponde a la dirección $[\bar{1}10]$ para un vector de onda $\mathbf{k}=(1,1,1)$ para (a) PC2 y (b) PC1. La correspondiente energía del excitón se muestra en el recuadro.

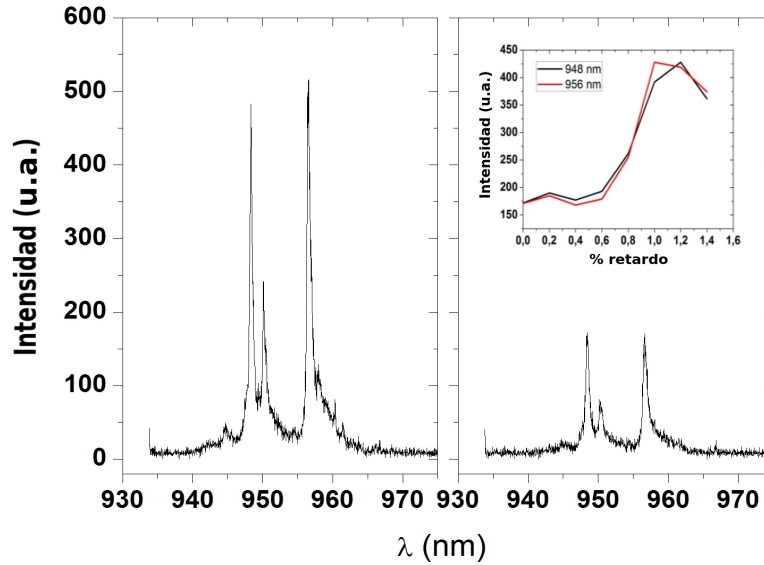


Figura 5.33: Espectro de μ FL de un solo anillo cuántico para dos diferentes orientaciones del vector de polarización de la luz incidente ϵ . El recuadro muestra la dependencia de la intensidad con respecto al ángulo del vector de polarización.

a efectos del gradiente de indio y con ello al desconocimiento de la distribución real de electrones y huecos en la nanoestructura. Se pudo observar (en cálculos no mostrados) que los tiempos de vida dependen del traslape entre las funciones de onda de los portadores, el cual depende de la distribución espacial que es diferente para electrones y huecos, como lo muestra la Figura 5.34, a mayor traslape es mayor la fuerza del oscilador y menor el tiempo de vida. El traslape en los cálculos está determinado así, por la distribución y magnitud del gradiente de indio, éste fue elegido pues se obtiene un mejor ajuste de las energías de emisión teóricas a las experimentales, además de estar dentro del rango de las concentraciones observadas para otras nanoestructuras. Es muy difícil determinar experimentalmente la concentración y distribución precisa de indio en las nanoestructuras, sin embargo, nuestra aproximación es aceptable.

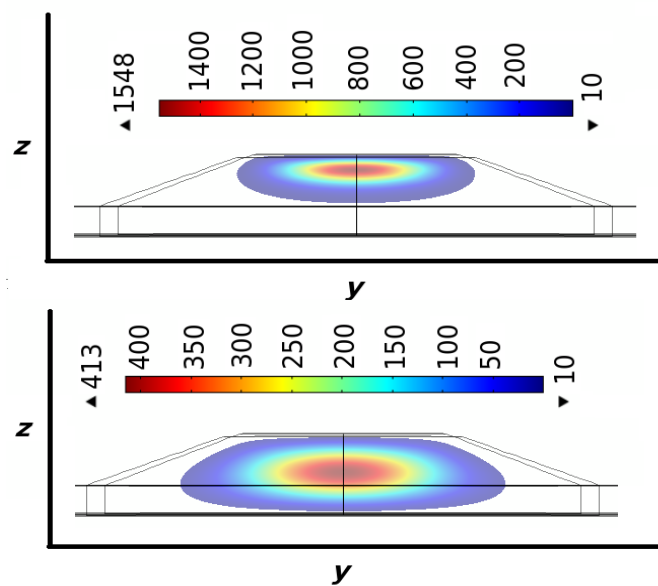


Figura 5.34: Distribución de la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ para (a) electrones y (b) huecos pesados a lo largo del plano yz .

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

Las conclusiones de este trabajo sobre las propiedades electrónicas y ópticas de los PCAE son las siguientes:

Se observó que las propiedades electrónicas están determinadas fundamentalmente por dos aspectos: el material del que están constituidos los PC y el tamaño de los mismos. El primer aspecto, es decir el material del PC, es más relevante, ya que su ancho de banda prohibida determina en primera instancia la energía de confinamiento de los portadores. Sin embargo, como es reportado en la literatura y de igual forma se encontró en este trabajo, otros aspectos como la deformación, campo piezoeléctrico y gradiente de concentración, influyen también en la energía de los portadores. Como se observó a lo largo de este trabajo, la deformación modifica la energía de confinamiento, en especial en PC de InAs/GaAs, donde ésta incrementa la energía en aproximadamente 0.6 eV. Con respecto a los PCs de GaN/AlN, la deformación juega un papel menos relevante, pues en estos sistemas el campo piezoeléctrico es más intenso que el campo de deformación, el primero se encuentra localizado en la base y parte superior del punto cuántico, lo que ocasiona que los portadores se encuentren en estas zonas de mayor o menor potencial, según sea el caso, de electrones o huecos.

En forma similar el gradiente de concentración (en este caso de Indio) modifica los potenciales de confinamiento, en particular en los anillos cuánticos estudiados aquí, se observó una mayor influencia del mismo en los electrones, pues la diferencia en la concentración a lo largo de la nanoestructura hace que se cree una zona de menor confinamiento en la parte superior (suponiendo un gradiente lineal incrementándose a lo largo del eje z) favoreciendo el confinamiento de los electrones en esta zona.

El tamaño de los puntos influye en la distribución de la deformación, potencial piezoeléctrico y concentración, sin embargo su mayor influencia se presenta en la separación entre los niveles de energía. Así pues, para PC pequeños (como los presentados con geometría piramidal cuadrada) los niveles se encuentran más separados que en caso de los anillos cuánticos. Esto se aprecia fácilmente al observar los espectros teóricos calculados en las diferentes geometrías.

Respecto a las propiedades ópticas, la energía de emisión, como se discutió anteriormente, está determinada por el material que constituye al punto y los potenciales adicionales. Pero la probabilidad de que ocurra una transición entre los diferentes estados de portadores está completamente determinada por sus funciones de onda, pues como se encontró la mayoría de estas transiciones son despreciables. El hecho de que una transición sea más probable que otra está determinada por el traslape entre la función de onda del electrón y la del hueco y, éste a su vez por la distribución espacial que presentan las mismas dentro del PC. En especial se observó que la probabilidad de transición puede ser modificada por parámetros exteriores como lo es el campo eléctrico \mathbf{E} para puntos de GaN/AlN y la orientación del vector de polarización para el caso de AC de InAs/GaAs.

El campo eléctrico externo permite modificar los niveles de energía y, en mayor grado, la distribución espacial de los portadores y con ello la probabilidad de transición, pues como se observó, las transiciones permitidas cuando \mathbf{E} es aplicado a lo largo del eje x son distintas al caso en que \mathbf{E} se orienta a lo largo del eje z . Esto es muy importante pues nos permite tener un medio de control en la energía de confinamiento de los portadores y la probabilidad de transición.

En cuanto a la parte experimental, se encontró que los espectros de microfotoluminiscencia de anillos cuánticos cambian con la longitud de onda y potencia del láser de excitación. A longitud de onda mayores a 810 nm la intensidad del espectro es despreciable, pues no posee la energía necesaria para inducir la transición de un electrón a la banda de conducción. A la longitud de onda fija y al incrementar la potencia, se presenta un pico adicional en el espectro en algunos anillos cuánticos, del cual no se ha comprendido bien su origen, aunque algunos artículos sugieren un proceso de transferencia de energía entre los PC que conforman la nanoestructura.

Se observó experimentalmente que la intensidad de la emisión depende del vector

de polarización del láser incidente por lo que, al igual que el campo eléctrico estático en el caso de PC de GaN/AlN, permite modificar las transiciones entre los estados de los portadores confinados.

El modelo propuesto para describir las propiedades ópticas de anillos cuánticos presenta buena concordancia con los espectros experimentales de microfotoluminiscencia, utilizando como parámetro de ajuste la concentración de indio, el cual está dentro del rango de los valores experimentales. Con respecto a los tiempos de vida de excitones neutros, teóricamente se encontraron valores con un orden de magnitud menor a los obtenidos experimentalmente, debido probablemente a diferencias en la distribución de la deformación y de indio que modifican el valor de la fuerza del oscilador f y con esto los tiempos de vida media.

Con el trabajo desarrollado, es posible determinar estados de portadores de distintas nanoestructuras semiconductoras, lo que permite calcular otras propiedades ópticas mediante métodos más elaborados, o bien incluir grados de libertad como el espín.

Apéndice A

Deformación

Los principales tipos de deformación son la longitudinal (elongación o contracción) y cizallamiento. La elongación (contracción) como se muestra en la Figura A.1, está definida como la razón del cambio en la longitud de un segmento de un cuerpo respecto a su longitud inicial, según la ecuación

$$\frac{P'Q' - PQ}{PQ} = \frac{\Delta\mu_1}{\Delta x_1} = e_{11}. \quad (\text{A.1})$$

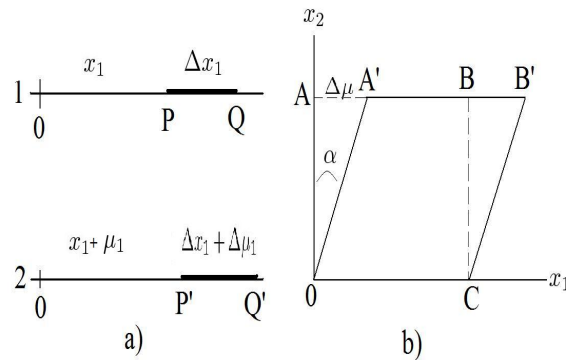


Figura A.1: Tipos de deformación a) elongación o contracción b) de cizallamiento [131].

La deformación por cizallamiento es el desplazamiento relativo de una parte del cuerpo con respecto a otro plano cercano como se ve en la Figura A.1b, su magnitud está determinada como la razón del desplazamiento de una parte del cuerpo respecto a un

plano, definida como

$$e_{12} = \Delta\mu_1/\Delta x_2 = \tan \alpha. \quad (\text{A.2})$$

En otras palabras, la deformación por cizallamiento se puede ver como la medida del cambio en el ángulo entre dos líneas arbitrarias paralelas al cuerpo bajo deformación. La deformación en un punto está definida por la expresión

$$e = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta\mu}{\Delta x} = \frac{d\mu}{dx}, \quad (\text{A.3})$$

donde $d\mu = edx$. Consideremos la deformación de un segmento en un plano. El segmento PQ ubicado en el plano (X_2, X_1) es transformado al segmento $P'Q'$ después de la deformación (Fig. A.2). Las coordenadas del punto P son (x_1, x_2) y los del punto P' son $(x_1 + \mu_1, x_2 + \mu_2)$.

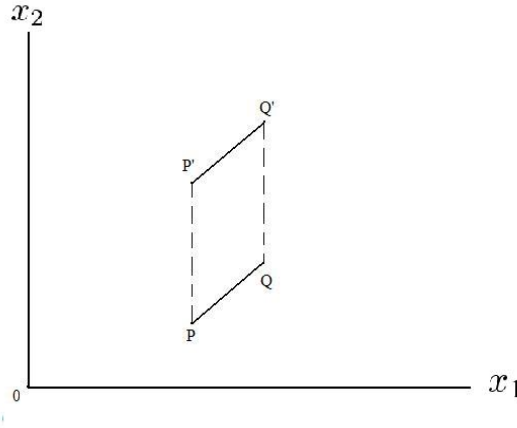


Figura A.2: Representación esquemática de la deformación de un segmento [131].

Las componentes del vector desplazamiento del punto P son $\mu = PP' = (\mu_1, \mu_2)$, las coordenadas del punto Q son $(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)$ y las componentes del vector desplazamiento del punto Q son $QQ' = (\mu_1 + \Delta\mu_1, \mu_2 + \Delta\mu_2)$. Es fácil ver que

$$\Delta\mu_1 = \frac{\partial\mu_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial\mu_1}{\partial x_2} \Delta x_2, \quad (\text{A.4})$$

$$\Delta\mu_2 = \frac{\partial\mu_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial\mu_2}{\partial x_2} \Delta x_2,$$

introduciendo la notación

$$\frac{\partial\mu_1}{\partial x_1} = \mu_{11}, \quad \frac{\partial\mu_1}{\partial x_2} = \mu_{12}, \quad \frac{\partial\mu_2}{\partial x_1} = \mu_{21}, \quad \frac{\partial\mu_2}{\partial x_2} = \mu_{22}, \quad (\text{A.5})$$

se pueden reescribir las ecuaciones (A.4) en la forma general

$$\Delta\mu_i = \mu_{ij}\Delta x_j, \quad (j = 1, 2) \quad (\text{A.6})$$

donde $\Delta\mu_i$ y Δx_j son vectores, los coeficientes μ_{ij} relacionan a éstos y forman un tensor de segundo rango, el cual es llamado *tensor de distorsión elástica*. Ahora se analizará el significado físico de estos coeficientes. Supongamos que el segmento Q_2PQ_1 es paralela a los ejes, se transforma en el segmento $Q'_2P'Q'_1$ como resultado de la deformación, como se observa en la Figura A.3. Al hacer $dx_2 = 0$ para el segmento PQ_1dx_2 y tomando (A.4) y (A.5) en consideración, se obtiene

$$\Delta\mu_1 = \frac{\partial\mu_1}{\partial x_1}\Delta x_1 = \mu_{11}\Delta x_1, \quad (\text{A.7})$$

$$\Delta\mu_2 = \frac{\partial\mu_2}{\partial x_1}\Delta x_1 = \mu_{21}\Delta x_1. \quad (\text{A.8})$$

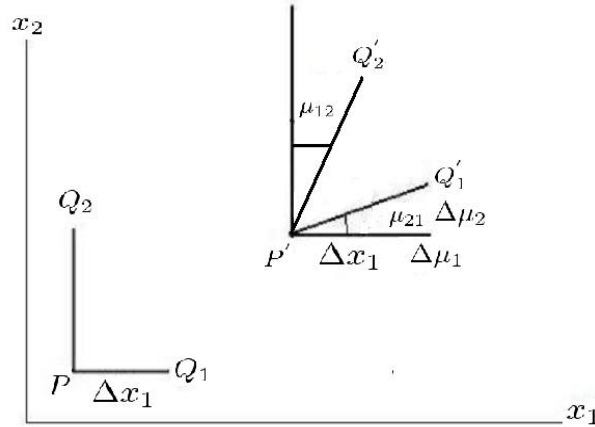


Figura A.3: Ilustración del significado físico de las componentes μ_{11} y μ_{21} [131].

Como se observa en la Figura A.3, μ_{11} mide la elongación del segmento PQ_1 y μ_{21} mide la rotación en sentido antihorario de este segmento. Similarmente, μ_{22} corresponde a la elongación del segmento PQ_2 , y μ_{12} mide la rotación antihorario.

El tensor μ_{ij} caracteriza no solo la deformación de un objeto, sino también la rotación de la red cristalina, por que el objeto puede no ser distorsionado, pero las componentes μ_{ij} pueden no ser cero.

Si μ_{ij} son constantes a través del cuerpo, significa que la deformación es homogénea. Bajo una deformación uniforme, una línea recta permanece recta; líneas paralelas

permanecen paralelas; todas las líneas mutuamente paralelas son elongadas o comprimidas en el mismo grado, una elipse se transforma en otra elipse, en particular un círculo se transforma en una elipse. Ignorando la rotación, tendremos que la parte simétrica del tensor μ_{ij} se denota por ϵ_{ij} y se la llama tensor deformación. Puede demostrarse que

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\mu_{ij} + \mu_{ji}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu_j}{\partial x_i} \right). \quad (\text{A.9})$$

Apéndice B

Función característica

En este apéndice se describe en forma más detallada el desarrollo analítico para obtener la función característica (2.26), la cual contiene la información de la geometría y es utilizada para la obtención de los potenciales de deformación y piezoeléctrico. A continuación se explicará el procedimiento para la obtención de la función característica de una pirámide hexagonal truncada, para posteriormente dar las expresiones para todas las geometrías empleadas en este trabajo, teniendo en cuenta que el procedimiento para la obtención de las demás es similar.

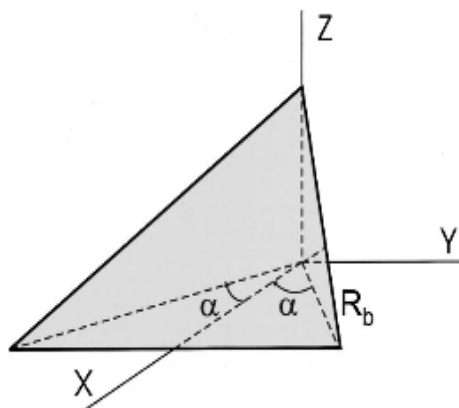


Figura B.1: Vista esquemática de una porción de una pirámide [59].

La definición de la función característica, es decir, la transformada de Fourier de

un cuerpo geométrico en coordenadas cartesianas está dada por [67]

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^x e^{-i\xi_x x} dx \int_0^y e^{-i\xi_y y} dy \int_0^z e^{-i\xi_z z} dz. \quad (\text{B.1})$$

Pirámide hexagonal truncada

Para el caso de puntos cuánticos de forma piramidal, la integral (2.26) puede evaluarse dividiendo la pirámide en porciones, y sobre uno de ellos, toma la forma (ver Fig. B.1)

$$\tilde{X}_{ps} = \int_0^{x_0} e^{-i\xi_x x} dx \int_{-y_0 x/x_0}^{y_0 x/x_0} e^{-i\xi_y y} dy \int_0^{h(1-x/x_0)} dz, \quad (\text{B.2})$$

donde h es la altura de la porción, $x_0 = R_b \cos \alpha$, $y_0 = R_b \sin \alpha$, R_b se indica en la Figura B.1 y, para una pirámide de N lados, $\alpha = \pi/N$. Al evaluar esta integral se obtiene fácilmente

$$\begin{aligned} \tilde{X}_{ps}(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = & \\ & \frac{1}{\xi_y \xi_z} \left\{ e^{-i\xi_z h} \left[I_{e0} \left(x_0, -\xi_x + \xi_y \frac{y_0}{x_0} + \xi_z \frac{h}{x_0} \right) - I_{e0} \left(x_0, -\xi_x - \xi_y \frac{y_0}{x_0} + \xi_z \frac{h}{x_0} \right) \right] \right. \\ & \left. - I_{e0} \left(x_0, \xi_x + \xi_y \frac{y_0}{x_0} \right) + I_{e0} \left(x_0, -\xi_x - \xi_y \frac{y_0}{x_0} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

con

$$I_e(a, \xi) = [e^{i\xi a} - 1]/i\xi. \quad (\text{B.4})$$

La ecuación (B.3) es la transformada de Fourier para una sola porción de una pirámide, como se ve en la Figura B.1. Ahora, para encontrar la función característica de toda la pirámide, se toman las propiedades de Fourier de superposición y de multiplicación por una constante. Así para una pirámide de N segmentos se tiene

$$\tilde{X}_{pir}(\xi) = \sum_{p=0}^{N-1} \tilde{X}_{ps} \left[\cos \left(\frac{2p\pi}{N} \right) \xi_1 + \sin \left(\frac{2p\pi}{N} \right) \xi_2, -\sin \left(\frac{2p\pi}{N} \right) \xi_1 + \cos \left(\frac{2p\pi}{N} \right) \xi_2, \xi_3 \right]. \quad (\text{B.5})$$

Si deseamos calcular $\tilde{X}_{PC}(\xi)$ de una pirámide truncada se hace una resta de pirámides. En el espacio real la parte truncada corresponde a una pirámide desplazada sobre el eje de la pirámide. La transformada resulta

$$\tilde{X}_{PC}(\xi) = \tilde{X}_{pir}(\xi, R_b, h_l) - e^{-i\xi_z h} \tilde{X}_{pir}(\xi, R_t, h_s), \quad (\text{B.6})$$

donde

$$\begin{aligned} h_l &= R_b h (R_b - R_t), \\ h_s &= R_t h (R_b - R_t), \end{aligned}$$

h_l es la altura de la pirámide completa, h_s es la altura de la pirámide que es restada a la original para obtener la pirámide truncada, es decir, $h = h_l - h_s$. R_b , como se puede ver en la Figura B.1, es la distancia desde el origen del sistema coordinado a un vértice de la pirámide y R_t es la distancia correspondiente de la pirámide que es substraída. El factor exponencial resulta del corrimiento en el espacio real por la altura h en la dirección positiva del eje z .

Es importante mencionar que la ecuación (B.3) resulta al evaluar la integral (ecuación B.1) en los límites establecidos; sin embargo, cuando una o dos de las variables x, y o z es cero, la ecuación B.3 ya no es válida, por lo que se tiene que realizar nuevamente la integral (ecuación B.1) con los límites apropiados.

Siguiendo pasos similares se presentan a continuación las funciones características para las demás geometrías empleadas en este trabajo.

Pirámide cuadrangular truncada

Para esta geometría la función característica es la siguiente:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{PC}(\xi_n) &= \chi_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, L_x, L_y) + \chi_1(\xi_2, \xi_1, \xi_3, L_y, L_x) \\ &+ \chi_1(-\xi_1, \xi_2, \xi_3, L_x, L_y) + \chi_1(-\xi_2, \xi_2, \xi_3, L_y, L_x), \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

con

$$\begin{aligned} \chi_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, L_x, L_y) &= \\ &\frac{1}{\xi_2 \xi_3} \left\{ e^{-i\xi_3 h} \left[I_e \left(\frac{L_x}{2}, -\xi_1 + \xi_3 \frac{L_y}{L_x} + \xi_2 \frac{2h}{L_x} \right) - I_e \left(\frac{L_x}{2}, -\xi_1 - \xi_3 \frac{L_y}{L_x} + \xi_2 \frac{2h}{L_x} \right) \right] \right. \\ &\left. - I_e \left(\frac{L_x}{2}, -\xi_1 + \xi_2 \frac{L_y}{L_x} \right) + I_e \left(\frac{L_x}{2}, -\xi_1 - \xi_2 \frac{L_y}{L_x} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

donde I_e está dado por la ecuación (B.4). Las ecuaciones (B.7) y (B.8) corresponden a una pirámide sin trincar. Finalmente, de manera similar al caso de la pirámide hexagonal, para

obtener la geometría final se restan dos pirámides de diferente tamaño desplazadas sobre el eje z , con lo que se obtiene la ecuación

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \tilde{\chi}_{PC}^{pir}(\xi, L_x^b, L_y^b, h_l) - e^{-i\xi_z h_t} \tilde{\chi}_{PC}^{pir}(\xi, L_x^t, L_y^t, h_s), \quad (\text{B.9})$$

donde los superíndices b y t corresponden a los lados en la base de la pirámide, b para la pirámide completa y t para la pirámide a restar. Los subíndices l y s corresponden a las alturas de las pirámides, la mayor y menor, respectivamente y h_t es el corrimiento de la pirámide a restar sobre el eje z .

Paralelepípedo

La función característica más fácil de encontrar analíticamente es la correspondiente a la del paralelepípedo, la cual se utilizó para simular la capa de mojado en las estructuras piramidales, su función característica está dada por:

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi_{\mathbf{n}}) = \frac{8}{\xi_1 \xi_2 \xi_3} \sin\left(\frac{\xi_1 a_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2 a_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3 a_3}{2}\right). \quad (\text{B.10})$$

Cono truncado

En las funciones características anteriores (ecuaciones B.3, B.7 y B.10), debido a su simetría, la ecuación general (ecuación B.1) está definida en coordenadas cartesianas. Sin embargo, para las siguientes geometrías es mejor utilizar el sistema cilíndrico de coordenadas. Esta geometría y las subsecuentes son utilizadas para calcular el tensor de deformación en anillos cuánticos, donde los PC se modelaron como conos truncados. La ecuación (B.1) se escribe entonces como

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \int_0^{D/2} \int_0^{2\pi} \int_{\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} e^{-i\xi_3 z} e^{-i\xi_{\parallel} r \cos\theta} r dr dz d\theta. \quad (\text{B.11})$$

La función característica de un cono sin truncar está dada por la ecuación

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \frac{2\pi i}{\xi_z} \left[e^{-i\xi_z h} R^2 I_2(\xi_{\parallel} R, \xi_z h) - \frac{R}{\xi_{\parallel}} J_1(\xi_{\parallel} R) \right], \quad (\text{B.12})$$

donde R es el radio de la base del cono, h es la altura e I_2 es la integral

$$I_2(\alpha, \beta) = \int_0^1 x J_0(\alpha x) e^{i\beta x} dx, \quad (\text{B.13})$$

aquí J_0 y J_1 son funciones de Bessel de orden cero y uno respectivamente y, de manera similar que en las geometrías anteriores, para obtener el cono truncado es necesario restar dos conos.

Cilindro

Forma parte de la geometría de anillos cuánticos, cuya función característica está dada por

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \frac{2\pi D}{\xi_{\parallel}\xi_3} \sin(\xi_3 h/2) J_1\left(\frac{D\xi_{\parallel}}{2}\right), \quad (\text{B.14})$$

donde h y D , son la altura y diámetro del cilindro, respectivamente. Esta función característica es la de un cilindro con centro coincidiendo en el origen del sistema coordenado. Sin embargo, si el origen del sistema coordenado coincide con en el centro de la base del cilindro, los límites de integración en la ecuación (B.11) con respecto a la variable z cambian de $-h/2, h/2$ a $0, h$, por lo que la ecuación (B.14) se puede reescribir como

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \frac{i\pi D}{\xi_3\xi_{\parallel}} (e^{-izh} - 1) J_1\left(\frac{D\xi_{\parallel}}{2}\right). \quad (\text{B.15})$$

Cilindro elíptico

Para completar la geometría de los AC, la función característica de la elipse es restada del cilindro para así obtener la geometría de un anillo con centro elíptico.

Es importante mencionar que todas las funciones características mencionadas anteriormente se pueden encontrar en [59, 67], pero la asociada a un cilindro elíptico, es encontrada aquí con ayuda de las propiedades de la transformada de Fourier (ecuación B.16).

$$\begin{aligned} F[f(x/a, y/b)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x/a, y/b) e^{-iux} e^{-ivy} dx dy, \\ &= |ab| \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', y') e^{-iua x'} e^{-ivb y'} dx' dy', \\ &= |ab| \cdot F(ua, vb), \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

donde $x' = x/a$ y $y' = y/b$. Finalmente, la función característica de un cilindro elíptico está dada por

$$\tilde{\chi}_{PC}(\xi) = \frac{2i\pi}{\xi_3\xi_{elip}} (e^{-izh} - 1) ab J_1(\xi_{elip}), \quad (\text{B.17})$$

donde

$$\xi_{elip} = \sqrt{(xa)^2 + (yb)^2}, \quad (\text{B.18})$$

con a y b los semiejes menor y mayor de la elipse.

Apéndice C

Elementos finitos

Es un método de resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales en los cuales es muy complicado o imposible obtener una solución analítica. Surgió en 1940 al tratar de resolver un sistema continuo elástico.

Este método consiste en dividir el continuo en un número finito de partes denominadas “elementos”, cuyo comportamiento es especificado por un número determinado de parámetros (ver Fig. C.1). En forma general el procedimiento consta de 4 pasos:

- 1 Se determinan las propiedades de los elementos a partir de la geometría del material y definir los parámetros asociados. Para cada elemento su matriz, y sus correspondientes nodos deben ser encontrados con la forma de la ecuación.

$$\mathbf{q}^1 = \mathbf{K}^1 \mathbf{u}^1 + \mathbf{f}^1, \quad (\text{C.1})$$

donde \mathbf{u}^1 es la posición original de cada elemento, \mathbf{f}^1 representa la fuerza nodal requerida para balancear cualquier carga concentrada o balanceada actuando en un elemento. El primer elemento representa la fuerza inducida por desplazamientos de los nodos. La matriz \mathbf{K}^1 es conocida como la matriz de rigidez del elemento e y \mathbf{q}^1 es el desplazamiento total de cada elemento dado por una fuerza \mathbf{f}^1 .

- 2 El ensamblado de las ecuaciones a resolver es del tipo

$$\mathbf{K}\mathbf{u} + \mathbf{f} = 0, \quad (\text{C.2})$$

con los apropiados parámetros. Si las matrices son simétricas solo es necesario encontrar la mitad de elementos.

- 3 La inserción de las condiciones de frontera dentro del ensamble final de la matriz.
- 4 El paso final es la resolución del sistema de ecuaciones. Para la cual existen numerosos algoritmos.

Generalmente, por simplicidad, se usan geometrías simples para la creación de los elementos, por ejemplo, en un sistema bidimensional se emplean triángulos y rectángulos. Para un sistema tridimensional se usan tetraedros o paralelepípedos.

La Figura C.1 muestra un esquema de un objeto estudiado por elementos finitos, donde e es el elemento, las etiquetas 1, 2, 3 representan los nodos, es decir, los puntos donde se resuelve el sistema, por lo que mientras más nodos o elementos posea el sistema, la solución tendrá mayor precisión. La información anterior fue obtenida de [133].

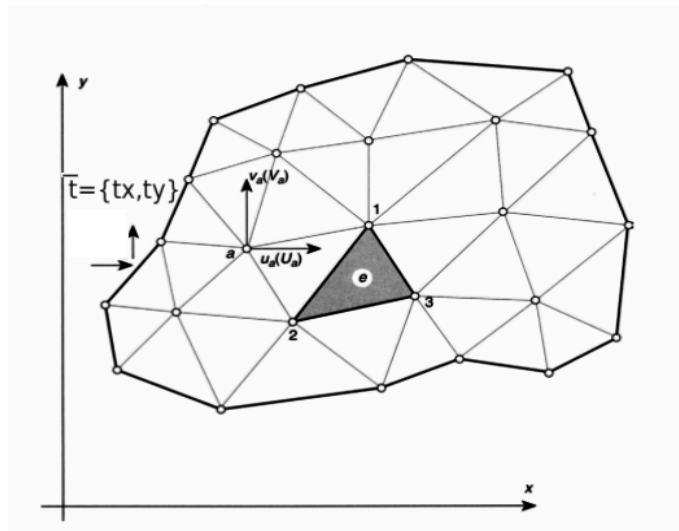


Figura C.1: Esquema de un elemento finito en 2D [133].

Aunque inicialmente este método surgió del análisis de sistemas elásticos, éste se ha empleado para la resolución numérica de cualquier sistema que incluya ecuaciones diferenciales, pues lo importante del método es dividir el sistema completo en elementos para poder encontrar una solución en determinados puntos con los parámetros apropiados. Obviamente entre mayor sea la cantidad de puntos (determinado por la forma y cantidad de los elementos) donde se encuentre la solución numérica, ésta se aproximará mejor a la exacta.

Apéndice D

Cálculo de la energía de una OEM

La ecuación para el cálculo de la energía de una onda electromagnética [105], en el sistema internacional de unidades, está dada por

$$U = \frac{1}{2}(\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) = \frac{1}{2}(\epsilon|\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{\mu}|\mathbf{B}|^2). \quad (\text{D.1})$$

La expresión anterior también se puede expresar haciendo uso del vector potencial \mathbf{A} recordando que

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{t}, \quad (\text{D.2})$$

si se considera un comportamiento sinusoidal de la forma $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$, sustituyendo en la ecuación (D.2) se obtiene

$$\mathbf{E} = \frac{2\omega}{c} \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (\text{D.3})$$

de la relación $\mathbf{E} = c\mathbf{B}$ [132] por lo que la ecuación (D.1) queda

$$U = \frac{1}{2} \left(\epsilon E^2 + \frac{1}{\mu} B^2 \right), \quad (\text{D.4})$$

y de la igualdad $c^2 = 1/\epsilon\mu$

$$U = \frac{1}{2} \left(\epsilon E^2 + \frac{E^2}{\mu c^2} \right) = \epsilon E^2, \quad (\text{D.5})$$

por lo que sustituyendo (D.3) en la ecuación (D.5) resulta

$$U = \frac{4\epsilon\omega^2}{c^2} A_0^2 \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (\text{D.6})$$

donde el valor promedio de \sin^2 es $\langle \sin^2 \rangle = 1/2$, con lo que finalmente se obtiene el valor de la energía por unidad de volumen V

$$U = 2V\epsilon\omega^2 A_0^2 c^2, \quad (\text{D.7})$$

despejando A_0 da como resultado

$$A_0 = \sqrt{\frac{c^2}{2\epsilon\omega^2V}}. \quad (\text{D.8})$$

Bibliografía

- [1] E. Borovitskaya, M.S. Shur, *Quantum Dots*, World Scientific, 1a. edición, (2002).
- [2] E. U. Rafailov, *The Physics and Engineering of Compact Quantum Dot-based Lasers for Biophotonics*, Wiley-VCH, 1a. edición, (2014).
- [3] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*, Springer, 1a. edición, (1998).
- [4] T. Suzuki, K. Nomoto, K. Taira, I. Hase, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **36**, 1917, (1997).
- [5] P. Michler, *Single Quantum Dots (Fundamentals, Applications and New Concepts)*. Springer, 1a. edición, (2003).
- [6] H. Huang, S. W. Koch, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductores*, World Scientific, 4a. edición, (2004).
- [7] J. Drbohlavova, V. Adam, R. Kisek, J. Hubalek, *Int. J. Mol. Sci.*, **10** (2), 656, (2009).
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, 8a. edición, (2005).
- [9] S. Tiwari, *Compound Semiconductors Device Physics*, Academic Press, 1a. edición, (1992).
- [10] De la página: <http://www.autoelektrix.ru/eng-109/2/>
- [11] Y. Taniyasu, M. Kasu, *Special Feature: Front-line Materials Research, NTT Technical Review*, **8**, 8, (2010).
- [12] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press, 2a. edición, (1991).
- [13] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics* Holt-Saunders International Editions, 1a. edición, (1976).

- [14] H. Kroemer, *Quantum Mechanics, For Engineering, Materials Science, and Applied Physics*, Prentice Hall, 1a. edición, (1994).
- [15] http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis_dbj/node75.html.
- [16] http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/Append/figs/fmd21_5.gif.
- [17] E. Resnick, *Física Cuántica*, Limusa Wiley, 1a. edición, (1997).
- [18] M. L. Cohen, T.K. Bergstresser, *Phys. Rev.*, **141**, 789, (1966).
- [19] H. Morkoc, *Nitride Semiconductors and Devices*, Springer, 1a. edición, (1999).
- [20] M. Rajesh, K. Tanabe, S. Kato, K. Kawaguchi, Masao Nishioka, Yasuhiko Arakawa, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **53**, 04EH05, (2014).
- [21] S. Bietti, S. Sanguinetti, C. Somaschini, N. Koguchi, G. Isella, D. Chrastina, A. Fedorov, *Conf. Series: Materials Science and Engineering*, **6**, 012009, (2009).
- [22] V. N. Stavrou, *Quantum Dots, Theory and Applications*, 1a. edición, (2015).
- [23] M. A. Herman, *Molecular Beam Epitaxy*, 2a. edición, (1996).
- [24] K. Yamaguchi, K. Yujobo, T. Kaizu, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39**, L1245, (2000).
- [25] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, J. L. Rouvière, *Phys. Rev. B.*, **56**, R7069, (1997).
- [26] O. Gywat, H. J. Krenner, J. Berezovsky, *Spins in Optically Active Quantum dots*, Wiley-VCH, 1a. edición, (2010).
- [27] A. Madhukar, T. R. Ramachandran, A. Konkar, I. Mukhametzhanov, W. Yu, P. Chen, *Appl. Surf. Sci.* **123**, 266, (1998).
- [28] C. Adelmann, B. Daudin, *Phys. Rev B.*, **70**, 125427, (2004).
- [29] http://www.uam.es/personal_pdi/ciencias/jdemigue/research/growth.html.
- [30] P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, T. S. Jones, *Phys. Rev. B* **62**, 10891, (2000).
- [31] F. Widmann, B. Daudin, G. Feuillet, Y. Samson, J. L. Rouvière, N. Pelekanos, *J. Appl. Phys.*, **83**, 7618, (1998).

-
- [32] L. S. Dang, G. Fishman, H. Mariette, C. Adelman, E. Martinez, J. Simon, B. Daudin, E. Monroy, N. Pelekanos, J. L. Rouviere, Y. H. Cho, *J. Korean Phys. Soc.*, **42**, S657, (2003).
- [33] H. Lüth, *Surfaces and Interfaces of Solids*, Springer-Verlag, 2a. edición, (1993).
- [34] N. Gogneau, D. Jalabert, E. Monroy, T. Shibata, M. Tanaka, B. Daudin, *J. Appl. Phys.*, **94**, 2254, (2003).
- [35] De la página <http://myersgroup.engineering.osu.edu/research/molecular-beam-epitaxy-growth-iii-nitride-heterostructures>
- [36] Z. B. Chen, W. Lei, B. Chen, Y. B. Wang, X. Z. Liao, H. H. Tan, J. Zou, S. P. Ringer, C. Jagadish, *Appl. Phys. Lett.*, **104**, 022108, (2014).
- [37] J. H. Lee, Z. M. Wang, M. E. Ware, K. C. Wijesundara, M. Garrido, E. A. Stinaff, G. J. Salamo, *Crystal Growth & Design*, **8**, 1945, (2008).
- [38] B. L. Liang, Z. M. Wang, X. Y. Wang, J.-H. Lee, Y. I. Mazur, C. K. Shih, G. J. Salamo, *ACS Nano*, **2**, 11, 2219, (2008).
- [39] J. H. Lee, Zh. M. Wang, E. S. Kim, N. Y. Kim, S. H. Park, G. J. Salamo, *Nanoscale Res. Lett.*, **5**, 308, (2010).
- [40] S. Bietti, C. Somaschini, L. Esposito, A. Fedorov, S. Sanguinetti *J. Appl. Phys.*, **116**, 114311 (2014).
- [41] S. Kiravittaya, A. Rastelli, O. G. Schmidt *Appl. Phys. Lett.*, **87** 243112 (2005).
- [42] H. Saito, K. Nishi, S. Sugou, *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 1224, (1999).
- [43] K. Nishi, T. Kageyama, M. Yamaguchi, Y. Maeda, K. Takemasa, T. Yamamoto, *J. Cryst. Growth*, **378**, 459, (2013).
- [44] J. N. Aqua, I. Berbezier, L. Favre, T. Frish, A. Ronda, *Phys. Rep.*, **522**, 59, (2013).
- [45] J. M. García, J. P. Silveira, F. Briones, *Appl. Phys. Lett.*, **77**, 409, (2000).
- [46] I. Daruka, A. L. Barabási, *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3708, (1997).
-

- [47] V. A. Shchukin, N. N. Ledentsov, P. S. Kop'ev, D. Bimberg, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 2968, (1995).
- [48] B. A. Joyce, P. C. Kelires, A. G. Naumovets, D. Vvedensky, *Quantum Dots Fundamentals Applications and Frontiers*, Springer, 1a. edición, (2003).
- [49] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 3203, (1993).
- [50] N. W. Strom, Z. M. Wang, J. H. Lee, Z. Y. Abuwaar, Y. I. Mazur, G. J. Salamo, *Nanoscale Res. Lett.*, **2**, 112, (2007).
- [51] J. Tersoff, *Phys. Rev. B*, **30**, 4874, (1984).
- [52] F. T. Vasko, A. V. Kusnetsov, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures*, Springer, 1a. edición, (1999).
- [53] Z. Hailong, Y. Qu, T. Zeid, X. Duan, *Energy & Environ. Sci.* **5**, 6732, (2012).
- [54] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. *Phys. Rev. B*, **52**, 16, (1995).
- [55] Documento realizado por Herbert Kroemer, de la página:
<http://www.eng.auburn.edu/niuguof/7760fall2010/Ch17%20Heterostructures%20Prof.%20Schubert.pdf>
- [56] G. Burns, *Solid State Physics*, Academic Press, 1a. edición, (1985).
- [57] L. Banyai, S.W. Koch, *Semiconductors Quantum Dots*, Word Scientific, 1a. edición, (1993).
- [58] M. Grundmann *Nano-Optoelectronics*, Springer, 1a edición, (2002).
- [59] A. D. Andreev, E. P. O'Relly, *Phys. Rev. B*, **62**, 15851-15869 (2000).
- [60] D. J. Arent, K. Deneffee, C. V. Hoof, J. D. Boeck, G. Borghs, *J. Appl. Phys.*, **66**, 1739, (1989).
- [61] H. Jiang, J. Singh, *Phys. Rev. B*, **56**, 4696, (1997).
- [62] L. A. Shuvalov. *Modern Crystallography IV (Physical Properties of Crystals)*, Springer Verlag, 1a. edición, (1988).

-
- [63] C. Weinberger, W. Cai, D. Barnett, *Elasticity of Microscopic Structures*, Stanford University, 1a. edición, (2004).
- [64] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, A. Zunger, *J. Appl. Phys.*, **83**, 2548, (1998).
- [65] J. D. Eshelby, *The Royal Society*, **241**, 376, (1957).
- [66] B. Falkenburg, M. Morrison, *Philosophical Issues in Condensed Matter Physics and Complex Systems*, Springer, 1a. edición, (2015).
- [67] A. D. Andreev, J. R. Downes, D. A. Faux, E. P. O'Reilly, *J. Appl. Phys.*, **86**, 297, (1999).
- [68] De la página <http://www.dreamstime.com/royalty-free-stock-image-3d-cube-array-image16139666>
- [69] J. Bardeen, W. Shockley, *Phys. Rev.*, **80**, 72, (1950).
- [70] S. L. Chuang, C. S. Chuang, *Phys. Rev B.*, **54**, 2491, (1996).
- [71] L. C. L. Y. Voon, M. Willatzen, *The $k \cdot p$ theory*, Springer, 1a. edición, (2009).
- [72] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures (Quantum States and Electronic Transport)*, Oxford University Press, 1a. edición, (2010).
- [73] G. Grosso, *Solid State Physics*, Academic Press, 1a. edición, (2000).
- [74] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductors heterostructures*, Halsted, 1a. edición, (1988).
- [75] C. Pryor, *Phys. Rev. B*, **57**, 7190, (1998).
- [76] O. Marquardt, D. Mourad, S. Schulz, T. Hickel, G. Czycholl, J. Neugebauer. *Phys. Rev. B*, **78**, 235302, (2008).
- [77] B. A. Foreman, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 425, (1998).
- [78] M. A. Cusack, P. R. Briddon, M. Jaros, *Phys. Rev. B.*, **54**, R2300, (1996).
- [79] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, 1a. edición, (2003).

- [80] M. O. Scully, M. S. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, 1a. edición, (1997)
- [81] J. C. Garrison, R. Y. Chiao, *Quantum Optics*, Oxford University Press, 1a. edición, (2008).
- [82] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison Wesley, 1a edición, (1967).
- [83] M. Schubert, B. Wilhelmi, *Nonlinear Optics and Quantum Electronics*, John Wiley & Sons, 1a. edición, (1986).
- [84] H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, North Holland, 1a. edición, (1976).
- [85] M. Fox, *Quantum Optics*, Oxford University Press, 1a. edición, (2006).
- [86] E. I. Rashba, *Excitons*, North Holland Ed., 1a. edición, (1982).
- [87] <http://varinia.es/blog/2009/12/>
- [88] A. C. Madueño, R. A. Rosas, J. L. Marin, R. Riera, *Rev. Mex. Fis.*, **50**, 412 (2004).
- [89] B. Patton, W. Langbein, U. Woggon, *Phys. Rev. B*, **68**, 125316, (2003).
- [90] M. Bayer, G. Ortner, O. Stern, A. Kuther, A. Gorbunov, A. Forchel, *Phys. Rev. B*, **65**, 195315, (2002).
- [91] A. L. Efros, M. Rosen, *Phys. Rev. B*, **54**, 4843, (1996).
- [92] M. Bayer, O. Stern, A. Kuther, A. Forchel, *Phys. Rev. B*, **61**, 7273, (2000).
- [93] A. Franceschetti, Y. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136805, (2008).
- [94] <http://nanotechweb.org/cws/article/lab/43698>
- [95] V. A. Fonoberov, A. A. Balandin, *J. Appl. Phys.*, **94**, 7178, (2003).
- [96] A. J. Williamson, L. W. Wang, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **62**, 12963, (2000).
- [97] R. J. Warbunton, B. T. Miller, C. S. Dürr, C. Bödefeld, K. Karrai, J. P. Kotthaus, *Phys. Rev. B*, **58**, 16221, (1998).
- [98] A. Franceschetti, A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 915, (1997).

-
- [99] L. W. Wang, J. Kim, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **59**, 5678, (1999).
- [100] J. C. Inkson, *Many-Body Theory of Solids*, Plenum Press, 1a. edición, (1984).
- [101] V. A. Fonoberov, A. A. Balandin, *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 5971, (2004).
- [102] A. J. Peter, C. W. Lee, *Phys. Sc.*, **85**, 015704, (2012).
- [103] C. W Lee, A. J. Peter, *Chin. Phys. B*, **20**, 077104, (2011).
- [104] D. E. Aspnes, A. A. Studna, *Phys. Rev. B*, **27**, 985, (1983).
- [105] Y. B. Band *Light and Matter: Electromagnetism, Optics, Spectroscopy and Laser*, John Wiley & Sonc Inc, 1a. edición, (2006).
- [106] A. Thilagam, M. A. Lohe, *J. Phys. Condens. Matter.*, **20**, 315205, (2008).
- [107] N. Baer, P. Garther, F. Jahnke, *Eur. Phys. J. B*, **42**, 321, (2004).
- [108] V. Milanovic, Z. Ikonc, D. Tjapkin, *Superlattices and Microstructures*, **8**, 475, (1990).
- [109] Manual de TriVista, de la página: <ftp://ftp.princetoninstruments.com/public/Manuals/Princeton%20Instruments/TriVista>
- [110] Manual de "Meadowlark Optics", de la página <http://www.meadowlark.com/liquid-crystal-polarization-rotator-p-96#.WATjvv6RA5Z>
- [111] De la página: <http://loci.wisc.edu/sites/default/files/2016-09/Tsunami%20Ti-Sapphire%20Laser%20Information.pdf>
- [112] De la página: <http://www.photonics.umd.edu/umd/sop/tsunami/>
- [113] Manual de Pico Quantum, de la página <https://www.picoquant.com/>
- [114] D. M. Bruls, J. W. A. M. Vugs, P. M. Koenradd, M. S. Skolnick, M. Hopkinson, J. H. Wolter, *Appl. Phys A.*, **72**, S205, (2001).
- [115] H. Saito, K. Nishi, S. Sugou, *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 1224, (1999).
- [116] H. Lee, R. L. Webb, W. Yang, P. C. Sercel, *Appl. Phys. Lett.*, **72**, 812, (1998).
- [117] G. Costantini, A. Rastelli, C. Manzano, P. Acosta-Diaz, R. Songmuang, G. Katsaros, O. G. Schmidt, K. Kern, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 226106, (2006).
-

- [118] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg, *Phys. Rev. B*, **59**, 5688, (1999).
- [119] G. A. Narvaez, G. Bester, A. Zunger, *Phys. Rev. B*, **72**, 245318, (2005).
- [120] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, R. V. Overstraeten, *J. Appl. Phys.*, **87**, 965, (2000).
- [121] T. Nakaoka, S. Kako, Y. Arakawa, *Phys. Rev. B*, **73**, 121305, (2006).
- [122] V. M. Fomin. *Physics of Quantum Rings, Nanoscience and Technology*, Springer, 1a. edición, (2014).
- [123] A. Lemaitre, G. Patriarche, F. Glas, *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 3717, (2004).
- [124] W. Hui, X. S. Jie, L. Qing, F. S. Lin, *Chin. Phys. Lett.*, **18**, 810, (2001).
- [125] A. Schliwa, M. Winkelnkemper, D. Bimberg, *Phys. Rev. B*, **76**, 205324, (2007).
- [126] W. Yang, R. R. Lowe-Webb, H. Lee, P. C. Sercel, *Phys. Rev. B*, **56**, 13314, (1997).
- [127] R. Heitz, M. Veit, N. N. Ledentsov, A. Hoffmann, D. Bimberg, *Phys. Rev. B*, **56**, 10435, (1997).
- [128] D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook, D.S. Katzer, D. Park, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 3005, (1996).
- [129] A. Zrenner, L. V. Butov, M. Hagn, G. Abstreiter, G. Böhm, G. Weimann, *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 3382, (1994).
- [130] B. L. Liang, P. S. Wong, N. Nuntawong, A. R. Albrecht, J. Tatebayashi, T. J. Rotter, G. Balakrishnan, D. L. Huffaker, *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 243106, (2007).
- [131] R. E. Newman, *Properties of Materials*, Oxford , 1a. edición, (2005).
- [132] J. R. Reitz, *Fundamentos de la Teoría electromagnética*, Addison Wesley Iberoamericana, 4a. edición, (1996).
- [133] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, J. Z. Zhu, *The Finite Element Method its Basic and Fundamentals*, Elsevier, 6a. edición, (2005).

NANO EXPRESS

Open Access



Optical Properties of a Quantum Dot-Ring System Grown Using Droplet Epitaxy

Gabriel Linares-García^{1*}, Lilia Meza-Montes¹ , Eric Stinaff², S. M. Alsolamy², M. E. Ware³, Y. I. Mazur³, Z. M. Wang³, Jihoon Lee^{3,4} and G. J. Salamo³

Abstract

Electronic and optical properties of InAs/GaAs nanostructures grown by the droplet epitaxy method are studied. Carrier states were determined by $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory including effects of strain and In gradient concentration for a model geometry. Wavefunctions are highly localized in the dots. Coulomb and exchange interactions are studied and we found the system is in the strong confinement regime. Microphotoluminescence spectra and lifetimes were calculated and compared with measurements performed on a set of quantum rings in a single sample. Some features of spectra are in good agreement.

Keywords: Quantum dots, Quantum rings, Photoluminescence, Finite element, Lifetime of excitons

Background

Three-dimensional carrier confinement of self assembled quantum dots (SAQDs) causes discrete energy states which give rise to several properties and applications [1–3]. In particular, for information processing, it is desirable to produce deterministic arrangements of the SAQDs to facilitate selective coupling. The most common method to obtain SAQDs is the Stranski-Krastanow strain-driven growth using molecular beam epitaxy. However, this method has the disadvantages of high densities and random distribution of the dots, making patterned arrangements difficult to achieve and limiting coupling to vertical stacks of SAQDs. An alternative is the droplet epitaxy technique [4, 5]. Using this technique, a variety of new structures have been obtained which show natural formation of two or more quantum dots (QDs) around a quantum ring (QR) structure, providing a potential route to self-assembly of laterally coupled QDs. This new geometry has been intensely studied during the last years [6].

Microphotoluminescence (MPL) in particular has been used to determine carrier and excitonic states of a single nanostructure and compare with theoretical results [7, 8].

Theoretical study of systems such as QRs is challenging due to their large sizes and complex shapes, compared with single QDs. A proper model to describe their properties is then required. Among the theoretical approaches to study electronic properties, the most commonly used are the tight-binding model and $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory [9]. It is possible to study non-periodic system, such as a single QD, with $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ assuming a periodic array of single entities [9].

Carriers in SAQDs are under several intrinsic potentials, such as local strain induced by misfit of lattice constants. This effect has been shown to be very important, particularly for arsenides [10, 11]. Andreev et al. used the continuum approach to calculate strain and piezoelectric potentials in a periodic array of single entities such as QDs of different shapes [12, 13]. On the other hand, it has been reported in experimental results that the distribution of indium in the QDs and QRs is not uniform [14, 15], creating a stronger confinement for electrons at the top of QDs and for holes at the bottom [11, 16].

In the present work, electronic and optical properties of InAs/GaAs nanostructures grown by the droplet epitaxy method are studied. MPL and lifetime measurements were performed on a set of QRs in a single sample. Results are compared with calculations based on $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method using Andreev's approach to calculate strain, and In gradient is included. Peak positions of MPL spectra are compared with those calculated with Fermi's Golden rule

*Correspondence: glinares@ifuap.buap.mx

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y, Blvd. 18 Sur Edif. 11F1, Cd. Universitaria, Puebla, Mexico
Full list of author information is available at the end of the article

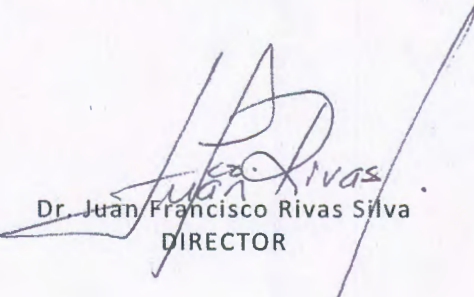


BUAP

MEMORANDUM

Para:	Presidente: Dr. Francisco Mireles Higuera. Vía skype. Secretario: Dr. Justo Miguel Gracia y Jiménez. Vocal: Dr. J. Jesús Arriaga Rodríguez. Vía Skype. Vocal: Dra. Ana Lilia González Ronquillo. Vocal: Dra. Lilia Meza Montes.
De:	Dr. Juan Francisco Rivas Silva, Director
Asunto:	Se cita al examen de grado del M.C. Gabriel Linares García.
Fecha:	Martes 08 de noviembre de 2016

Me permito informarles que el Comité Académico del IFUAP, los ha designado integrantes del Comité para el EXAMEN DE GRADO de Doctorado en Ciencias (en la especialidad de Ciencia de Materiales) del **M.C. Gabriel Linares García**, con su tesis cuyo título es: **“Estudio de Propiedades Electrónicas y Ópticas de Puntos Cuánticos Autoensamblados”**, que presentará el día jueves 17 de noviembre de 2016 a las 10:00hrs.* en el auditorio del IFUAP.


Dr. Juan Francisco Rivas Silva
DIRECTOR



*Hora de Puebla, México.

Instituto de Física
“Ing. Luis Rivera
Terrazas”

Av. San Claudio esq. 18 sur, edif 110 A, B y C.
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C.P. 72570
01(222) 2295610, Fax: ext. 5611