

INTEGRACIÓN DEL HAMILTONIANO
 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ MULTIBANDA EN SIMETRÍA
AXIAL

POR
JUAN IGNACIO CLIMENTE PLASENCIA

TESIS
PRESENTADA EN CUMPLIMIENTO PARCIAL DE LOS
REQUERIMIENTOS PARA EL TÍTULO DE
DOCTOR POR LA UNIVERSITAT JAUME I

10 de Enero de 2005

Departament de Ciències Experimentals
Universitat Jaume I
Castelló de la Plana, España, 2005

El Doctor Josep Planelles Fuster, del Departament de Ciències Experimentals de la Universitat Jaume I,

CERTIFICA:

Que la memòria presentada pel llicenciat Juan I. Climente Plasencia sota el títol “Integración del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Multibanda en Simetría Axial” ha estat realitzada sota la meua direcció i constitueix la Tesi Doctoral de l'esmentat llicenciat. Autoritze la presentació d'aquesta mitjançant el present escrit.

Castelló de la Plana, a 10 de gener de 2005.

Josep Planelles Fuster

Agradecimientos

Llevo algo más de cuatro años invertidos en este proyecto de Tesis doctoral, y casi el mismo tiempo esperando que llegara este instante, en el cual me dispongo a hacer justicia revelando los nombres de aquellas personas que, directa o indirectamente, consciente o inconscientemente, han contribuido a hacer este trabajo si no posible, al menos sí más llevadero.

El primero de ellos es, sin duda alguna, el Dr. Josep Planelles. Su entrega y dedicación en las labores de dirección de esta Tesis han sido absolutas. A él fundamentalmente debo mi vertebración como investigador.

A los doctores Włodzimierz Jaskólski (UMK, Toruń), Paweł Hawrylak (IMS-NRC, Ottawa) y Janusz Adamowski (AGH, Kraków) deseo agradecer su colaboración científica y su hospitalidad durante sendas estancias en sus grupos de investigación, el aprovechamiento de las cuales trascendió lo estrictamente académico. A J.G. Díaz (el P) quiero agradecerle muchísimas cosas, tantas que no tiene sentido mencionar ninguna en particular. Baste con decir que hemos combatido en la misma trinchera los últimos ocho años. Que Dios te bendiga en tu aventura americana. A J.L. Movilla y F. Rajadell agradezco sus colaboraciones científicas y su sentido del humor en los momentos críticos. A V. Molina agradezco el suministro de publicaciones científicas cuando ya nadie confiaba en conseguirlas. A S. Martí (Xexo) y J. Villaplana, ambos grandes profesionales, agradezco su asistencia en los aspectos informáticos de mi Tesis. A M. Korkusiński (actualmente en Purdue University, Indiana), agradezco su colaboración científica durante mi estancia en Ottawa. Él constituye mi principal referente de investigador joven.

Agradezco al Ministerio de Educación y Ciencia, la Universitat Jaume I y Bancaixa su apoyo económico, y al Departament de Ciències Experimentals de la Universitat Jaume I la posibilidad de haber disfrutado de sus instalaciones para la elaboración de esta Tesis.

Otras muchas personas contribuyeron a mi trabajo sacándome del despacho cuando comenzaba a ver las cosas más negras de lo que en realidad son. Entre ellos quisiera destacar al Dr. Rick Leavens (IMS-NRC, Ottawa), Alain Delgado (CAT-DN, Ciudad Habana), Dr. Rafał Oszwaldowski (UMK, Toruń), Dr. Sławomir Berski (UW, Wrocław), Fernando Delgado (EHU, Bilbao), Dr. Shun-Jen Cheng (NCT, Taiwan) y Sławomir Sroka (AGH, Kraków).

Finalmente, quisiera dar las gracias a mis padres por su apoyo incondicional e inquebrantable durante todo este tiempo. A ellos, que son lo más importante en mi vida, les dedico esta Tesis.

Lista de Acrónimos

AB	Aharonov-Bohm
AFM	Microscopía de fuerza atómica (<i>Atomic Force Microscopy</i>)
BC	Banda de conducción
BV	Banda de valencia
CI	Interacción de configuraciones (<i>Configuration Interaction</i>)
DMS	Semiconductor magnético diluido (<i>Diluted Magnetic Semiconductor</i>)
EFA	Aproximación de función envolvente (<i>Envelope function approximation</i>)
$e-h$	electrón-hueco
FIR	Infrarrojo lejano (<i>Far Infrared</i>)
HH	Hueco pesado (<i>Heavy Hole</i>)
LH	Hueco ligero (<i>Light Hole</i>)
NIR	Infrarrojo cercano (<i>Near Infrared</i>)
PL	Fotoluminiscencia (<i>Photoluminescence</i>)
QD	Punto cuántico (<i>Quantum Dot</i>)
QDQB	Punto cuántico-barrera cuántica (<i>Quantum Dot-Quantum Barrier</i>)
QDQW	Punto cuántico-pozo cuántico (<i>Quantum Dot-Quantum Well</i>)
QR	Anillo cuántico (<i>Quantum Ring</i>)
RHEED	Difracción de electrones (<i>Reflection High Energy Electron Diffraction</i>)
u.a.	Unidades atómicas
WL	Capa humectante (<i>Wetting Layer</i>)

Introduction

In 1986, scientists of Texas Instruments Incorporated succeeded in confining electrons inside artificial structures with all their three dimensions below the De Broglie wavelength (which in semiconductors typically ranges between 10 nm and 1 μm).[1] These nanoscopic-sized structures were then named *quantum dots* (QDs). The carriers (electrons or holes) trapped inside a QD experience such a strong spatial confinement that energy gaps between levels of up to several tens of millielectronvolts may appear. This discrete energy spectrum allows to draw an analogy between QDs and atoms. This is why QDs are often referred to as “artificial atoms”. [2, 3] However, unlike atoms, where the confining potential is centrosymmetric and the number of electrons is conditioned by the charge of the nuclei, QDs offer the possibility to manipulate the geometry and strength of the confining potential, as well as the number of carriers confined inside the nanostructure.[4] This flexible design makes QDs an ideal scenario to study the effects of confinement, Coulomb interactions and external fields *in situ*. Moreover, the potential technological applications of QDs are enormous, including high-efficiency semiconductor lasers, infrared photodetectors, light-emitting diodes, single-electron transistors, ultradense optical memories, breast cancer treatment and applications in the emerging fields of spintronics and quantum computation.[3, 5, 6, 7] As a true reflection of the interest sparked off by QDs, one can note that, at present, searching the keyword “quantum dot” in *www.google.com* gives a larger number of results than keywords as popular as ‘Katie Price’, and almost as many as “Claudia Schiffer”. Indeed, in 2003 the amount of scientific articles investigating these structures outnumbered one thousand units.

The theoretical understanding of these systems, and especially that of semiconductor QDs, is of great interest from both the fundamental and practical (technological) points of view. Unfortunately, the *ab initio* atomistic theories cannot be used to describe the physics of QDs, for each of these structures contains typically between 1.000 and 100.000 atoms. Therefore, simpler and computationally more efficient methods, such as the effective

mass and $k \cdot p$ theories combined with the envelope function approximation[8] (which were originally developed to study semiconductors bulk[9]) are employed.

Although nowadays QDs can be synthesized in a wide variety of shapes, the structures presenting axial symmetry are particularly interesting. This symmetry allows to observe an energy spectrum with shell structure and a spin sequence obeying Hund rules, which are otherwise lost when the symmetry is broken.[10] Axial symmetry is often the default symmetry of QDs obtained with usual synthesis procedures, such as *wet chemistry*[11] or *self-assembly* growth techniques.[12] Whereas wet chemistry methods originate spherical or slightly elongated QDs[13], self-assembly techniques lead to QDs with shapes including semi-spheres, lenses,[14] disks[15] and rings.[16, 17]

At the moment this Thesis was started, the energy structure of axially symmetric QDs had been studied using essentially bidimensional models with parabolic[4, 18] or infinite walls[19] confinement potentials. On the one hand, bidimensional models take advantage from the fact that many QDs exhibit a much stronger confinement in the growth direction (z) than in the lateral one. Therefore, it is generally a good approximation to assume that the carriers are “frozen” in the ground state resulting from the confinement in the z direction, thus reducing the problem to the study of the movement in the xy plane. On the other hand, parabolic and infinite walls confinement potentials are frequently used because they allow to obtain analytical eigenvalues and eigenstates of the single-electron Hamiltonian.

Although these models have proved useful to understand the fundamental physics of QDs,[4, 18, 20] their limitations prevent them from capturing some relevant features. To name a few:

- Bidimensional models cannot be used to describe QDs with similar vertical and lateral confinement. This is the case of spherical dots synthesized via wet chemistry. Even if the QDs are approximately planar, assuming a completely missing vertical dimension leads to severe overestimations of Coulomb interactions and inaccurate estimations of oscillator strength in optical transitions.
- The parabolic confinement potential cannot be used to investigate weakly confined particles, owing to its infinite depth.[21, 22, 23] Furthermore, it predicts a reduced number of magneto-optical transitions[19] and it is subject to an empirical fitting procedure of parameters, which in turn makes the definition of the problem highly dependent on the quality of the experimental spectroscopic data that are available before-

hand. The parabolic confinement potential also stops being a convenient approximation in semiconductor heterostructures where the details of the confinement potential are important. This is the case, for instance of multilayer structures or small self-assembled QDs.[24]

- The infinite walls confinement potential does not consider the (finite) penetration of the electron wave function into the material surrounding the QD. Therefore, it overestimates the confinement energy and cannot account for the *tunnel effect* at all.[25]

The main goal of this Thesis is to develop a theoretical model which allows to study the energy structure of semiconductor QDs with axial symmetry. We would like this model to offer a realistic description of the physics of these nanostructures while keeping a moderate computational cost, thus bridging the gap existing between the simpler models (such as two-dimensional models with parabolic or infinite walls confinement potential) and the more complicated and computationally heavy models (such as models based on *tight-binding* atomistic theories,[26] pseudopotential methods[27] or multi-band $k \cdot p$ theory in the absence of symmetries[28]). Once the model is ready, we use it to probe several different systems which cannot be properly described with the models previously used in the literature. For some of these systems, experimental results are available. In such cases we discuss the degree of agreement between experimental data and our predictions. Where possible, we also compare with the theoretical interpretations proposed by other authors. In general, we conclude that our model yields qualitatively correct estimations of the experimental properties of all the systems we investigate, and it also allows to foresee novel physical phenomena in systems still lacking experimental work. The Thesis is organized as follows:

In Chapter 1 we derive in detail the theoretical model we will use to study the energy structure of conduction electrons and valence holes in QDs with axial symmetry. The electron states are described within the one-band $k \cdot p$ -EFA Hamiltonian (i.e., the *effective mass approach*), considering non-parabolicity effects[8] and the dependence of the effective mass on the position in the heterostructure.[29] In order to describe the hole states, we take into account the spin-orbit coupling, which in quantum dots (unlike in structures with lower confinement) plays a significant role, leading to an important mixing between the *heavy hole* and *light hole* subbands.[4] Therefore, we use a four-band $k \cdot p$ -EFA Hamiltonian,[9] which considers this mixing. Potential terms accounting for external magnetic fields and stress forces are

included in the Hamiltonians. The Hamiltonians of electrons and holes are then integrated in cylindrical coordinates. In systems with axial symmetry this allows to integrate out the angular coordinate analytically, thus reducing the three-dimensional Hamiltonians to effective two-dimensional expressions in the ρz plane. These expressions are computationally inexpensive, so that we can still impose a step-like (finite) confinement potential in order to provide realistic descriptions of QDs with arbitrary shape. The integration of the resulting $k \cdot p$ Hamiltonians for axially symmetric systems is carried out numerically in a finite differences scheme. This chapter also includes expressions corresponding to the absorption coefficient of optical interband and intraband transitions, according to our model. Finally, we describe how to calculate the energy structure of two-electron systems using a configuration interaction (CI) method.

In Chapter 2 we study the effect of a magnetic field on spherical QDs synthesized via wet chemistry. This synthesis method allows to grow QDs with concentric layers of different semiconductor materials, so that one can alternate potential wells and barriers along the radial direction.[30, 31, 32] Switching on a magnetic field breaks the spherical symmetry and then only axial symmetry is preserved. We study the effect of a magnetic field on both homogeneous and multilayer QDs. The interplay between spatial and magnetic-field-induced confinements in these structures gives rise to several different phenomena, which are revealed by the magneto-optical spectra.[33, 34, 35]

In Chapter 3 we investigate the effect of a thin AlAs layer embedded in a GaAs matrix on the energy structure of a nearby-deposited self-assembled In(Ga)As QD. In this system, the AlAs layer behaves as a higher potential barrier than the GaAs matrix. We study the influence of this barrier as a function of its position and distance with respect to the QD. The results we obtain are compared with related experimental works.[36]

In Chapter 4 we analyze the energy structure of self-assembled quantum rings (QRs)[16, 37] in the presence of a magnetic field parallel to the growth axis. There are no direct evidences that these nanostructures preserve their ring geometry once they are completely buried inside a semiconductor matrix, so that the observed experimental spectra may simply correspond to QDs with similar dimensions to those of the uncovered QR. Our work is mainly focused to elucidate this question. We thus compare several spectra of buried QRs (each charged with one electron, two electrons or one exciton) with our calculations for self-assembled QRs and QDs.[38, 39, 40] It is concluded that qualitative agreement with all the experimental works can be obtained if we assume the covered rings to keep the shape and dimen-

sions observed from atomic force micrographs (AFM) prior to the covering. However, this is not the case when we assume simply-connected topologies (i.e., QDs). In addition, we suggest magnetization experiments in order to easily and unambiguously determine the topology of buried self-assembled nanostructures.[41] This chapter also includes an empirical validation of the multi-band $k \cdot p$ Hamiltonian for holes in the presence of a magnetic field which was recently proposed in Ref.[42].

In Chapter 5 we describe an independent work where we demonstrate the possibility to control the magnetization of diluted magnetic III-V semiconductors QDs by means of the number of holes confined in the dot. We assume a disk-shaped QD with a (Mn) magnetic impurity in the center and use a theoretical model taken from Refs.[43, 44]. This model employs infinite walls confinement potential, therefore allowing semianalytic solutions of the four-band $k \cdot p$ Hamiltonian for holes in the presence of an acceptor impurity. The spins of the d -shell electrons of the Mn ion interact with those of the holes confined in the dot via the so-called $sp-d$ exchange interaction.[45] When there is only one confined hole, this interaction results in an effective magnetic field which modifies the Zeeman spectrum of the Mn ion. When a second hole is confined in the QD, its spin aligns anti-parallel to the spin of the first hole. Therefore, it compensates for the first hole contribution to the $sp-d$ exchange interaction energy and the effective magnetic field is strongly suppressed.[46]

The present report gathers the most important results obtained in a collection of ten articles published by the author of this Thesis and his co-workers. All these articles have been published or are about to be published in international and national scientific journals. These papers are:

1. J. Planelles, J.G. Díaz, J. Climente, and W. Jaskólski, “Semiconductor nanocrystals in a magnetic field”, *Physical Review B* **65**, 245302 (2002).¹
2. J. Planelles, J. Climente, J.G. Díaz, and W. Jaskólski, “Hole energy structure of multishell nanocrystals in a magnetic field”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 12537 (2002).
3. J.I. Climente, J. Planelles, W. Jaskólski, and J.I. Aliaga, “Magneto-optical transitions in multilayer semiconductor nanocrystals”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 3593 (2003).

¹Selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, issue of June 10th, 2002.

4. J.L. Movilla, J.I. Climente, and J. Planelles, “Effects of a thin AlAs layer on InAs quantum dot electronic structure”, *Journal of Applied Physics* **94**, 4515 (2003).²
5. J.I. Climente, J. Planelles, and W. Jaskolski, “Magneto-optical transitions in nanoscopic rings”, *Physical Review B* **68**, 075307 (2003).³
6. J.I. Climente, J. Planelles, and J.L. Movilla, “Magnetization of nanoscopic quantum rings and dots”, *Physical Review B* **70**, 081301(R) (2004).⁴
7. J. Planelles, and J.I. Climente, “Far-infrared absorption of self-assembled semiconductor rings”, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, accepted in November 2004. (See also cond-mat/0412552).
8. J.I. Climente, J. Planelles, and F. Rajadell, “Energy structure and far-infrared spectroscopy of two electrons in a self-assembled quantum ring”, under acceptance process by *J. Phys.: Condens. Matter* (favorable report of the Referees with minor suggestions, January 2005).
9. J.I. Climente, M. Korkusiński, P. Hawrylak, and J. Planelles, “Voltage control of the magnetic properties of charged semiconductor quantum dots containing magnetic ions”, accepted by *Phys. Rev. B*, January 2005.
10. F. Rajadell, J. Planelles, and J.I. Climente, “Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras” [Calculation of the strain tensor of QDs buried in semiconductor matrices], submitted to *Revista Española de Física* (December 2004).

The Reader may find copies of these articles attached at the end of this report. The paper dealing with calculations of the strain tensor derives the expressions of the strain tensor elements of self-assembled QDs with arbitrary shape within the isotropic elastic theory. This article is complemented with a text corresponding to an internal report by our research group,[47] where such expressions are derived in a more detailed manner. We have used the obtained expressions to determine the effect of stress forces over

²Selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, issue of September 29th, 2003.

³Selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, issue of August 25th, 2003.

⁴Selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, issue of August 23rd, 2004.

some of the nanostructures which were studied in this Thesis.[39, 40, 41] Although these expressions were previously obtained by other authors,[48, 49] the originality of our work lies in its detailed derivation, starting from the very definitions of strain and stress.

Finally, we would like to mention that a significant part of the work comprised in this Thesis was devoted to the implementation of computational codes which allow to efficiently solve the equations of the developed theoretical model. For the sake briefly, these codes have been omitted in the present report.

Introducción

En 1986, científicos de Texas Instruments Incorporated lograron por primera vez confinar electrones en estructuras artificiales con las tres dimensiones espaciales inferiores a la longitud de onda de De Broglie (que en semiconductores oscila entre 10 nm y 1 μm).[1] Estas estructuras de tamaño nanoscópico fueron entonces bautizadas como puntos cuánticos (*quantum dots* o QDs). El principal interés de los puntos cuánticos reside en que un portador de carga (electrón o hueco) atrapado en su interior está sujeto a un confinamiento espacial tan fuerte que sus niveles energéticos exhiben separaciones de hasta decenas de milielectronvoltios (meV). Este espectro de energías discreto permite establecer paralelismos entre los QDs y los átomos, motivo por el cual los QDs a menudo se denominan “átomos artificiales”. [2, 3] Sin embargo, a diferencia de los átomos, donde el potencial confinante es centrosimétrico y el número de electrones viene condicionado por la carga del núcleo, en los QDs es posible manipular la geometría y la fuerza del potencial confinante, así como el número de portadores de carga que pueblan la nanoestructura. [4] Esta flexibilidad en su diseño los convierte en el escenario ideal para estudiar *in situ* efectos de confinamiento, interacciones coulombicas y campos externos. Asimismo, las potenciales aplicaciones tecnológicas que presentan son numerosísimas: láseres semiconductores de alto rendimiento, fotodetectores infrarrojos, diodos emisores de luz, transistores de un único electrón, memorias ópticas ultradensas, tratamiento de cáncer de pecho, aplicaciones en el campo de la espintrónica y la computación cuántica. . . [3, 5, 6, 7] Un reflejo inequívoco del interés despertado por los QDs es que, en la actualidad, una búsqueda en *www.google.com* de la palabra clave “quantum dots” ofrece más resultados que otras palabras clave tan populares como “Katie Price” y casi tantas como “Claudia Schiffer”. De hecho, en el año 2003 el número de publicaciones científicas sobre estas estructuras sobrepasó el millar.

El entendimiento teórico de estos sistemas, y particularmente de los QDs semiconductores, es pues de gran interés tanto a nivel de física fundamental como de aplicaciones prácticas. Desafortunadamente, las teorías atomís-

ticas *ab initio* no pueden ser empleadas para describir los fenómenos que se observan en QDs, debido a que una sola de estas estructuras contiene típicamente entre 1.000 y 100.000 átomos. Por tal motivo habitualmente se emplean métodos más simples y computacionalmente más tratables tales como las teorías de masas efectivas y métodos $k \cdot p$ en aproximación de función envolvente (EFA),[8] que originalmente fueron diseñados para estudiar las propiedades de sólidos semiconductores macroscópicos.[9]

Aunque hoy en día es posible sintetizar QDs semiconductores con una gran diversidad formas, son especialmente interesantes las nanoestructuras que presentan simetría axial. Esta simetría permite observar claramente una estructura de capas en el espectro energético y una secuencia de espines definida por las reglas de Hund, que sin embargo se pierden al romperla.[10] La simetría axial se obtiene por defecto en algunas de las técnicas de síntesis de QDs más habituales, como la vía de la química húmeda[11] o las técnicas de crecimiento cristalino epitaxial basadas en fuerzas de tensión.[12] La vía de la química húmeda da lugar a QDs esféricos o ligeramente prolongados[13], mientras que las fuerzas de tensión originan QDs con forma de semiesferas, lentes,[14] discos[15] y hasta anillos.[16, 17]

En el momento de iniciar esta Tesis Doctoral, el estudio de la estructura energética de QDs con simetría axial se había abordado esencialmente utilizando modelos bidimensionales con potencial confinante parabólico[4, 18] o de paredes infinitas.[19] Los modelos bidimensionales tienen en cuenta que muchos de los QDs presentan un confinamiento en la dirección de crecimiento (z) muy superior al confinamiento lateral. Esto les permite asumir que los portadores de carga se encuentran “congelados” en el estado fundamental que resulta del confinamiento en la dirección z , reduciendo el problema al estudio del movimiento en el plano xy . El uso de potenciales confinantes parabólico y de paredes infinitas viene motivado por la posibilidad que ofrecen de obtener funciones y valores propios analíticos del Hamiltoniano monoeléctrico. Si bien es cierto que estos modelos han conseguido establecer las bases de la física de los QDs,[4, 18, 20] no es menos cierto que sus limitaciones impiden captar algunos aspectos importantes de la misma:

- Los modelos bidimensionales no son aplicables en QDs donde la altura sea de magnitud comparable a la base. Un ejemplo paradigmático son los QDs con simetría axial sintetizados por química húmeda. Incluso en QDs aproximadamente planos, asumir una ausencia total de la dimensión vertical conlleva importantes sobrestimaciones de las interacciones coulombicas y estimaciones inexactas de la fuerza de oscilador de las transiciones ópticas.
- El potencial parabólico no es aplicable en sistemas con confinamiento

débil debido a su profundidad infinita,[21, 22, 23] predice un número reducido de transiciones magneto-ópticas[19] y está sujeto a un procedimiento de ajuste empírico de parámetros que condiciona la definición de cada problema con la cantidad y calidad de datos espectroscópicos experimentales conocidos de antemano. Por otro lado, el perfil confinante parabólico deja de ser una aproximación conveniente en heteroestructuras semiconductoras donde los detalles del potencial confinante son importantes, como en estructuras multicapa o en QDs auto-ordenados pequeños.[24]

- El potencial de paredes infinitas no tiene en cuenta la penetración de la función de onda electrónica en el material que envuelve el QD, por lo que sobrestima la energía de confinamiento y niega cualquier manifestación del efecto túnel.[25]

El principal objetivo de esta Tesis es la construcción de un modelo teórico para estudiar la estructura energética de QDs semiconductores con simetría axial. Se espera que dicho modelo ofrezca una descripción realista de la física de estas nanoestructuras por un coste computacional moderado. De esta manera se cubriría el vacío existente entre los modelos más simples (como los bidimensionales con potencial confinante parabólico o de paredes infinitas) y los más complejos y computacionalmente pesados (como los basados en teorías atomísticas *tight-binding*[26], métodos de pseudopotencial[27] o $k \cdot p$ multibanda en ausencia de simetrías[28]). Posteriormente se hace uso de este modelo para investigar diversos sistemas que escapan del alcance de los modelos previamente utilizados en la literatura. Para algunos de estos sistemas se dispone de resultados experimentales, en cuyo caso discutimos el grado de acuerdo con nuestras predicciones y comparamos con las interpretaciones teóricas formuladas en trabajos anteriores. Se concluye que, en general, nuestro modelo ofrece estimaciones cualitativamente correctas de los diversos experimentos analizados y permite la predicción de numerosos fenómenos físicos novedales en sistemas para los cuales todavía no existen estudios empíricos. La memoria de Tesis Doctoral está organizada de la siguiente manera:

En el Capítulo 1 se deriva con detalle el modelo teórico con el que estudiamos la estructura energética de electrones de conducción y huecos de valencia en QDs con simetría cilíndrica. Los estados de electrones se describen mediante un Hamiltoniano $k \cdot p$ -EFA de una banda (esto es, en *aproximación de masa efectiva*), considerando efectos de no parabolicidad[8] y dependencia de la masa efectiva con la posición en la heteroestructura.[29] Para la descripción de los estados de huecos en QDs, en contra de lo que sucede en

estructuras de menor confinamiento, el acoplamiento espín-órbita conduce a una mezcla entre las subbandas de *huecos pesados* y *huecos ligeros* que no puede ser descartada.[4] Por este motivo, el modelo que utilizamos es un Hamiltoniano $k \cdot p$ -EFA de cuatro bandas,[9] que tiene en cuenta dicho acoplamiento. En los Hamiltonianos incluimos diversos potenciales, como campos magnéticos externos o fuerzas de tensión. Los Hamiltonianos de electrones y huecos se integran en coordenadas cilíndricas. En sistemas con simetría axial, la coordenada angular se integra analíticamente y podemos reducir los Hamiltonianos a expresiones efectivas bidimensionales en el plano ρz . La economía de cálculo de estas expresiones nos permite imponer un potencial confinante escalonado (finito) para describir realísticamente heteroestructuras con forma arbitraria. La integración de los Hamiltonianos $k \cdot p$ en simetría axial se lleva a cabo numéricamente mediante el uso de diferencias finitas. En este capítulo se incluye también las expresiones generales de coeficientes de absorción para transiciones ópticas intra e interbanda según nuestro modelo. Por último se describe el cálculo de sistemas bielectrónicos mediante un método de interacción de configuraciones (CI).

En el Capítulo 2 se estudia el efecto de un campo magnético axial sobre QDs esféricos sintetizados por vía de la química húmeda. Este método sintético permite la formación de QDs con capas concéntricas de diferentes materiales semiconductores, de manera que se pueden alternar pozos y barreras de potencial confinante a lo largo de la dirección radial.[30, 31, 32] La aplicación de un campo magnético externo rompe la simetría esférica de estos sistemas y sólo se preserva la simetría circular. Estudiamos el efecto de un campo magnético en QDs mono y multicapa. La interacción entre el confinamiento espacial y el confinamiento introducido por el campo magnético da lugar a diversos fenómenos que se manifiestan en el espectro magneto-óptico de estas estructuras.[33, 34, 35]

En el Capítulo 3 se investiga el efecto que tiene una capa fina de AlAs inmiscuida en una matriz de GaAs sobre la estructura energética de un QD auto-ordenado de In(Ga)As con forma de lente. En este sistema, la capa de AlAs constituye una barrera de potencial confinante más alta que la impuesta por GaAs, de modo que los niveles electrónicos del QD son sensibles a la proximidad de la misma. Estudiamos la influencia de esta barrera en función de la posición y la proximidad respecto del QD. Los resultados obtenidos se comparan con diversos trabajos experimentales relacionados.[36]

En el Capítulo 4 se analiza la estructura energética de anillos cuánticos (*quantum rings* o QRs) auto-ordenados[16, 37] en presencia y ausencia de un campo magnético paralelo al eje de crecimiento. No existen evidencias directas de que estas nanoestructuras preserven la geometría anular cuan-

do son completamente recubiertas en una matriz semiconductor. Nuestros estudios están enfocados principalmente a dilucidar esta cuestión. A tal fin, comparamos diversos espectros experimentales (monoelectrónicos, bielectrónicos y excitónicos) con nuestros cálculos para QRs y QDs con forma de lente.[38, 39, 40] Se concluye que, asumiendo geometría de anillo con las dimensiones que se observan por microscopía de fuerza atómica (AFM) en muestras previas al recubrimiento, es posible obtener un acuerdo cualitativo con todos los sistemas experimentales investigados. En cambio, no sucede lo mismo si asumimos topologías simplemente conectadas (QDs). Adicionalmente, proponemos experimentos de magnetización para determinar de manera sencilla y unívoca la topología de nanoestructuras auto-ordenadas enterradas.[41] El capítulo incluye una validación empírica del Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda de huecos en presencia de campos magnéticos propuesto recientemente en la Ref.[42].

El Capítulo 5 presenta un trabajo independiente en el que se demuestra la posibilidad de controlar la magnetización de QDs de semiconductores magnéticos diluidos III-V mediante el número de huecos confinados en su interior. Para ello se asume un QD con forma de disco (cilindro chato) con una impureza magnética (Mn) confinada en su centro. El modelo teórico utilizado en este capítulo se basa en las Refs.[43, 44] y asume potencial confinante de paredes infinitas para obtener soluciones semianalíticas del Hamiltoniano $k \cdot p$ de huecos en presencia de una impureza aceptora. Cuando un solo hueco se confina en el QD, los espines de los electrones de la capa d del ion Mn y el espín del hueco interactúan a través de la energía de intercambio $sp-d$. [45] Como resultado de esta interacción se crea un campo magnético efectivo que modifica el espectro Zeeman del ion Mn. Cuando se introduce un segundo hueco, su espín compensa el efecto del primer hueco y se obtiene un campo magnético efectivo neto igual a cero o casi cero, en ausencia y presencia de campos magnéticos externos respectivamente.[46]

Esta memoria recoge los resultados más importantes descritos en una colección de diez artículos de los cuales el doctorando es coautor. Todos estos artículos han sido publicados (o son de inminente publicación) en revistas científicas nacionales e internacionales. Una lista completa de los mismos se ofrece a continuación:

1. J. Planelles, J.G. Díaz, J. Climente, y W. Jaskólski, “Semiconductor nanocrystals in a magnetic field”, *Physical Review B* **65**, 245302 (2002).⁵

⁵Seleccionado para el número del 10 de junio de 2002 de *Virtual Journal of Nanoscale*

2. J. Planelles, J. Climente, J.G. Díaz, y W. Jaskólski, “Hole energy structure of multishell nanocrystals in a magnetic field”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 12537 (2002).
3. J.I. Climente, J. Planelles, W. Jaskólski, y J.I. Aliaga, “Magneto-optical transitions in multilayer semiconductor nanocrystals”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 3593 (2003).
4. J.L. Movilla, J.I. Climente, y J. Planelles, “Effects of a thin AlAs layer on InAs quantum dot electronic structure”, *Journal of Applied Physics* **94**, 4515 (2003).⁶
5. J.I. Climente, J. Planelles, y W. Jaskolski, “Magneto-optical transitions in nanoscopic rings”, *Physical Review B* **68**, 075307 (2003).⁷
6. J.I. Climente, J. Planelles, y J.L. Movilla, “Magnetization of nanoscopic quantum rings and dots”, *Physical Review B* **70**, 081301(R) (2004).⁸
7. J. Planelles, y J.I. Climente, “Far-infrared absorption of self-assembled semiconductor rings”, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, aceptado en Noviembre 2004. (Ver también cond-mat/0412552).
8. J.I. Climente, J. Planelles, y F. Rajadell, “Energy structure and far-infrared spectroscopy of two electrons in a self-assembled quantum ring”, pendiente de publicación.
9. J.I. Climente, M. Korkusiński, P. Hawrylak, y J. Planelles, “Voltage control of the magnetic properties of charged semiconductor quantum dots containing magnetic ions”, aceptado por *Phys.Rev.B* (Enero 2005).
10. F. Rajadell, J. Planelles, y J.I. Climente, “Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras”, pendiente de publicación.

Pueden encontrarse copias de estos artículos adjuntas al final de esta memoria. La publicación referente al cálculo de tensores de deformación

Science & Technology.

⁶Seleccionado para el número del 29 de septiembre de 2003 de *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*.

⁷Seleccionado para el número del 25 de agosto de 2003 de *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*.

⁸Seleccionado para el número del 23 de agosto de 2004 de *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*.

obtiene las expresiones de los elementos del tensor de deformación de QDs auto-ordenados con forma arbitraria en el marco de la teoría de elasticidad isotrópica. Esta publicación se complementa con un texto, correspondiente a un informe interno de nuestro grupo de investigación,[47] en el que dichas expresiones se derivan de manera más detallada. Las expresiones obtenidas han sido utilizadas para determinar el efecto de las fuerzas de tensión sobre algunas de las nanoestructuras estudiadas durante la Tesis.[39, 40, 41] Aunque estas expresiones fueron obtenidas anteriormente por otros autores,[48, 49] la originalidad de nuestro trabajo radica en su derivación detallada y completa, partiendo de las definiciones de tensión y deformación.

Por último, cabe mencionar que una parte significativa del trabajo realizado a lo largo de la Tesis fue dedicado a la implementación de códigos informáticos que permitieran una resolución computacional eficiente de las ecuaciones inherentes al modelo teórico desarrollado. Por motivos de brevedad, éstos han sido omitidos en la presente memoria.

Índice General

1	Hamiltonianos $k \cdot p$-EFA en simetría axial	1
1.1	Hamiltonianos de partícula independiente	3
1.1.1	Hamiltoniano monoelectrónico	3
1.1.2	Hamiltoniano de huecos	11
1.2	Potenciales de partícula independiente	14
1.2.1	Confinamiento espacial	14
1.2.2	Campo magnético externo	17
1.2.3	Potencial de deformación elástica	21
1.3	Integración de los Hamiltonianos de partícula independiente .	24
1.4	Espectro de absorción óptico	25
1.4.1	Transiciones intrabanda	26
1.4.2	Transiciones interbanda	28
1.5	Sistemas bielectrónicos	30
2	Puntos cuánticos esféricos en un campo magnético	37
2.1	Punto cuántico homogéneo	41
2.1.1	Electrones	41
2.1.2	Huecos	44
2.1.3	Transiciones interbanda	48
2.2	Punto cuántico-barrera cuántica	50
2.3	Punto cuántico-pozo cuántico	55
3	Puntos cuánticos auto-ordenados en matrices heterogéneas	61
3.1	Puntos cuánticos auto-ordenados	63
3.2	Puntos cuánticos de InAs/GaAs con capas finas de AlAs . . .	64
3.3	Efecto de la posición de una capa fina de AlAs	66
4	Anillos cuánticos auto-ordenados	73
4.1	Estructura energética de un electrón en un campo magnético	75

4.2	Interacción electrón-electrón	82
4.3	Transiciones ópticas intrabanda	85
4.3.1	Absorción de sistemas monoelectrónicos	88
4.3.2	Absorción de sistemas bielectrónicos	91
4.4	Magnetización	95
4.5	Estructura energética de un hueco en un campo magnético .	100
4.6	Transiciones ópticas interbanda	103
4.6.1	Espectro de absorción	105
4.6.2	Espectro de magneto-fotoluminiscencia	110
4.6.3	Efecto Aharonov-Bohm óptico	111
5	Control eléctrico de las propiedades magnéticas de puntos cuánticos semiconductores III-V magnéticos diluidos	115
5.1	Interacción magnética entre un hueco y un ion Mn	116
5.2	Interacción magnética entre dos huecos y un ion Mn	121
5.3	Dispositivo de control eléctrico de las propiedades magnéticas	124
6	Conclusiones	127
A	Funciones de onda de huecos en un disco	131
B	Elementos de matriz del Hamiltoniano de intercambio $sp-d$ en un disco	135
C	Curriculum Vitae	139

Índice de Figuras

1.1	Relaciones de dispersión de las bandas de un semiconductor de <i>gap</i> directo en los alrededores del punto Γ de la Zona de Brillouin.	2
1.2	Coordenadas cilíndricas.	4
1.3	Representación cualitativa del Hamiltoniano monoelectrónico con masa dependiente de la energía frente a la energía.	8
1.4	Diagrama de flujo del procedimiento seguido para resolver el Hamiltoniano monoelectrónico con masa dependiente de la energía.	10
1.5	Pefil del potencial confinante espacial de una heteroestructura según la aproximación de función envolvente.	15
1.6	Distancias entre dos cargas puntuales expresadas en coordenadas cilíndricas.	32
1.7	Ilustración cualitativa de la componente angular del integrando del elemento de matriz coulombico.	35
2.1	Niveles de energía $n l_m$ de un electrón en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm frente a un campo magnético.	42
2.2	Curvas de nivel de las funciones de onda correspondientes a los estados electrónicos más bajos en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm a $B=0$ T.	42
2.3	Niveles de energía $n l_m$ de un electrón en un nanocrystal de InAs con radio $R = 11.5$ nm frente a un campo magnético.	43
2.4	Curvas de nivel de la función de onda correspondiente al estado electrónico $1d_0$ en un nanocrystal de InAs con radio $R = 11.5$ nm a $B=0$ T y $B=100$ T.	43
2.5	Niveles de energía $n_h Q_F, F_z$ de un hueco en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm frente a un campo magnético.	45

2.6	Niveles de energía $n_h Q_F, F_z$ de un hueco en un nanocristal de InAs con radio $R = 3$ nm en función del grado de acoplamiento HH/LH.	45
2.7	Curvas de nivel de la densidad de carga y de las funciones envolventes de las componentes $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ del estado de huecos $1P_{3/2}, 1/2$	47
2.8	Niveles de energía $n_h Q_F, F_z$ de un hueco en un nanocristal de InAs con radio $R = 8$ nm frente a un campo magnético.	47
2.9	Momentos de transición en la región de baja energía del espectro magneto-óptico NIR de un nanocristal de InAs con $R = 3$ nm.	49
2.10	Como la Figura 2.9, pero para $R = 8$ nm.	49
2.11	Esquema de la estructura de capas y del perfil de las bandas de conducción y de valencia de un punto cuántico-barrera cuántica.	51
2.12	Niveles de energía $n l_m$ de un electrón en QDQBs de InAs/GaAs/ InAs frente a un campo magnético.	51
2.13	Curvas de nivel de la densidad de carga del estado electrónico $1F_3$ en un QDQB con capa externa larga	53
2.14	Como la Figura 2.9 pero para un QDQB de InAs/InP/InAs.	53
2.15	Funciones de onda del estado $1s$ de un electrón y de los estados de huecos $1S_{3/2}, 2S_{3/2}$ y $3S_{3/2}$ en un QDQB de InAs/ InP/ InAs.	54
2.16	Esquema de la estructura de capas y del perfil de las bandas de conducción y de valencia de un punto cuántico-pozo cuántico.	55
2.17	Niveles de energía $n l_m$ de un electrón en un QDQW de GaAs/ InAs/ GaAs frente a un campo magnético.	56
2.18	Niveles de energía $n_h Q_F$ de un hueco en un QDQW de InP/ InAs/ InP frente a un campo magnético.	56
2.19	Curvas de nivel de la densidad de carga de los estados $1S_{3/2}$ y $2S_{3/2}$ en un QDQW.	57
2.20	Curvas de nivel de la función de onda de los estados $1s_0$ y $1p_0$ en un QDQW a $B = 0$ y a $B = 100$ T.	58
2.21	Momentos de transición en la región de baja energía del espectro magneto-óptico NIR de un QDQW de InP/InAs/InP con luz polarizada en z	60
3.1	Perfil de la BC de un QD inmerso en una heteroestructura semiconductor A/B.	62

3.2	Micrografía de transmisión de electrones de un punto cuántico auto-ordenado de InAs.	64
3.3	Esquema de las tres estructuras estudiadas: A, B y C.	66
3.4	Perfil de las BC de los puntos cuánticos estudiados cuando crecen sobre un sustrato de AlAs y de GaAs.	68
3.5	Variaciones de energía de los estados fundamental y primer excitado de los puntos cuánticos QD1, QD2 y QD3 en función de la distancia entre el extremo superior del punto y una capa de AlAs (sistema B).	70
4.1	Micrografía de fuerza atómica de QRs auto-ordenados de InAs/GaAs por recubrir y perfil a través del centro de un anillo típico. . .	74
4.2	Niveles energéticos de un anillo unidimensional vs. flujo magnético.	76
4.3	Funciones de onda del estado fundamental en un QD y un QR auto-ordenados	77
4.4	Sección de un QD lenticular y un QR, con sus respectivos perfiles de los tensores de deformación elástica ε_{av} y ε_{zz}	79
4.5	Niveles de energía de un electrón en un QD de InAs/GaAs con altura 4.5 nm y radio 60 nm, y en QRs de igual composición y dimensiones exteriores más radio interior de 1 nm, 2 nm y 5 nm.	80
4.6	Niveles de energía de un electrón en un QR de InAs/GaAs calculado según la Ref. [40] y según la Ref. [188].	81
4.7	Niveles energéticos de dos electrones vs. un campo magnético en ausencia y presencia de interacción coulombica electrón-electrón.	83
4.8	Potencial confinante parabólico para un anillo con y sin corrección de anharmonicidad	86
4.9	Espectros de magneto-absorción FIR de un electrón en QD1, QR1 y QR2 a $T = 0$ K.	88
4.10	Espectros de magneto-absorción FIR combinados de un electrón en QR1 y en QR2 a $T = 0$ K.	90
4.11	Espectros de magneto-absorción FIR de dos electrones en QD1, QR1 y QR2 a $T = 0$ K.	92
4.12	Espectros de magneto-absorción FIR combinados de dos electrones en QR1 y QR2 a $T = 0$ K.	93
4.13	Magnetización de un electrón en nanoestructuras auto-ordenadas con radio interior creciente.	96

4.14	Magnetización de dos electrones en nanoestructuras auto-ordenadas con radio interior creciente.	97
4.15	Magnetización de un electrón en un QD, un electrón en un QR con $R_{in} = 5$ nm, dos electrones en un QD y dos electrones en un QR con $R_{in} = 5$ nm.	99
4.16	Niveles de energía de los estados ligados de huecos en un anillo auto-ordenado de InAs en función del campo magnético según la Ref.[132].	101
4.17	Niveles de energía de huecos vs. campo magnético en un anillo auto-ordenado de InAs, calculados con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$	102
4.18	Forma del QR y del QD investigados.	104
4.19	Absorción por densidad de absorbentes de puntos y anillos cuánticos a 4.2 K.	106
4.20	Momento de absorción en la región de baja energía de transiciones interbanda de un anillo auto-ordenado, un punto auto-ordenado y un punto de fuerte confinamiento vertical y gran extensión lateral.	107
4.21	Esquema de las transiciones interbanda $e-h$ en el punto y el anillo que dan lugar al espectro de absorción de la Ref. [79].	108
4.22	Espectro de magneto-PL de un anillo auto-ordenado de InGaAs calculado con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$, con $\hat{\mathcal{H}}_L$ y el correspondiente espectro experimental.	110
4.23	Espectro energético de los niveles más bajos de pares $e-h$ vs. un campo magnético.	112
4.24	Estructura energética de un electrón y un hueco vs. un campo magnético. La energía del hueco se ha calculado con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ y con $\hat{\mathcal{H}}_L$	113
5.1	Espectro Zeeman de un complejo Mn^0 en un disco cuántico de InAs.	120
5.2	Espectro Zeeman de un complejo Mn^+ en un disco cuántico de InAs, con y sin interacción de intercambio $sp-d$	123
5.3	Energía de intercambio $sp-d$ del nivel $ 0; S_z = -5/2\rangle$ frente a un campo magnético externo.	123
5.4	Ilustración esquemática de un dispositivo que permite controlar el número de huecos en un QD a través del voltaje.	126
A.1	Estructura energética de un hueco en un disco cuántico de InAs vs. un campo magnético.	134

Índice de Tablas

1.1	Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas.	13
1.2	Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas con inclusión “exacta” del campo magnético.	22
1.3	Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas con inclusión tradicional del campo magnético.	23
2.1	Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas con momento angular del término de interacción magnética lineal promediado	40
3.1	Parámetros de InAs, GaAs y AlAs, y datos geométricos de los QDs investigados en matrices heterogéneas.	67
3.2	Variaciones de energía de los estados electrónicos fundamental y primer excitado para diferentes modelos de puntos cuánticos con y sin recubrimiento de AlAs (sistema A).	69
3.3	Variaciones de energía del pico de PL experimental y de las energías calculadas para el estado fundamental y el primer excitado de un electrón en el sistema C, en función de la distancia entre la WL y una capa de AlAs.	71

Capítulo 1

Hamiltonianos $k \cdot p$ -EFA en simetría axial

En este capítulo desarrollamos las ecuaciones que nos permitirán estudiar el espectro energético de electrones de conducción y huecos de valencia en QDs semiconductores con simetría cilíndrica y forma arbitraria. Empleamos la teoría $k \cdot p$ en aproximación de función envolvente (EFA). Este método extrapola perturbacionalmente la estructura de bandas de heteroestructuras semiconductoras en la vecindad de algún punto conocido de la denominada Zona de Brillouin, utilizando un número reducido de parámetros empíricos.[8, 51]

La Figura 1.1 ilustra un perfil típico de estructura de bandas de un semiconductor de *gap* directo alrededor del centro de la Zona de Brillouin (punto Γ). La banda de conducción (BC) de un semiconductor se forma a partir de orbitales atómicos tipo s y, por tanto, está constituida por una única subbanda (doblemente degenerada si se consideran grados de libertad de espín) separada del tope de la banda de valencia (BV) por la energía de *gap*, E_g . En semiconductores con energía de *gap* amplia, la BC y la BV no se acoplan apreciablemente. En tal caso, es una buena aproximación describir los estados electrónicos poco excitados con un Hamiltoniano $k \cdot p$ de una banda que trate la BC independientemente. Por contra, en semiconductores con energía de *gap* pequeña existe un acoplamiento significativo entre la BC y la BV. En estos sistemas el modelo simple de una banda ofrece estimaciones desviadas de las energías electrónicas correctas.[28] Ante este hecho uno podría optar emplear un Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda que considere simultáneamente la BC y la BV y, por tanto, el acoplamiento entre ambas bandas. Sin embargo, existe una alternativa más sencilla: el Hamiltoni-

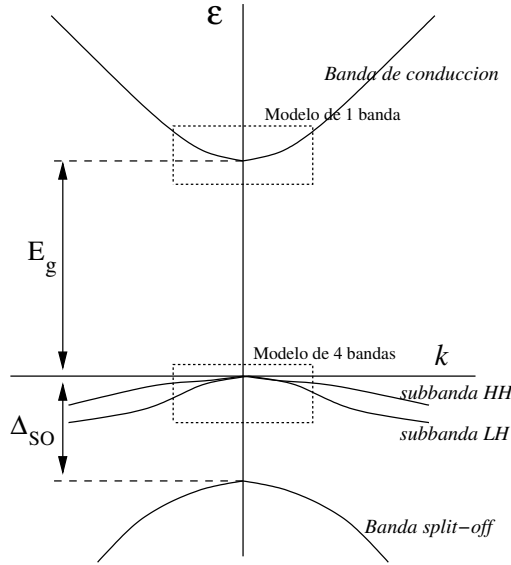


Figura 1.1: Relaciones de dispersión de las bandas de un semiconductor de *gap* directo en los alrededores del punto Γ de la Zona de Brillouin.

ano de una banda todavía puede ser válido si se utiliza una masa efectiva electrónica que refleje el efecto del acoplamiento de la BC con la BV, las fuerzas de tensión hidrostática y la dependencia de la masa electrónica con la posición.[8, 24, 52, 53]

La BV se forma a partir de orbitales atómicos tipo p , por lo que está constituida (en semiconductores cúbicos de *gap* directo) por dos subbandas degeneradas en el tope de la banda más una tercera subbanda separada energéticamente por una cantidad denominada *split-off* (Δ_{SO}). Las dos subbandas degeneradas en el tope de la BV se denominan subbandas de huecos pesados (HH) y de huecos ligeros (LH) (ver Figura 1.1). Una descripción realista de los estados de huecos requiere el uso de un Hamiltoniano que considere el acoplamiento entre (al menos) estas dos subbandas. Esto es especialmente cierto en QDs, donde el fuerte confinamiento espacial hace que los estados de huecos presenten valores del vector de onda k para los cuales la interacción entre subbandas de HH y LH no puede ser despreciada.[4] El Hamiltoniano $k \cdot p$ que considera acoplamiento entre HH y LH e incluye grados de libertad de espín se conoce como Hamiltoniano Luttinger-Kohn de cuatro bandas.[9]

En este capítulo se desarrollan Hamiltonianos $k \cdot p$ de una banda para electrones y de cuatro bandas para huecos, que posibilitan una descripción realista de estados poco excitados de la BC y de la BV en semiconductores. Además, para poder estudiar QDs, utilizamos la aproximación de función envolvente, la cual permite extender el uso de la teoría $k \cdot p$ a heteroestructuras.[8] El capítulo está organizado de la siguiente manera. En la Sección 1.1 se derivan las expresiones de los Hamiltonianos de partícula independiente en coordenadas cilíndricas. Para el caso de electrones, se discute la introducción de la dependencia de la masa efectiva respecto de la energía (efectos de no parabolicidad) y de la posición. En la Sección 1.2 se discuten las expresiones apropiadas para distintos tipos de potenciales mono-electrónicos: confinamiento espacial en heteroestructuras, campo magnético externo y fuerzas de tensión elástica. En la Sección 1.3 se describe el método numérico empleado para la resolución de los Hamiltonianos de electrones y huecos. En la Sección 1.4 se desarrollan las expresiones del coeficiente de absorción para transiciones intrabanda e interbanda. Por último, en la Sección 1.5 se explica el procedimiento seguido para el cálculo de estados bielectrónicos.

1.1 Hamiltonianos de partícula independiente

1.1.1 Hamiltoniano monoeléctrico

El Hamiltoniano $k \cdot p$ -EFA de una banda para electrones en un cristal se escribe simplemente como el Hamiltoniano de un electrón libre pero con la masa del electrón libre m_0 sustituida por una *masa efectiva* m^* y, en lugar del potencial periódico de la red cristalina, un *potencial confinante* $V(\vec{r})$ definido por los límites de la heteroestructura (Sección 1.2.1).¹ En coordenadas cartesianas y unidades atómicas ($\hbar = e = m_0 = 1$), la expresión es:

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{1}{2m^*} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{V}(x, y, z). \quad (1.1)$$

donde $\hat{p}_{x,y,z}$ son las proyecciones del operador momento, $\hat{p}_{x,y,z} = -i\nabla_{x,y,z}$. Las funciones propias de la expresión anterior se denominan *funciones envolventes* del electrón. Estas funciones describen el comportamiento electrónico

¹En esta memoria no mostramos el desarrollo que permite pasar del Hamiltoniano de un electrón libre en una heteroestructura cristalina al correspondiente Hamiltoniano $k \cdot p$ -EFA. Una explicación completa de este procedimiento puede encontrarse, p.ej. en las Refs.[8, 51].

en la escala (nanoscópica o mesoscópica) de la heteroestructura.² Para transformar la Ecuación 1.1 a coordenadas cilíndricas consideramos las siguientes equivalencias entre coordenadas, definidas en la Figura 1.2:

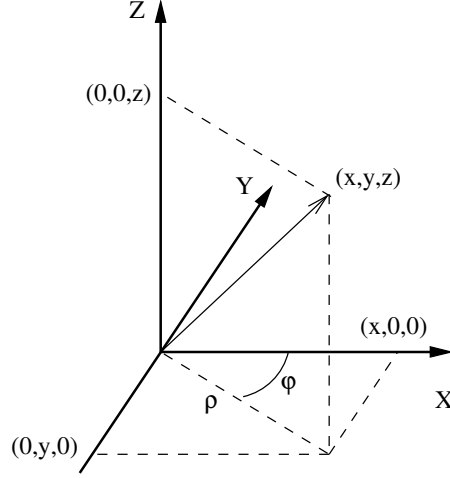


Figura 1.2: Coordenadas cilíndricas.

$$x = \rho \cos \theta, \quad y = \rho \sin \theta, \quad (1.2)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad \rho = (x^2 + y^2)^{1/2}. \quad (1.3)$$

Las derivadas cartesianas se expresan en coordenadas cilíndricas como:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (1.5)$$

de donde obtenemos:

²Adicionalmente, el comportamiento del electrón en cada celda unidad del cristal viene dado por una función periódica, u_i , donde i es el índice de la banda estudiada. La función de onda completa, pues, se escribe como el producto de la función envolvente por la parte periódica u_i .

$$\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{\sin \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho}, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\cos \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \rho}. \quad (1.7)$$

Teniendo en cuenta las relaciones anteriores, podemos reescribir las proyecciones del operador momento como:

$$\hat{p}_x = -i \left(-\frac{\sin \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \quad (1.8)$$

$$\hat{p}_y = -i \left(\frac{\cos \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \quad (1.9)$$

$$\hat{p}_z = -i \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.10)$$

Así, el Hamiltoniano de una banda en coordenadas cilíndricas resulta:

$$\hat{\mathcal{H}}_e = -\frac{1}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \hat{V}(\theta, \rho, z). \quad (1.11)$$

En sistemas con simetría circular (cilíndrica o esférica), la función envolvente electrónica puede escribirse como

$$f_{n,m}^e(\theta, \rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} f_{n,m}(\rho, z), \quad (1.12)$$

donde m es la proyección z del momento angular envolvente y n el número cuántico principal. La componente θ del Hamiltoniano puede entonces desacoplarse de (ρ, z) e integrarse analíticamente, de manera que la ecuación de autovalores se reduce a:

$$\left(-\frac{1}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right) f_{n,m}^e(\rho, z) = 0. \quad (1.13)$$

Puesto que pretendemos estudiar nanoestructuras con simetría axial pero forma arbitraria, en general el potencial confinante $V(\rho, z)$ impide la separación de las variables ρ y z . Por tanto, la Ecuación 1.13 debe integrarse numéricamente. El método que empleamos a este fin se describe en la Sección 1.3.

Efecto de no parabolicidad de la banda

En el modelo $k \cdot p$ de una banda, la masa efectiva viene determinada por la curvatura de la relación de dispersión de la banda frente al vector de onda, k , alrededor de un punto conocido k_0 . La relación de dispersión de bandas no degeneradas es parabólica en k alrededor del punto Γ , por lo que suele aceptarse la equivalencia:[8]

$$\frac{1}{m^*} = \left. \frac{\partial^2 \varepsilon(k)}{\partial k^2} \right|_{k=k_0}, \quad (1.14)$$

donde $\varepsilon(k)$ es la relación de dispersión de la banda. En esta aproximación es posible calcular el valor experimental de la masa efectiva mediante la determinación espectroscópica de un reducido número de parámetros dependientes del material semiconductor.

Sin embargo, para estados cuya separación energética respecto del extremo de la banda es comparable a las energías de *gap*, la relación de dispersión se desvía de la forma parabólica debido a la creciente importancia del acoplamiento con bandas próximas. En esta situación, la descripción parabólica de la masa efectiva es insuficiente. Una manera de mejorar la expresión de la masa efectiva sería emplear una descripción cúbica de la relación de dispersión, pero esta aproximación ha sido utilizada en raras ocasiones debido a su complejidad. Una alternativa más habitual para considerar la no parabolicidad de una banda consiste en utilizar una masa efectiva derivada del modelo multibanda de Kane[54, 55] en el Hamiltoniano de una sola banda. En esta aproximación, la masa efectiva *no parabólica* de un electrón de conducción resulta:[8]

$$\frac{m^*(E_{n,m})}{m^*(E_{n,m} = 0)} = \frac{(E_{n,m} + E_g)(E_{n,m} + E_g + \Delta_{SO})(E_g + 2\Delta_{SO}/3)}{E_g(E_g + \Delta_{SO})(E_{n,m} + E_g + 2\Delta_{SO}/3)}, \quad (1.15)$$

donde $m^*(E_{n,m} = 0)$ es la masa efectiva del electrón en el extremo de la banda (Ecuación 1.14), E_g es la energía de *gap* y Δ_{SO} es la energía del *split-off* (ver Figura 1.1). De acuerdo con la Ecuación 1.15, *a mayor energía del estado electrónico, $E_{n,m}$, mayor masa efectiva*. El efecto de la no parabolicidad en la BC es, por tanto, un aumento de la densidad de estados electrónicos.

Los efectos de no parabolicidad son especialmente relevantes, por ejemplo, en la descripción de estados excitados de QDs auto-ordenados.[56] Estas nanoestructuras suelen estar compuestas por semiconductores con energía

de *gap* pequeña (típicamente InAs) y, debido al fuerte confinamiento, los estados electrónicos son muy energéticos. Incluso en estructuras con tamaños moderadamente grandes, como los anillos cuánticos auto-ordenados, los efectos de no parabolicidad que predice la Ecuación 1.15 suponen una corrección de decenas de meV sobre las energías de los estados calculados en aproximación parabólica.

Normalmente sólo disponemos del valor espectroscópico inferido para la masa efectiva en el extremo de la banda, $m^*(E_{n,m} = 0)$. Para calcular la masa efectiva de un estado con energía $E_{n,m} > 0$ debemos sustituir la masa efectiva dependiente de la energía, Ecuación 1.15, en el Hamiltoniano monoeléctrico, Ecuación 1.13:

$$\left(-\frac{1}{2m^*(E_{n,m})} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right) f_{n,m}^e(\rho, z) = 0. \quad (1.16)$$

La Ecuación 1.16 depende explícita e implícitamente de la energía. En principio, podría pensarse en el método iterativo para determinar la energía auto-consistente. Sin embargo, puesto que integramos la Ecuación de Schrödinger siguiendo un procedimiento de diagonalización matricial (Sección 1.3), la convergencia sólo estaría garantizada para el estado más bajo de cada simetría, $E_{1,m}$. Un método alternativo, de moderado coste computacional y válido para el cálculo de estados excitados, se describe a continuación. Supongamos que queremos calcular la energía auto-consistente del n -ésimo estado de simetría m , $E_{n,m}^{AC}$, tras haber calculado $E_{1,m}^{AC}$ a $E_{n-1,m}^{AC}$. Los pasos a seguir son:³

1. Calculamos la energía del n -ésimo estado de una simetría dada utilizando $m^*(E_{n,m} = 0)$ en la Ecuación 1.16. Obtenemos $E_{n,m}^1$.
2. Calculamos la energía del n -ésimo estado de esta simetría utilizando $m^*(E_{n,m}^1)$. Obtenemos $E_{n,m}^2$.
3. A partir de las Ecuaciones 1.15 y 1.16 y que, obviamente, $E_{n,m} = 0$ es la mínima energía, se infiere que $E_{n,m}^1$ y $E_{n,m}^2$ son las cotas supe-

³En el resto de la sección el número del superíndice de la energía indica las veces que se ha iterado con la Ecuación 1.16.

rior e inferior de las energías iterativas, respectivamente.⁴ $E_{n,m}^{AC}$ es necesariamente una energía intermedia.

Por otra parte, si tenemos dos energías E^i y E^j tales que $E^i < E_{n,m}^{AC} < E^j$, la diferencia de energía ($E^{i+1} - E^i$) será de signo contrario a ($E^{j+1} - E^j$). Esto puede observarse en la Figura 1.3 izquierda, donde se representa cualitativamente la relación entre las energías E^i y $\hat{\mathcal{H}}(E^i) = E^{i+1}$ descrita por la Ecuación 1.16.

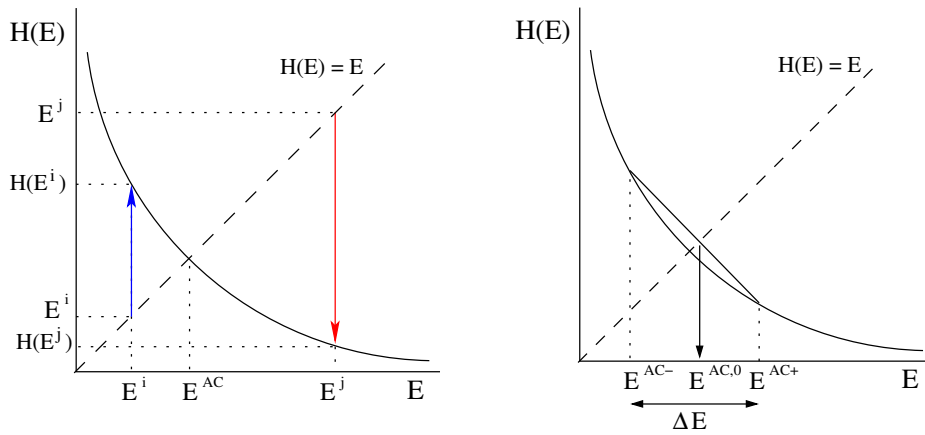


Figura 1.3: Representación cualitativa de la Ecuación 1.16 frente a la energía. La línea discontinua indica la recta $\hat{\mathcal{H}}(E) = E$. Izquierda: la flecha azul representa $(E^{i+1} - E^i)$ y la flecha roja $(E^{j+1} - E^j)$. La dirección de las flechas indica el signo de la diferencia de energías. Derecha: justificación gráfica de la aproximación de E^{AC} realizada en el paso 4.

Podemos, pues, intentar determinar $E_{n,m}^{AC}$ a partir del cambio de signo de $E^{i+1} - E^i$, variando E^i entre $E_{n,m}^1$ y $E_{n,m}^2$ en intervalos de energía ΔE lo bastante pequeños para acotar convenientemente $E_{n,m}^{AC}$.

4. Una vez localizado el primer cambio de signo entre dos energías, que etiquetamos como E^{AC-} y $E^{AC+} = E^{AC-} + \Delta E$, aproximamos $E_{n,m}^{AC}$ por el punto de corte de la diagonal, $\hat{\mathcal{H}}(E) = E$, y la recta que une

⁴Sabemos que la masa efectiva crece con la energía de la cual depende, Ecuación 1.15. Sabemos también que la masa efectiva está dividiendo en el término de energía cinética, Ecuación 1.16, por lo que un aumento de ésta hace decrecer los autovalores de energía. Así pues, $E_{n,m} = 0$ da lugar a la mínima masa efectiva que, al utilizarla en la Ecuación 1.16, da lugar a la cota superior de energía, $E_{n,m}^1$. Justo lo contrario sucede con $E_{n,m}^1$, por ser la cota superior de energía, dando lugar a la máxima masa efectiva y ésta, en la Ecuación 1.16, a la cota inferior de energía, $E_{n,m}^2$.

E^{AC^-} y E^{AC^+} (ver Figura 1.3 derecha). Etiquetamos este valor como $E^{AC,0}$.

5. Calculamos $E^{AC^+,1}$ resolviendo la Ecuación 1.16 con $m^*(E^{AC,0})$.
6. Si $(E^{AC,1} - E^{AC,0})$ es mayor que una energía de tolerancia predeterminada, volvemos al paso 4 sustituyendo E^{AC^+} (o E^{AC^-}) por $E^{AC,0}$. De lo contrario, sabemos que $E^{AC,1}$ está muy próximo a la auto-consistencia.
7. Si $E^{AC,1}$ coincide con alguna de las energías auto-consistentes previamente determinadas, $E_{1,m}^{AC}, \dots, E_{n-1,m}^{AC}$, rechazamos el resultado y volvemos al paso 2 asignando $E_{n,m}^1 = E^{AC,1}$. Si, por contra, no coincide con ninguna de las energías auto-consistentes anteriores, $E_{n,m}^{AC} = E^{AC,1}$.

La Figura 1.4 representa el diagrama de flujo que resume el procedimiento arriba descrito.

Masa dependiente de la posición

En el método $k \cdot p$, la participación de las bandas no incluídas explícitamente en el Hamiltoniano se incorpora a través de la masa efectiva. Ahora bien, las bandas de los distintos materiales que componen una heteroestructura no son iguales y, por tanto, tampoco lo son sus masas efectivas. Así pues, en una heteroestructura formada por dos materiales A y B la masa es una función de la posición definida como:

$$m^*(\vec{r}) = \begin{cases} m_A^* & \text{si } \vec{r} \in A, \\ m_B^* & \text{si } \vec{r} \in B. \end{cases} \quad (1.17)$$

Al introducir la dependencia de la masa efectiva respecto de la posición, los operadores masa y momento dejan de conmutar. En consecuencia, la expresión general del término cinético en el Hamiltoniano no es trivial. Debe escogerse un orden correcto de los operadores que garantice la hermiticidad del Hamiltoniano, la invarianza galileana y las reglas de conexión de la función envolvente a través de la interfaz de la heteroestructura. Actualmente parece existir consenso en la siguiente forma del término de la energía cinética:[57]

$$\hat{T} = -\frac{1}{2} \left[\vec{p} \frac{1}{m^*(\vec{r})} \vec{p} \right]. \quad (1.18)$$

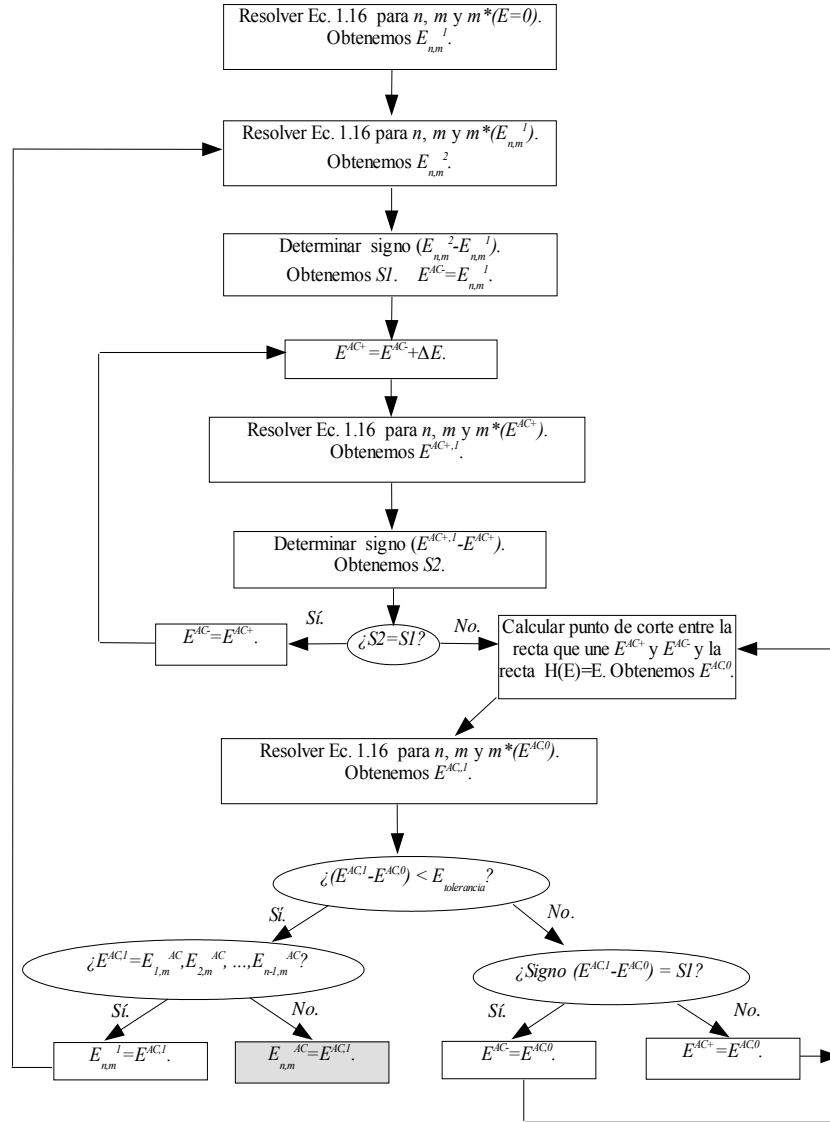


Figura 1.4: Diagrama de flujo del procedimiento seguido para resolver la Ecuación 1.16.

Por otra parte, las condiciones de contorno en heteroestructuras exigen que la función envolvente, $f(\vec{r})$, y el término $\frac{1}{m^*(\vec{r})} \vec{p} f(\vec{r})$ sean continuos en la interfaz.[58, 59, 60, 61] Es interesante notar que estas condiciones, denominadas condiciones de contorno de BenDaniel-Duke, implican una *discontinuidad de la derivada* de la función envolvente en la interfaz.

Teniendo en cuenta las anteriores consideraciones, podemos reescribir la Ecuación 1.16 combinando efectos de no parabolicidad y masa dependiente de la posición:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{m^2}{\rho^2 m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \right) + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right] f_{n,m}^e(\rho, z) = 0, \quad (1.19)$$

donde $m^*(E_{n,m}; \rho, z)$ se calcula con la Ecuación 1.15, utilizando en cada posición la energía de *gap*, y de *split-off* del material correspondiente. $E_{n,m}$ se expresa como la energía de enlace referida al fondo de la BC del material determinado por (ρ, z) . La Ecuación 1.19 se integra imponiendo las condiciones de contorno de BenDaniel-Duke (Sección 1.3).

1.1.2 Hamiltoniano de huecos

En el punto Γ ($k = 0$), las partes periódicas (u_i) de la función de onda de un electrón libre en un cristal son base de las representaciones irreducibles del subgrupo puntual de simetría cristalina. Concretamente, las funciones periódicas del tope de la BV en cristales tipo Zinc-Blenda (subgrupo puntual T_d) son base de Γ_5 (T_2 en notación de Schönflies), la misma simetría que presentan los orbitales atómicos p_x, p_y, p_z . Por este motivo, es costumbre etiquetar estas funciones como $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$.

Además, en la BV el término de acoplamiento espín-órbita es significativo, por lo que no podemos separar coordenadas espaciales de coordenadas de espín. Por ello, en la descripción de la función periódica de valencia empleamos una base con espín: $\{|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, \dots, |Z \downarrow\rangle\}$. Alternativamente, podemos utilizar una transformación de esta base que esté adaptada al momento angular total (*de Bloch*): $\{|J, J_z\rangle\}$, con $J = 3/2, 1/2$ y $J_z = -J, \dots, J$. De esta manera la base es propia del Hamiltoniano en el que se incluye el término de interacción espín-órbita. La subbanda $\{|1/2, J_z\rangle\}$ (denominada subbanda de *split-off*) se separa energéticamente de $\{|3/2, J_z\rangle\}$ incluso a $k = 0$, por acción del mencionado término de interacción espín-orbital. Por su parte, la banda $\{|3/2, J_z\rangle\}$ se divide en dos

subbandas si $k \neq 0$, la de HH, $\{|3/2, \pm 3/2\rangle\}$ y la de LH, $\{|3/2, \pm 1/2\rangle\}$ (ver Figura 1.1).

El método $k \cdot p$, en la aproximación más simple (aproximación de masa efectiva) trata cada subbanda independientemente. Sin embargo, una descripción más realista de los estados próximos al tope de la BV requiere tener en cuenta al menos el acoplamiento entre subbandas HH y LH. El Hamiltoniano más simple que considera este acoplamiento es el Hamiltoniano Luttinger-Kohn de cuatro bandas.[9] Si además incluimos la aproximación de función envolvente, obtenemos un Hamiltoniano $k \cdot p$ -EFA de cuatro bandas. En aproximación axial y expandido sobre una base de funciones de Bloch con $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, éste se escribe (en coordenadas cartesianas y unidades atómicas) como:[63, 64]

$$\hat{\mathcal{H}}_h = \begin{bmatrix} -(P+Q) + V & -iL & -M & 0 \\ iL^* & -(P-Q) + V & 0 & -M \\ -M^* & 0 & -(P-Q) + V & iL \\ 0 & -M^* & -iL^* & -(P+Q) + V \end{bmatrix} \quad (1.20)$$

donde $V = \hat{V}(x, y, z)$ es el potencial confinante espacial,

$$\begin{aligned} P &= \frac{\gamma_1}{2} p^2, & Q &= \frac{\gamma_2}{2} (p_{\perp}^2 - 2p_z^2), & L &= -i\sqrt{3}\gamma_3 p_z p_{-}, \\ M &= \frac{\sqrt{3}\gamma_2}{2} p_{-}^2, & p_{\pm} &= p_x \pm ip_y, & p_{\perp}^2 &= p_x^2 + p_y^2, \\ p^2 &= p_{\perp}^2 + p_z^2, & p_{x,y,z} &= -i\nabla_{x,y,z}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ son los parámetros de Luttinger ($\gamma_3 = \gamma_2$ en aproximación esférica[64]), que definen la masa efectiva de los huecos pesados y ligeros:

$$m_{HH} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \quad m_{LH} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}. \quad (1.22)$$

Haciendo uso de las relaciones 1.2-1.10 e integrando sobre la coordenada angular, reescribimos el Hamiltoniano de huecos en coordenadas cilíndricas para un sistema de simetría axial. La expresión obtenida se muestra en la Tabla 1.1, donde F_z es la proyección en z del momento angular total $\vec{F} = \vec{J} + \vec{L}$, siendo L el momento angular de la función envolvente.

La función envolvente solución del Hamiltoniano de huecos tiene pues cuatro componentes, cada una de ellas asociadas a un valor de J_z :

$$f_{n_h, F_z}^h(\vec{r}) = \{f_{n_h, F_z, J_z}^h(\vec{r})\} = \{e^{im_h\theta} f_{n_h, F_z, J_z}^h(\rho, z)\}, \quad (1.23)$$

donde $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, $m_h = F_z - J_z$ es la proyección en z del momento angular envolvente del hueco y n_h es el número cuántico principal.

$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{3}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z - \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z (F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right]$	0
$\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z - \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(\rho, z)$	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	0	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(F_z + 1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z (F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right]$
$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(F_z - 1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z (F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + V(\rho, z)$	0	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$-\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z + \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$
0	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z (F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + V(\rho, z)$	$-\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z + \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{3}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$

Tabla 1.1: Hamiltoniano $\mathbf{k-p-EFA}$ de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas.

1.2 Potenciales de partícula independiente

1.2.1 Confinamiento espacial

En heteroestructuras semiconductoras, la diferencia de energía de una misma banda en dos materiales adyacentes constituye una barrera o un pozo de potencial que confina espacialmente a los portadores de carga libres de dicha banda. En la aproximación de función envolvente, este potencial tiene forma de escalón en la interfaz entre los dos materiales y su magnitud viene determinada por la diferencia entre las energías de la banda en uno y otro material.[8] Por ejemplo, sea una estructura donde a lo largo de la dirección z se deposita una capa de material A seguida de una capa de un material distinto B. El potencial confinante que actúa sobre un portador de carga libre en una banda determinada es:

$$\hat{V}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z \in A, \\ \varepsilon_B - \varepsilon_A & \text{si } z \in B, \end{cases} \quad (1.24)$$

donde ε_A y ε_B son las energías del extremo de la banda (punto Γ) en el material A y B, respectivamente. Una representación gráfica de este potencial se puede encontrar en la Figura 1.5. La diferencia $\varepsilon_B - \varepsilon_A$ se denomina potencial de alineamiento de bandas (*band offset*) de los materiales A y B. La magnitud y el signo de esta energía tienen una influencia decisiva sobre los niveles energéticos y las propiedades electrónicas del portador de carga.

Una práctica habitual en el estudio de QDs consiste en sustituir el potencial confinante de la Ecuación 1.24 por otros cuyos perfiles permiten soluciones analíticas de la Ecuación de Schrödinger. Uno de los perfiles más frecuentemente empleados es el de una parábola simple:

$$\hat{V}(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r^2, \quad (1.25)$$

donde m^* es la masa efectiva del portador de carga y ω_0 es la frecuencia característica del potencial (que determina la fuerza del confinamiento). El potencial de la Ecuación 1.25 permite resolver el Hamiltoniano de una banda en términos de las soluciones del oscilador armónico.[197, 198]

El potencial parabólico permite una descripción realista de QDs donde el confinamiento lateral es electrostático (ver, p.ej., las Refs.[4, 18]). En la investigación de QDs donde el confinamiento viene determinado por los límites de la heteroestructura, como QD auto-ordenados (Sección 3.1), este potencial también ha sido utilizado debido al bajo coste de cálculo que implica.[65] Aunque los detalles del potencial confinante de estos QDs difieren de una

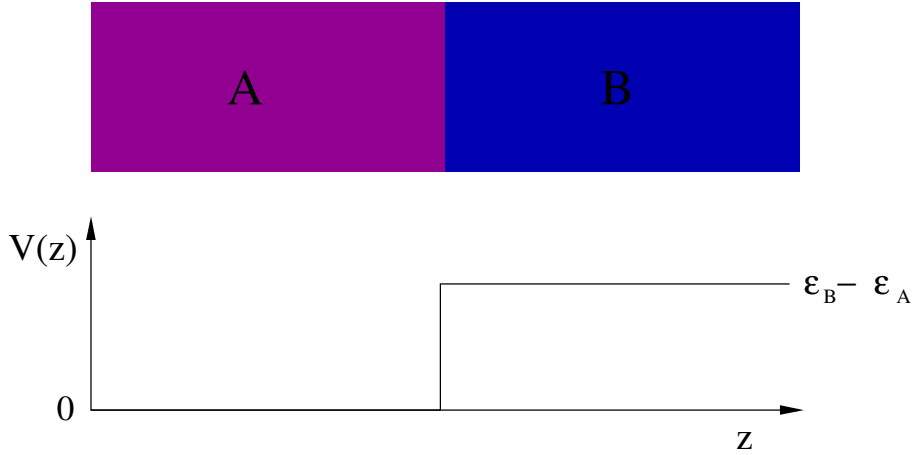


Figura 1.5: Perfil del potencial confinante espacial de una heteroestructura según la aproximación de función envolvente.

simple parábola, la validez de la aproximación se sustenta típicamente por el cumplimiento del teorema de Kohn generalizado.[66, 67, 68, 69] Este teorema afirma que los efectos de interacción electrónica en un QD pueden ser observados mediante espectroscopía en el infrarrojo lejano sólo si el potencial confinante es suficientemente anharmónico. Por ello, el hecho de que en muchos casos los espectros de absorción observados en QDs se hayan correspondido con los de sistemas no interactuantes[70, 71, 72, 73, 74] respalda la validez general del confinamiento parabólico.[20] Sin embargo, las limitaciones del este potencial también se han manifestado en diversas ocasiones:

- Al tener una profundidad infinita, no describe correctamente los estados débilmente ligados[21, 22, 23]
- Las reglas de selección son más selectivas que las correspondientes a un potencial confinante escalonado o de paredes infinitas, con lo que se “pierden” transiciones magneto-ópticas posibles.[19]
- Es necesario ajustar empíricamente la frecuencia característica ω_0 .
- Si se pretende estudiar QDs circulares, es necesario desacoplar el movimiento en la dirección de crecimiento del QD, z , de las componentes en el plano del punto, $x y$. Esta aproximación es válida en QDs donde la dimensión vertical es mucho menor que la lateral, en los cuales se

puede asumir que solamente el estado más bajo de la componente z está ocupado. Sin embargo, en general se requiere reajustar la masa efectiva de la partícula a valores incrementados para compensar la ausencia de la dirección vertical.[75]

- En la descripción de anillos cuánticos deben introducirse nuevos parámetros ajustables. En el caso más sencillo, el potencial confinante parabólico sería el descrito por $\hat{V}(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 (r - R)^2$, donde R es el radio efectivo del anillo.[77]
- El radio interior de un anillo cuántico está pobremente descrito por una simple parábola.[39, 78]

Debe notarse que la presencia de diversos parámetros ajustables introduce grados de libertad en el modelo que pueden ser peligrosos en sistemas en los cuales se dispone de datos experimentales escasos o inciertos. Una clara manifestación de este problema se encuentra en la Ref.[76], donde los autores utilizaron un modelo con potencial confinante parabólico para calcular el espectro de absorción interbanda de un anillo cuántico auto-ordenado de InAs. Sus resultados consiguieron reproducir todos los picos que se observan en el correspondiente experimento,[79] a pesar de que evidencias posteriores[80, 81] demostraron que algunos de estos picos provenían en realidad de un segundo tipo de anillo que no había sido considerado en los cálculos teóricos.

Otro tipo de potencial confinante ampliamente utilizado en el estudio de estados electrónicos en QDs es el de paredes infinitas.[62, 63, 82] Este potencial asume que la mayoría de la densidad de carga de las partículas se encuentra en el interior de la nanoestructura, por lo que aproxima el potencial de confinamiento en el exterior del punto a infinito. Esta aproximación ofrece estimaciones cualitativamente correctas de la estructura energética de los estados fuertemente ligados, si bien da lugar a un error cuantitativo por sobrestimar el confinamiento espacial. Este error puede llegar a ser significativo en estructuras de pequeño tamaño[25, 62]. Además, este modelo de potencial confinante no rinde cuenta del efecto túnel, que es esenciales en algunos fenómenos como, por ejemplo, la formación de moléculas artificiales[83] o la localización de la densidad de carga electrónica en nanocristales multicapa.[33, 84, 85]

Finalmente, algunos autores han sugerido el uso de potenciales confinantes parametrizados con perfil gaussiano.[21, 86] Estos tipos de potencial, al igual que el potencial escalonado, permiten representar correctamente la profundidad y anchura finitas del potencial confinante en QDs. Su principal

ventaja es que describen una variación gradual (*blanda*) del potencial confinante. Esto les permite rendir cuenta de los efectos de modulación de la composición en los límites del QD y eliminar la discontinuidad que se obtiene con modelos de barrera abrupta (*dura*) en la derivada de la función envolvente a través de la interfaz.[21] Sin embargo, en la actualidad no es posible cuantificar los efectos de difusión ni la variación de la concentración de elementos constituyentes en los límites de una nanoestructura. Por lo tanto, la parametrización del potencial confinante implica introducir grados de libertad en el modelo teórico que deben ser ajustados de manera completamente arbitraria.

En base a la discusión anterior, en nuestro modelo emplearemos un potencial confinante escalonado como el de la Ecuación 1.24. Este tipo de potencial ofrece una estimación apropiada de las características más importantes del confinamiento: su anchura y profundidad. La anchura vendrá determinada por las dimensiones del QD y la profundidad por el *band-offset* de los materiales del interior y exterior del punto.

1.2.2 Campo magnético externo

El efecto de un campo magnético externo sobre QDs es de gran interés porque la masa efectiva de electrones (y huecos) en estas estructuras es mucho menor que la masa del electrón libre. Esto hace posible observar fenómenos que en átomos naturales requerirían campos magnéticos órdenes de magnitud superiores a los actualmente disponibles en el laboratorio. Los efectos más interesantes producidos por campos magnéticos externos se observan cuando el sistema conserva simetría cilíndrica, como en el caso de QDs esféricos bajo un campo axial o QDs con forma de lente o disco en un campo paralelo al eje de crecimiento, z . En estos casos, el campo magnético origina complicados desplazamientos, desdoblamientos y anticruzamientos de niveles energéticos, pero manteniendo la estructura energética de capas. Contrariamente, un campo paralelo al plano de un QD con forma de lente o disco tiene una influencia despreciable sobre los niveles energéticos debido al fuerte confinamiento espacial en la dimensión vertical.[87]

En este apartado desarrollamos los Hamiltonianos de un electrón y de un hueco en un sistema de simetría cilíndrica con presencia de un campo magnético externo y homogéneo aplicado a lo largo del eje z .

En presencia de un campo magnético, el operador momento cinemático \vec{p} se sustituye por $\vec{p} - e\vec{A}$, donde ahora \vec{p} es el momento canónico conjugado, e es la carga del electrón (o hueco) y \vec{A} es el potencial vector. Recientemente se ha sugerido que la manera más correcta de introducir el campo

magnético en Hamiltonianos $k \cdot p$ es sustituyendo \vec{p} por $\vec{p} - e\vec{A}$ en el Hamiltoniano del electrón libre en un potencial cristalino *antes* de integrar la parte periódica de las funciones de Bloch.[42] Sin embargo, el primer Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda en presencia de un campo magnético externo, realizó esta sustitución *después* de haber integrado la parte periódica de las funciones de Bloch, cuando el operador momento ya sólo actúa sobre la función envolvente.[88] La mayoría de autores desde entonces ha seguido el mismo desarrollo.[43, 90] En este apartado obtenemos y discutimos las expresiones correspondientes a una y otra aproximación.

El Hamiltoniano de un electrón libre en un cristal semiconductor y en presencia de un campo magnético es:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right)^2 + \hat{V}_{cr}(\vec{r}), \quad (1.26)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre y $\hat{V}_{cr}(\vec{r})$ el potencial periódico cristalino. Definimos nuestro potencial vector en el gauge simétrico ($\nabla \cdot \vec{A} = 0$) como $\vec{A} = \left(-\frac{1}{2}y, \frac{1}{2}x, 0\right) B$. Así, es fácil comprobar que $\vec{B} = \nabla \wedge \vec{A} = (0, 0, B)$. Sustituyendo $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ se llega a la siguiente expresión:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p}^2 - 2e\vec{A} \cdot \vec{p} + e^2 \vec{A}^2 \right) + \hat{V}_{cr}(\vec{r}), \quad (1.27)$$

donde

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = -\frac{1}{2}i\hbar B \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{2}B \hat{L}_z, \quad (1.28)$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4}B (x^2 + y^2) = \frac{1}{4}B^2 \rho^2. \quad (1.29)$$

Llevando las Ecuaciones 1.28 y 1.29 a 1.27 obtenemos:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{eB}{2m_0} \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{8m_0} \rho^2 + \hat{V}_{cr}(\vec{r}). \quad (1.30)$$

El Hamiltoniano anterior se proyecta sobre una base finita de funciones:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i f^i(\vec{r}) |u_i\rangle, \quad (1.31)$$

donde $f^i(\vec{r})$ y $|u_i\rangle$ son la función envolvente y la función periódica correspondientes a la banda de energía i , respectivamente. Las bandas no incluidas

en el sumatorio de 1.31 se tienen en cuenta sustituyendo m_0 por una masa efectiva m^* en la Ecuación 1.30. En sistemas con simetría circular, la función envolvente puede escribirse como en la Ecuación 1.12, con m siendo el número cuántico de \hat{L}_z . Por otra parte, como decíamos en 1.1.2, las funciones periódicas pueden ser escritas como $|(c/v), J, J_z\rangle$ (donde J denota el momento angular de Bloch y c/v la BV/BV):[64]

$$\begin{aligned}
|c, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= |S\rangle |\uparrow\rangle \\
|c, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= |S\rangle |\downarrow\rangle \\
|v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= -1/\sqrt{2}|P_+\rangle |\uparrow\rangle \\
|v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{2/3}|P_Z\rangle |\uparrow\rangle - 1/\sqrt{6}|P_+\rangle |\downarrow\rangle \\
|v, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{2/3}|P_Z\rangle |\downarrow\rangle + 1/\sqrt{6}|P_-\rangle |\uparrow\rangle \\
|v, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= 1/\sqrt{2}|P_-\rangle |\downarrow\rangle,
\end{aligned} \tag{1.32}$$

siendo $|P_\pm\rangle = |X\rangle \pm i|Y\rangle$.

El Hamiltoniano $k \cdot p$ de una banda para electrones de conducción se obtiene integrando la Ecuación 1.30 sobre la celda unidad en la base $\Psi(\vec{r}) = f_{n,m}^e(\vec{r}) |c, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$. El operador ρ es aproximadamente constante dentro de la celda unidad, luego:

$$\langle c, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | \rho | c, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle | f_{n,m}^e \rangle \approx \rho | f_{n,m}^e \rangle. \tag{1.33}$$

Por otro lado, $\hat{L}_z |S\rangle = 0$ y por tanto:

$$\langle c, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | \hat{L}_z | c, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle | f_{n,m}^e \rangle = \hat{L}_z | f_{n,m}^e \rangle. \tag{1.34}$$

Así pues, la ecuación de autovalores de electrones de conducción en presencia de un campo magnético a lo largo del eje z queda:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m^*} - \frac{e B m}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{8m^*} \rho^2 + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right) f_{n,m}^e(\rho, z) = 0, \tag{1.35}$$

donde $\hat{V}(\rho, z)$ es el potencial confinante espacial de la heteroestructura (Sección 1.2.1).

La inclusión del espín electrónico incorpora dos nuevos términos a 1.35: la energía del efecto Zeeman, $g\mu_B\sigma B$ (donde g es el factor de Landé y μ_B el magnetón de Bohr), y el término de espín-órbita. Este último término suele despreciarse, ya que que la BC está formada esencialmente por funciones tipo s , lo que hace débil a esta interacción.[4]

Reescribiendo la Ecuación 1.35 en coordenadas cilíndricas, masa efectiva dependiente de la energía y de la posición, más efecto Zeeman de espín electrónico llegamos a:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{m^2}{\rho^2 m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \right) + \frac{Bm}{2m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{B^2 \rho^2}{8m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{1}{2} g(E_{n,m}; \rho, z) \mu_B B \sigma + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right] f_{n,m}^e(\rho, z) = 0, \quad (1.36)$$

donde $g(E_{n,m}; \rho, z)$ es el factor de Landé dependiente de la energía y de la posición:[89]

$$g(E_{n,m}; \rho, z) = 2 \left(1 - \frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \times \frac{\Delta_{SO}(\rho, z)}{3 \left[E_{n,m} + E_g(\rho, z) - \hat{V}(\rho, z) \right] + 2\Delta_{SO}(\rho, z)} \right). \quad (1.37)$$

A partir de las Ecuaciones 1.33 y 1.34 se concluye que, en el Hamiltoniano de electrones de una banda, es indistinto que la sustitución $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ se realice antes o después de integrar sobre la celda unidad. Sin embargo, la parte periódica de la función de Bloch puede tener una proyección de \hat{L}_z distinta de cero. En el caso general, la integración de $\langle u_j | \hat{L}_z (|u_i\rangle |f^i\rangle) \rangle$ sobre la celda unidad da lugar a:

$$\langle u_j | \hat{L}_z (|u_i\rangle |f^i\rangle) \rangle = \langle u_j | \hat{L}_z |u_i\rangle |f^i\rangle + \delta_{ij} \hat{L}_z |f^i\rangle, \quad (1.38)$$

donde el primer término de la suma puede ser no nulo. Concretamente, en un Hamiltoniano de valencia de cuatro bandas, que incluya el acoplamiento entre subbandas de HH y de LH, y una función envolvente con simetría cilíndrica, la expresión anterior se puede escribir como:

$$\langle u_j | \hat{L}_z (|u_i\rangle |f^i\rangle) \rangle = \delta_{ij} (c_i |f^i\rangle + m |f^i\rangle), \quad (1.39)$$

donde el factor c_i vale $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, -\frac{1}{6}, -\frac{1}{2}\}$ para las funciones periódicas de la banda de valencia con $J_z = \{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\}$, respectivamente (ver Ecuación

1.32). Teniendo en cuenta las Ecuaciones 1.33 y 1.39, podemos derivar el Hamiltoniano de huecos en simetría cilíndrica y un campo magnético aplicado a lo largo de z . El resultado obtenido se muestra en la Tabla 1.2.

La determinación *ab initio* de los coeficientes másicos que deben acompañar el término de interacción magnética en el Hamiltoniano de cuatro bandas es una tarea de gran complejidad. Los coeficientes empleados en la Tabla 1.2 han sido determinados empíricamente, comparando las energías inducidas por el campo magnético utilizando diversas combinaciones de los coeficientes presentes en el Hamiltoniano a $B = 0$, Tabla 1.1, y comparándolas con datos experimentales de magneto-fotoluminiscencia de anillos cuánticos auto-ordenados.[38] Los coeficientes másicos que ofrecieron resultados más razonables en esta comparativa fueron: $m_{HH/LH}$ frente al término cuadrático del campo magnético en huecos pesados/ligeros, y el promedio $\frac{1}{2}(m_{HH} + m_{LH})$ frente al término lineal del campo.

El Hamiltoniano de la Tabla 1.2 es formalmente distinto del derivado por Luttinger[88] y habitualmente empleado por otros autores,[43, 90] donde el término de interacción magnética aparece en elementos extradiagonales de la matriz Hamiltoniano, conforme se muestra en la Tabla 1.3.

Los Hamiltonianos de las Tablas 1.2 y 1.3 estiman contribuciones del campo magnético que en general son parecidas, pero pueden ser significativamente distintas en determinados casos.[42] En el Capítulo 4 se comparan los resultados ofrecidos por ambos Hamiltonianos con datos experimentales. El análisis revela que el Hamiltoniano de la Tabla 1.2 predice resultados más correctos.

1.2.3 Potencial de deformación elástica

Las diferencias de constante de red entre los materiales que forman una heteroestructura semiconductor originan fuerzas de tensión que, a su vez, ejercen una influencia determinante en la estructura de bandas.[51, 91, 92] La BC de un QD sometido a tensiones se estabiliza/desestabiliza proporcionalmente a la deformación hidrostática, mientras que en la banda de valencia los huecos pesados y ligeros rompen su degeneración en el punto Γ de la Zona de Brillouin proporcionalmente al campo de deformaciones biaxial, a la vez que son afectados por la tensión hidrostática. Además, el campo de tensiones genera un potencial piezoeléctrico, aunque éste es generalmente pequeño y, excepto en algunos casos, contribuye poco a la energía electrónica.[52]

El potencial de deformación elástica en la BC, debido a consideraciones de simetría de las funciones tipo s , puede escribirse simplemente como:[51]

$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{3}{2})^2}{\rho^2} \right]$ $+ \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{B^2 \rho^2}{4} \right]$ $-(\gamma_1 - \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}) \frac{(F_z - 1)B}{2} + V(\rho, z)$	$\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z - \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right]$	0
$\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z - \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right]$ $+ \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{B^2 \rho^2}{4} \right]$ $-(\gamma_1 - \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}) \frac{(F_z - 1/3)B}{2} + V(\rho, z)$	0	$-\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z + \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$
$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(F_z - 1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right]$	0	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right]$ $+ \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{B^2 \rho^2}{4} \right]$ $-(\gamma_1 - \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}) \frac{(F_z + 1/3)B}{2} + V(\rho, z)$	$-\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z + \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$
0	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right]$	$-\sqrt{3}\gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z + \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{3}{2})^2}{\rho^2} \right]$ $+ \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{B^2 \rho^2}{4} \right]$ $-(\gamma_1 - \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}) \frac{(F_z + 1)B}{2} + V(\rho, z)$

Tabla 1.2: Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas y un campo magnético a lo largo de z . El término de interacción magnética ha sido incluido antes de integrar la parte periódica de las funciones de Bloch.

$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{3}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$\sqrt{3} \gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2F_z + B\rho^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + (F_z + \frac{1}{2})B + \frac{B^2 \rho^2}{4}$	0
$\sqrt{3} \gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z - \frac{3}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] - \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	0	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(F_z + 1 + \frac{1}{2} B \rho^2)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + (F_z + \frac{3}{2})B + \frac{B^2 \rho^2}{4}$
$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(F_z - 1) + B\rho^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + (F_z - \frac{3}{2})B + \frac{B^2 \rho^2}{4}$	0	$\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$-\sqrt{3} \gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$
0	$-\sqrt{3} \frac{\gamma_2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2F_z + B\rho^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] + (F_z - \frac{1}{2})B + \frac{B^2 \rho^2}{4}$	$-\sqrt{3} \gamma_3 \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 + 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$	$\frac{(\gamma_2 + \gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(F_z + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} B \rho^2)^2}{\rho^2} \right] + \frac{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z)$

Tabla 1.3: Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas y un campo magnético a lo largo de z . El término de interacción magnética ha sido incluido después de integrar la parte periódica de las funciones de Bloch.

$$V_{def} = a_c \varepsilon_{hid}(\rho, z), \quad (1.40)$$

donde a_c es el potencial de deformación del material semiconductor y $\varepsilon_{hid} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ la deformación hidrostática. ε_{ii} representa el elemento del tensor de deformación a lo largo del eje i . Así pues, si en nuestro modelo incluimos el potencial de deformación para electrones de conducción, la Ecuación 1.36 queda:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{m^2}{\rho^2 m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \right) + \frac{Bm}{2m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{B^2 \rho^2}{8m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{1}{2} g(E_{n,m}; \rho, z) \mu_B B \sigma + \hat{V}(\rho, z) + a_c(\rho, z) \varepsilon_{hid}(\rho, z) - E_{n,m} \right] f_{n,m}^e(\rho, z) = 0. \quad (1.41)$$

El cálculo del tensor de deformación, en la denominada *aproximación isotrópica elástica*, se explica con detalle en las Refs.[47, 50], que adjuntamos al final de esta memoria.

1.3 Integración de los Hamiltonianos de partícula independiente

Los Hamiltonianos de un electrón de conducción y un hueco de valencia desarrollados en las secciones anteriores carecen en general de solución analítica, ya que el potencial confinante tiene forma arbitraria. Por este motivo los integramos numéricamente en un esquema de diferencias finitas.[93] Utilizamos fórmulas de tres puntos y derivadas centradas.⁵ Las ecuaciones diferenciales se discretizan en un mallado bidimensional homogéneo en el plano ρz . Imponemos condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann sobre la función envolvente $f(\rho, z)$ en los extremos del mallado:

$$f(\rho, 0) = f(\rho, Z) = f(R, z) = 0, \quad (1.42)$$

$$f(0, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0, \\ f(h, z) \neq 0, \frac{\partial f(0, z)}{\partial \rho} = 0 & \text{si } m = 0, \end{cases} \quad (1.43)$$

⁵Cálculos exploratorios empleando fórmulas de cinco puntos o extrapolaciones de Richardson ofrecieron resultados similares.

donde R es el mayor valor de ρ en el mallado, Z el mayor valor de z , h el paso del mallado y m la proyección z del momento angular. La condición de contorno 1.42 exige que la función envolvente se desvanezca en los extremos del mallado. Esta condición es razonable para estados ligados en el QD y un mallado de dimensiones algo mayores que las del punto. La condición de contorno 1.43 es tal vez menos intuitiva. Ésta exige que la función envolvente sea nula (presente un nodo) en el eje z si tiene momento angular $m \neq 0$, o que la derivada en el eje z sea nula si $m = 0$. Estas condiciones pueden deducirse a partir de la condición de que el límite $\rho = 0$ de la ecuación de autovalores del electrón, Ecuación 1.13, sea finito.[94] En los problemas donde se emplea masa efectiva electrónica variable con la posición debemos imponer además condiciones de contorno de BenDaniel-Duke en la frontera entre distintos materiales.[8, 89] Una manera sencilla de imponer implícitamente estas condiciones de contorno, garantizando la robustez de la integración por diferencias finitas, consiste en discretizar la masa efectiva del término de energía cinética antes de derivarla.[95] Por ejemplo, la componente ρ del término de energía cinética en la Ecuación 1.41 quedaría:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) = \\ & = \frac{1}{\hbar \rho} \left(\frac{\rho + h/2}{m^*(E_{n,m}; \rho + h/2, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \Big|_{\rho+h/2} - \frac{\rho - h/2}{m^*(E_{n,m}; \rho - h/2, z)} \frac{\partial}{\partial \rho} \Big|_{\rho-h/2} \right). \end{aligned} \quad (1.44)$$

La discretización completa de los Hamiltonianos de electrones y de huecos transforma las ecuaciones diferenciales en matrices asimétricas, dispersas y de gran dimensión. En el caso de electrones, la asimetría procede de los distintos coeficientes de las derivadas en ρ que se observan en el término de la derecha de la Ecuación 1.44. En el caso de huecos, la asimetría ya se encuentra en el propio Hamiltoniano multibanda (ver Tabla 1.1). Estas matrices se diagonalizan mediante el algoritmo iterativo de Arnoldi[96], implementado en la librería *Fortran* ARPACK y en su versión paralelizada, pARPACK.[97]

1.4 Espectro de absorción óptico

El coeficiente de absorción de transiciones ópticas en nanoestructuras responde a la siguiente proporcionalidad:[8]

$$\alpha(E) \propto \frac{1}{E} \sum_{i,f} |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if}|^2 \delta(E - E_{if}) [\rho(E_i) - \rho(E_f)]. \quad (1.45)$$

En la anterior ecuación,⁶ $|i\rangle$ y $|f\rangle$ hacen referencia al estado inicial y final de la transición respectivamente, $\vec{\varepsilon}$ es el vector polarización de la radiación electromagnética, $\vec{p}_{if} = \langle i|\vec{p}|f\rangle$ es el momento de transición, E_{if} la diferencia de energía entre los estados final e inicial, y $\rho(E_\nu)$ es la ocupación media del nivel $|\nu\rangle$. A $T = 0$ K únicamente el estado fundamental $|i\rangle = |0\rangle$ está poblado, por lo que la Ecuación 1.45 se simplifica a:

$$\alpha(E) \propto \frac{1}{E} \sum_f |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{0f}|^2 \delta(E - E_{0f}). \quad (1.46)$$

Las reglas de selección de transiciones ópticas se derivan del producto $\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{0f}$. En cristales semiconductores este producto se escribe:

$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{0f} = \vec{\varepsilon} \cdot (\langle u_0|\vec{p}|u_f\rangle \langle 0|f\rangle + \langle u_0|u_f\rangle \langle 0|\vec{p}|f\rangle). \quad (1.47)$$

En la anterior ecuación, el primer sumando se cancela para transiciones *intrabanda* (transiciones entre estados de una misma banda de energía), mientras que el segundo se cancela para transiciones *interbanda* (entre estados de distintas bandas). Basándonos en la Ecuación 1.47, en esta sección desarrollamos las expresiones del coeficiente de absorción de transiciones intrabanda e interbanda para partículas independientes.

1.4.1 Transiciones intrabanda

El coeficiente de absorción de transiciones entre estados monoeléctricos de la BC (esto es, absorción en el infrarrojo lejano o FIR), a $T = 0$ K, se puede describir por:

$$\alpha^{ee}(E) \propto \frac{1}{E} \sum_f \left(\sum_{r=x,y,z} |\varepsilon_r \langle \Psi_0^e | \hat{p}_r | \Psi_f^e \rangle|^2 \right) \delta(E - E_{0f}), \quad (1.48)$$

donde la función de onda electrónica, incluyendo grados de libertad de espín, es el producto de función envolvente por una parte periódica definida en 1.32:

$$\Psi_{n,m,J_z}^e = f_{n,m}^e(\vec{r}) |c, \frac{1}{2}, J_z\rangle. \quad (1.49)$$

⁶La Ecuación 1.45 se ha obtenido mediante un tratamiento clásico de la radiación electromagnética, por lo que no considera la emisión espontánea.

Así, el elemento de matriz del momento de transición se simplifica a:

$$\langle \Psi_0^e | \hat{p}_r | \Psi_f^e \rangle = \delta_{J_{z_0}, J_{z_f}} \langle f_0^e | \hat{p}_r | f_f^e \rangle. \quad (1.50)$$

Evitamos tener que calcular la derivada de nuestra función envolvente numérica reemplazando el operador momento de transición por el operador momento dipolar:[51]

$$\langle f_0^e | \hat{p}_r | f_f^e \rangle = \frac{im_0}{\hbar} E_{0f} \langle f_0^e | \hat{r} | f_f^e \rangle. \quad (1.51)$$

Teniendo en cuenta que, en simetría cilíndrica, la función envolvente $f_{n,m}^e(\vec{r})$ tiene la forma mostrada en la Ecuación 1.12, las tres componente del elemento de matriz del momento dipolar son (u.a.):

$$\begin{aligned} \langle f_0^e | \hat{x} | f_f^e \rangle &= \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^Z e^{i(m_f - m_0)\theta} f_0^e(\rho, z) \rho \cos \theta f_f^e(\rho, z) \rho d\rho dz d\theta = \\ &= \frac{1}{2} \delta_{m_0, m_f \pm 1} S_\rho^{0f}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

$$\begin{aligned} \langle f_0^e | \hat{y} | f_f^e \rangle &= \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^Z e^{i(m_f - m_0)\theta} f_0^e(\rho, z) \rho \sin \theta f_f^e(\rho, z) \rho d\rho dz d\theta = \\ &= \frac{1}{2i} (\delta_{m_0, m_f + 1} - \delta_{m_0, m_f - 1}) S_\rho^{0f}, \end{aligned} \quad (1.53)$$

$$\begin{aligned} \langle f_0^e | \hat{z} | f_f^e \rangle &= \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^Z e^{i(m_f - m_0)\theta} f_0^e(\rho, z) z f_f^e(\rho, z) \rho d\rho dz d\theta = \\ &= \delta_{m_0, m_f} S_z^{0f}, \end{aligned} \quad (1.54)$$

donde $S_\rho^{0f} = \iint f_0^e f_f^e \rho^2 d\rho dz$ y $S_z^{0f} = \iint f_0^e f_f^e z \rho d\rho dz$. Las Ecuaciones 1.52-1.54 contienen las reglas de selección para transiciones entre estados de electrones de conducción. Son transiciones permitidas aquellas que se producen entre un estado inicial y uno final que cumplan $\Delta m = 0, \pm 1$, sin que exista ninguna restricción en Δn .⁷ Sustituyendo las Ecuaciones 1.50-1.54 en 1.48 y asumiendo luz no polarizada ($\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z$) obtenemos:

$$\alpha^{ee}(E) \propto \sum_f \delta_{J_{z_0}, J_{z_f}} \left(\frac{1}{2} \delta_{m_0, m_f \pm 1} (S_\rho^{0f})^2 + \delta_{m_0, m_f} (S_z^{0f})^2 \right) \delta(E - E_{0f}) E_{0f}. \quad (1.55)$$

⁷Debe notarse que los potenciales confinantes de tipo parabólico sí introducen reglas de selección en Δn , [19] por lo que están perdiendo algunas transiciones permitidas por potenciales más realistas.

Para tener en cuenta la anchura finita de las bandas de transición sustituimos $\delta(E - E_{0f})$ en la ecuación anterior por una curva lorentziana. De esta manera, la expresión final del coeficiente de absorción queda:

$$\alpha^{ee}(E) \propto \sum_f \delta_{J_{z_0}, J_{z_f}} \left(\frac{1}{2} \delta_{m_0, m_f \pm 1} (S_\rho^{0f})^2 + \delta_{m_0, m_f} (S_z^{0f})^2 \right) \frac{E_{0f}}{1 + 4 \frac{E - E_{0f}}{\Gamma}}, \quad (1.56)$$

donde Γ es un parámetro fenomenológico que describe la anchura total de banda.

1.4.2 Transiciones interbanda

La función de onda de un hueco de valencia en simetría cilíndrica es:

$$\begin{aligned} \Psi_{n_h, F_z}^h(\vec{r}) &= \sum_{J_z = -3/2}^{3/2} f_{n_h, F_z, J_z}^h(\vec{r}) |v, \frac{3}{2}, J_z\rangle \\ &= \sum_{J_z = -3/2}^{3/2} e^{im_h \theta} f_{n_h, F_z, J_z}^h(\rho, z) |v, \frac{3}{2}, J_z\rangle. \end{aligned} \quad (1.57)$$

donde $m_h = F_z - J_z$ es la proyección en z del momento angular envolvente del hueco (Sección 1.1.2). Llevando las Ecuaciones 1.49 y 1.57 a 1.46 y asumiendo luz no polarizada tenemos que el coeficiente de absorción correspondiente a la transición entre un estado de valencia $|\nu\rangle = |n_h, F_z\rangle$ y uno de conducción $|\nu'\rangle = |n, m, J'_z\rangle$ (esto es, absorción en el infrarrojo cercano o NIR) cumple:

$$\alpha_{\nu\nu'}^{eh}(E) \propto \frac{1}{E} \delta(E - E_{\nu'\nu}) \left| \sum_{J_z} \langle e^{im\theta} f_{\nu'}^e(\rho, z) | e^{im_h\theta} f_\nu^h(\rho, z) \rangle \langle c, \frac{1}{2}, J'_z | \vec{p} | v, \frac{3}{2}, J_z \rangle \right|^2. \quad (1.58)$$

Integrando sobre la coordenada θ obtenemos:

$$\alpha_{\nu\nu'}^{eh}(E) \propto \frac{1}{E} \delta(E - E_{\nu'\nu}) \left| \sum_{J_z} \delta_{m, m_h} \underbrace{\langle f_{\nu'}^e(\rho, z) | f_\nu^h(\rho, z) \rangle}_{\text{integral de solape}} \underbrace{\langle c, \frac{1}{2}, J'_z | \vec{p} | v, \frac{3}{2}, J_z \rangle}_{\text{parte angular}} \right|^2. \quad (1.59)$$

De la regla de selección δ_{m,m_h} en la Ecuación 1.59 se desprende que como máximo una de las cuatro componentes de cada función de onda de huecos puede contribuir al elemento de matriz del momento de transición.

Llamamos a la primera parte de la ecuación anterior *integral de solape* y a la segunda *parte angular*. La parte angular se calcula fácilmente con ayuda de las Ecuaciones 1.32. El resultado se expresa como un coeficiente que multiplica el parámetro de Kane,[8] $\mathcal{P} = \langle S | \hat{p}_x | X \rangle, = \langle S | \hat{p}_y | Y \rangle = \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle$. La siguiente tabla resume los posibles valores:

$ c, \frac{1}{2}, J_z\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, J_z\rangle$	$ \text{parte angular} ^2$	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	\mathcal{P}^2	
$ c, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{2}{3} \mathcal{P}^2$	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$	$\frac{1}{3} \mathcal{P}^2$	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle$	0	(1.60)
$ c, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	0	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{3} \mathcal{P}^2$	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle$	$\frac{2}{3} \mathcal{P}^2$	
	$ v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle$	\mathcal{P}^2	

Si sumamos las partes angulares que resultan de acoplar los dos posibles espín-orbitales de electrones con una misma función $|v, \frac{3}{2}, J_z\rangle$ y asumimos luz no polarizada (es decir, sumamos las componentes x , y y z del momento de transición), el resultado es simplemente $|\text{parte angular}|^2 = \mathcal{P}^2$. En tal caso, el coeficiente de absorción viene dado fundamentalmente por la integral de solape (en unidades de \mathcal{P}^2):

$$\alpha_{\nu\nu'}^{eh}(E) \propto \frac{1}{E} \delta(E - E_{\nu'\nu}) S_{eh}^2 \delta_{m,m_h}, \quad (1.61)$$

donde S_{eh} es la integral de solape entre la función envolvente electrónica con proyección z del momento angular m y la componente de la envolvente de huecos asociada a $m_h = m$. Representando las transiciones por curvas lorentzianas llegamos a la expresión final:

$$\alpha_{\nu\nu'}^{eh}(E) \propto \frac{1}{E} \frac{1}{1 + 4 \frac{E - E_{\nu'\nu}}{\Gamma}} S_{eh}^2 \delta_{m,m_h}. \quad (1.62)$$

Alternativamente, podemos simular el espectro de absorción asumiendo luz polarizada en una sola dirección, p.ej. z . En dicho caso sustituimos \vec{p} por p_z en la parte angular de la Ecuación 1.59, lo cual conlleva reglas de selección más restrictivas.

1.5 Sistemas bielectrónicos

La superposición del confinamiento cuántico y la energía de interacción culómbica en sistemas nanoscópicos se manifiesta en un amplio rango de fenómenos físicos, como la posibilidad de cargar QDs partícula a partícula,[73, 74, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104] la formación de *moléculas de Wigner*,[105] la aparición de *números mágicos* del momento angular[4] y las transiciones de espín en el estado fundamental en presencia de un campo magnético.[106]

Los QDs cargados con dos electrones han sido objeto de estudio y debate por parte de numerosos autores.[106, 75, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115] Gran parte de estos trabajos ha sido realizada para QDs con forma de disco, despreciando el movimiento en la dirección de crecimiento y asumiendo un potencial confinante parabólico en el plano del punto.[18, 116] Las limitaciones de esta aproximación se han comentado en la Sección 1.2.1. En particular, las energías de interacción culómbica se determinan con un error cuantitativo apreciable, debido a la ausencia de la dimensión vertical. Además, el teorema de Kohn generalizado puede ser demasiado restrictivo, ya que pequeñas desviaciones del potencial estrictamente parabólico bastan para causar manifestaciones claras de efectos interacción culómbica.[117, 118] También el reducido número de estados ligados en QDs pequeños (p.ej. en QDs auto-ordenados) puede originar importantes discrepancias respecto a las predicciones para partículas interactuantes basadas en potenciales parabólicos bidimensionales.[98, 107] Por todo esto resulta interesante un tratamiento de la interacción electrón-electrón en un modelo tridimensional de potencial confinante realista.

La inclusión de la interacción culómbica en el estudio de la estructura energética de QDs ha sido abordada mediante una gran diversidad de aproximaciones teóricas. Entre éstas se encuentran el modelo de interacción constante (con y sin energía de intercambio), cálculos Hartree-Fock, diagonali-

zaciones numéricas de Hamiltonianos multipartícula, métodos del funcional de la densidad, cálculos Monte-Carlo y métodos CI.[6] Los métodos CI son apropiados para investigar QDs con un número reducido de electrones.⁸ En estos sistemas, los métodos CI permiten una estimación correcta de la correlación electrónica[119] (responsable de fenómenos como, por ejemplo, las transiciones espín-singulete-espín-triplete del estado fundamental[106, 113]) y una descripción realista de la estructura fina de espín.

En esta sección desarrollamos un método CI partiendo de las soluciones numéricas del Hamiltoniano monoeléctrico obtenido en secciones anteriores 1.1.1. Puesto que éstas proceden de un Hamiltoniano tridimensional con potencial confinante finito y de forma arbitraria (que podemos ajustar razonablemente a la nanoestructura estudiada), éste es el modelo más realista disponible hasta la fecha para el estudio de QDs con simetría cilíndrica cargados con dos electrones.

El Hamiltoniano de dos electrones interactuantes en simetría cilíndrica es:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ee}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{\mathcal{H}}_e(\rho_1, z_1) + \hat{\mathcal{H}}_e(\rho_2, z_2) + \hat{V}_{ee}, \quad (1.63)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_e$ es el Hamiltoniano de un electrón desarrollado en la Sección 1.1.1 y \hat{V}_{ee} es el potencial de repulsión culómbica:

$$\hat{V}_{ee} = \frac{e^2}{\epsilon r_{12}}. \quad (1.64)$$

En la ecuación anterior, e la carga del electrón ($e = -1$ en u.a.) y ϵ la constante dieléctrica efectiva del medio, que suponemos idéntica dentro y fuera del QD.⁹

La Figura 1.6 muestra las distancias entre dos cargas puntuales, expresadas en coordenadas cilíndricas. La carga 1 se encuentra en el punto $Q_1(\rho_1, z_1, \theta_1)$ y la carga 2 en $Q_2(\rho_2, z_2, \theta_2)$. Ambas cargas se hallan separadas por una distancia r_{12} . La subfigura define las distancias entre Q_1 y Q_2 en el plano $\rho\theta$. Aplicando el teorema del coseno en el triángulo de la subfigura obtenemos que:

⁸Cuando el número de partículas es elevado, la CI suele ser demasiado costosa computacionalmente.

⁹Esta aproximación es buena en QDs auto-ordenados, donde el QD y la matriz semiconductor que lo envuelve presentan valores similares de ϵ . En sistemas donde la diferencia sea notable, como en QDs coloidales, los efectos de polarización de la carga sobre la superficie del QD pueden ser importantes.[120]

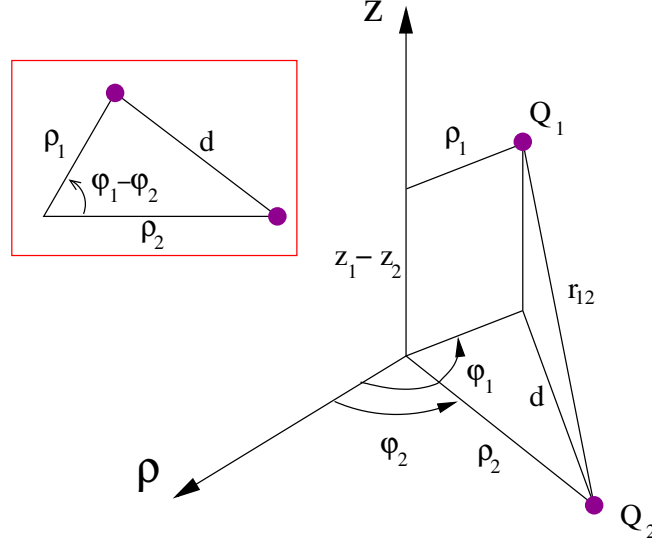


Figura 1.6: Distancias entre dos cargas puntuales, situadas en Q_1 y Q_2 , expresadas en coordenadas cilíndricas. La subfigura muestra la separación en el plano ρz .

$$d = \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2 \rho_1 \rho_2 \cos(\theta_1 - \theta_2), \quad (1.65)$$

y por tanto:

$$r_{12} = \sqrt{(z_1 - z_2)^2 + d^2} = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 + (z_1 - z_2)^2 - 2 \rho_1 \rho_2 \cos(\theta_1 - \theta_2)}. \quad (1.66)$$

El elemento de matriz de interacción coulombica, escribiendo la función de onda electrónica según las Ecuaciones 1.49 y 1.12, es:

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_1^e(\vec{r}_1) \Psi_3^e(\vec{r}_2) | \hat{V}_{ee} | \Psi_2^e(\vec{r}_1) \Psi_4^e(\vec{r}_2) \rangle = \\ & = \frac{1}{4\pi^2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} \iiint_{V_1} \iiint_{V_2} f_1^e(\rho_1, z_1) f_2^e(\rho_1, z_1) f_3^e(\rho_2, z_2) f_4^e(\rho_2, z_2) \\ & \quad \times e^{i(m_2 - m_1)\theta_1} e^{i(m_4 - m_1)\theta_2} V_{ee} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 dz_1 dz_2 d\theta_1 d\theta_2, \quad (1.67) \end{aligned}$$

donde las integrales se extienden a todo el espacio y σ_i es el espín del electrón en el estado Ψ_i^e . De la Ecuación 1.67 se infiere la conservación del espín total,

$S = \sigma_1 + \sigma_3 = \sigma_2 + \sigma_4$. Podemos reducir la integral a cinco dimensiones realizando un cambio de variables:

$$\theta_+ = \theta_1 + \theta_2, \quad \theta_+ \in (0, 4\pi), \quad (1.68)$$

$$\theta_- = \theta_1 - \theta_2, \quad \theta_- \in (0, 2\pi), \quad (1.69)$$

$$(1.70)$$

de manera que:

$$\theta_1 = \frac{1}{2}(\theta_+ + \theta_-), \quad (1.71)$$

$$\theta_2 = \frac{1}{2}(\theta_+ - \theta_-), \quad (1.72)$$

$$d\theta_1 d\theta_2 = \frac{1}{2} d\theta_+ d\theta_-, \quad (1.73)$$

donde el factor $1/2$ de la Ecuación 1.73 representa el jacobiano de la transformación de coordenadas. Con las Ecuaciones 1.68, 1.69 y 1.73 podemos reescribir el elemento de matriz:

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_1^e(\vec{r}_1) \Psi_3^e(\vec{r}_2) | \hat{V}_{ee} | \Psi_2^e(\vec{r}_1) \Psi_4^e(\vec{r}_2) \rangle = \\ & = \frac{1}{8\pi^2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} \int \int \int \int f_1^e(\rho_1, z_1) f_2^e(\rho_1, z_1) f_3^e(\rho_2, z_2) f_4^e(\rho_2, z_2) \\ & \times e^{\frac{i}{2}(m_2+m_4-m_1-m_3)\theta_+} e^{\frac{i}{2}(m_2+m_3-m_1-m_4)\theta_-} V_{ee} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 dz_1 dz_2 d\theta_+ d\theta_-. \end{aligned} \quad (1.74)$$

En la expresión anterior, la variable θ_+ se puede desacoplar del resto y se integra por separado:

$$\int_0^{4\pi} e^{\frac{i}{2}(m_2+m_4-m_1-m_3)\theta_+} d\theta_+ = \begin{cases} 0 & \text{si } (m_2 + m_4 - m_1 - m_3) \neq 0, \\ 4\pi & \text{si } (m_2 + m_4 - m_1 - m_3) = 0, \end{cases} \quad (1.75)$$

de donde se infiere que la proyección z del momento angular total se conserva, $M = m_2 + m_4 = m_1 + m_3$. El elemento de matriz de interacción culómbica, una vez integrada la coordenada θ_+ , queda:

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi_1^e(\vec{r}_1) \Psi_3^e(\vec{r}_2) | \hat{V}_{ee} | \Psi_2^e(\vec{r}_1) \Psi_4^e(\vec{r}_2) \rangle = \frac{1}{2\pi} \\
& \times \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} \delta_{m_2+m_4, m_1+m_3} \iiint \iiint f_1^e(\rho_1, z_1) f_2^e(\rho_1, z_1) f_3^e(\rho_2, z_2) f_4^e(\rho_2, z_2) \\
& \times e^{i(m_2-m_1)\theta_-} V_{ee} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 dz_1 dz_2 d\theta_-. \quad (1.76)
\end{aligned}$$

En la ecuación anterior podemos reescribir la exponencial imaginaria según la fórmula de Euler:

$$e^{i(m_2-m_1)\theta_-} = \cos(m_2 - m_1)\theta_- + i \sin(m_2 - m_1)\theta_-. \quad (1.77)$$

Al hacerlo, el elemento de matriz se descompone en una parte real asociada con $\cos(m_2 - m_1)\theta_-$ más una parte imaginaria asociada con $\sin(m_2 - m_1)\theta_-$. Además, en ambos integrandos \hat{V}_{ee} introduce una dependencia de tipo cosenoidal en el denominador (Ecuación 1.64). La integral sobre la parte imaginaria se desvanece debido a la simetría impar de la componente angular, del tipo $\sin(k\theta_-)/\cos\theta_-$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$). No sucede lo mismo con la parte real, donde la componente angular es del tipo $\cos(k\theta_-)/\cos\theta_-$. Esto se ilustra en la Figura 1.7. En ella, la línea verde muestra un ejemplo de función angular que puede aparecer en la parte imaginaria del elemento de matriz culómbico y la simetría impar es evidente. En cambio, la línea azul muestra una función angular de la parte real, cuya área neta entre 0 y 2π no es nula.

Así pues, el elemento de matriz resulta en una integral real en cinco dimensiones:

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi_1^e(\vec{r}_1) \Psi_3^e(\vec{r}_2) | \hat{V}_{ee} | \Psi_2^e(\vec{r}_1) \Psi_4^e(\vec{r}_2) \rangle = \frac{1}{2\pi} \\
& \times \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_3, \sigma_4} \delta_{m_2+m_4, m_1+m_3} \iiint \iiint f_1^e(\rho_1, z_1) f_2^e(\rho_1, z_1) f_3^e(\rho_2, z_2) f_4^e(\rho_2, z_2) \\
& \times \cos((m_2 - m_1)\theta_-) V_{ee} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 dz_1 dz_2 d\theta_-. \quad (1.78)
\end{aligned}$$

La Ecuación 1.78 es susceptible de ser integrada empleando métodos Monte Carlo, dada su multidimensionalidad y el integrando con carácter oscilatorio (pero exento de picos abruptos). El algoritmo “Vegas”[121] resulta particularmente eficiente y robusto a tal fin. Reemplazamos las integrales extendidas a todo el espacio por integrales sobre los límites del mallado de discretización del Hamiltoniano monoeléctrico (Sección 1.3). La integración Monte-Carlo requiere evaluar el integrando en puntos aleatorios que

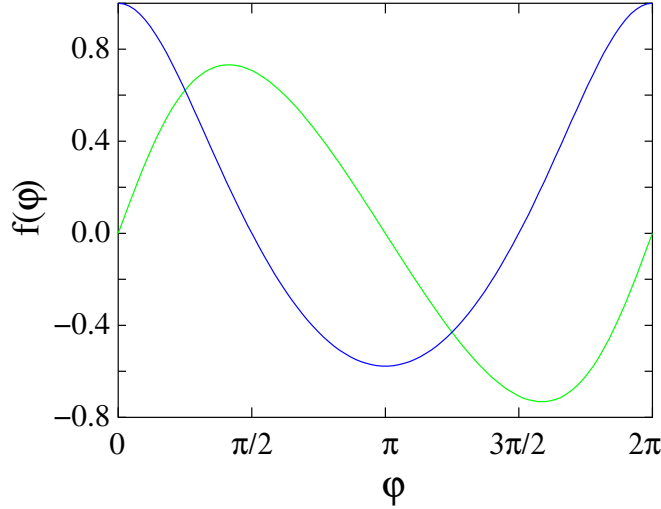


Figura 1.7: Ilustración cualitativa de la componente angular del integrando del elemento de matriz coulombico. La línea azul representa la componente de la parte real, $f(\theta) = \frac{\cos(\theta)}{\sqrt{2-\cos(\theta)}}$, y la verde la de la parte imaginaria, $f(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{2-\cos(\theta)}}$.

no tiene porqué corresponderse con un punto del mallado. Para determinar el valor de las funciones envolventes electrónicas en estos puntos interpolamos linealmente entre los valores (conocidos) de la función en los puntos del mallado más próximos.¹⁰ Siguiendo este procedimiento las energías de interacción Coulombica se estiman con errores inferiores a 0.05 meV.

La Ecuación 1.63 se proyecta en una base de determinantes de Slater,

$$\Phi_{ee}^{S,S_z,M,N}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\substack{i,j \\ \sigma_1, \sigma_2}} C_{i,j}^{S,S_z,M,N} \|\Psi_i^e(\vec{r}_1)\sigma_1(1) \Psi_j^e(\vec{r}_2)\sigma_2(2)\|, \quad (1.79)$$

donde el coeficiente $C_{i,j}^{S,S_z,M,N}$ está etiquetado por el espín total S , la proyección z del momento angular total, M , y del espín total, S_z , y el número cuántico principal N . La matriz hamiltoniana que se obtiene se diagonaliza mediante rutinas para matrices reales y simétricas implementadas en la librería LAPACK.[122]

¹⁰La interpolación polinómica de grado $n > 1$ no mejora el error cometido significativamente y sí el coste computacional.

Capítulo 2

Puntos cuánticos esféricos en un campo magnético

La síntesis de QDs en soluciones coloidales por vía de la *química húmeda* da lugar a nanocristales con geometría aproximadamente esférica y tamaños extremadamente monodispersos.[123, 124, 125] Debido a su simetría esférica, la estructura electrónica de estos nanocristales es análoga a la de átomos.[11, 126] Sus dimensiones, manipulables con gran precisión, pueden ser tan pequeñas como 2 nm de diámetro, lo que los convierte en las nanoestructuras de mayor confinamiento tridimensional.[127] Además, la flexibilidad en el proceso de síntesis permite la construcción de nanocristales formados por capas concéntricas de materiales distintos con espesor controlable. Esta posibilidad introduce un grado de libertad adicional en la ingeniería de QDs con determinadas propiedades optoelectrónicas.[30, 31, 32] Por ejemplo, la energía y la fuerza de oscilador de las transiciones ópticas pueden ajustarse por el tamaño del núcleo y de las capas externas de un nanocristal multicapa.[84, 128, 129] Todas estas características, sumadas al bajo coste del procedimiento sintético, convierten a los QDs sintetizados por vía de la química húmeda en candidatos atractivos para potenciales aplicaciones prácticas.

En el momento de comenzar esta Tesis doctoral, los primeros estudios teóricos sobre efectos de un campo magnético en la estructura energética de QDs esféricos multicapa revelaban algunos fenómenos interesantes, como la localización de estados resonantes en ausencia de campo.[130] Sin embargo, el primer estudio teórico exhaustivo de estos efectos fue realizado en una serie de tres artículos que revisamos en este capítulo. En ellos, se analiza la influencia que tiene un campo magnético axial sobre la estructura energética de

electrones y huecos en diversos tipos de nanocristales multicapa,[33, 34] así como el efecto sobre las probabilidades de transición óptica interbanda.[35]

Los electrones se estudian con un modelo $k \cdot p$ de una banda en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección z . La contribución del efecto Zeeman atómico en semiconductores es típicamente de escasos meV,[131] motivo por el que no se considera en los estudios cualitativos que componen este capítulo. Por simplicidad tomamos una masa efectiva electrónica constante e igual a la del material de menor energía de *gap* del QD. Esta aproximación es razonable porque el potencial confinante localizará la mayoría de densidad de carga en dicho material. En unidades atómicas y coordenadas cilíndricas, la ecuación de autovalores queda:

$$\left(-\frac{1}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) + \frac{Bm}{2m^*} + \frac{B^2 \rho^2}{8m^*} + \hat{V}(\rho, z) - E_{n,m} \right) f_{n,m}^e(\rho, z) = 0, \quad (2.1)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, m la proyección z del momento angular envolvente \vec{l} sobre el eje del campo magnético (B), y n el número cuántico principal. Para lograr una descripción realista de los efectos de confinamiento, utilizamos un potencial confinante espacial $\hat{V}(\rho, z)$ escalonado cuya altura viene determinada por el *band-offset* entre los materiales del QD multicapa (ver Sección 1.2.1). En ausencia de campo magnético, los estados electrónicos confinados en los QDs que estudiamos presentan simetría esférica, por lo que pueden etiquetarse por $|n, l_m\rangle$, donde n denota estados consecutivos de un mismo l .¹ Cuando se aplica un campo, la simetría esférica se rompe y sólo m es un buen número cuántico. En este capítulo construimos diagramas de energía de estados electrónicos frente al campo magnético, desde $B = 0$ (simetría esférica) hasta altos valores del campo (simetría axial). Puesto que en los diagramas existe una correspondencia biunívoca entre los estados $|n, l_m\rangle$ a campo cero y $|\tilde{n}, m\rangle$ en presencia de campo, usamos la notación de los primeros aún estando en presencia de campo.

Los estados de huecos de valencia se describen con un Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas que considera el acoplamiento entre subbandas de HH y

¹No incluimos el espín en la notación del estado electrónico porque, al no considerar el efecto Zeeman, los estados $|n, l_m, J_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$ están degenerados.

LH. Empleamos aproximación esférica ($\gamma_3 = \gamma_2 = \gamma$).² Por simplicidad, utilizamos los parámetros de Luttinger del material de menor energía de *gap* en toda la estructura multicapa. De acuerdo con la Sección 1.2.2, el término de interacción magnética se introduce únicamente en la diagonal principal del Hamiltoniano. Además, en los trabajos que componen este capítulo el término lineal de interacción magnética utiliza un momento angular promediado sobre las cuatro componentes de la función de huecos. El Hamiltoniano resultante se muestra en la Tabla 2.1.[42, 132]

Este Hamiltoniano utiliza la masa efectiva del HH (m_{HH}) o del LH (m_{LH}) como coeficiente másico para el término lineal del campo magnético. Como consecuencia, se predice la formación de estados fundamentales de huecos con valores de F_z muy negativos en nanocristales grandes a campos magnéticos fuertes. Sin embargo, en trabajos posteriores observamos que un coeficiente más adecuado para el término lineal es un promedio entre m_{HH} y m_{LH} (Sección 1.2.2). Dicho coeficiente da lugar a menores contribuciones del término lineal del campo magnético y, por tanto, prevendría la formación de estados fundamentales de huecos con F_z muy negativo. En cualquier caso, estos cambios no afectan cualitativamente al resto de fenómenos producidos por el campo magnético que describimos en las siguientes secciones.

En ausencia de un campo magnético externo, los estados de huecos pueden etiquetarse por $|n_h, Q_F, F_z\rangle$, donde Q denota el menor número cuántico angular L de la función envolvente, F es el momento angular total $\vec{F} = \vec{L} + \vec{J}$, F_z su componente z y n_h etiqueta estados consecutivos de un mismo Q_F, F_z . [133] Cuando se aplica un campo magnético externo, se rompe la simetría esférica y sólo $F_z = m_h + J_z$ es un buen número cuántico. Al igual que hacemos con los estados electrónicos, en este capítulo usamos la notación de simetría esférica para estados de huecos aún en presencia de campo magnético.

Adicionalmente, estimamos las probabilidades de transición óptica a partir de los elementos de matriz del momento de transición entre un estado electrónico y un estado de huecos, siguiendo las indicaciones de la Sección 1.4.2.

²Aunque la aplicación de un campo magnético rompe la simetría esférica, nosotros mantenemos esta aproximación para poder comparar con los resultados exactos en ausencia de campo.

$ \begin{aligned} & \frac{\gamma+1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right. \\ & \left. - \frac{(F_z - \frac{3}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{\gamma_1 - 2\gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ & - (\gamma_1 - 2\gamma) \left[\frac{(B\rho)^2}{8} + \frac{BF_z}{2} \right] \\ & + \hat{V}(\rho, z) \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & \sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} \right. \\ & \left. + \frac{F_z - \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & -\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right. \\ & \left. + \frac{F_z(F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & 0 \\ & + \frac{2(F_z + 1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \\ & + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \end{aligned} $
$ \begin{aligned} & \sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} \right. \\ & \left. - \frac{F_z - \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & \frac{\gamma_1 - \gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right. \\ & \left. - \frac{(F_z - \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{\gamma_1 + 2\gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ & - (\gamma_1 + 2\gamma) \left[\frac{(B\rho)^2}{8} + \frac{BF_z}{2} \right] \\ & + \hat{V}(\rho, z) \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & 0 \\ & + \frac{\gamma_1 - \gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right. \\ & \left. - \frac{(F_z + \frac{1}{2})^2}{\rho^2} \right] + \frac{\gamma_1 + 2\gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ & - (\gamma_1 + 2\gamma) \left[\frac{(B\rho)^2}{8} + \frac{BF_z}{2} \right] \\ & + \hat{V}(\rho, z) \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & -\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} \right. \\ & \left. + \frac{F_z + \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] \\ & - (\gamma_1 - 2\gamma) \left[\frac{(B\rho)^2}{8} + \frac{BF_z}{2} \right] \\ & + \hat{V}(\rho, z) \end{aligned} $
$ \begin{aligned} & -\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(F_z - 1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right. \\ & \left. + \frac{F_z(F_z - 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \right] \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & 0 \\ & + \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \\ & + \frac{F_z(F_z + 1) - \frac{3}{4}}{\rho^2} \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & -\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} \right. \\ & \left. - \frac{F_z + \frac{1}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] \end{aligned} $	$ \begin{aligned} & -\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} \right. \\ & \left. + \frac{F_z + \frac{3}{2}}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right] \\ & - (\gamma_1 - 2\gamma) \left[\frac{(B\rho)^2}{8} + \frac{BF_z}{2} \right] \\ & + \hat{V}(\rho, z) \end{aligned} $

Tabla 2.1: Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -EFA de cuatro bandas en coordenadas cilíndricas con un campo magnético a lo largo de z . La proyección z del momento angular total en el término lineal de interacción magnética se ha promediado sobre J_z .

2.1 Punto cuántico homogéneo

Comenzamos estudiando el caso más simple: un QD esférico constituido por un único material semiconductor y rodeado por un medio aislante, como una solución acuosa o polimérica. Modelamos esta estructura definiendo un pozo de potencial esférico:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sqrt{\rho^2 + z^2} \leq R, \\ 4 \text{ eV} & \text{si } \sqrt{\rho^2 + z^2} > R, \end{cases} \quad (2.2)$$

donde R es el radio del nanocrystal. Asumimos una barrera de 4 eV porque éste es aproximadamente el valor de la electroafinidad de la mayoría de semiconductores.

2.1.1 Electrones

Tomamos InAs como material del QD. La masa efectiva del electrón en dicho material es la más baja de todos los compuestos binarios semiconductores, $m^* = 0.024$ (unas 41 veces menor que la masa del electrón libre), lo que lo hace particularmente sensible a campos magnéticos externos.

La Figura 2.1 muestra los niveles de energía más bajos de un electrón en un nanocrystal de radio $R = 3$ nm en presencia de un campo magnético creciente.³ La Figura 2.2 ilustra las correspondientes funciones de onda a $B = 0$. Ambas figuras revelan que, en ausencia de campo magnético, los niveles energéticos muestran las degeneraciones y distribuciones de carga propias de simetría esférica, en clara analogía con los niveles atómicos. La dependencia de los niveles energéticos respecto del campo magnético en QDs pequeños como el de la Figura 2.1 es, al igual que sucede en átomos, casi exclusivamente lineal incluso a campos tan grandes como 100 T. El término lineal del campo magnético rompe las degeneraciones de $B = 0$ de manera similar al efecto Zeeman atómico, con la proyección z del momento angular envolvente, m , supliendo el papel del espín atómico. Los estados con $m < 0$ se estabilizan energéticamente mientras los estados con $m > 0$ se inestabilizan.

Contrariamente, en QDs de mayor tamaño la componente cuadrática del campo magnético es visible incluso a campos magnéticos accesibles en el laboratorio. Esto se puede observar en la Figura 2.3, que representa

³En los diagramas de energía de estados electrónicos que se muestran en este capítulo, el cero de la escala de energía está definido por el tope de la barrera energética, de modo que los niveles con energía $E < 0$ están ligados.

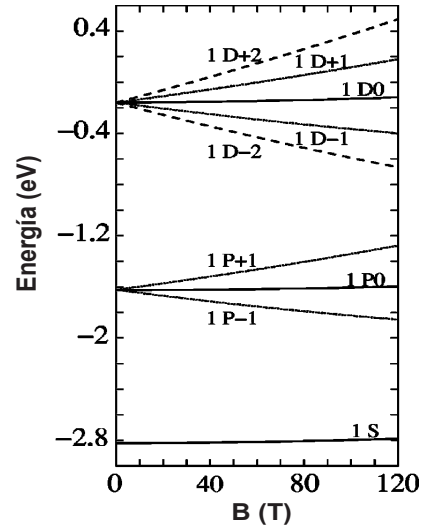


Figura 2.1: Niveles de energía nl_m de un electrón en un nanocristal de InAs con radio $R = 3$ nm frente a un campo magnético.[33]

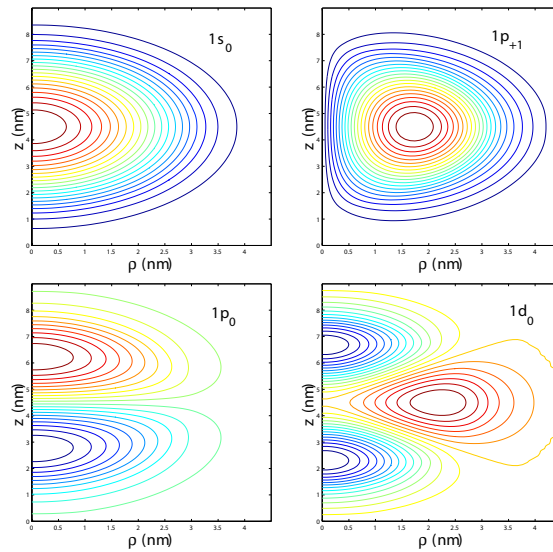


Figura 2.2: Curvas de nivel de las funciones de onda correspondientes a los estados electrónicos más bajos en un nanocristal de InAs con radio $R = 3$ nm a $B=0$ T.

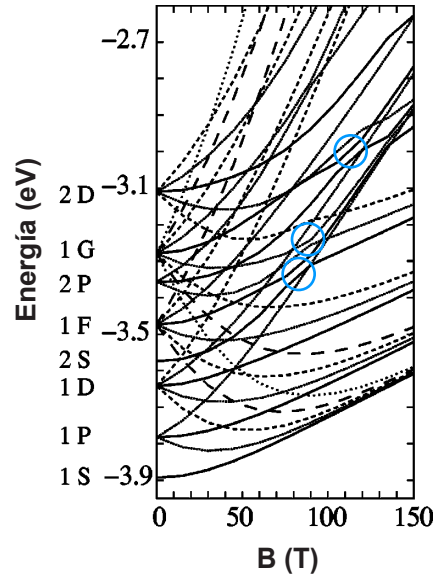


Figura 2.3: Niveles de energía nl_m de un electrón en un nanocristal de InAs con radio $R = 11.5$ nm frente a un campo magnético. Los círculos azules señalan algunos cruzamientos evitados.[33]

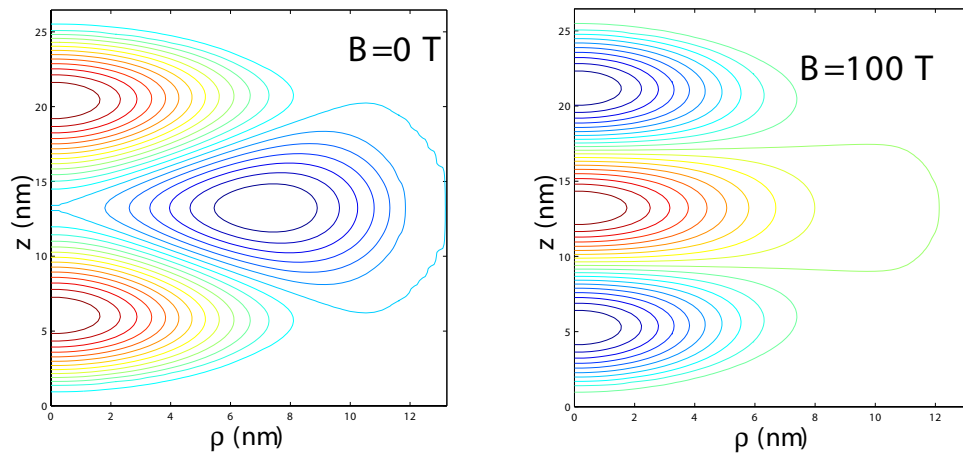


Figura 2.4: Curvas de nivel de la función de onda correspondiente al estado electrónico $1d_0$ en un nanocristal de InAs con radio $R = 11.5$ nm a $B=0$ T (izquierda) y $B=100$ T (derecha).

el espectro energético de un electrón en un nanocristal de InAs con radio $R = 11.5$ nm. En ella, el efecto de la componente cuadrática sobre los niveles energéticos es notable desde valores pequeños del campo magnético, y a campos magnéticos muy fuertes ($B > 100$ T) comienzan a formarse los llamados *niveles de Landau*.⁴ Además, los estados que a $B = 0$ presentan distinto número de nodos por pertenecer a diferentes simetrías esféricas (l) evolucionan de manera diferente frente al campo magnético. Esto da lugar a cruzamientos evitados en la Figura 2.3 (círculos azules en la figura).

La componente cuadrática del campo magnético comprime la densidad electrónica en la dirección perpendicular al eje de aplicación del campo. En el límite de los niveles de Landau, la densidad electrónica se encuentra completamente comprimida en un pozo de potencial unidimensional en z . La Figura 2.4 ilustra la compresión de la función de onda para el estado electrónico $1d_0$ en el nanocristal de $R = 11.5$ nm.

El que la componente cuadrática del campo magnético afecte significativamente a un estado electrónico o no viene determinado por la razón ρ_0/r_{max} , donde $\rho_0 = [(2|m| + 1)(\hbar/eB)]^{1/2}$ es el radio del máximo de densidad de carga en el nivel de Landau más bajo, y r_{max} es el máximo de la densidad de carga del estado electrónico en cuestión.[134] Si $\rho_0/r_{max} > 1$ los efectos del término cuadrático no son importantes, y viceversa. A $B = 100$ T, $\rho_0 = 2.4$ nm. Por tanto, en nanocristales de $R = 3$ nm, donde el estado fundamental presenta $r_{max} \approx 1.5$ nm, la compresión de la función de onda por parte del campo magnético es despreciable. Lo contrario sucede en nanocristales de $R = 11.5$ nm, donde $r_{max} \approx 10$ nm y los efectos del término cuadrático de la interacción magnética son relevantes.

2.1.2 Huecos

Los parámetros de Luttinger para huecos en InAs son $\gamma_1 = 19.7$ y $\gamma = 8.4$, [135] y las correspondientes a masas efectivas $m_{HH}^* = 0.345$ y $m_{LH}^* = 0.027$. La Figura 2.5 representa los niveles energéticos más bajos de huecos en un nanocristal de InAs con radio $R = 3$ nm.⁵ En ausencia de campo

⁴En ausencia de potencial confinante espacial, el movimiento de un gas bidimensional de electrones independientes bajo la influencia de un campo magnético uniforme axial da lugar a estados energéticamente equiespaciados (niveles de Landau). Las funciones de onda de estos estados pueden escribirse en términos de polinomios de Hermite debido a que el Hamiltoniano del sistema tiene la forma del Hamiltoniano del oscilador armónico (ver, p.ej. Refs.[8] p.317, y [134]).

⁵En los diagramas de energía de estados de huecos que se muestran en este capítulo, el cero de la escala de energía está establecido en el tope de la BV. Además, las energías se han definido con signo contrario a las de electrones, de modo que los estados con $E > -4$

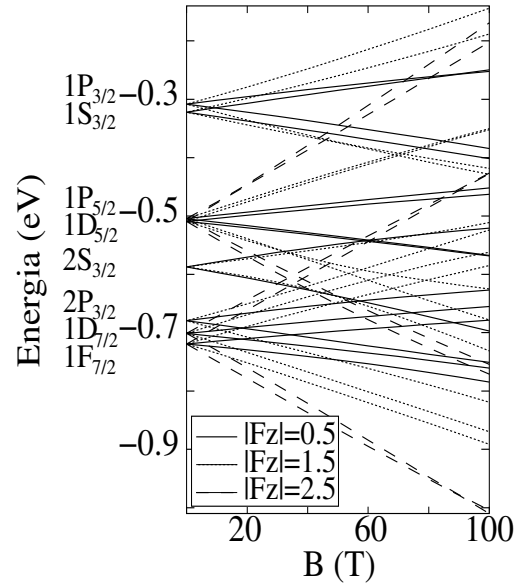


Figura 2.5: Niveles de energía $n_h Q_F$, F_z de un hueco en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm frente a un campo magnético.[132]

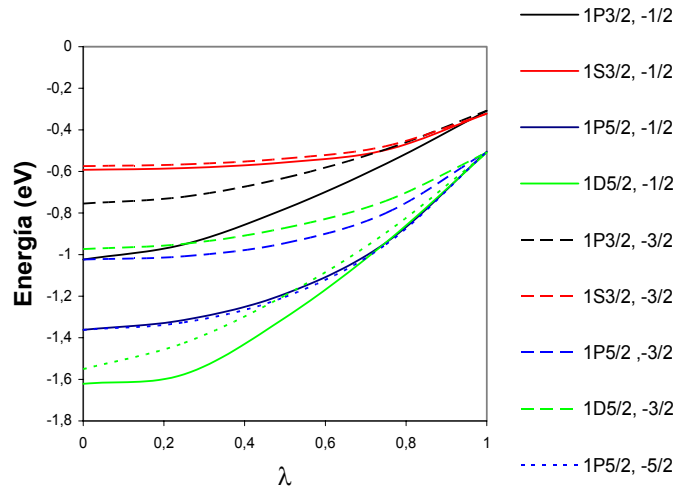


Figura 2.6: Niveles de energía $n_h Q_F$, F_z de un hueco en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm en función del grado de acoplamiento HH/LH.

magnético, el estado fundamental de huecos es $1P_{3/2}$, mientras que el de electrones es $1s_0$ (Figura 2.1). Como consecuencia, la transición fundamental entre electrones de conducción y huecos de valencia no cumple la regla de selección $\delta_{l,L}$ (es decir, corresponde a un *excitón oscuro*).

Es interesante notar que, de no haber considerado el acoplamiento entre subbandas de HH y LH, el estado fundamental de huecos a $B = 0$ hubiera sido $1S_{3/2}$ y por tanto las transiciones ópticas predichas serían erróneas. Para visualizar el impacto del acoplamiento entre subbandas sobre los niveles energéticos, escribimos el Hamiltoniano de cuatro bandas de huecos como una suma de dos matrices, una que contiene los elementos diagonales de la Tabla 2.1 y otra que contiene los elementos extradiagonales (términos de acoplamiento). Multiplicamos la segunda matriz por un parámetro λ , cuyo valor puede establecerse desde cero (elimina los términos de acoplamiento) hasta uno (el acoplamiento es completo). Calculamos entonces los niveles de huecos más bajos en un nanocrystal de InAs con radio $R = 3$ nm, en ausencia de campo magnético, como una función de λ . Los resultados, que se ilustran en la Figura 2.6, evidencian la necesidad de utilizar un Hamiltoniano multibanda para huecos.

La respuesta de los niveles energéticos de huecos al campo magnético es, como en el caso de electrones, casi exclusivamente lineal. Esto se debe a que, incluso para $F_z = 1/2$, $\rho_0 = [(2|F_z|+1)(\hbar/eB)]^{1/2}$ a $B = 100$ T es mayor que el radio del nanocrystal. El término lineal del campo magnético rompe las degeneraciones de $B = 0$ de manera similar al efecto Zeeman atómico, con F_z supliendo el papel del espín atómico. Los estados con $F_z < 0$ se estabilizan energéticamente y los de $F_z > 0$ se inestabilizan. Una diferencia respecto al espectro de estados electrónicos es que la magnitud del desdoblamiento de los niveles de huecos en un campo magnético no depende sólo del valor de F_z . Por ejemplo, la separación energética entre $(1S_{3/2}, +3/2)$ y $(1S_{3/2}, -3/2)$ es menor que la separación entre $(1P_{5/2}, +3/2)$ y $(1P_{5/2}, -3/2)$. El motivo es que el campo magnético altera el acoplamiento entre subbandas de HH y LH *con distinta fuerza para distintos niveles energéticos*.

Debido al acoplamiento entre HH y LH, la densidad de carga de los estados de huecos no muestra la distribución típica de un estado con simetría esférica L , sino una mezcla de las funciones envolventes de las componentes con $J_z = 3/2$ a $J_z = -3/2$. Ahora bien, las componentes por separado sí tienen una simetría L definida. Esto se ilustra en la Figura 2.7, donde se representa la densidad de carga (izquierda) y las funciones envolventes de las cuatro componentes (derecha) de un estado de huecos $(1P_{3/2}, 1/2)$. Mientras

eV están ligados.

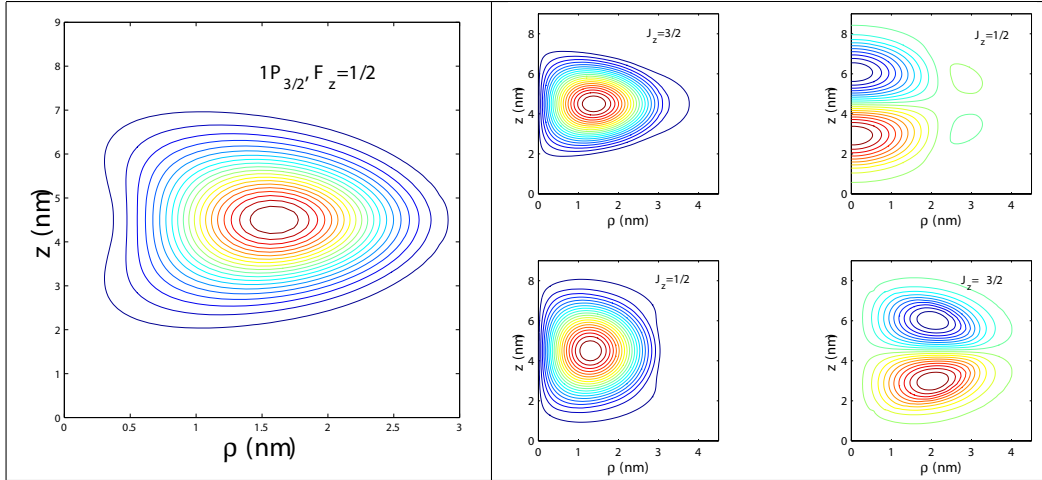


Figura 2.7: Curvas de nivel de la densidad de carga (izquierda) y de las funciones envolventes de las componentes $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ (derecha) del estado de huecos $1P_{3/2}, 1/2$.

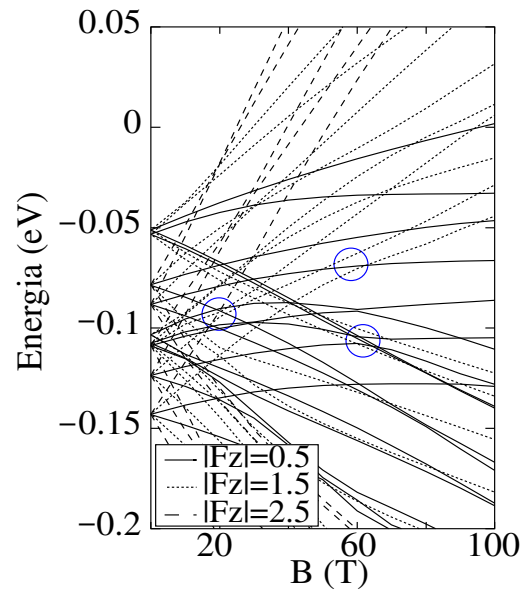


Figura 2.8: Niveles de energía n_h, Q_F, F_z de un hueco en un nanocrystal de InAs con radio $R = 8$ nm frente a un campo magnético. Los círculos azules señalan algunos cruzamientos evitados.[34]

la densidad de carga no se corresponde claramente con ninguna función orbital atómica, las funciones de onda de las componentes se corresponden con orbitales $1p_{-1}$ ($J_z = 3/2$), $1p_z$ ($J_z = 1/2$), $1p_{+1}$ ($J_z = -1/2$) y $1f_{+2}$ ($J_z = -3/2$).

La Figura 2.8 muestra los niveles energéticos más bajos de huecos en un nanocrystal de InAs con radio $R = 8$ nm. El aumento de tamaño del QD cambia la ordenación energética a $B = 0$ respecto al nanocrystal de $R = 3$ nm (por ejemplo, el estado fundamental a $B = 0$ es ahora $1S_{3/2}$).[63]

Para los niveles con $F_z = \pm 1/2$ el término cuadrático del campo magnético es significativo incluso a campos magnéticos accesibles en el laboratorio. En cambio, para los niveles con $F_z = \pm 5/2$ el término lineal predomina en todo el rango de campo magnético estudiado.

Al igual que sucede en el caso de electrones en el nanocrystal grande, los estados de huecos que a $B = 0$ presentan distintas simetrías esféricas (Q_F) evolucionan de manera diferente frente al campo magnético, lo cual da lugar a cruzamientos evitados (círculos azules en la Figura 2.8).

2.1.3 Transiciones interbanda

En la Figura 2.9 se representan las transiciones ópticas calculadas entre los estados más bajos de electrones y huecos de un nanocrystal de InAs con $R = 3$ nm. De abajo a arriba, los campos magnéticos considerados son $B = 0, 10, 20, 30$ y 40 T. Puesto que la densidad de estados de huecos es mucho mayor que la de electrones, calculamos las transiciones entre el estado $1s$ de electrones y los cinco estados más bajos de huecos: $1P_{3/2}$, $1S_{3/2}$, $1P_{5/2}$, $1D_{5/2}$, y $2S_{3/2}$.

En ausencia de campo, la regla de selección δ_{m,m_h} (Ecuación 1.59) debe complementarse con la regla de selección de simetría esférica, $\delta_{l,L}$. [136] Así pues, sólo las transiciones $1s \leftarrow 1S_{3/2}$ y $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ están permitidas. Cuando se aplica un campo magnético, la degeneración entre estados $nS_{3/2}$ y $F_z = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ se rompe y cada una de las transiciones permitidas a $B = 0$ se desdobra en cuatro ramas. Debido al comportamiento lineal de los niveles de electrones y huecos en el nanocrystal de $R = 3$ nm, todas las ramas evolucionan linealmente frente al campo magnético. Es interesante notar que incluso en campos magnéticos fuertes, las únicas transiciones con intensidad apreciable son aquellas que cumplen la regla de selección de simetría esférica. En la Figura 2.9 sólo se observan desviaciones esta regla por la aparición de señales muy débiles, como la correspondiente a la transición $1s \leftarrow (1P_{5/2}, 3/2)$ a $B = 40$ T, indicada con una flecha.

La Figura 2.10 muestra la región de baja energía del espectro de transi-

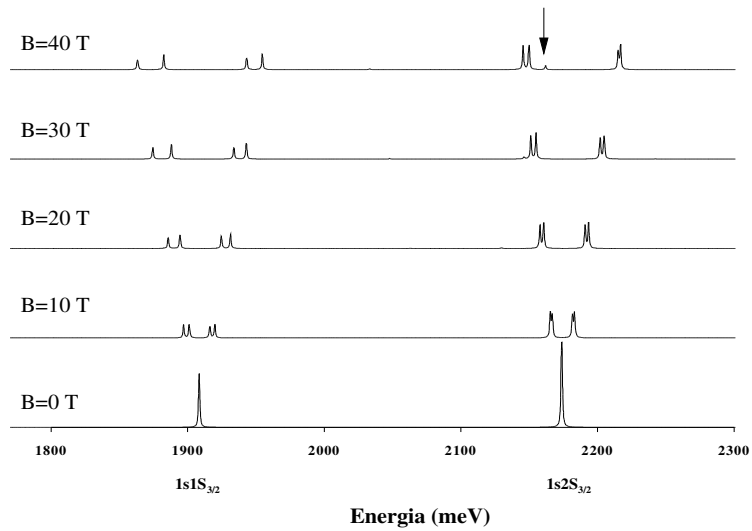


Figura 2.9: Momentos de transición en la región de baja energía del espectro magneto-óptico NIR de un nanocristal de InAs con $R = 3$ nm. Las transiciones a $B = 0$ se han etiquetado explícitamente. La flecha señala la resonancia correspondiente a la transición $1s \leftarrow (1P_{5/2}, 3/2)$. El espectro se ha modelado representando las transiciones con curvas Lorentzianas de amplitud media 1 meV.[35]

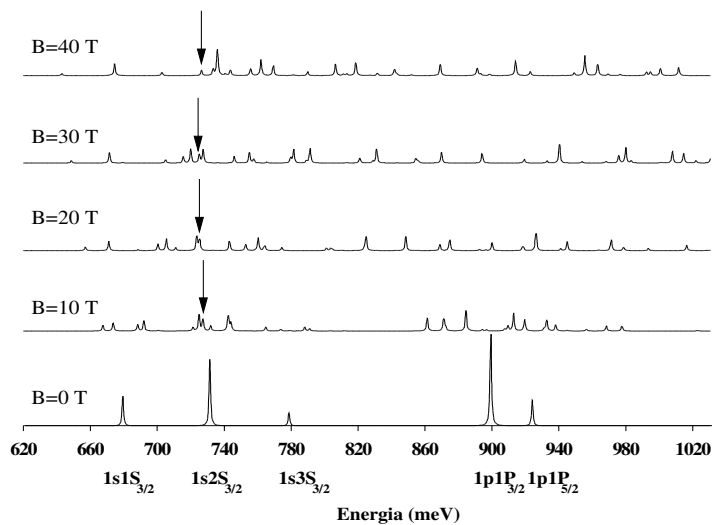


Figura 2.10: Como la Figura 2.9, pero para $R = 8$ nm. Las flechas señalan las resonancias correspondientes a la transición $1s \leftarrow (1D_{7/2}, -3/2)$. [35]

ciones magneto-ópticas electrón-hueco en un nanocristal de InAs con $R = 8$ nm. El mayor tamaño del QD que en el caso anterior da lugar a una densidad de estados más elevada. Como consecuencia, al aplicar un campo magnético se entremezclan señales procedentes de diferentes transiciones permitidas en ausencia de campo. Los cruzamientos evitados entre niveles de huecos implican un intercambio de funciones de onda entre los niveles implicados. Esto se refleja en el espectro magneto-óptico como un intercambio de intensidad entre diferentes transiciones. De esta manera, transiciones que violan la regla de selección $\delta_{l,L}$ pueden alcanzar intensidades significativas en presencia de un campo magnético. Por ejemplo, los estados de huecos ($2S_{3/2}, -3/2$) y ($1D_{7/2}, -3/2$) experimentan un cruzamiento evitado a $B = 10$ T. Así, la transición $1s \leftarrow (1D_{7/2}, -3/2)$ (indicada con flechas en la figura) crece en intensidad a expensas de $1s \leftarrow (2S_{3/2}, -3/2)$, que se vuelve débil. Excepto por los cruzamientos evitados, la Figura 2.10 confirma que las transiciones permitidas en ausencia de campo siguen siendo las más intensas a campos altos también en nanocristales de gran tamaño.

2.2 Punto cuántico-barrera cuántica

En esta sección estudiamos QDs esféricos formados por tres capas concéntricas. La capa interior (núcleo) está formada por InAs, la intermedia por un material de mayor energía de *gap* (GaAs o InP) y la exterior de nuevo por InAs. Debido a su mayor energía de *gap*, el material intermedio actúa como una barrera de potencial. Por este motivo la estructura recibe el nombre de punto cuántico-barrera cuántica (QDQB). La Figura 2.11 muestra un esquema de la estructura investigada y el perfil de la estructura de bandas correspondiente.

Investigamos los niveles de energía de un electrón en dos QDQBs diferentes. En ambos casos el radio de la capa interior es de 7 nm y el espesor de la capa intermedia es de 1 nm. Sin embargo, cambiamos el espesor de la capa externa para estudiar su influencia sobre la estructura energética. En la Figura 2.12 se representan los niveles de energía para un QDQB con una capa exterior de InAs de 2 nm (izquierda) y de 3.5 nm (derecha). Debido a la similitud en el tamaño total, los espectros son relativamente parecidos al del nanocristal homogéneo de $R = 11.5$ nm (Figura 2.3).

En ausencia de campo magnético, el cambio de tamaño de la capa exterior produce un reordenamiento de algunos niveles energéticos ($1D$, $2S$ y $1F$, $2P$).⁶ Los cambios se deben a la estabilización que experimentan los

⁶Esta dependencia del orden de los estados con respecto al tamaño de la capa ex-

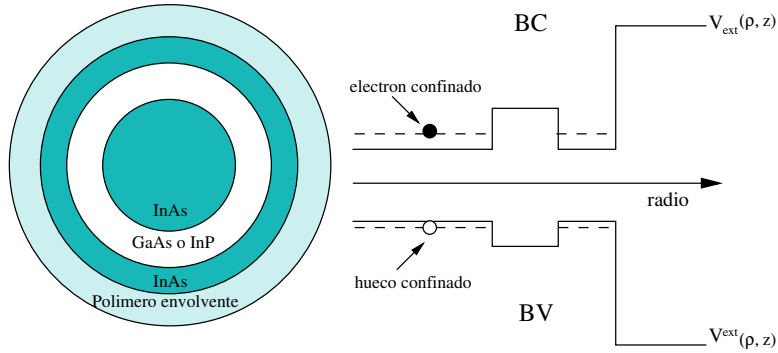


Figura 2.11: Esquema de la estructura de capas (izquierda) y del perfil de las bandas de conducción y de valencia (derecha) de un punto cuántico-barrera cuántica. Las líneas discontinuas representan un estado ligado de electrones (BC) y uno de huecos (BV).

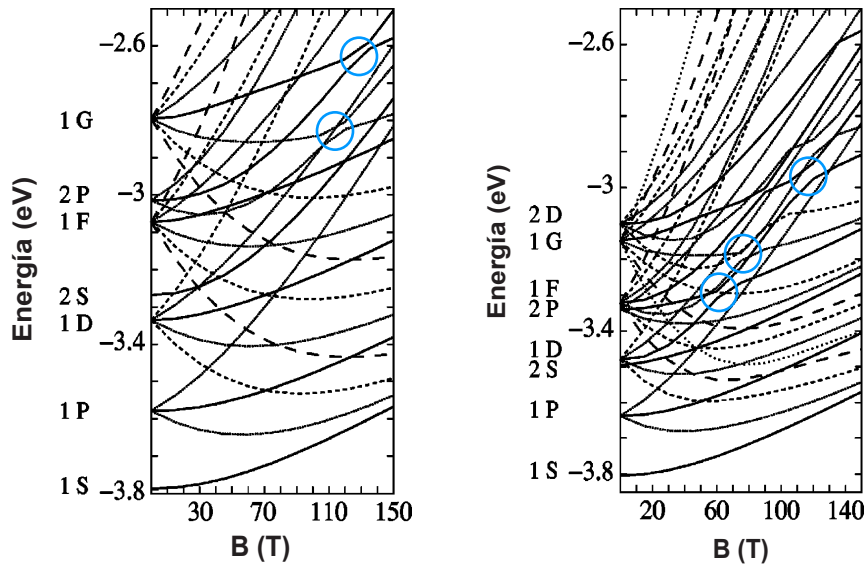


Figura 2.12: Niveles de energía $n l_m$ de un electrón en un QDQB de InAs(7 nm)/GaAs(1 nm)/InAs(2 nm) (izquierda) y de InAs(7 nm)/GaAs(1 nm)/InAs(3.5 nm) (derecha) frente a un campo magnético. Los círculos azules señalan algunos cruzamientos evitados.[33]

estados con nodos radiales ($2S$ y $2P$) al disponer de más espacio en la capa externa para depositar la carga posterior al nodo. Además, los estados con nodo radial presentan mayores valores de r_{max} , por lo que son más sensibles al término magnético cuadrático del Hamiltoniano que los estados sin nodo radial. Consecuentemente, los estados estabilizados $2S$ y $2P$ originan un número elevado de cruzamientos evitados en la región espectral de baja energía del electrón en el QDQB con capa externa larga (círculos azules en la Figura 2.12).

Algunos estados excitados presentan mucha densidad de carga en la capa externa a $B = 0$. En estos casos, cuando un campo magnético externo comprime la densidad de carga en la dirección radial, la densidad de carga salta la barrera de potencial constituida por la capa intermedia. Este efecto se ilustra en la Figura 2.13, donde se muestra la densidad de carga del estado electrónico $1F_3$ a campos magnéticos $B = 0$ T (izquierda), $B = 50$ T (centro) y $B = 100$ T (derecha). Se observa que la aplicación del campo hace saltar el máximo de densidad de carga de la capa exterior a la interior del punto.⁷ Estos saltos pueden utilizarse para modificar la intensidad de absorción de transiciones magneto-ópticas (como comentaremos más adelante en esta sección) o la fuerza de enlace entre QDs próximos.

Los estados de huecos de valencia en un QDQB presentan un comportamiento similar al que hemos descrito para electrones de conducción: reordenación de niveles según el tamaño de la capa externa, cruzamientos evitados entre estados con la misma simetría esférica y saltos de carga de la capa externa a la interna.[34]

Los efectos del campo magnético sobre el espectro magneto-óptico de un QDQB se pueden observar en la Figura 2.14, donde se representa la región de baja energía del espectro magneto-óptico de un nanocrystal de InAs (7 nm)/InP (1 nm)/InAs (3.5 nm). Como en el caso del QD homogéneo grande, el débil confinamiento lleva a una elevada densidad espectral.

A primera vista, el espectro de la Figura 2.14 es parecido al del QD con $R = 11.5$ nm (Figura 2.10). Sin embargo, la barrera de InP origina algunas diferencias interesantes. En primer lugar, a $B = 0$ la transición $1s \leftarrow 2P_{3/2}$ aparece energéticamente muy próxima a la $1s \leftarrow 1P_{5/2}$. Esto es debido a la estabilización de los niveles con nodo radial mencionada anteriormente. En segundo lugar, la transición $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ es muy débil mientras que la $1s \leftarrow 3S_{3/2}$ es muy fuerte (en un QD homogéneo la situación es precisamente

terna de un QDQB ya fue observada teóricamente con anterioridad en un sistema CdS/ZnS/CdS.[137]

⁷En QDQBs con núcleos más grandes que el investigado en esta sección, estos saltos podrían observarse a campos magnéticos accesibles en el laboratorio.

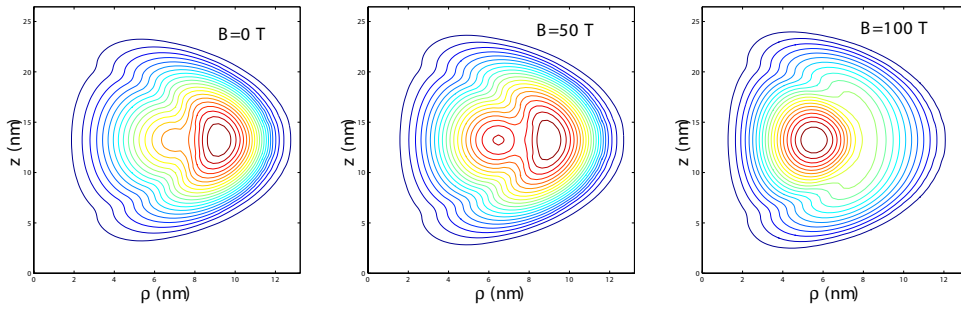


Figura 2.13: Curvas de nivel de la densidad de carga del estado electrónico $1F_3$ en el QDQB largo. De izquierda a derecha, los campos magnéticos son $B = 0, 50$ y 100 T. La barrera de GaAs se encuentra entre 7 y 8 nm.[33]

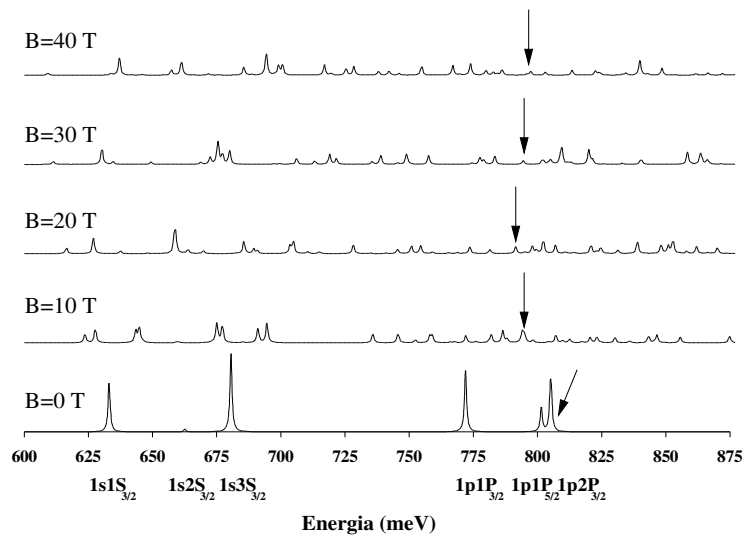


Figura 2.14: Como la Figura 2.9 pero para un QDQB de InAs (7 nm)/InP (1 nm)/InAs (3.5 nm). Las flechas señalan las resonancias correspondientes a la transición $1p_0 \leftarrow (2P_{3/2}, -1.5)$. [35]

la opuesta. Este cambio se debe a las modificaciones que la barrera de InP introduce sobre la densidad de carga de los estados involucrados, puesto que el momento de transición (Ecuación 1.59) es proporcional al solape entre el estado electrónico ($1s$) y el de huecos ($nS_{3/2}$). La Figura 2.15 ilustra el perfil de la función de onda a $B = 0$ del estado $1s$ de electrones y los estados $1S_{3/2}$, $2S_{3/2}$ y $3S_{3/2}$ de huecos. En la fila superior, éstas se muestran para un QD homogéneo y en la fila inferior para un QDQB. Puede observarse que la barrera de InP (región sombreada en la fila inferior) introduce cambios importantes en la distribución de carga.

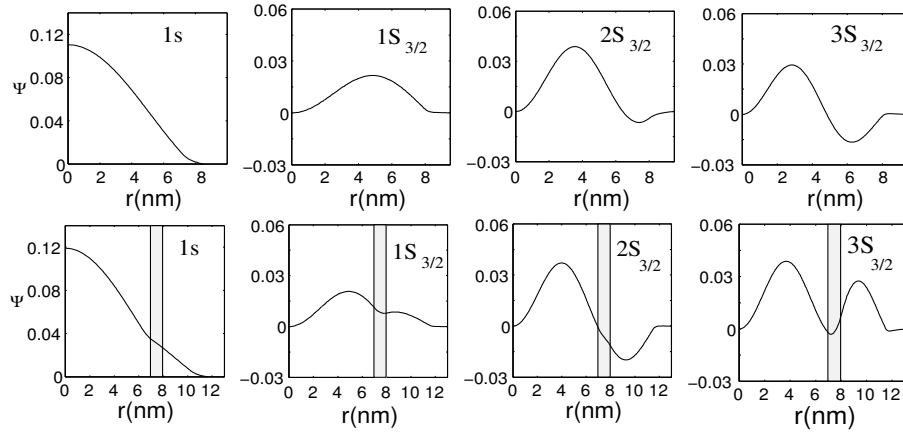


Figura 2.15: Funciones de onda del estado $1s$ de un electrón y de los estados de huecos $1S_{3/2}$, $2S_{3/2}$ y $3S_{3/2}$ (arriba) en un QD homogéneo de $R = 8$ nm y (abajo) en un QDQB InAs (7 nm)/InP (1 nm)/InAs (3.5 nm). La zona sombreada indica la región de la barrera de potencial.

Otra diferencia entre el espectro de QDQB y QD homogéneo es la producida por el salto de densidad de carga desde la capa externa a la interna en presencia de un campo magnético. En la región espectral que estudiamos sólo los estados de huecos llegan a experimentar este efecto. Por ello, el salto de carga conlleva una disminución de la integral de solape, que a su vez implica una menor intensidad de transición. Un ejemplo de este hecho puede observarse en la transición $1p_0 \leftarrow (2P_{3/2}, -1.5)$ (señalada con flechas en la Figura 2.14), la cual decrece progresivamente en intensidad al aumentar el campo magnético.

2.3 Punto cuántico-pozo cuántico

En esta sección estudiamos un QD esférico formado por tres capas concéntricas. La capa interior está formada por GaAs (o InP), la intermedia por InAs y la exterior de nuevo por GaAs (InP). Debido a su menor energía de *gap*, el material intermedio actúa como un pozo de potencial. Por este motivo la estructura recibe el nombre de punto cuántico-pozo cuántico (QDQW). La Figura 2.16 muestra un esquema de la estructura investigada y el perfil de la estructura de bandas correspondiente.

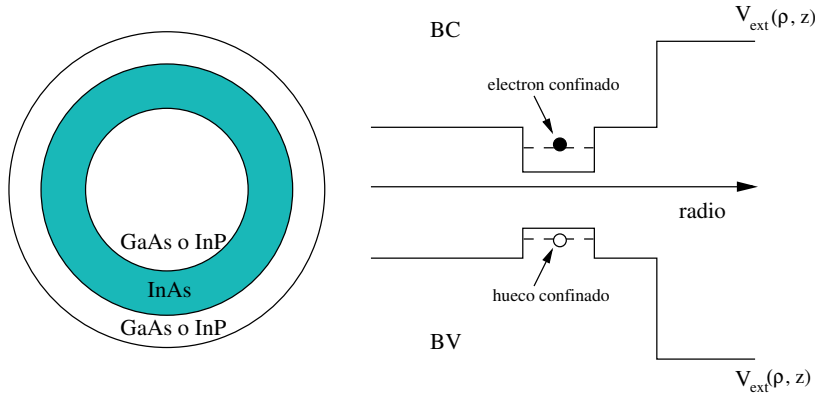


Figura 2.16: Esquema de la estructura de capas (izquierda) y del perfil de las bandas de conducción y de valencia (derecha) de un punto cuántico-pozo cuántico. Las líneas discontinuas representan un estado ligado de electrones (BC) y uno de huecos (BV).

Los niveles de energía de un electrón (hueco) en un QDQW de GaAs (8 nm)/InAs (2 nm)/GaAs (2 nm) (InP (8 nm)/InAs (2 nm)/InP (2 nm)) se representan en la Figura 2.17 (Figura 2.18).

En ausencia de campo magnético, los estados con nodo radial de electrones ($n > 1$) y de huecos ($n_h > 1$) se encuentran más excitados que en las estructuras estudiadas en secciones anteriores. Esto es debido a que el nodo radial obliga a depositar parte de la densidad de carga en la capa externa de la estructura. En un QDQB, esta capa tiene una energía de *gap* elevada, lo que justifica la desestabilización energética. En la Figura 2.19 se ilustra este efecto comparando la densidad de carga de los estados de huecos $1S_{3/2}$ y $2S_{3/2}$ en ausencia de campo magnético.

La Figura 2.17 muestra que la aplicación de un campo magnético induce

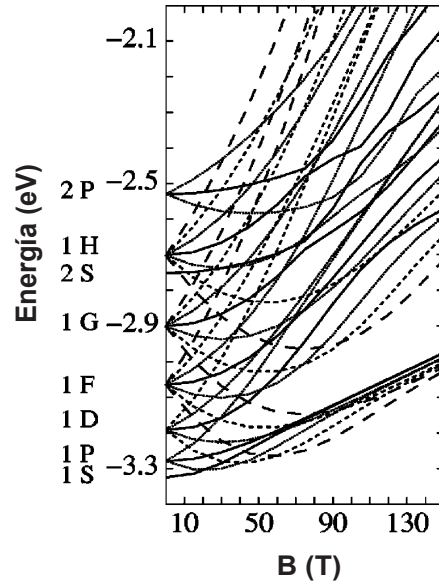


Figura 2.17: Niveles de energía nl_m de un electrón en un QDQW de GaAs(8 nm)/InAs(2 nm)/GaAs(2 nm) frente a un campo magnético.[33]

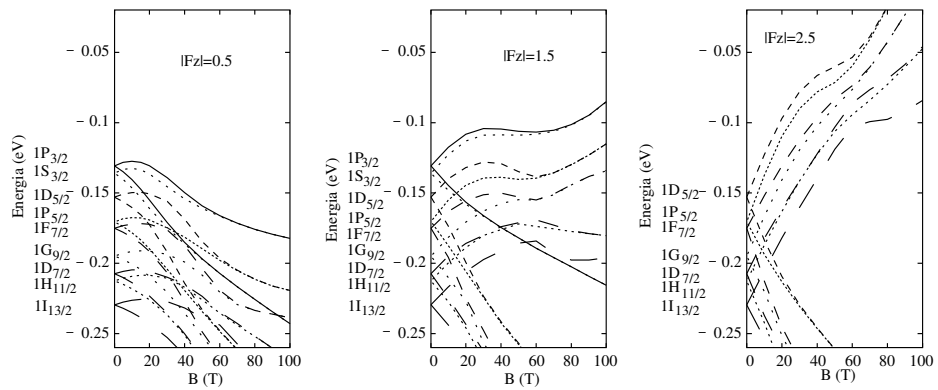


Figura 2.18: Niveles de energía $n_l Q_F$ de un hueco en un QDQW de InP(8 nm)/InAs(2 nm)/InP(2 nm) frente a un campo magnético. El panel izquierdo muestra estados con $F_z = \pm 1/2$, el central con $F_z = \pm 3/2$ y el derecho con $F_z = \pm 5/2$. [34]

cambios sucesivos en la simetría del estado fundamental electrónico, que de esta manera describe oscilaciones energéticas en clara analogía con el efecto Aharonov-Bohm de anillos cuánticos (ver Capítulo 4). A $B = 0$ la simetría del estado fundamental es $1s_0$, a $B \approx 20$ T cambia a $1p_{-1}$, a $B \approx 40$ T cambia a $1d_{-2}$, etc... Un análisis detallado de estas oscilaciones revela que son aperiódicas, lo cual es debido a la penetración del campo magnético en la región donde se localiza la densidad electrónica. Las oscilaciones energéticas se saturan al formarse los niveles de Landau.

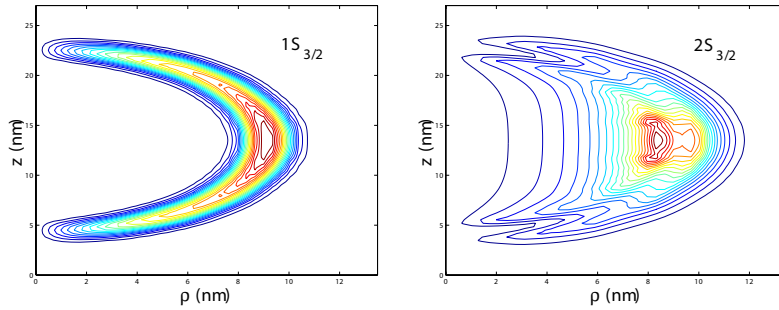


Figura 2.19: Curvas de nivel de la densidad de carga de los estados $1S_{3/2}$ y $2S_{3/2}$ en un QDQW.[34]

En el caso de huecos (Figura 2.18), el campo magnético también induce cambios en la simetría del estado fundamental. Sin embargo, el término lineal de la interacción magnética tiende a predominar sobre el cuadrático. Como consecuencia, la energía de los estados con $F_z \leq -3/2$ se estabiliza linealmente en campos magnéticos fuertes (notar, por ejemplo, el punto de inflexión del estado más bajo de energía con $F_z = -3/2$ a $B \approx 70$ T). La fuerte contribución del término lineal del campo magnético es responsable de que los cambios de simetría del estado fundamental de huecos en un QDQW no se produzcan de unidad en unidad de F_z . [34] Ahora bien, como se comentó en la introducción del presente capítulo, el peso relativo del término lineal en el modelo empleado para estos cálculos podría estar sobrestimado. Por lo tanto, el detalle fino de los cambios de simetría del estado fundamental de huecos no debe tomarse como completamente definitivo.

Otro aspecto interesante de los espectros de electrones y de huecos en un QDQW es que los dos primeros niveles de cada simetría m (para electrones) o F_z (para huecos) convergen con campos magnéticos crecientes, de manera que están casi degenerados a campos magnéticos altos. Este hecho puede

observarse en la Figura 2.17 para los estados electrónicos $1s_0$ y $1p_0$, para $1p_{-1}$ y $1d_{-1}$, etc. En la Figura 2.18 se observa para los estados de huecos $(1P_{3/2}, -1/2)$ y $(1S_{3/2}, -1/2)$, para $(1P_{3/2}, -3/2)$ y $(1S_{3/2}, -3/2)$, etc. A fin de entender este efecto, en la Figura 2.20 se ilustran las funciones de onda del par de estados electrónicos $1s_0$ y $1p_0$ a $B = 0$ y $B = 100$ T. A $B = 0$, el estado $1p_0$ tiene la misma simetría que el orbital atómico p_z . El campo magnético tiende a comprimir la función de onda pero, debido al confinamiento espacial ejercido por la barrera interna de GaAs, la carga se distribuye finalmente en dos partes. Cada una de las partes se concentra alrededor de un punto de corte (inferior o superior) del eje z con la capa de InAs. Lo mismo sucede con $1s_0$, con la salvedad de que la función de onda de $1s_0$ tiene el mismo signo en todo el espacio y la de $1p_0$ presenta un nodo en el plano $z = 0$.

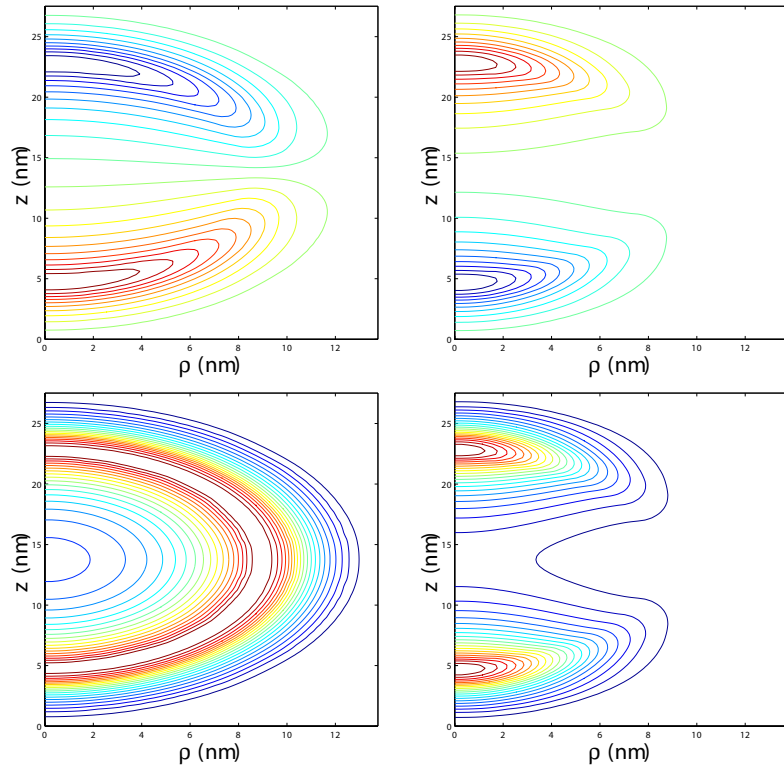


Figura 2.20: Curvas de nivel de la función de onda de los estados $1s_0$ (abajo) y $1p_0$ (arriba) en un QDQW a $B = 0$ (izquierda) y a $B = 100$ T (derecha).[33]

En un campo magnético muy fuerte, los estados están tan fuertemente confinados en la dirección radial que la distribución electrónica se asemeja a un doble pozo cuántico unidimensional en la dirección z . Ambos pozos están separados por una barrera de potencial de 16 nm de anchura. Los estados $1s_0$ y $1p_0$ se corresponden con las soluciones *par* e *impar* de este doble pozo cuántico. Este cambio en la distribución de carga, desde uniforme a distribuida en dos regiones separadas espacialmente, podría encontrar aplicaciones en computación cuántica.

En la Figura 2.21 se representa la región energética más baja del espectro magneto-óptico de transiciones electrón-hueco en un QDQW. Para simplificar el espectro, se ha asumido luz polarizada en la dirección del campo magnético y únicamente se consideran transiciones a estados de la BC con espín \uparrow . En estas condiciones, sólo la componente $J_z = 1/2$ de los estados de huecos puede dar lugar a un momento de transición finito (Sección 1.4.2). En la figura, las líneas trazadas son una guía para la vista que muestra la evolución de cada transición permitida a $B = 0$. En ausencia de campo magnético, no se observan transiciones que involucren estados con nodo radial ($n > 1$ o $n_h > 1$). Esto es debido a la ausencia de estos estados en la región energética más baja del espectro del QDQW. En presencia de un campo magnético, las señales espectroscópicas evolucionan con una trayectoria cuadrática dictada esencialmente por la energía de los estados electrónicos. La Figura 2.21 vuelve a poner de manifiesto que, en presencia de un campo magnético externo, la mayoría de transiciones con intensidad apreciable siguen siendo las que cumplen la regla de selección de simetría esférica. Las únicas excepciones en la región estudiada son las transiciones $1s \leftarrow 1D_{5/2}$, $1p \leftarrow 1F_{7/2}$ y $1d \leftarrow 1S_{3/2}$, pero su intensidad es pequeña incluso a $B = 40$ T.

El hecho de que las reglas de selección de simetría esférica sean aproximadamente cumplidas en todas las nanoestructuras estudiadas incluso en presencia de campos magnéticos intensos pone de manifiesto que el confinamiento espacial es dominante en todos los casos, y la reducción de simetría ocasionada por el campo relativamente poco significativa. Esta es una propiedad característica de sistemas nanoscópicos que, sin embargo, se pierde al pasar a sistemas mesoscópicos y macroscópicos, donde el confinamiento espacial es débil.

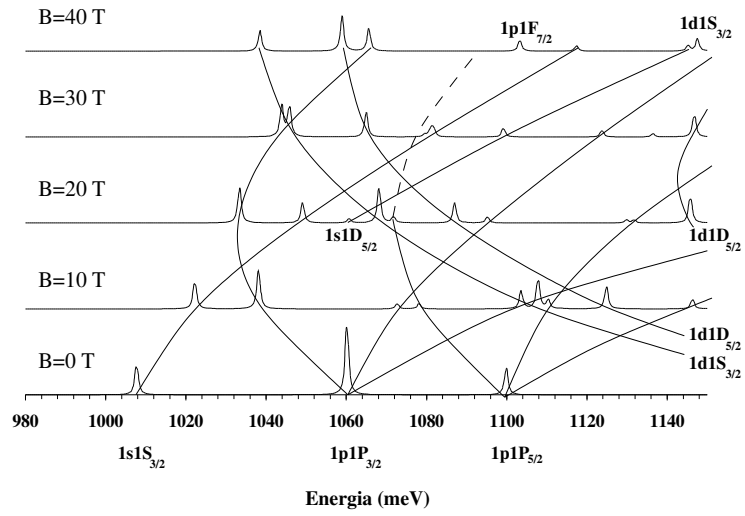


Figura 2.21: Momentos de transición en la región de baja energía del espectro magneto-óptico NIR de un QDQW de InP (8 nm)/InAs (2 nm)/InP (2 nm). Se ha asumido luz polarizada en z y sólo se consideran transiciones al estado de electrones con espín \uparrow . Las transiciones a $B = 0$ se han etiquetado explícitamente. El espectro se ha modelado representando las transiciones con curvas Lorentzianas de amplitud media 1 meV. Las líneas trazadas son una guía para la vista.[35]

Capítulo 3

Puntos cuánticos auto-ordenados en matrices heterogéneas

Cuando tenemos un punto cuántico enterrado en una matriz semiconductor heterogénea, el material de la matriz en contacto con el QD (que llamaremos material A) actúa como una barrera de potencial y es el principal responsable del confinamiento y, por tanto, de la formación de estados ligados en el punto. Sin embargo, debido a la penetración finita de la función de onda electrónica en el material barrera, el material que no está en contacto directo con el QD (material B) también puede tener un efecto sobre estos estados. Dependiendo de las energías de *gap* de los materiales A y B pueden darse tres situaciones. La Figura 3.1 recoge los tres casos para electrones de la BC:

1. El material A tiene menor energía de *gap* que el material B. En este caso el material B constituye una barrera de potencial confinante más alta que A. Los estados ligados del QD pueden experimentar un confinamiento superior al que experimentarían con una matriz homogénea de A.
2. El material A tiene mayor energía de *gap* que el material B, y el material B tiene mayor energía de *gap* que el material del QD. En este caso el material B constituye una barrera de potencial confinante más baja que A. Los estados ligados del QD pueden experimentar un confinamiento inferior al que experimentarían con una matriz homogénea de A.

3. El material A tiene mayor energía de *gap* que el material B, y el material B tiene menor o igual energía de *gap* que el material del QD. En este caso el material B constituye un pozo de potencial al cual pueden acceder los electrones del QD por efecto túnel.

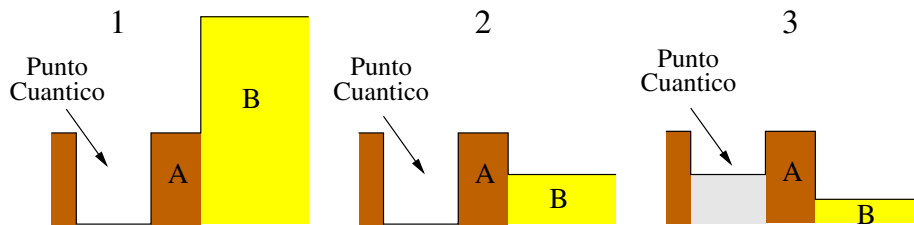


Figura 3.1: Perfil de la BC de un QD inmerso en una heteroestructura semiconductor A/B. 1, 2 y 3 representan los distintos casos posibles en función de la energía de *gap* del material del QD, del material A y del material B.

Debido a la asimetría y a los valores finitos del potencial confinante, estos sistemas no pueden ser descritos en general por los modelos simples con solución analítica. El uso de un potencial confinante finito y escalonado (y, por tanto, de una resolución numérica) resulta esencial para un correcto entendimiento de la física de estos sistemas.

En este capítulo estudiamos la influencia que ejercen barreras de potencial confinante generadas por matrices heterogéneas sobre la estructura energética de electrones en QDs auto-ordenados (sistemas 1 y 2 de la Figura 3.1). Los resultados se comparan con diversos sistemas sobre los cuales se dispone de información experimental y se discute el acuerdo en cada caso. Puesto que se intenta lograr un acuerdo cuantitativo con los experimentos, utilizamos un potencial confinante realista (Sección 1.2.1) y una correcta descripción de la dependencia de la masa efectiva del electrón con su posición en la heteroestructura (Sección 1.1.1).

En la primera sección del capítulo se ofrece una breve introducción a los QDs auto-ordenados. En la Sección 3.2 se comenta un ejemplo de sistemas donde el uso de matrices heterogéneas para QDs auto-ordenados es de interés práctico. El capítulo concluye con una sección en la que algunos experimentos se discuten a la luz de nuestro modelo teórico.

3.1 Puntos cuánticos auto-ordenados

Los QDs auto-ordenados se obtienen a partir de la transición de fase Stranski-Krastanow que tiene lugar durante el crecimiento de heteroestructuras semiconductoras con una tensión elástica significativa.[138, 139] Cuando se hace crecer epitaxialmente un cristal semiconductor sobre la superficie de otro material cuya constante de red difiere del primero en 1 – 10 %, el material depositado forma una capa epitaxial de buena calidad, pero sujeta a fuertes tensiones elásticas. La tensión aumenta a medida que crece el espesor de la capa depositada. Cuando se alcanza un espesor crítico (típicamente del orden de unas pocas monocapas), el crecimiento planar cesa y empiezan a formarse pequeñas islas del material depositado sobre una fina capa humectante residual (*wetting layer* o WL). Esta es la denominada transición de fase Stranski-Krastanow. La formación de estas islas es un proceso cinético guiado por las fuerzas de tensión elástica. Si el material sustrato posee mayor energía de *gap* que el material depositado, las islas actuarán como QDs. Por ello es frecuente utilizar sustratos de GaAs o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre los cuales se deposita InAs o $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$, formando así QDs de gran calidad.

Los QDs formados por el mecanismo Stranski-Krastanow son en última instancia recubiertos por una nueva capa de material de mayor energía de *gap* (típicamente el mismo material del sustrato), lo cual permite el confinamiento tridimensional de los portadores de carga en el interior del punto.

La forma, tamaño y composición de los QDs auto-ordenados depende de numerosos factores, como el tipo de materiales empleados, las temperaturas de crecimiento y los tiempos de deposición.[143, 144] Las geometrías más habituales incluyen pirámides[145], discos[15] y lentes[14], con tamaños en el régimen nanoscópico. La Figura 3.2 muestra el perfil típico de un QD auto-ordenado de InAs con forma de lente.

De especial interés para los ejemplos estudiados más adelante en este capítulo es la dependencia del tamaño y la composición de QDs auto-ordenados con el tipo de material sustrato. El crecimiento de QDs de InAs sobre sustratos de GaAs y de AlAs presenta diferencias debidas a la menor movilidad del catión Al^{+3} en comparación con Ga^{+3} . Por una parte, los puntos crecidos sobre AlAs únicamente incluyen el material depositado más pequeñas cantidades de material procedente de la WL. En cambio, los QDs crecidos sobre GaAs experimentan una interdifusión de In y Ga importante, por lo que suelen incorporar GaAs procedente de las capas atómicas inmediatamente inferiores a la WL.[140, 141] Por otra parte, el tamaño de los QDs crecidos sobre GaAs suele ser mayor que el de los crecidos sobre AlAs. Esto se debe a que la mayor interdifusión de Ga^{+3} e In^{+3} reduce la tensión en la

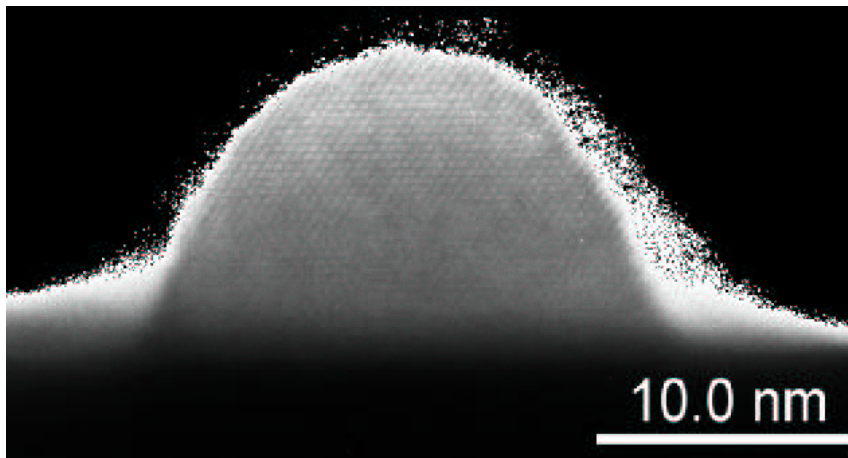


Figura 3.2: Micrografía de transmisión de electrones de un punto cuántico auto-ordenado de InAs.[20]

capa de material depositado, siendo necesario un mayor espesor de la misma para que tenga lugar la transición de fase Stranski-Krastanow.[142]

Algunos de los principales atractivos de los QDs auto-ordenados son sus excelentes propiedades como medio activo en dispositivos semiconductores como láseres[146, 147] o detectores en el infrarrojo.[148, 149, 150]

3.2 Puntos cuánticos de InAs en matrices de GaAs con capas finas de AlAs

El sistema auto-ordenado más estudiado hasta la fecha es el formado por QDs de InAs envueltos en una matriz de GaAs (esto es, QDs de InAs/GaAs). Este sistema suele mostrar el pico de fotoluminiscencia(PL) correspondiente a la transición interbanda fundamental hacia 1050 nm.[151] Sin embargo, para aplicaciones prácticas más extensivas es esencial poder desplazar este canal espectral hacia diferentes longitudes de onda de emisión o absorción.

La técnica habitual para reducir la longitud de onda de emisión consiste en introducir Ga en la composición del material depositado, de manera que se forman puntos de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$. De esta manera se alcanzan longitudes de onda típicamente alrededor de 975 nm.[152, 154, 155] Sin embargo, mediante esta técnica no es posible reducir la longitud de onda de emisión por debajo de la energía de *gap* de la barrera de GaAs. Además, la disminución del *band-offset* entre el QD y la matriz da lugar a un menor confinamiento

de los portadores de carga en el punto. Consecuentemente, los efectos de activación térmica pueden imponer serias limitaciones a las aplicaciones a temperatura ambiente.

Una técnica alternativa para reducir la longitud de onda de emisión en QDs auto-ordenados consiste en modificar el material de la barrera.[153] Las matrices de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ son la elección más habitual para aplicaciones prácticas,[156, 157] ya que la constante de red es similar a la de GaAs, y por tanto ofrece unas fuerzas de tensión similares para el crecimiento de QDs.[158] Mediante el uso de matrices de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, se han obtenido efectos hipsocrómicos (reducción de la energía de emisión) de hasta 612 meV.[153] Otros beneficios para aplicaciones prácticas asociados al uso de barreras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ son una mayor estabilidad térmica[153, 159] o una mayor (y controlable) densidad de QDs.[140, 160] Desafortunadamente, las matrices de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ también presentan algunas desventajas. Las más importantes son la reducción en la intensidad de emisión en comparación con QDs de InAs/GaAs y el ensanchamiento de las bandas de transición espectroscópica. Los motivos para estos dos problemas son la presencia de canales no radiativos en la barrera[161] y fluctuaciones en el tamaño del QD,[153] respectivamente.

Recientemente, se ha introducido una técnica que incorpora muchas de las ventajas de usar matrices de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a la vez que elude sus principales inconvenientes. Esta técnica consiste en enterrar QDs de InAs en una matriz de GaAs con una[162, 164, 163] o más[165, 166] capas finas de AlAs depositadas en las proximidades de los punto. Manipulando la posición de las capas de AlAs se pueden lograr numerosos beneficios, entre los que se incluyen:

- Efectos hipsocrómicos de hasta 500 meV.[166]
- Emisiones a energías por encima de la barrera de GaAs, útiles en dispositivos que aprovechen el efecto túnel, como láseres *de cascada* basados en QDs.[166]
- Gran control de la energía del estado fundamental de los portadores de carga confinados en QDs.[167]
- Mayor densidad de QDs que en ausencia de AlAs.[140, 163]
- Mayor uniformidad de tamaño de los QDs, como consecuencia de una segregación de In reducida por la capa de AlAs.[164]

- Bloqueo de la corriente oscura (*dark current*) generada por emisión termoiónica.[168] Esto permite mejores detectividades a temperatura ambiente que en ausencia de AlAs.[169]

3.3 Efecto de la posición de una capa fina de AlAs

En la sección anterior hemos discutido el interés de sistemas de QDs de InAs/GaAs con capas finas de AlAs ubicadas en las proximidades del punto. En esta sección investigamos teóricamente la influencia que tiene una capa de AlAs con 1 nm de espesor sobre la estructura energética de un electrón en un QD de In(Ga)As/GaAs, en función de la distancia entre la capa de AlAs y el punto.[36] El Hamiltoniano electrónico que empleamos viene dado por la Ecuación 1.19. Así pues, utilizamos un potencial confinante finito escalonado, considerando además la dependencia de la masa efectiva respecto de la posición y de la energía (efectos de no parabolicidad). En cambio, no consideramos explícitamente efectos de tensión elástica. El principal efecto de estas fuerzas sobre los electrones de conducción es aumentar su masa efectiva.[28] En nuestros cálculos tenemos en cuenta este hecho combinando los efectos de no parabolicidad con la energía de *gap* de InAs tensionado.

Estudiamos tres sistemas diferentes que denominamos A, B y C. Representamos esquemáticamente estos sistemas en la Figura 3.3.

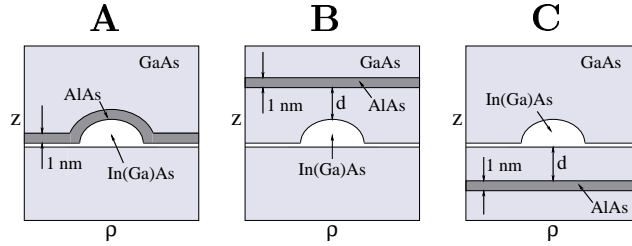


Figura 3.3: Esquema de las tres estructuras estudiadas: A, B y C.

Como comentaremos más adelante, estos tres sistemas han sido investigados recientemente desde un punto de vista experimental. Al no disponer de información completa sobre las dimensiones de los QDs y sus WL en las muestras experimentales, estudiamos en cada caso hasta cuatro modelos diferentes (Tabla 3.1). Asumimos que todos los QDs tienen forma de lente, y describimos su sección en el plano ρz mediante una semielipse.

QD1 y QD2 son puntos cuánticos con los radios observados en la Ref.[162]

para puntos crecidos sobre GaAs y AlAs, respectivamente. Asumimos que ambos puntos tienen una relación altura/radio pequeña,[158] de modo que la penetración de la función de onda en el exterior del QD es significativa y, por tanto, también lo es el efecto confinante de la barrera de AlAs. QD3 y QD4 tienen una relación altura/radio igual a la unidad. QD3 es un punto cuántico voluminoso típico, mientras que QD4 es un punto cuántico ideal para fotodetección en el infrarrojo lejano: con sólo dos estados ligados y con un fuerte confinamiento lateral. Al contener sólo dos estados ligados (y un único electrón), el estado excitado está vacío incluso a temperaturas moderadas, por lo que la absorción es máxima.[172] Además, la proximidad entre el estado excitado y el tope de la barrera de GaAs permite la extracción de fotocorriente empleando voltajes bajos, lo cual mejora la detectividad del dispositivo.[149] Por otra parte, el fuerte confinamiento lateral mejora la detección de radiación lateral, que es una de las ventajas clave de los QDs sobre los pozos cuánticos para la detección en el infrarrojo.[150] El espesor de la WL es de 1.7 monocapas para QD1 y QD3. Para QD2 utilizamos un valor menor de 1 monocapa para simular la reducción de la WL cuando la deposición se realiza directamente sobre AlAs.[140, 162] Para QD4 también asumimos 1 monocapa para simular condiciones ideales de crecimiento.

Cuando el material del QD se deposita sobre AlAs, asumimos una composición de InAs puro. El perfil de la BC en dicho caso se muestra en la Figura 3.4 izquierda. Sin embargo, para simular la difusión de Ga hacia el QD cuando el crecimiento tiene lugar sobre GaAs, describimos la BC con

	InAs	GaAs	AlAs
E_g (eV)	0.785 [†]	1.519	3.1
Δ_{SO} (eV)	0.39	0.34	0.28
E_p (eV)	21.5	28.8	21.1
F	-2.9	-1.94	-0.48
$m_e^*(E_{n,m_z} = 0)$	0.051	0.067	0.15
V (eV)	0.0	0.513	1.08 [‡]
	altura (nm)	radio (nm)	espesor de WL (nm)
QD1	2	10	0.5
QD2	1.65	8.25	0.3
QD3	6	6	0.5
QD4	4	4	0.3

Tabla 3.1: Parámetros de los materiales semiconductores y la geometría de los QDs estudiados. Los datos de materiales se han tomado de la Ref.[170], excepto [†] (de la Ref.[52]) y [‡] (de la Ref.[171]).

un perfil como el mostrado en la Figura 3.4 derecha. Así, en la base de la nanoestructura asumimos una composición de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$, con $x = 50\%$, y conforme nos aproximamos al extremo superior dejamos que la concentración de Ga decrezca en cinco escalones a $x = 40\%$, 30% , 20% , 10% y 0% . De esta manera, el perfil de composición desplaza la densidad de carga del electrón hacia la parte superior de la nanoestructura, ensalzando el efecto de la barrera de AlAs cuando ésta se ubica en las capas de recubrimiento. Los parámetros de las aleaciones se obtienen utilizando los datos de la Tabla 3.1 y los procedimientos de interpolación para aleaciones ternarias descritos en la Ref.[170].

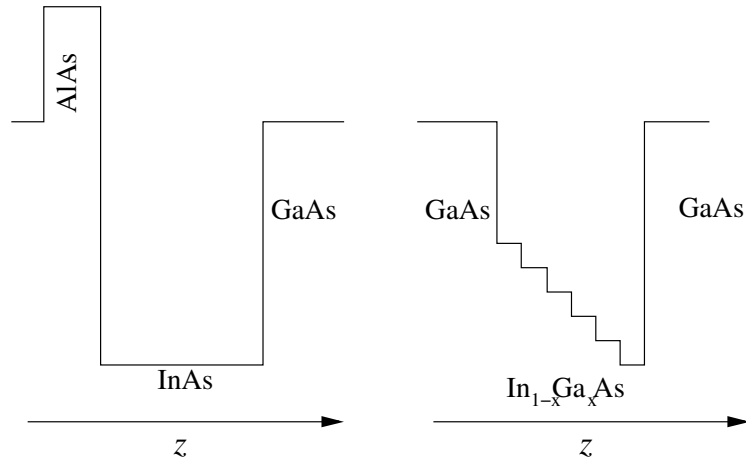


Figura 3.4: Perfil de las BC de los puntos cuánticos estudiados cuando crecen sobre un sustrato de AlAs (izquierda) y de GaAs (derecha).

El sistema A (Figura 3.3 izquierda) ha sido estudiado experimentalmente por Arzberger *et al.*[164] A 480°C (una temperatura suficientemente baja para que los efectos de difusión y segregación sean menores), se sintetizó una muestra de QDs de InAs/GaAs y otra de InAs/GaAs con una fina capa de AlAs recubriendo los QDs. Al comparar los espectros de PL de ambas muestras, se observó un efecto hipsocrómico de unos 27 meV en la muestra cubierta de AlAs. Esta variación de energía fue atribuida principalmente al confinamiento que ejerce la capa de AlAs (mayor que el de GaAs). En principio, el mayor confinamiento afecta tanto a la energía de electrones de conducción como a la de huecos de valencia. Sin embargo, el principal impacto tiene lugar en los niveles energéticos de los electrones.[166] Este hecho

está de acuerdo con cálculos exploratorios en los que hemos comprobado que la energía de los primeros estados de huecos, descritos con un modelo de una banda y masa de HH, es poco sensible al potencial confinante de la capa de AlAs. Así pues, en adelante consideraremos exclusivamente los estados electrónicos para rendir cuenta de las variaciones energéticas en los espectros de PL.

La Tabla 3.2 resume las diferencias de energía de los estados electrónicos fundamental ($n = 1, m = 0$) y primer excitado ($n = 1, |m| = 1$) producidas por la presencia de una capa fina de AlAs recubriendo los QDs (sistema A). En ella se observa un buen acuerdo de QD1 con los datos experimentales de la Ref.[164].

	$\Delta E_{e.f.}$ (meV)	$\Delta E_{1^{er} exc.}$ (meV)
QD1	21	23
QD3	4	11
QD4	11	31

Tabla 3.2: Variaciones de energía de los estados electrónicos fundamental y primer excitado para diferentes modelos de puntos cuánticos con y sin recubrimiento de AlAs (sistema A).

Los estados de una lente pueden identificarse cualitativamente con los estados de simetría impar de una esfera ($l + m$ impar), por lo que el estado fundamental ($l = 1, m = 0$) deposita su densidad de carga principalmente a lo largo del eje z (dirección de crecimiento), mientras que el primer estado excitado ($l = 2, m = 1$) la deposita entre el eje z y los ejes en el plano de la base del QD. Del anterior razonamiento se infiere que el estado fundamental es esencialmente sensible al confinamiento vertical (cuanto más bajo el QD, mayor el efecto hipsocrómico debido al recubrimiento con AlAs), mientras que el primer estado excitado es sensible al confinamiento vertical y lateral simultáneamente. Esta diferencia de comportamiento sugiere que QD1 debe presentar una altura similar a los QDs de la muestra experimental, ya que los estados fundamentales de los QDs más altos (QD3 y QD4) son mucho menos sensibles al efecto de la capa de AlAs que en el experimento de Arzberger. Estos hechos también sugieren que el espaciado energético entre los dos estados más bajos de una lente puede incrementarse reforzando el confinamiento vertical y lateral de los QDs mediante un recubrimiento con AlAs.[173]

A continuación estudiamos el sistema B (Figura 3.3 centro). En la Figura 3.5 se representan las variaciones de energía de los estados fundamental (línea continua) y primer excitado (línea discontinua) en función de la distancia d entre el extremo superior del QD y una capa fina de AlAs situada

en el material de recubrimiento. A diferencia del sistema A, en este caso la capa de AlAs no ofrece un confinamiento lateral reforzado. Como resultado, las diferencias de variaciones de energía entre los estados fundamental y primer excitado son pequeñas. Además, sólo la altura del QD es relevante para determinar la magnitud de la variación de energía. Así, QD1 (el punto más bajito) muestra el mayor efecto hipsocrómico tanto para el estado fundamental como para el primer excitado.

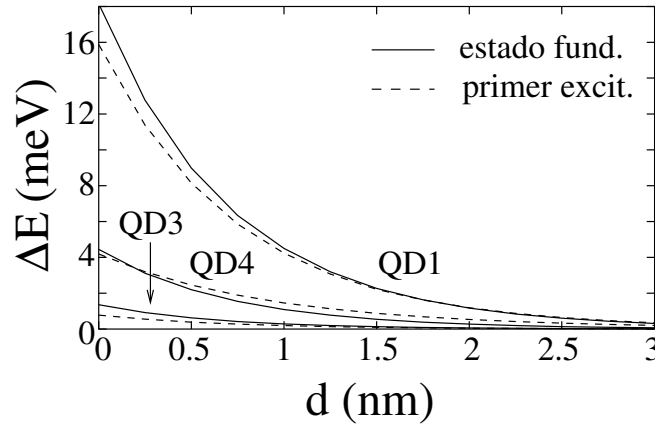


Figura 3.5: Variaciones de energía de los estados fundamental (línea continua) y primer excitado (línea discontinua) de los puntos cuánticos QD1, QD2 y QD3 en función de la distancia entre el extremo superior del punto y una capa de AlAs (sistema B).

El sistema C (Figura 3.3 derecha) ha sido investigado experimentalmente por Kim y colaboradores,[162] quienes midieron las variaciones en la energía de PL de QDs de InAs/GaAs en función de la distancia d entre la WL y una capa fina de AlAs depositada en el sustrato. En el experimento se observaron efectos hipsocrómicos de hasta 171 meV, a la vez que se conservaban una intensidad de emisión, anchura de banda y forma del QD similares a los que se encuentran en sustratos de GaAs puro.¹ Los autores del experimento asignaron las variaciones de energía exclusivamente al confinamiento espacial que ejerce la capa de AlAs. Nosotros calculamos la variación de energía debida a la capa de AlAs en QD1 para simular sus puntos crecidos sobre GaAs, y en QD2 para simular sus puntos crecidos sobre AlAs. Debe notarse que los radios de QD1 y QD2 se corresponden con los medidos en la

¹En el caso de QDs crecidos directamente sobre la capa de AlAs, se registró una pequeña disminución del tamaño lateral del punto y del espesor de la WL. Los motivos de estos cambios se han descrito en la Sección 3.1.

Ref.[162] para los puntos crecidos en cada sustrato. Aunque no disponemos de información experimental sobre la altura de dichos puntos, asumimos que son muy bajitos para maximizar el efecto confinante de la barrera de AlAs.

En la Tabla 3.3 se compara la magnitud de los efectos hipsocrómicos observados en la Ref.[162] con los que nosotros determinamos teóricamente. La tabla refleja un importante desacuerdo entre las predicciones teóricas y los valores experimentales.² La gran magnitud de esta discrepancia, junto con el buen acuerdo que nuestro modelo ha ofrecido en sistemas experimentales similares (sistema A) nos lleva a sugerir que *la barrera de potencial de AlAs y la reducción de tamaño del QD a $d = 0$ no son la única fuente del efecto hipsocrómico observado experimentalmente*. Esta hipótesis está reforzada por el hecho de que cálculos realizados utilizando parámetros óptimos (y hasta poco realistas) para ensalzar los efectos de la barrera de potencial, incluyendo una masa efectiva de InAs no sujeta a fuerzas de tensión elástica, composición homogénea del QD y *band-offset* de las BC de InAs/GaAs reducido, continúan subestimando las energías experimentales.

modelo de QD	d(nm)	ΔE_{PL} (meV)	$\Delta E_{e.f.}$ (meV)	$\Delta E_{1^{er} exc.}$ (meV)
QD1	2	25	1	2
QD1	1	55	5	6
QD2	0	171	41	55

Tabla 3.3: Variaciones de energía del pico de PL experimental y de las energías calculadas para el estado fundamental y el primer excitado de un electrón en el sistema C, en función de la distancia entre la WL y una capa de AlAs.

La incorporación de pequeñas cantidades de Al en los QDs de InAs ha sido identificada como un mecanismo predominante para la consecución de efectos hipsocrómicos en algunos sistemas de QDs.[159, 174] Por tanto, podríamos apuntar a la incorporación de átomos de Al por el QD como el mecanismo responsable de las diferencias entre nuestros cálculos y las mediciones de la Ref.[162]. Cuando los QDs crecen sobre la capa de AlAs, es fácil suponer que la WL contendrá cationes Al, que pasarán a formar parte del QD durante el cambio de fase Stranski-Krastanow. Un caso menos evidente se da cuando la barrera de AlAs está depositada varias monocapas por debajo de la WL, puesto que la movilidad del catión Al es baja. Ahora bien, es sabido que a temperaturas por encima de 420°C, las islas de InAs se forman

²Debe notarse que la importante variación de energía teórica a $d = 0$ se debe principalmente a la reducción de tamaño del QD cuando crece sobre AlAs. Dicha reducción de tamaño daría lugar a una variación adicional de 30 meV si consideramos también los niveles de huecos. Sin embargo, la predicción teórica continuaría estando muy por debajo del valor determinado en los experimentos de PL.

tomando material no sólo de la WL sino también del sustrato.[141] En la Ref.[162] el sustrato se hace crecer a 580°C , lo que produciría una difusión significativa de Al fuera de la capa fina. Posteriormente los QDs se hacen crecer a 440°C , por lo que las islas de InAs posiblemente drenen pequeñas cantidades de Al procedentes del sustrato y la WL “contaminados”.

Esta interpretación estaría de acuerdo con los resultados observados en otros estudios experimentales en los que se manejaron capas finas de AlAs. Rebohle *et al.* sintetizaron un sistema similar a C con $d = 1$ nm, pero depositando las capas del sustrato a 485°C para reducir la mezcla de In,Ga y Al.[165] El efecto hipsocrómico que determinaron a partir de espectroscopía de PL fue de tan solo 33 meV, menor que el observado en la Ref.[162] para el mismo caso (pero todavía mayor que el que nosotros predecimos a partir del confinamiento espacial). Por contra, sistemas relacionados en los que el sustrato se depositó a 610°C dieron lugar a energías de transición interbanda mucho mayores.[166]

Hemos comprobado que la magnitud del efecto hipsocrómico determinado en la Ref.[162] para los puntos crecidos sobre AlAs pueden ser reproducidos con nuestro modelo si asumimos que los puntos tienen una composición promedio $\text{In}_{0.93}\text{Al}_{0.07}\text{As}$. Por ello, sugerimos la difusión de Al como principal responsable del gran efecto hipsocrómico encontrado experimentalmente. Puesto que la presencia de Al en los puntos auto-ordenados de InAs da lugar a cambios cinéticos en la formación de la nanoestructura,[174] ésta podría confirmarse experimentalmente mediante experimentos de difracción de electrones (RHEED) en QDs de InAs/GaAs con capas finas de AlAs depositadas en el sustrato.

Capítulo 4

Anillos cuánticos auto-ordenados

Los QRs constituyen un campo de aplicación paradigmático del modelo teórico desarrollado en el Capítulo 1, pues a su simetría cilíndrica se une la dificultad de su descripción mediante otros modelos de solución analítica típicamente empleados en estructuras compactas. Los QRs han recibido gran atención por parte de los investigadores en el campo de materia condensada a lo largo de las dos últimas décadas.[77, 175, 176, 177, 178, 179] El principal atractivo de estos sistemas reside en sus propiedades magnéticas. Cuando un QR cargado con un electrón en exceso es penetrado por un campo magnético perpendicular al plano del anillo, el efecto Aharonov-Bohm(AB)[180] genera una corriente persistente y oscilaciones en la energía del estado fundamental del electrón.[181] El efecto AB es un fenómeno puramente cuántico, del cual existen evidencias experimentales en anillos metálicos y semiconductores en el régimen mesoscópico.[178, 182] Sin embargo, los anillos mesoscópicos pueden estar sujetos a dispersiones de tipo electrón-electrón, electrón-impureza o electrón-fonón, que ponen en peligro la coherencia de los portadores de carga confinados en su interior. Por este motivo, la reciente fabricación de anillos semiconductores nanoscópicos -que se encuentran en el verdadero límite cuántico, sin dispersiones y con pocas partículas confinadas- ha sido reconocida como un logro mayor en el estudio de estructuras de baja dimensión donde pueden explorarse fenómenos físicos noveles originados por el confinamiento, las correlaciones electrónicas y la influencia de campos electromagnéticos externos.[18]

Los QRs nanoscópicos pueden sintetizarse por medio de técnicas de auto-ordenación[16, 17] o litográficas.[183] Aunque las técnicas litográficas per-

miten un mayor grado de control sobre las dimensiones del anillo, una ventaja importante de las estructuras auto-ordenadas es su superior calidad óptica, que las hace especialmente atractivas para aplicaciones prácticas.[184]

Los anillos auto-ordenados se obtienen introduciendo una variación en el proceso de síntesis de QDs auto-ordenados: se hace crecer QDs, típicamente de InAs, sobre un sustrato de GaAs o InP utilizando la transición de fase Stranski-Krastanow (Sección 3.1) y, posteriormente, en lugar de recubrirlos completamente con nuevas capas de GaAs (o InP), se recubren sólo parcialmente. Entonces, la fina sobrecapa del material de mayor energía de *gap* origina un cambio en el balance de la energía libre de superficie, creando una fuerza que redistribuye el material depositado. El resultado es una estructura con morfología anular.[185, 186] Esta morfología anular ha sido evidenciada por AFM (ver Figura 4.1).[16, 17, 80] En sistemas InAs/GaAs, los QRs que se forman tienen un radio interior de entre 10 y 15 nm, un radio exterior de unos 60 nm y una altura entre 4 y 5 nm.[37, 187] Ahora bien, los anillos auto-ordenados, al igual que los puntos, en última instancia deben ser completamente recubiertos con nuevas capas del material de mayor energía de *gap* para ser aplicables en dispositivos prácticos. En estas condiciones ya no es posible obtener imágenes directas de las estructuras. Por ello, se han llevado a cabo diversos experimentos espectroscópicos a fin de confirmar si se preserva la geometría anular o si, contrariamente, un nuevo cambio morfológico ha tenido lugar durante el recubrimiento.[37, 101, 79, 81, 188, 189]

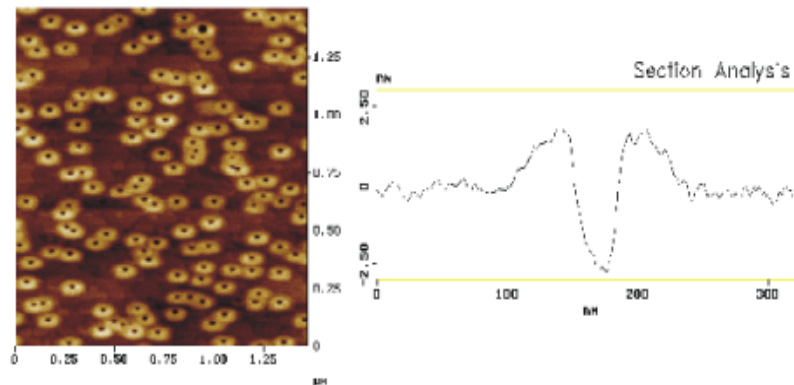


Figura 4.1: Izquierda: micrografía de fuerza atómica de QRs auto-ordenados de InAs/GaAs por recubrir. Derecha: perfil a través del centro de un anillo típico.[80]

En este capítulo estudiamos teóricamente la estructura energética y propiedades ópticas de QRs auto-ordenados cargados con un electrón, dos electrones o un par electrón-hueco ($e-h$) en presencia de un campo magnético externo. Además, compararemos los resultados obtenidos con los de diferentes experimentos espectroscópicos para buscar una respuesta a la cuestión sobre la topología de los anillos auto-ordenados una vez recubiertos. En la Sección 4.1 se determinan los niveles de energía de un electrón en presencia de un campo magnético perpendicular al plano del anillo. En la Sección 4.2 se discute el efecto de las interacciones coulombicas electrón-electrón en la estructura energética. En la Sección 4.3 se combinan los resultados obtenidos en sistemas mono y bielectrónicos para ofrecer la primera descripción teórica de los espectros de magneto-absorción en el FIR que brinda un acuerdo completo con los experimentos de QRs auto-ordenados. En la Sección 4.4 proponemos el uso de la magnetización como magnitud conveniente para determinar la topología de estructuras cuánticas recubiertas. En la Sección 4.5 se determinan los niveles de energía de un hueco en un QR auto-ordenado en presencia de un campo magnético. Por último, en la Sección 4.6 calculamos las transiciones magneto-ópticas interbanda (recombinación de pares $e-h$), comparando con diversos experimentos relacionados. También en esta sección discutimos los coeficientes másicos apropiados para el término de interacción magnética en el Hamiltoniano multibanda de huecos. Adicionalmente, a lo largo de todo el capítulo realizaremos una crítica comparativa con estudios teóricos previos basados en modelos más simples (principalmente Hamiltonianos de masa efectiva banda con potencial confinante de tipo parabólico bidimensional).

4.1 Estructura energética de un electrón en un campo magnético

El modelo más simple que permite describir los estados electrónicos en un QR considera que el anillo es un hilo unidimensional, el cual se cierra sobre sí mismo formando un círculo de radio R . Los niveles energéticos que se derivan de las condiciones de contorno, en presencia de un flujo magnético $\phi = \pi R^2 B$ que penetra el anillo (perpendicular al plano de éste), vienen dados por:[176]

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left(m + \frac{\phi}{\phi_0} \right), \quad (4.1)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, m es la proyección z del momento

angular y ϕ_0 es el cuanto de flujo. La Figura 4.2 muestra la evolución de los niveles energéticos más bajos en función del flujo magnético que penetra el anillo. Puede observarse que el estado fundamental cambia periódicamente de proyección z del momento angular conforme aumenta el flujo magnético, describiendo las esperadas oscilaciones AB.

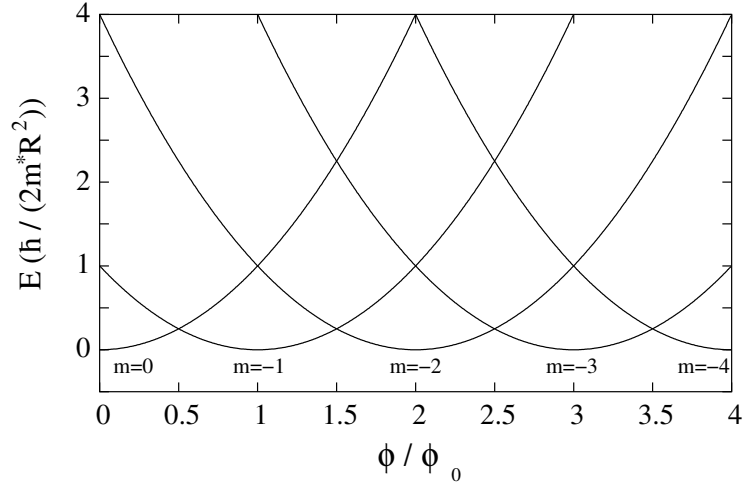


Figura 4.2: Niveles energéticos de un anillo unidimensional vs. flujo magnético.

En cualquier caso, los anillos auto-ordenados, con secciones de una anchura alrededor de 50 nm, distan mucho de ser unidimensionales. Por ello, los primeros intentos de estudiar la estructura energética de electrones en estas estructuras[37, 188, 190] recurrieron a modelos bidimensionales como el usualmente empleado en anillos mesoscópicos.¹ [18, 77] Estos modelos consideran que el electrón de masa efectiva m^* se mueve por el plano xy (la escasa altura de los anillos justificaría esta aproximación cualitativa), confinado por un potencial parabólico. El Hamiltoniano de un electrón independiente se escribe entonces:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + \frac{1}{2}m^* \omega_0^2 (r - R)^2, \quad (4.2)$$

donde \vec{A} es el potencial vector del campo magnético axial, mientras que ω_0 y R son la *frecuencia característica* y el *radio efectivo* del anillo. Los mod-

¹Recientemente también se han derivado las soluciones analíticas exactas para anillos cuánticos en un modelo de barreras de potencial infinitas.[191]

los bidimensionales tienen en cuenta la anchura finita de la sección de un anillo y, por tanto, la penetración del campo magnético en la misma. Como consecuencia, las oscilaciones de energía del estado fundamental que se predicen son aperiódicas.[77, 192] Este hecho parece estar de acuerdo con el experimento[37, 188] y pone de manifiesto la limitada utilidad de los modelos unidimensionales.[193] Sin embargo, también los modelos con potencial confinante parabólico bidimensional presentan limitaciones importantes (Sección 1.2.1). El potencial parabólico puede ser una aproximación válida para estados poco excitados de QDs auto-ordenados.[4] En estas estructuras la máxima densidad de carga se distribuye en el centro del punto, de modo que la forma exacta del potencial confinante en la interfaz de la heteroestructura tiene una importancia menor. En cambio, en anillos, incluso los estados más bajos sienten con fuerza el efecto de la cavidad (ver Figura 4.3) y el uso de un potencial realista para describir este confinamiento cobra gran importancia.[194] Esta importancia se acentúa en presencia de un campo magnético, puesto que éste concentra la densidad de carga alrededor (o incluso dentro) de la cavidad.[132]

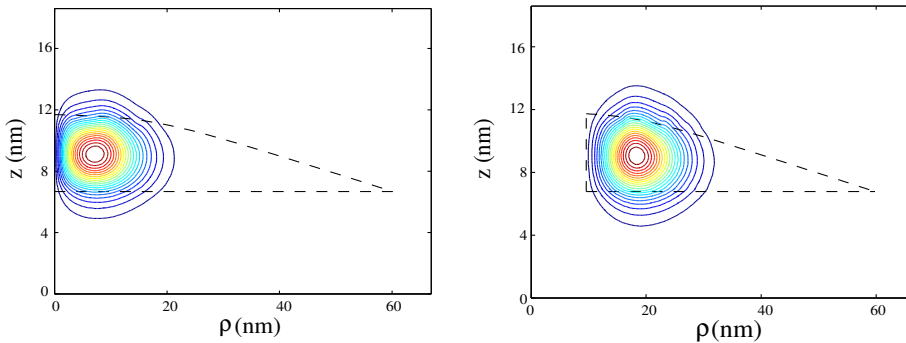


Figura 4.3: Curvas de nivel de las funciones de onda del estado fundamental en un QD de InAs/GaAs con radio 60 nm y altura 4.5 nm (izquierda), y en un QR de InAs/GaAs con las mismas dimensiones más un radio interior de 10 nm (derecha). Las líneas discontinuas representan las paredes de la nanoestructura en cada caso.

Li y Xia estudiaron el efecto del confinamiento espacial sobre la estructura electrónica de QRs utilizando por primera vez un modelo verdaderamente tridimensional con potencial confinante escalonado.[78] Planelles *et al.* integraron el Hamiltoniano $k \cdot p$ tridimensional de una banda para un electrón en coordenadas cilíndricas, lo que les permitió además describir el efecto de un campo magnético externo.[132] Poco después el grupo de

Voskoboynikov utilizó un modelo similar, añadiendo efectos de no parabolicidad y masa dependiente de la posición, para ofrecer un estudio de la influencia combinada de campos magnéticos y confinamiento espacial.[89] En general, los resultados de estos tres estudios apuntaron a la conveniencia de los modelos tridimensionales para describir correctamente los estados electrónicos sin necesidad de ajustar parámetros empíricamente.

Muchos otros trabajos, realizados con distintos modelos teóricos, han estudiado el impacto de diversos efectos sobre la estructura energética y propiedades ópticas de electrones en anillos semiconductores auto-ordenados: fuerzas de deformación elástica y potencial piezoeléctrico,[80, 187] excentricidad[199] o campos eléctricos paralelos al plano del anillo.[199, 200]

A fecha de hoy, el modelo teórico que permite la descripción más completa y realista de los estados monoeléctricos de anillos auto-ordenados es el desarrollado en la presente Tesis (Capítulo 1). En él, los estados electrónicos, en presencia de un campo magnético perpendicular al plano del anillo, se calculan con un Hamiltoniano $k \cdot p$ tridimensional de una banda (Ecuación 1.41). Este Hamiltoniano utiliza un potencial confinante escalonado, considera los efectos de las fuerzas de deformación elástica y la dependencia de la masa efectiva y el factor de Landé respecto de la posición y de la energía. Los estados electrónicos solución del mismo pueden etiquetarse por $|n, m, \sigma\rangle$, donde m es la proyección z del momento angular envolvente, σ el espín del electrón y n hace referencia al n -ésimo estado con un m y σ dados (número cuántico principal).

Puesto que el potencial confinante de la Ecuación 1.41 tiene forma arbitraria en el plano ρz , podemos estudiar estados electrónicos tanto de QDs como de QRs con simetría cilíndrica mediante un simple cambio del mismo. En la Figura 4.4 se muestran las geometrías que definimos para describir un QD lenticular (izquierda) y un QR (derecha). En ambos casos otorgamos a las secciones forma de casquete esférico. Debe notarse que, de acuerdo con la Figura 4.1, la geometría que mejor describe a un anillo auto-ordenado es la de un toro cortado con máxima altura en el borde interior.

La Figura 4.4 también ilustra el perfil cualitativo de la deformación elástica de cada estructura. Las líneas continuas representan la componente del tensor $\varepsilon_{av} = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ y las discontinuas ε_{zz} . El perfil horizontal se ha tomado a mitad altura de las estructuras y el vertical a mitad sección.

En la Figura 4.5 se representan los niveles de energía electrónicos en un QD con forma de lente (A) y en QRs con radio interior $R_{in} = 1$ nm (B), $R_{in} = 2$ nm (C) y $R_{in} = 5$ nm (D). Todas las estructuras están compuestas por InAs puro en una matriz de GaAs, tienen una altura de 4.5 nm y un radio exterior de 60 nm. Los parámetros empleados para InAs (GaAs) son:

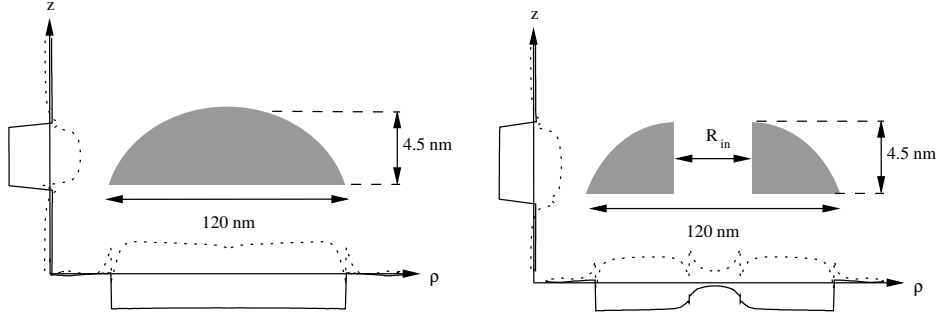


Figura 4.4: Sección de un QD lenticular (izquierda) y un QR (derecha), con sus respectivos perfiles de los tensores de deformación elástica ε_{av} (líneas continuas) y ε_{zz} (líneas discontinuas).

masa efectiva en el fondo de la BC $m^* = 0.028$ (0.067), energía de *gap* $E_g = 0.42$ (1.52) eV, *split-off* $\Delta = 0.38$ (0.34) eV y potencial de deformación hidrostática $a_c = -6.66$ (-9.3) eV.[170, 195] $V_C = 0.77$ eV es el *band-offset* de conducción entre InAs y GaAs (70% de la diferencia entre energías de *gap*[196]).

En la figura, las líneas continuas representan niveles con espín \uparrow y las discontinuas niveles con espín \downarrow . El color de las líneas indica el número cuántico principal del estado, negro para $n = 1$, azul para $n = 2$ y rojo para $n = 3$.

En ausencia de campo magnético, el estado fundamental (doblemente degenerado contando grados de libertad de espín) es $|n = 1, m = 0, \sigma\rangle$, con $\sigma = \uparrow$ o \downarrow . El primer estado excitado (cuádruplemente degenerado) es $|n = 1, m = \pm 1, \sigma\rangle$. El segundo estado excitado lo forman los niveles $|n = 1, m = \pm 2, \sigma\rangle$ (cuádruplemente degenerados), que a su vez están quasidegenerados con el nivel $|n = 2, m = 0, \sigma\rangle$ (doblemente degenerado). Los siguientes niveles excitados aparecen en intervalos de energía decrecientes² y con la degeneración (o quasidegeneración) aumentando de dos en dos unidades.

Al aplicar un campo magnético externo, los niveles se desdoblán según su m y convergen a distintos niveles de Landau.[134] El desdoblamiento de niveles energéticos debido al efecto Zeeman atómico (desdoblamiento debido

²Este aspecto difiere de las soluciones del Hamiltoniano con potencial confinante parabólico bidimensional, donde en ausencia de campo los estados son los de un oscilador armónico, por lo que están equiespaciados.

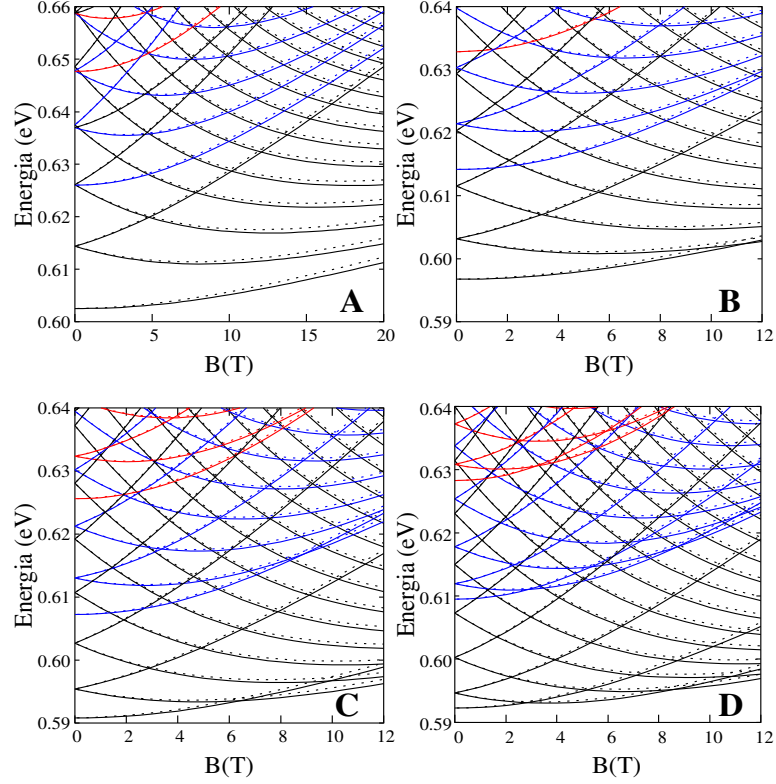


Figura 4.5: Niveles de energía de un electrón en un QD de InAs/GaAs con altura 4.5 nm y radio 60 nm (a), y en QRs de igual composición y dimensiones exteriores más radio interior de 1 nm (b), 2 nm (c) y 5 nm (d).

al espín del electrón) es pequeño incluso para campos magnéticos fuertes, lo cual justifica que en el estudio de QDs a menudo se desprecie este término. En general, la estructura energética del QD es similar a la descrita por las soluciones del oscilador armónico bidimensional.[197, 198]

La inclusión de una cavidad tiene un efecto dramático sobre la estructura energética: en ausencia de campo, los niveles azimutales consecutivos ($m = 0, m = \pm 1, m = \pm 2 \dots$) se aproximan en energía. Como consecuencia, mientras que en un QD el estado fundamental no cambia de simetría con el campo magnético, una cavidad con un radio interior de tan solo 1 nm basta para que se observe un cruzamiento en el estado fundamental a $B = 11.3$ T (Figura 4.5B). Este cruzamiento corresponde a un cambio de proyección z

del momento angular, de $m = 0$ a $m = -1$, en el estado fundamental. El anillo con $R_{in} = 2$ nm presenta los niveles azimutales consecutivos mucho más próximos entre sí (Figura 4.5C), de manera que el cruzamiento entre $|n = 1, m = 0\rangle$ y $|n = 1, m = -1\rangle$ ocurre a un campo magnético casi la mitad que el observado con $R_{in} = 1$ nm. Además, con $R_{in} = 2$ nm también el cruzamiento entre los niveles más bajos de $n = 2$ empieza a observarse a campos magnéticos relativamente bajos ($B < 10$ T). Por último, un anillo con $R_{in} = 5$ nm ya muestra una estructura energética con claras oscilaciones energéticas AB. Debe notarse que estas oscilaciones son aperiódicas debido a la anchura finita del anillo.

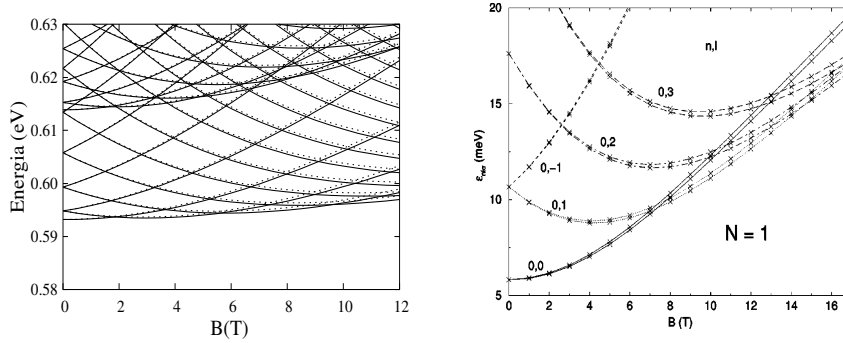


Figura 4.6: Niveles de energía de un electrón en un QR de InAs/GaAs calculado según la Ref. [40] (izquierda) y según la Ref. [188] (derecha).

La estructura energética de anillos que hemos calculado es aparentemente similar a la obtenida con modelos bidimensionales más simples.[77, 37] Sin embargo, como discutiremos más adelante, nuestra aproximación ofrece mejores estimaciones de propiedades derivadas de la distribución de carga en el anillo (Secciones 4.3 y 4.6). Además, nuestros cálculos predicen un número de cruzamientos debidos al campo magnético sensiblemente diferente del estimado para estructuras similares con modelos de potencial parabólico bidimensional. La Figura 4.6 ilustra la estructura energética de un anillo auto-ordenado de InAs/GaAs, descrita según nuestro modelo (izquierda) y según un modelo de potencial confinante parabólico bidimensional (derecha). Ambos cálculos coinciden en obtener la misma separación energética entre el nivel fundamental $n = 1, m = 0$ y el estado excitado $n = 2, m = \pm 1$ que se observa experimentalmente a $B = 0$. [188] En cambio, nuestro modelo predice tres cruzamientos en el estado fundamental entre 0 y 12 T, donde

el modelo parabólico tan solo predice uno. Para entender esta diferencia hay que tener presente el valor promedio $\langle \rho \rangle$ de la función de onda calculada con uno y otro modelo. Mientras los modelos con potencial confinante parabólico imponen un radio efectivo de 14 nm para poder describir el experimento,[37, 188, 190, 201] los modelos tridimensionales utilizan simplemente las dimensiones de los anillos medidas por AFM. Así pues, mientras la densidad de carga calculada con modelos bidimensionales se concentra alrededor de $\langle \rho \rangle \approx 14$ nm, con modelos tridimensionales ésta se puede distribuir desde el radio interior, $R_{in} = 10 - 15$ nm, hasta el radio exterior, $R_{ex} \approx 60$ nm (ver Figura 4.3 derecha). El mayor $\langle \rho \rangle$ estimado por los modelos tridimensionales tiene dos consecuencias relevantes. En primer lugar, el término centrífugo del Hamiltoniano es menor, por lo que los estados azimutales consecutivos están más próximos en energía. En segundo lugar, el término cuadrático de la interacción magnética (término diamagnético) es más importante (Ecuación 1.41). Ambas consecuencias estimulan un mayor número de cruzamientos en el estado fundamental al aplicar un campo magnético.

4.2 Interacción electrón-electrón

Los QRs constituyen estructuras de gran interés para la investigación de interacciones coulombicas interelectrónicas. La principal razón es que el confinamiento anular impide la aplicación del teorema de Kohn generalizado. Esto implica que, en principio, es posible encontrar manifestaciones de los efectos de la interacción coulombica en los espectros de excitación. Además, en presencia de un campo magnético, se espera que las correlaciones electrónicas introduzcan cambios importantes respecto al espectro energético monoeléctrico.[202] Para investigar estas propiedades, Lorke y colaboradores midieron la absorción en el FIR de un número macroscópico de anillos auto-ordenados, cada uno de ellos cargado en promedio con uno (Ref.[188]) y dos (Ref.[37]) electrones, en presencia de un campo magnético externo.

Desde el punto de vista teórico, la interacción coulombica entre electrones en anillos semiconductores ha sido estudiada en repetidas ocasiones utilizando modelos con un potencial confinante parabólico bidimensional como el de la Ecuación 4.2,[77, 202, 203, 204] o potencial confinante de barreras infinitas.[205, 206] También el experimento de Lorke en anillos auto-ordenados se ha intentado interpretar utilizando un potencial confinante parabólico.[37, 188, 190] Sin embargo, las limitaciones de este potencial con-

finante para describir anillos nanoscópicos (Sección 4.1) pueden cuestionar la validez de estos estudios. En particular, el escaso número de datos experimentales (debido a la baja resolución del experimento FIR en anillos auto-ordenados) constituye un riesgo para el ajuste empírico de parámetros que requiere la Ecuación 4.2, y la ausencia de la dimensión vertical hace que se sobrestimen sistemáticamente las energías de interacción coulombica. En este contexto, el uso de un modelo más realista para esclarecer el papel de la interacción electrón-electrón en anillos auto-ordenados es sin duda de gran interés.

En esta sección utilizamos el bagaje teórico desarrollado en la Sección 1.5 para estudiar la estructura energética de sistemas bielectrónicos en anillos auto-ordenados en presencia de un campo magnético.

En sistemas con simetría axial, la función envolvente bielectrónica viene etiquetada por la proyección z del momento angular total, $M = m_1 + m_2$, el espín total $S = \sigma_1 + \sigma_2$, y el número cuántico principal N .

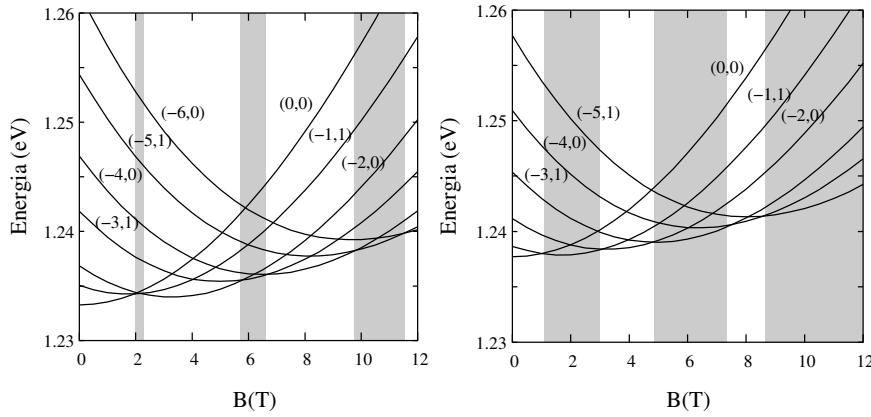


Figura 4.7: Niveles energéticos de dos electrones vs. un campo magnético en ausencia (izquierda) y presencia (derecha) de interacción coulombica electrón-electrón. Sólo aquellos niveles que participan del estado fundamental están representados. Las regiones sombreadas indican ventanas del campo magnético donde el estado fundamental tiene espín total $S = 1$. [39]

La Figura 4.7 muestra la energía del estado fundamental de un sistema bielectrónico en un anillo en presencia de un campo magnético. El panel de la izquierda corresponde a dos electrones no interactuantes mientras que el de la derecha corresponde a dos electrones interactuantes. Los estados están etiquetados según su componente z del momento angular total y su espín total, (M, S) . Las regiones sombreadas representan ventanas del campo

magnético en las que el espín total del estado fundamental es uno (triplete). En ausencia de campo, el estado fundamental es $(0, 0)$ independientemente de la interacción electrónica. A medida que aumenta el campo magnético los niveles con menor momento angular M se estabilizan, llegando a reemplazar a los de momento angular $(M + 1)$ como estado fundamental. El resultado es que el estado fundamental decrece en M de unidad en unidad a la vez que oscila entre configuración espín-singulete y espín-triplete. Este comportamiento es característico de la interacción entre el efecto Zeeman y el confinamiento anular.[190]

En ausencia de interacción coulombica, el estado fundamental es predominantemente singulete ($S = 0$), aunque el término Zeeman atómico da lugar a ventanas estrechas del campo magnético donde el estado fundamental es triplete (regiones sombreadas en la figura). La anchura de estas ventanas es mayor cuanto más fuerte el campo magnético aplicado. La inclusión de la interacción coulombica resulta en un desplazamiento de los niveles electrónicos hacia mayores energías debido a la repulsión interelectrónica. Además, los niveles tripletes $S = 1$ son estabilizados por la energía de intercambio. Como resultado, aumenta el número de oscilaciones AB en comparación con el caso no interactuante, de acuerdo con el denominado *efecto Aharonov-Bohm fraccional*. [202] Ahora bien, las predicciones originales del efecto AB fraccional (basadas en un modelo de anillo quasiunidimensional) sugieren que la energía de intercambio reduce los periodos de las oscilaciones AB del sistema no interactuante en un número entero determinado por el número de partículas interactuantes. Así, en un QR cargado con dos electrones se esperaría que las oscilaciones AB del caso interactuante y no interactuante estén relacionadas por un factor $1/2$. No sucede así en la Figura 4.7, donde el efecto Zeeman atómico y la anchura finita del anillo hacen que esta proporcionalidad sea sólo aproximada. De hecho, la energía de intercambio crece con campos magnéticos más fuertes, lo que ensancha gradualmente los dominios de niveles tripletes en el estado fundamental.

Cabe notar que el primer cruzamiento en las Figuras 4.7 izquierda y 4.7 derecha tiene lugar a campos magnéticos menores que los estimados en aproximación de potencial confinante parabólico para dos electrones no interactuantes [190] e interactuantes, [188, 190] respectivamente. Sin embargo, nuestra predicción sí coincide con la obtenida por Puente y Serra utilizando un modelo con potencial confinante parabólico *modificado para el radio interior*. [201] Más adelante en este capítulo volveremos a discutir sobre la concordancia de nuestros resultados con los de este modelo bidimensional de potencial parabólico modificado.

4.3 Transiciones ópticas intrabanda

Los espectros de magneto-absorción en el FIR registrados por Lorke y colaboradores[37, 188] revelaron cambios espectrales característicos hacia $B = 8$ T, los cuales se identificaron con cambios de simetría del estado fundamental debidos al efecto AB.[37, 188, 190] Esta interpretación de los experimentos está basada en modelos con potencial confinante parabólico bidimensional (Ecuación 4.2). Aunque estos modelos permiten un acuerdo razonable con la mayoría de los datos experimentales, también es cierto que conllevan una serie de implicaciones difíciles de entender, por ejemplo:

- Son necesarias diferentes frecuencias características del potencial confinante, ω_0 , para ajustar los resultados experimentales dependiendo de si el anillo contiene uno o dos electrones, a pesar de que la geometría del anillo es en realidad la misma.[188, 190]
- Hace falta un radio efectivo de $R = 14$ nm para ajustar el experimento.[37, 188, 190] Esto es algo sorprendente porque las imágenes de AFM muestran que el radio interior de los anillos auto-ordenados es $R_{in} = 10 - 15$ nm y el exterior $R_{ex} \approx 60$ nm, con la máxima altura de InAs a 18 nm del origen.[37, 187]
- En el experimento se observan transiciones de baja energía ($\Delta n = 0$) y de alta energía ($\Delta n = 1$), con ambos tipos de transiciones exhibiendo intensidades relativas del mismo orden de magnitud.[37] Por contra, los modelos de potencial confinante parabólico predicen intensidades relativas diferentes en al menos un orden de magnitud.[188, 190]
- Las resonancias de mayor energía calculadas en presencia de un campo magnético sobrestiman la posición energética de los correspondientes picos experimentales (representados con círculos en las Figuras 3 y 6 de la Ref. [188]).[188, 190]
- Unas pocas resonancias experimentales (representadas con cruces en las Figuras 3 y 6 de la Ref. [188]) no pueden ser explicadas.

Los puntos primero y segundo son limitaciones inherentes al carácter empírico de los modelos de potencial parabólico bidimensional. Los puntos tercero y cuarto fueron superados por Puente y Serra al utilizar un modelo también bidimensional pero introduciendo correcciones de anharmonicidad en el potencial confinante parabólico que describe el radio interior:[201]

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{2}\omega_0^2(r-R)^2 & \text{si } r \geq R, \\ \frac{1}{2}\omega_0^2(r-R)^2[1 + c(r-R) + d(r-R)^2] & \text{si } r < R. \end{cases} \quad (4.3)$$

donde c y d son parámetros que se determinan fijando una altura de la barrera en el origen, imponiendo la condición de máximo relativo en dicho punto y fijando la altura a cero en R . La Figura 4.8 compara el potencial de la Ecuación 4.3 (línea continua) y el de la Ecuación 4.2 (línea discontinua) para un mismo anillo (en unidades arbitrarias de distancia y energía).

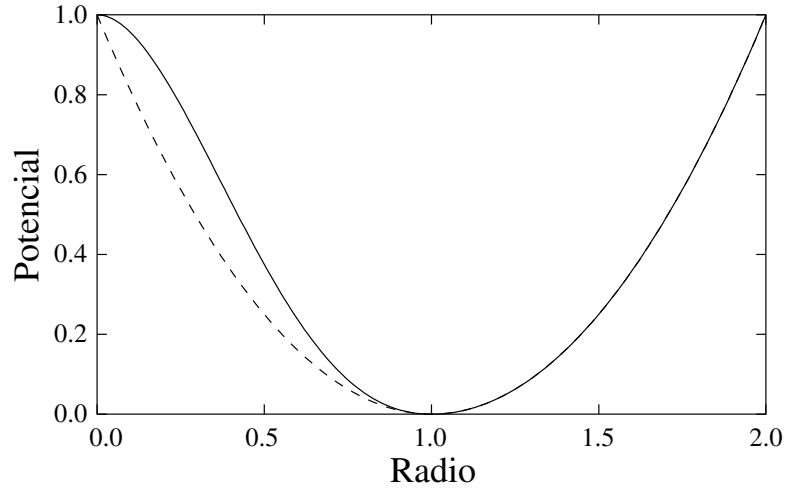


Figura 4.8: Potencial confinante parabólico para un anillo con (línea continua) y sin (línea discontinua) corrección de anarmonicidad.

El modelo utilizado por Puente y Serra conduce inevitablemente a una interpretación alternativa de los experimentos en el FIR, según la cual la muestra experimental (Ref.[37]) debía contener una mezcla de (al menos) dos tipos de anillos. Además, los cambios en energías de transición a $B = 8$ T ya no se asignan a una oscilación AB sino a un cruzamiento entre niveles energéticos de los dos tipos de anillos. Un primer tipo de anillos, bien formado, se describiría con los mismos parámetros de potencial empleados anteriormente en las Refs. [37, 188]. El segundo tipo de anillos estaría formado por QDs que no han completado la transformación morfológica. Estos últimos podrían describirse como anillos con barrera de potencial interior baja (y por tanto densidad electrónica casi compacta). La hipótesis de una distribución

bimodal de tamaños de anillos concuerda con recientes observaciones espectroscópicas de anillos auto-ordenados en el infrarrojo cercano.[80, 81, 38]

En esta sección calculamos los espectros de absorción en el FIR de uno y dos electrones en anillos auto-ordenados de InAs/GaAs. El objetivo es proporcionar una interpretación última a los experimentos de Lorke en base a un modelo tridimensional, libre de ajustes empíricos de parámetros. Como veremos, nuestros resultados muestran que los espectros de absorción combinados de dos tipos de anillos son cualitativamente comparables con los datos experimentales. Además, nuestro modelo demuestra estar exento de todas las limitaciones de los modelos bidimensionales arriba enumeradas. De hecho, ésta es la primera descripción teórica que es capaz de explicar *todas* las resonancias experimentales de la Ref. [37], incluyendo las representadas con cruces (ver Figura 4.10).

Investigamos tres nanoestructuras auto-ordenadas. La primera estructura (QD1) es un QD compacto, la segunda (QR1) es un QR con radio interior pequeño, $R_{in} = 1$ nm, y la tercera (QR2) es un QR con un radio interior del tamaño medido por AFM en anillos auto-ordenados antes de su recubrimiento, $R_{in} = 10$ nm. Las tres estructuras tienen un radio exterior de 63 nm y una altura de 4.5 nm, ambos valores próximos a las dimensiones observadas por AFM.[37, 187] El QD tiene forma de lente y los anillos de toro cortado con pared interior vertical (Figura 4.4). Aunque experimentalmente no se ha determinado si los anillos están compuestos por InAs puro o por una aleación de InGaAs, nosotros asumimos InAs puro en las tres estructuras (utilizamos los mismos parámetros que en las secciones previas). De esta manera evitamos introducir arbitrariedades sobre el grado de difusión de Ga en el anillo. Además, se espera que una aleación de InGaAs produzca resultados similares a los que obtenemos aquí, puesto que el incremento de la masa efectiva del electrón debido a la presencia de Ga quedaría contrarrestada por menores efectos de fuerzas de tensión y, por tanto, un menor incremento de la masa efectiva inducido por las mismas.³ Para el cálculo de la absorción utilizamos las expresiones derivadas en la Sección 1.4.1.⁴ Así pues, asumimos luz no polarizada (si bien la mayor parte de la intensidad procede de las componentes de radiación en el plano del anillo) y asumimos

³El principal efecto de las fuerzas de tensión hidrostáticas es incrementar la energía de *gap*. Este efecto, junto con la no parabolicidad, conducen a masas efectivas del electrón incrementadas. De este modo obtenemos masas efectivas que describen bien el experimento sin necesidad de ajustar los parámetros de los materiales como en la Ref. [132].

⁴Para la absorción monoeléctronica empleamos la Ecuación 1.56. Para la bielectrónica, la absorción se calcula combinando la Ecuación 1.56 entre las distintas funciones envolventes monoeléctronicas que componen la función de onda bielectrónica (Sección 1.5).

$T = 0$ K, de modo que únicamente se calculan las transiciones que parten del estado fundamental. Las probabilidades de transición se representan mediante curvas Lorentzianas de anchura media $\Gamma = 0.5$ meV.

4.3.1 Absorción de sistemas monoelectrónicos

La Figura 4.9 ilustra la zona de baja energía del espectro de absorción FIR de un electrón en QD1, QR1 y QR2 para $B = 0.5, 1, 1.5, \dots, 12$ T. Las intensidades se dan en unidades arbitrarias y han sido separadas verticalmente para una mayor claridad.

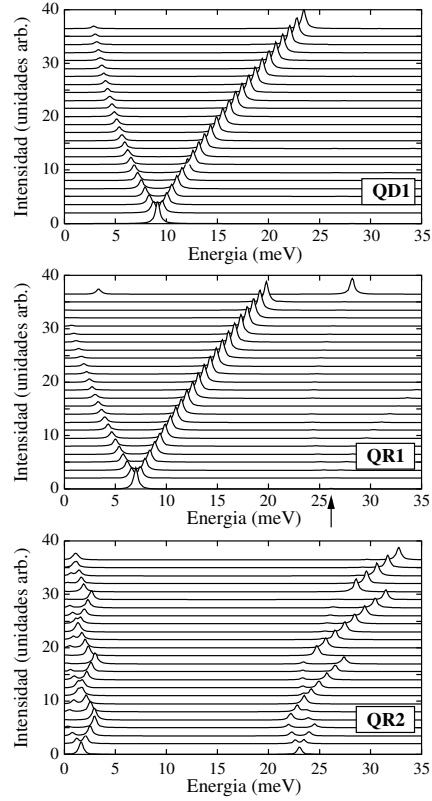


Figura 4.9: Espectros de absorción FIR de un electrón en QD1 (arriba), QR1 (medio) y QR2 (abajo) a $T = 0$ K. Los espectros han sido calculados para $B = 0 - 12$ T en intervalos de 0.5 T. La flecha en QR1 señala la posición de la resonancia $\Delta n = 1, \Delta m = \pm 1$. [40]

Los espectros de QD1 muestran un único pico visible en ausencia de campo magnético, a 9.1 meV. Este pico corresponde a las transiciones $\Delta n =$

0, $\Delta m = \pm 1$. La aplicación de un campo magnético desdobra el espectro en dos ramas. Una rama, que decrece en energía e intensidad al aumentar el campo, proviene de la transición $\Delta n = 0, \Delta m = -1$. La otra rama, que crece monotónicamente en energía sin perder intensidad, proviene de la transición $\Delta n = 0, \Delta m = 1$. Estos espectros son típicos de QDs en un campo magnético, donde en general solamente se observan dos resonancias, una decreciente en energía y otra creciente.[70, 98]

Los espectros de QR1 son parecidos a los de QD1, excepto por dos rasgos importantes. En primer lugar, a 12 T ambas ramas, la de $\Delta m = 1$ y la de $\Delta m = -1$, experimentan un desplazamiento abrupto hacia mayores energías. Esto es el reflejo del primer cruzamiento en el estado fundamental de QR1, de $m = 0$ a $m = -1$, que tiene lugar a 11.6 T, ya que el cambio en el estado fundamental conlleva cambios pronunciados en las posibles transiciones. En segundo lugar, aparece un pico nuevo a 26.1 meV en ausencia de campo magnético, correspondiente a las transiciones $\Delta n = 1, \Delta m = \pm 1$. Este pico, que está señalado con una flecha en la Figura 4.9, es todavía muy pequeño (sólo el 4% de la intensidad de la resonancia $\Delta n = 0$). Sin embargo, es un orden de magnitud más intenso que en el caso de QD1. Tanto el desplazamiento abrupto en energías de resonancias en presencia de un campo magnético como la presencia de una resonancia $\Delta n = 1$ de intensidad apreciable son rasgos distintivos del potencial confinante anular.

En el caso de QR2, la geometría de anillo está mucho mejor definida (no existe apenas densidad de carga distribuida en la cavidad). Consecuentemente, los rasgos propios de geometría anular en el espectro de absorción FIR son mucho más visibles: a $B = 0$ se observan ya dos picos de intensidad comparable. Al aplicar un campo magnético, ambos picos se desdobl原因 en ramas $\Delta m = -1$ y $\Delta m = 1$. Las energías de las transiciones $\Delta n = 0$ (baja energía) describen una evolución en zig-zag que revela las oscilaciones AB de la estructura energética (ver Figura 4.6 izquierda). Las energías de las resonancias más intensas de transiciones $\Delta n = 1$ (alta energía) también exhiben desplazamientos energéticos abruptos provocados por las oscilaciones AB. Por otro lado, en contra de lo que sucede en los casos de QD1 y QR1, las rápidas oscilaciones en el estado fundamental de QR2 impiden que las resonancias alcancen energías entre 5 meV y 20 meV. Este *gap* de energía parece ser característico de anillos auto-ordenados bien formados.[201]

Los espectros de QR2 son sólo capaces de reproducir un número limitado de las características de los espectros experimentales FIR de un electrón en anillos auto-ordenados.[39] Se ha sugerido que la muestra experimental pudiera contener una mezcla de anillos bien formados más anillos parcialmente formados,[201] o incluso QDs grandes que no han evolucionado a

anillos.[37] Para estudiar estas posibilidades, en la Figura 4.10 representamos los espectros de magneto-absorción combinados de un electrón en QR1 y en QR2. Utilizamos líneas continuas para la absorción de QR1 y líneas discontinuas para la de QR2. Las resonancias experimentales se simbolizan igual que en la Ref. [188] con el fin de ilustrar la manera en que las resonancias fueron agrupadas originalmente.

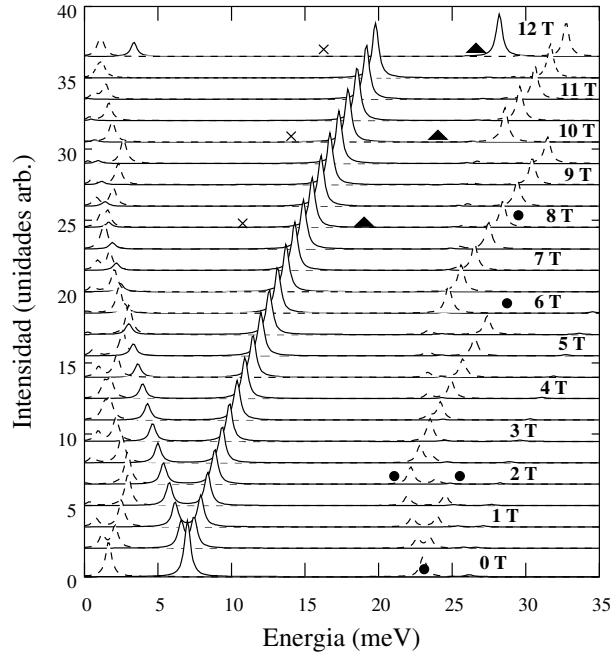


Figura 4.10: Espectros de absorción FIR combinados de un electrón en QR1 y en QR2 a $T = 0$ K. Los espectros han sido calculados para $B = 0 - 12$ T en intervalos de 0.5 T. Las líneas continuas representan QR1 y las discontinuas QR2. Los símbolos indican las energías de las resonancias experimentales.[40]

Debe subrayarse que en el experimento,[37, 188] el ruido de fondo no permitió la detección de resonancias por debajo de 10 meV. En la Figura 4.10 se observa que los círculos están razonablemente descritos por QR2. Únicamente el círculo a $B = 6$ T parece desviarse significativamente de la correspondiente resonancia calculada. Sin embargo, su energía está muy próxima a la de la resonancia calculada a $B = 5.5$ T, por lo que parece probable que el cambio de estado fundamental (de $m = -1$ a $m = -2$) que nosotros predecimos a $B = 5.8$ T realmente tenga lugar a $B \geq 6$ T.

La comparación entre las resonancias de QR1 con las cruces y los triángulos es menos satisfactoria. La rama $\Delta m = 1$ de QR1 yace en energías intermedias entre las de las cruces y las de los triángulos. Aunque la pendiente de la rama calculada coincide con la de ambos tipos de resonancias experimentales, es difícil determinar si la rama está reproduciendo aproximadamente las cruces o los triángulos. Lo que sí parece claro es que, en cualquier caso, solamente uno de los dos tipos de resonancias podría ser justificado por esta rama. En la siguiente subsección retomaremos el problema de esta asignación.

Es interesante notar que, si incluyéramos la absorción de QD1 en la Figura 4.10, el resultado no variaría sustancialmente porque ésta es muy parecida a la de QR1 (a $B < 11$ T).

4.3.2 Absorción de sistemas bielectrónicos

La Figura 4.11 muestra la zona de baja energía del espectro de absorción FIR de dos electrones interactuantes en QD1, QR1 y QR2 para $B = 0.5, 1, 1.5, \dots, 12$ T.

Se puede ver que la absorción de dos electrones en QD1 es muy similar a la de un electrón, excepto por una intensidad significativamente mayor y un desdoblamiento pequeño (< 1.5 meV) de la rama $\Delta M = 1$ a campos $B > 7.5$ T.⁵ Este resultado era esperable porque los QDs auto-ordenados se pueden describir aproximadamente utilizando un potencial confinante parabólico simple, el cual permite separar el Hamiltoniano del centro de masas y el Hamiltoniano de movimientos relativos. En estas condiciones, el teorema de Kohn impide que la espectroscopía de excitación revele efectos de interacción electrónica.[18] Contrariamente, la cavidad de los anillos impide esta separación del Hamiltoniano, luego el teorema de Kohn no es aplicable y los espectros de absorción de dos electrones en QR1 y QR2 exhiben diferencias considerables respecto al caso monoelectrónico.

A campos magnéticos pequeños ($B < 5.0$ T), el espectro de QR1 es semejante al del caso monoelectrónico. Sin embargo, a 5.1 T tiene lugar un cruzamiento en la energía del estado fundamental (nótese que la interacción bielectrónica ha disminuido el valor del campo de este primer cruce) que da lugar a cambios en el espectro de absorción. Por un lado, se observa un desplazamiento abrupto en la rama $\Delta M = -1$. Por el otro lado, la rama $\Delta M = 1$ se desdobra en dos ramas paralelas. Una de ellas es la prolongación de la rama $\Delta M = 1$ previa a $B = 5.0$ T, pero la otra se encuentra

⁵Este desdoblamiento no se observaría en un QD perfectamente parabólico.

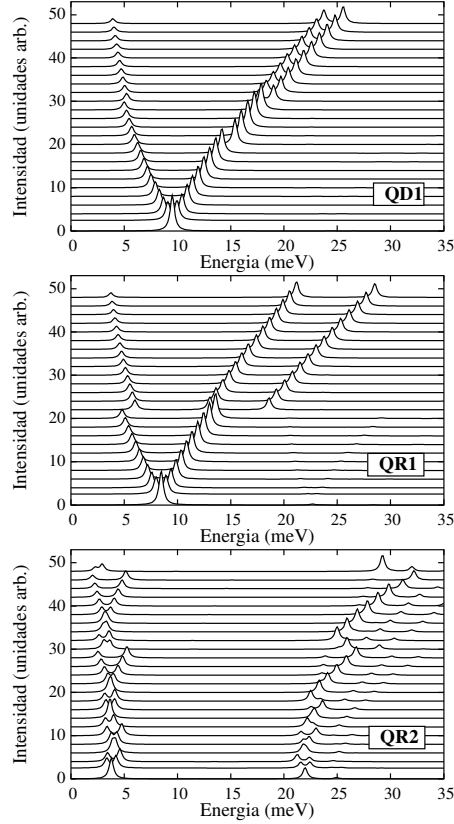


Figura 4.11: Espectros de absorción FIR de dos electrones en QD1 (arriba), QR1 (medio) y QR2 (abajo) a $T = 0$ K. Los espectros han sido calculados para $B = 0 - 12$ T en intervalos de 0.5 T.[40]

abruptamente desplazada hacia energías más altas. Estas ramas $\Delta M = 1$ de baja y alta energía se originan a partir de transiciones $\Delta N = 0$ y $\Delta N = 1$, respectivamente. Es interesante subrayar que esta doble rama $\Delta M = 1$ no se ha encontrado en cálculos anteriores de anillos con confinamiento interior débil.[201]

La influencia de la cavidad en los espectros de QR2 es todavía más notable: tanto las resonancias de baja energía, $\Delta N = 0$, como las de alta energía, $\Delta N = 1$, son visibles a $B = 0$, y las rápidas oscilaciones AB originan varios desplazamientos pequeños de las energías de las resonancias, así como un *gap* energético entre 7 y 20 meV. El efecto más visible de la interacción electrón-electrón en la absorción FIR de QR2 es un incremento en el número

de desplazamientos de energía inducidos por el efecto AB fraccional.

En la Figura 4.12 se ilustran los espectros de absorción bielectrónicos combinados de de QR1 y QR2. Las líneas continuas corresponden a QR1 y las discontinuas a QR2. Los datos experimentales están representados por los mismos símbolos que en la Ref. [37]. Puede notarse que el número de resonancias experimentales detectadas es mayor que en el caso de un electrón, debido a la mejor relación señal/ruido de fondo.

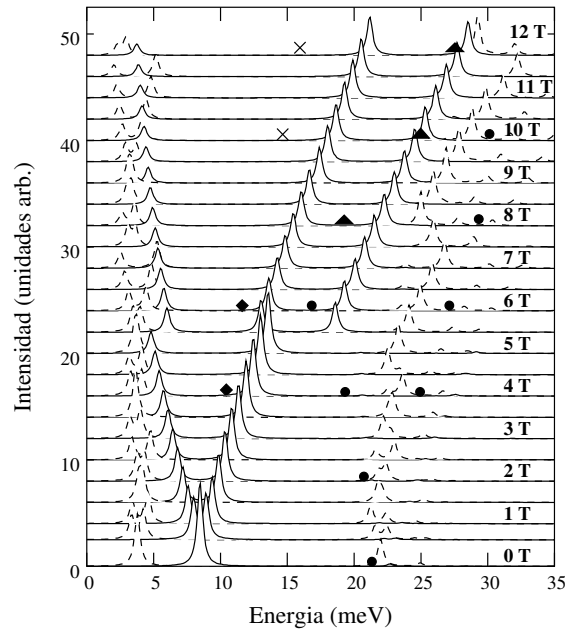


Figura 4.12: Espectros de absorción FIR combinados de dos electrones en QR1 y QR2 a $T = 0$ K. Los espectros han sido calculados para $B = 0 - 12$ T en intervalos de 0.5 T. Las líneas continuas representan QR1 y las discontinuas QR2. Los símbolos indican las energías de las resonancias experimentales.[40]

Los círculos están bastante bien descritos por la absorción de QR2. La única excepción es el círculo a $B = 6$ T, que no asignamos a QR2 sino a la rama $\Delta N = 1, \Delta M = 1$ de QR1. Los triángulos también están bien descritos por la rama $\Delta N = 1, \Delta M = 1$ de QR1. Por último, la rama $\Delta N = 0, \Delta M = 1$ rinde cuenta de los diamantes y las cruces. Así pues, a pesar de que algunos puntos experimentales sólo son descritos cualitativamente, se puede concluir que la Figura 4.12 presenta una asignación completa de las resonancias medidas en la Ref.[37]. Además, las intensidades de las

resonancias de baja energía y alta energía son del mismo orden, conforme al experimento.

Nuestra asignación difiere de la propuesta por otros autores que utilizaron potencial confinante parabólico,[37, 188, 190] y se asemeja en cambio a la propuesta por Puente y Serra en base a un modelo de potencial confinante parabólico con corrección de anarmonicidad.[201] Sin embargo, nuestros cálculos aventajan todos los anteriores al conseguir ofrecer una explicación para las resonancias simbolizadas por cruces, que carecían de interpretación hasta la fecha.

Asumir una mezcla de QD1 y QR2 no podría explicar los triángulos en la Figura 4.12, ya que la rama $\Delta N = 1$, $\Delta M = 1$ de QD1 está demasiado próxima en energía a la $\Delta N = 0$, $\Delta M = 1$ (ver Figura 4.11).

Adicionalmente, los resultados bielectrónicos sugieren que las cruces en el sistema monoeléctrico (Figura 4.11) deben asignarse a la rama $\Delta n = 0$, $\Delta m = 1$ de QR1, mientras que los triángulos podrían corresponder a la rama $\Delta n = 1$, $\Delta m = 1$, que no está permitida a $T = 0$ K, pero estaría permitida a temperatura finita cuando el primer nivel excitado está parcialmente poblado.

Al igual que la Ref. [201], nuestros cálculos indican que los cambios espectrales característicos encontrados en el experimento a $B = 8$ T no son debidos a oscilaciones AB, sino a un cruzamiento entre las resonancias de los dos tipos de anillos. Así, la verdadera evidencia de geometría anular en el espectro de absorción FIR experimental es la presencia de una resonancia intensa entre 20-23 meV en ausencia de un campo magnético. Esta resonancia ha sido precedida teóricamente por varios modelos tridimensionales[132, 89, 39] que describían estructuras similares a QR2.

Es también remarcable el hecho de que nuestros cálculos reproducen bien la resonancia a $B = 0$ T tanto en el caso monoeléctrico (Figura 4.11) como en el bielectrónico (Figura 4.12). Esto evidencia que nuestro modelo ofrece una estimación correcta de la energía de interacción coulombica (3-5 meV a $B = 0$), contrariamente a lo que sucede con modelos bidimensionales (entre 7 y 11 meV).[190, 207] Las energías de interacción coulombica que precedimos son también inferiores a los 20 meV inferidos por Lorke *et al.* a partir de experimentos de capacitancia.[37] Esta energía es sorprendentemente grande para una estructura con las dimensiones de un anillo auto-ordenado. Los autores del experimento apuntaron a la ausencia de la región central en un anillo como posible responsable de la misma. Sin embargo, nuestro modelo predice que una energía de interacción tan grande no es posible ni siquiera en anillos estrechos si mantenemos el radio interior de 10 nm, precisamente porque la densidad de carga electrónica se distribuye sobre la cavidad antes

de permitir una interacción tan fuerte.

4.4 Magnetización

En la sección anterior hemos conseguido reproducir los espectros de magneto-absorción FIR de QRs auto-ordenados asumiendo geometría anular. Sin embargo, la resolución de estos espectros experimentales es baja[37, 188], motivo por el que sería interesante disponer de alguna técnica experimental complementaria que permitiera una confirmación de la topología de nanoestructuras enterradas en una matriz semiconductor.

Las mediciones de magnetización han demostrado ya su utilidad para estudiar la estructura electrónica de QDs, donde superan en algunos aspectos a técnicas como la absorción FIR o experimentos de transporte.[208, 209, 210] Por ejemplo, en QDs parabólicos con un número reducido de electrones, el teorema de Kohn generalizado impide que las transiciones dipolares manifiesten efectos de interacción electrónica. En cambio, los estudios de magnetización han permitido observar algunos de estos efectos, tales como las transiciones espín-singulete-espín-triplete en el estado fundamental.[211] Muy recientemente también se ha resaltado la utilidad de la magnetización como herramienta para investigar la reducción de simetría en QDs.[212, 213] En esta sección demostramos que la magnetización puede ser utilizada además para determinar de manera clara e inambigua la topología de nanoestructuras auto-ordenadas.

La magnetización total de un punto (o anillo) cuántico a temperatura $T = 0$ K viene definida por

$$M = -\frac{\partial E_{tot}}{\partial B}, \quad (4.4)$$

donde E_{tot} es la energía total para un sistema de N electrones, que calculamos con la Ecuación 1.41 para sistemas monoelectrónicos e integrando el Hamiltoniano 1.63 para sistemas bielectrónicos.

Calculamos la magnetización de un electrón y dos electrones en QDs y anillos cuánticos auto-ordenados de InAs/GaAs. Los parámetros de material y la forma de las estructuras son los mismos que en las secciones previas. La altura es de 4.5 nm en todos los casos, y fijamos el radio exterior en el valor experimental aproximado de 60 nm, variando el radio interior desde 0 hasta 10 nm. Es importante remarcar que la magnitud finita del potencial confinante que utilizamos ($V_c = 0.77$ eV) permite que una pequeña parte de la densidad de carga electrónica se extienda sobre la cavidad de los anillos. Por este motivo, introducir una cavidad central en realidad no cambia la

topología de la distribución de densidad de carga de simple a doblemente conectada. En lugar de ello, la cavidad produce una transición más bien gradual. Asumir barreras confinantes más altas exaltaría el carácter de anillo de la estructura electrónica.[201] Nuestras conclusiones, sin embargo, se derivan del uso de un potencial confinante finito y realista.

La Figura 4.13 representa la magnetización de un electrón en una serie de nanoestructuras auto-ordenadas con radio interior creciente. Las curvas han sido separadas verticalmente 1.0 meV/T para mayor claridad. De abajo a arriba, las curvas corresponden a $R_{in} = 0, 1, 2, 5$ y 10 nm.

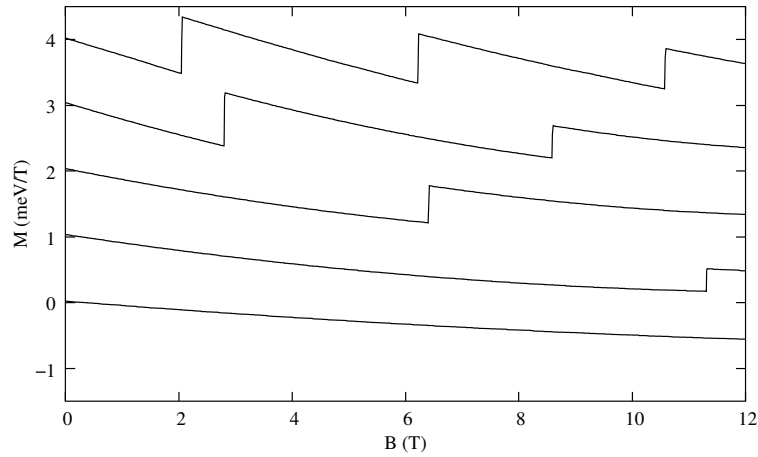


Figura 4.13: Magnetización de un electrón en nanoestructuras auto-ordenadas con radio interior creciente. De abajo a arriba las líneas corresponden a $R_{in} = 0, 1, 2, 5$ y 10 nm.[41]

En el límite de un QD ($R_{in} = 0$), la magnetización es continua en todo el rango de campo magnético estudiado. En cambio, un radio interior tan pequeño como $R_{in} = 1$ nm basta para encontrar un escalón a 11.3 T. Este escalón está originado por el cambio de momento angular en el estado fundamental que se observa en la Figura 4.5B. Al incrementar el radio interior, el escalón crece en altura y se desplaza hacia campos magnéticos más débiles. Esto es así por el incremento en la pendiente de los niveles de energía frente al campo magnético a medida que la sección del anillo se estrecha.[89] Un radio interior de $R_{in} = 5$ nm ya da lugar a dos escalones, que pueden verse a 2.8 y 8.6 T. Estos escalones se corresponden con los cruzamientos en la energía del estado fundamental mostrados en la Figura 4.5C. Por último, un radio interior de $R_{in} = 10$ nm da lugar a tres escalones a 2, 6.2 y 10 T. Las curvas de magnetización no son periódicas, debido a la penetración del

campo magnético en la región del anillo. La Figura 4.13 también muestra que los escalones son más pequeños cuanto mayor es el campo magnético, como resultado de los menores cambios de pendiente en los cruzamientos de energía (Figura 4.5). En conclusión, la magnetización de un electrón en un QD o en un QR es inambiguamente diferenciable. Además, las diferencias pueden observarse a valores bajos del campo magnético incluso para anillos con cavidades tan pequeñas como $R_{in} = 1$ nm.

En QDs es sabido que la interacción electrón-electrón desplaza los escalones de la magnetización hacia campos más débiles.[214] Nos podemos preguntar entonces si la magnetización de dos electrones permite determinar la topología del potencial confinante a campos magnéticos aún más débiles que en el caso monoeléctrico. Para responder a esta cuestión, en la Figura 4.14 se ilustran las curvas de magnetización de dos electrones en las mismas estructuras que las estudiadas para un solo electrón. Las curvas se han separado verticalmente 1.0 meV/T.

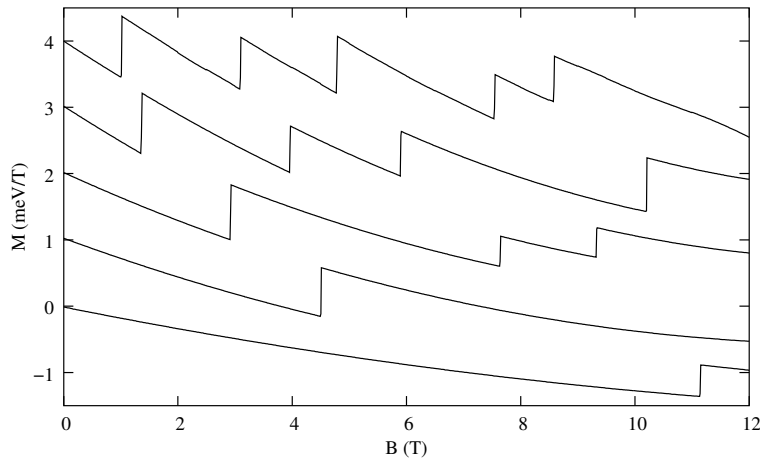


Figura 4.14: Magnetización de dos electrones en nanoestructuras auto-ordenadas con radio interior creciente. De abajo a arriba las líneas corresponden a $R_{in} = 0, 1, 2, 5$ y 10 nm.[41]

La figura confirma que los escalones en la magnetización de dos electrones aparecen a campos magnéticos inferiores a los de un electrón. Esto es debido principalmente a la energía de intercambio. Además, llama la atención es la presencia de un escalón en la magnetización del punto cuántico, a $B = 11.15$ T, cuando en el caso monoeléctrico (Figura 4.13) no había ninguno. El origen de este nuevo escalón es la transición de espín-singulete-espín-triplete inducida por la energía de intercambio en el estado fundamental de QDs con

dos electrones.[106] El estado fundamental de QRs también presenta estas transiciones de espín, pero a campos magnéticos sensiblemente más débiles.

Las Figuras 4.13 y 4.13 sugieren que un análisis de la magnetización permite determinar la topología de estructuras auto-ordenadas de InAs/GaAs con uno o dos electrones. La morfología anular viene determinada por la presencia y la posición de los escalones de magnetización, que aparecen a campos magnéticos muy inferiores a los de un QD incluso para cavidades pequeñas. Además, el estudio de la topología mediante la magnetización puede complementarse con estimaciones sobre la simetría circular de la nanoestructura, ya que una reducción de esta simetría implica esencialmente variaciones en el tamaño de los escalones pero no en su posición.[212, 213]

Los resultados recién expuestos constituyen el primer estudio de magnetización en anillos nanoscópicos con electrones interactuantes. El único estudio anterior de magnetización en anillos nanoscópicos utiliza la aproximación de partículas independientes,[89] a pesar de que se sabe que en QDs los efectos de intercambio y de correlación tienen una fuerte influencia sobre la magnetización.[208, 214] Para clarificar el papel de la interacción coulombica sobre el momento magnético de anillos auto-ordenados, en la Figura 4.15 se muestran las curvas de magnetización de uno y dos electrones en un QR con $R_{in} = 5$ nm, así como las de un QD para su comparación. Las Figuras 4.15a y 4.15b representan la magnetización de un electrón en un punto y en un anillo cuántico, y las Figuras 4.15c y 4.15d representan la magnetización de dos electrones en un punto y en un anillo cuántico, respectivamente. En las Figuras 4.15c y 4.15d se utilizan líneas continuas para electrones interactuantes, y líneas discontinuas para electrones no interactuantes.

La magnetización de dos electrones no interactuantes puede construirse simplemente a partir de los niveles monoeléctricos de la Figura 4.5 asumiendo ocupación de los dos espín-orbitales más bajos (que no están exactamente degenerados debido al desdoblamiento Zeeman). Así pues, en un QD la magnetización de dos electrones no interactuantes es igual que la de un solo electrón pero aproximadamente el doble en magnitud. Solamente al incluir la repulsión coulombica es posible observar algún escalón en la curva de magnetización, procedente de las transiciones singulete-triplete. Además, puede verse que la interacción electrón-electrón aumenta la magnitud de la magnetización en campos $B < 11$ T. El motivo de este fenómeno es que la repulsión coulombica extiende la densidad de carga del estado fundamental a mayores valores de $\langle \rho \rangle$ que en el caso no interactuante, con el consiguiente aumento de la contribución diamagnética.[214]

En el QR, la magnetización de dos electrones es claramente diferente a la de un electrón incluso en ausencia de interacción coulombica. Para entender

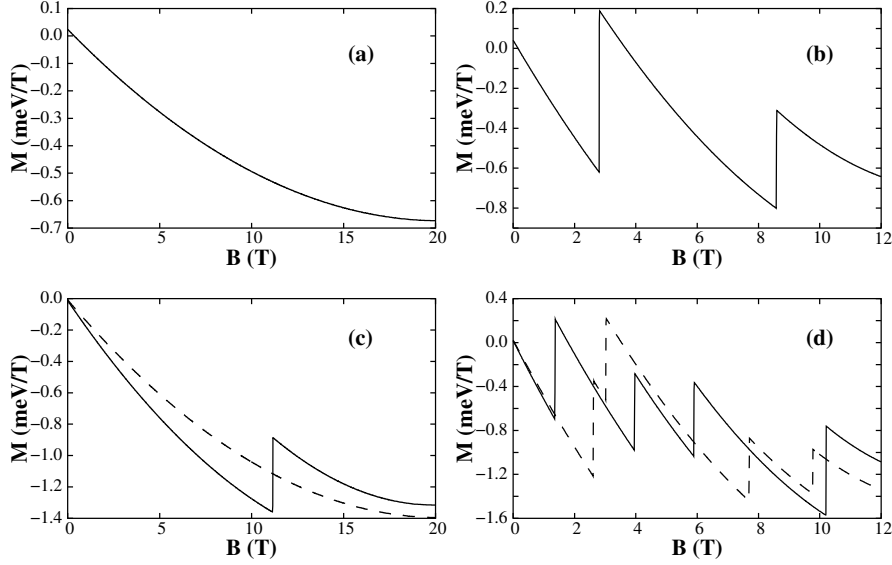


Figura 4.15: Magnetización de un electrón en un QD (a), un electrón en un QR con $R_{in} = 5$ nm (b), dos electrones en un QD (c) y dos electrones en un QR con $R_{in} = 5$ nm (d). En (c) y (d) las líneas continuas representan electrones interactuantes y las discontinuas electrones no interactuantes.[41]

este aspecto es necesario tener en cuenta la influencia del término Zeeman atómico sobre la energía monoeléctronica. En ausencia de efecto Zeeman atómico, los estados $\sigma = \uparrow$ y $\sigma = \downarrow$ en la Figura 4.5d estarían degenerados y la magnetización de los electrones no interactuantes sería similar a la de un solo electrón pero de mayor magnitud. Ahora bien, el término Zeeman atómico rompe la degeneración de los niveles $\sigma = \uparrow$ y $\sigma = \downarrow$ a $B \neq 0$. Esto origina estrechos dominios de campo magnético, alrededor de las energías de los cruzamientos en el estado fundamental monoeléctronico, donde el estado fundamental bielectrónico tiene espín triplete (alrededor de 2 T y de 8 T en la Figura 4.5D). Estos estados tripletes son los que dan pie a los escalones de magnetización adicionales que no se observan en el caso de un solo electrón. Asimismo, los dominios de estado fundamental triplete se ensanchan a medida que el campo magnético crece, debido a la mayor contribución del efecto Zeeman sobre la energía y a la menor pendiente de los niveles de energía próximos al estado fundamental.

Por otro lado, la inclusión de la interacción culómbica da lugar a cambios importantes en la magnetización del anillo:

- La posición de los escalones es muy diferente a la del caso no interactuante debido a variaciones en el espaciado entre niveles energéticos y a interacciones de intercambio, que favorecen la configuración triplete del estado fundamental.
- Los escalones correspondientes a estado fundamental triplete son más altos como consecuencia del intercambio coulombico.

En resumen, tanto el desdoblamiento Zeeman atómico (que es a menudo despreciado en cálculos de anillos auto-ordenados, argumentando su contribución relativamente pequeña a la energía[37, 190, 207, 132, 38]) como las correlaciones electrónicas, son esenciales para una descripción realista de las propiedades magnéticas de QRs.

4.5 Estructura energética de un hueco en un campo magnético

La mayoría de estudios teóricos sobre estados de huecos de la BV en QRs se han realizado empleando modelos de una sola banda con masa de HH. [76, 194, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225] En esta aproximación, la estructura energética de huecos en presencia de un campo magnético es, naturalmente, similar a la de electrones. Las diferencias que se observan derivan esencialmente de la mayor masa efectiva de los HHs en comparación con los electrones de conducción. En estructuras auto-ordenadas las fuerzas de tensión debilitan el acoplamiento entre las subbandas de HH y de LH,[91] lo que eventualmente puede justificar que sólo se consideren HHs para la descripción de estados excitónicos o de huecos poco excitados. Sin embargo, la aproximación de una banda para huecos suele sufrir deficiencias incluso para los estados más bajos. Para suplirlas, deben realizarse ajustes empíricos de la masa efectiva y potencial confinante en función de la forma del QD investigado y del grado de excitación del estado de huecos.[24] Además, al despreciar la contribución de los LHs se pierden canales permitidos de transiciones dipolares.

Los primeros estudios en anillos auto-ordenados que consideraron el acoplamiento entre las bandas de HH y LH pusieron de manifiesto la relevancia de esta mezcla sobre la estructura energética de la BV.[132, 226]

Asimismo, la descripción de niveles energéticos de huecos en QRs en presencia de un campo magnético utilizando un modelo multibanda planteó un problema interesante: en contra de lo que se observa en el caso de electrones, la energía de los huecos no parecía describir oscilaciones AB (Figura

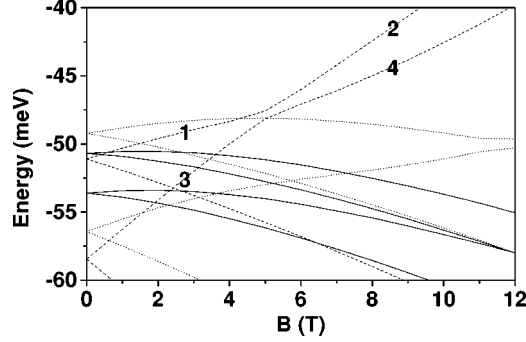


Figura 4.16: Niveles de energía de los estados ligados de huecos en un anillo auto-ordenado de InAs en función del campo magnético según la Ref.[132]. El trazado de las líneas está relacionado con la simetría de cada estado.

4.16). En primera instancia, estos resultados se interpretaron como consecuencia de la continua variación del grado de acoplamiento entre HH y LH (y, por tanto, de las masas efectivas) con campos magnéticos crecientes.[132] Posteriormente, la discusión de este problema se trasladó a la manera en que se había introducido el término de interacción magnética en el Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda (ver Sección 1.2.2).[42] En la formulación original del Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas para huecos, el término de interacción magnética se introduce en el Hamiltoniano de un electrón libre en el cristal después de haber realizado las aproximaciones $k \cdot p$ y EFA.[88] En el Hamiltoniano de huecos así obtenido, que se muestra en la Tabla 1.3, el término de interacción magnética no es diagonal. Denominamos a este Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_L$.

Ahora bien, un tratamiento más exacto requeriría introducir el término de interacción magnética en el Hamiltoniano antes de aplicar las aproximaciones $k \cdot p$ y EFA. Al hacerlo, el Hamiltoniano de cuatro bandas presenta un término de interacción magnética diagonal, conforme se observa en la Tabla 1.2. Denominamos a este Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$.

El Hamiltoniano utilizado en la Ref. [132] para determinar la estructura energética de huecos en anillos auto-ordenados en presencia de un campo magnético es similar a $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ pero con los términos de interacción magnética promediados. Denominamos a este último Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{pr}$.

Aunque un análisis comparativo reveló que $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ y $\hat{\mathcal{H}}_{pr}$ dan resultados similares entre sí y diferentes a los de $\hat{\mathcal{H}}_L$, no se contrastaron resultados con datos experimentales que pudieran dar soporte a una u otra formulación del

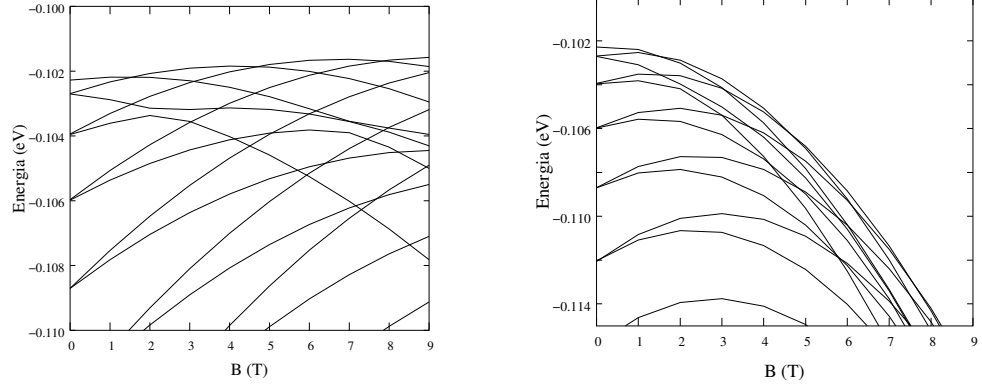


Figura 4.17: Niveles de energía de huecos vs. campo magnético en un anillo auto-ordenado de InAs, calculados con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$. El coeficiente másico frente al término magnético lineal es un promedio entre la masa de HH y LH. Los coeficientes frente al término magnético cuadrático son las masas de HH y LH (izquierda) y los mismos coeficientes que en la segunda derivada de ρ del término cinético en la Tabla 1.1 (derecha). Sólo los estados con $F_z < 0$ están representados.

Hamiltoniano de cuatro bandas.[42] También la elección de los coeficientes másicos que deben acompañar al término de interacción magnética quedó como un punto abierto pendiente de exploración (Sección 1.2.2). La Figura 4.16 se obtiene utilizando las masas de HH y LH frente al término magnético, pero es posible esperar que otros coeficientes másicos sean más apropiados.

En la Figura 4.17 se muestra la evolución frente a un campo magnético de los niveles energéticos de huecos en un anillo auto-ordenado similar al descrito en la Ref. [132], pero empleando $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ y diferentes coeficientes másicos. En 4.17 izquierda, los coeficientes frente al término magnético cuadrático son las masas del HH y del LH, mientras que los coeficientes frente al término magnético lineal son el promedio de las masas del HH y el LH. En 4.17 derecha, los coeficientes frente al término magnético cuadrático son de nuevo las masas de HH y LH, pero los coeficientes frente al término lineal son los mismos que acompañan las derivadas segundas en ρ en el término cinético del Hamiltoniano. Sólo se han representado los estados con $F_z < 0$. La Figura 4.17 izquierda, por su semejanza con el espectro de electrones de la BC, parece ofrecer resultados más razonables que la Figura 4.17 derecha o que la Figura 4.16. En cualquier caso, la sensibilidad de los estados de huecos a la selección de los coeficientes másicos del término de interacción magnética (al menos en el caso de anillos, donde el carácter diamagnético

es muy importante) urge una constatación empírica de la estructura energética real de huecos en un campo magnético externo. En la sección 4.6.2 mostraremos que los coeficientes empleados para la Figura 4.17 izquierda reproducen satisfactoriamente la estructura energética de huecos inferida a partir de experimentos de magneto-PL en anillos auto-ordenados.[81]

4.6 Transiciones ópticas interbanda

Existen diversos experimentos que investigan transiciones ópticas[16, 17, 80, 101, 79] y magneto-ópticas[81] de QRs auto-ordenados en el NIR. Estos trabajos demuestran que la estructura energética de los anillos auto-ordenados difiere en general de la de los QDs que los originan. En la mayoría de los casos, sin embargo, estos trabajos no vienen acompañados por estudios teóricos que vinculen sólidamente los resultados con la estructura energética de un QR.

En esta sección usamos los Hamiltonianos de electrones y huecos independientes desarrollados en el Capítulo 1 para calcular los espectros de anillos auto-ordenados en el NIR. Los cálculos, que utilizan parámetros geométricos y de material asociados a los anillos de In(Ga)As/GaAs previos al recubrimiento, están cualitativamente de acuerdo con los diversos experimentos que investigamos. De esta manera, proveemos la primera interpretación teórica de los espectros de QRs auto-ordenados en el NIR basada en un modelo tridimensional.

Describimos los estados electrónicos por el Hamiltoniano de masa efectiva, considerando efectos de no parabolicidad de la BC y potencial confinante escalonado. La ecuación correspondiente, incluyendo un campo magnético perpendicular al plano del anillo, puede escribirse en unidades atómicas como:

$$\left(-\frac{1}{2m^*(E_{n,m})} \Delta + \frac{(B\rho)^2}{8m^*(E_{n,m})} + \frac{Bm}{2m^*(E_{n,m})} + \frac{1}{2} \mu_B g B \sigma + V(\rho, z) - E_{n,m} \right) f_{n,m}^e = 0, \quad (4.5)$$

donde $m^*(E_{n,m})$ es la masa efectiva dependiente de la energía, Eq. 1.15, y $V(\rho, z)$ es el potencial confinante, que se corresponde con la forma de anillos y QDs mostrados en la Figura 4.18.⁶

⁶El resto de parámetros se han definido en la Sección 1.1.1.

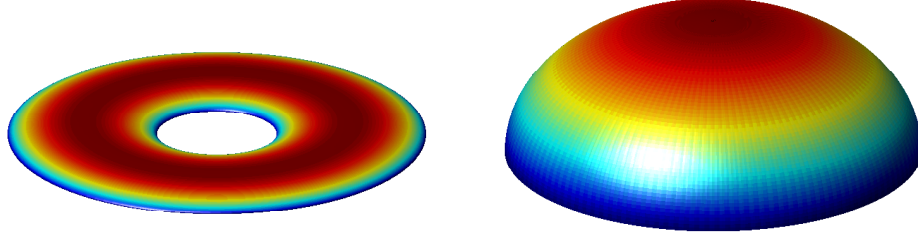


Figura 4.18: Forma del QR (izquierda) y del QD (derecha) investigados. El perfil utilizado es de casquete esférico.

Los huecos se describen con un Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas e inclusión “exacta” del término de interacción magnética.[42] Los coeficientes másicos que empleamos frente a los términos cuadráticos de la interacción magnética son las masas de HH y LH ($1/m_{LH/HH} = \gamma_1 \pm 2\gamma_2$), y frente los términos lineales el promedio de las masas de HH y LH ($1/m_{pr} = \gamma_1 - 4\gamma_2^2/\gamma_1$). El Hamiltoniano de huecos completo, $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$, puede verse en la Tabla 1.2.

En los cálculos de transiciones entre estados de conducción y de valencia excluimos efectos excitónicos. Esta aproximación está justificada por el hecho de que en estructuras auto-ordenadas es el potencial confinante el que localiza electrones y huecos, ya que excede considerablemente el potencial de atracción coulombica entre partículas. Incluso en anillos auto-ordenados, cuyo tamaño es bastante grande para una estructura de tipo auto-ordenada, el potencial de interacción coulombica entre electrones y huecos se puede tratar con simples modelos perturbacionales.[101] Además, la heterogeneidad de tamaños en las muestras auto-ordenadas ensancha las bandas de transiciones espectroscópicas, enmascarando efectos menores.[100]

Investigamos un anillo auto-ordenado con forma de torus cortado y un QD con forma de lente (Figura 4.18). Las dimensiones del anillo son 2 nm de altura, 40 nm de radio exterior y 15 nm de radio interior. La lente tiene 6 nm de altura y 20 nm de diámetro. Estas dimensiones se corresponden aproximadamente con las de un anillo auto-ordenado y un QD previo a su conversión a anillo, según las imágenes de AFM.[80] Asumimos que tanto el anillo como el punto están compuestos de InGaAs e inmersos en una matriz de GaAs. La masa efectiva electrónica que empleamos, $m^*(E_{n,m} = 0) = 0.05$, está próxima a la masa promediada en anillos[89] y QDs[227] de InGaAs.

El *band-offset* de la BC es 0.77 eV. Los parámetros de Luttinger de InGaAs son:[170] $\gamma_1 = 11.01$, $\gamma_2 = 4.18$ y $\gamma_3 = 4.84$. El potencial de alineación de bandas de valencia correspondiente es de 0.38 eV, y el *split-off* $\Delta = 0.36$ eV. Por simplicidad, las masas del electrón y el hueco se consideran homogéneas en toda la estructura. Puesto que los estados más bajos del electrón y el hueco están confinados dentro de la nanoestructura, esta aproximación no debe introducir un error importante. La energía de *gap* de InAs es 0.42 eV, y la de GaAs 1.52 eV, así que nosotros tomamos un valor intermedio de 0.86 eV para nuestras nanoestructuras de InGaAs. Por simplicidad, el factor de Landé que empleamos es constante e igual a $g = -3.94$, el valor medio estimado para el estado electrónico fundamental en un anillo similar al que nosotros estudiamos y ausencia de campo magnético.[89] Estudiamos el espectro de absorción utilizando luz no polarizada, de manera que el elemento de matriz de transición óptica se calcula siguiendo la Sección 1.4.2. Las probabilidades de transición se representan mediante curvas Lorentzianas de anchura media $\Gamma = 5$ meV.

4.6.1 Espectro de absorción

Petterson y colaboradores compararon el espectro de absorción de un excitón neutro en QDs auto-ordenados de In(Ga)As y en los anillos derivados de los mismos.[79] La Figura 4.19 muestra el espectro de absorción conjunto de anillos y puntos cuánticos que obtuvieron. Aunque la densidad de una muestra de anillos y de lentes no es idéntica, se ha escalado la absorción por la densidad de absorbentes, lo que permite comparar las intensidades relativas en cada tipo de estructura.

Los autores del experimento identificaron la mayor energía de las bandas asociadas al anillo con el mayor confinamiento vertical que en los QDs. Por otra parte, supusieron que la mayor intensidad de los picos de absorción del anillo se debe a que los pares *e-h* pueden estar en un régimen de confinamiento débil, donde la interacción excitónica conduce a fuerzas de oscilador incrementadas, de manera similar a lo que sucede en estructuras semiconductoras con menor grado de confinamiento.[228] Otra diferencia entre la absorción de puntos y anillos es la intensidad relativa de las transiciones excitadas. En el QD la primera transición excitada es el doble de intensa que la fundamental, simplemente por la doble degeneración del primer estado excitado en electrones en un QD lenticular (ver Figura 4.5A a $B = 0$). En cambio, en el anillo la primera transición excitada es menos intensa que la fundamental.

En general, todas estas diferencias entre los espectros de absorción son

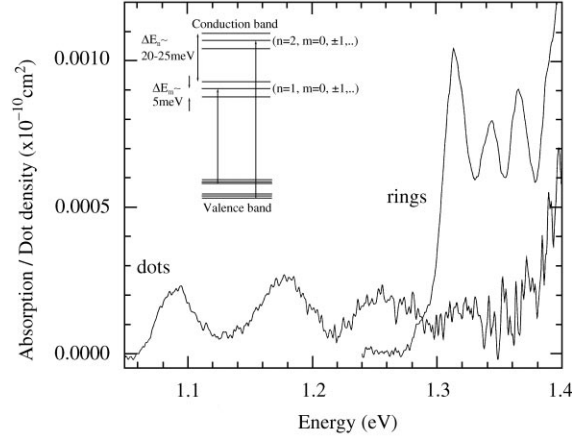


Figura 4.19: Absorción por densidad de absorbentes de puntos (*dots*) y anillos (*rings*) cuánticos a 4.2 K. La subfigura interior muestra esquemáticamente la estructura electrónica para las transiciones fundamental y primera excitada según la Ref.[79].

cualitativamente compatibles con el hecho de que los anillos recubiertos conserven su geometría anular. Sin embargo, también podría discutirse que los datos del supuesto anillo simplemente se corresponden con QDs de escasa altura y gran dimensión lateral.[79]

A continuación simulamos el espectro de absorción de la Figura 4.19 calculando las transiciones interbanda $e-h$ en un punto y en un anillo cuánticos con los parámetros anteriormente descritos. La Figura 4.20 ilustra el espectro calculado para el anillo (línea roja) y para el punto (línea azul). Las unidades de absorción son arbitrarias.

Para la lente, el pico de más a la izquierda aparece a 1.082 eV, y le siguen dos picos aproximadamente equiespaciados en intervalos de 90 meV. Para el anillo, se observa esencialmente un fuerte pico a 1.314 eV. La siguiente transición aparece a 1.406 eV, pero no se puede detectar en el experimento debido al efecto túnel de los portadores de carga hacia la WL cuando la energía fotónica excede 1.4 eV.

Una representación esquemática de las transiciones responsables del espectro de absorción calculado se puede encontrar en la Figura 4.21. En el QD (Figura 4.21 izquierda), la BV está compuesta por una serie de estados muy próximos en energía (en comparación con la BC). Esta proximidad permite encontrar para cada estado electrónico de baja energía estados excitados de huecos, próximos en energía al fundamental, que cumplan la regla

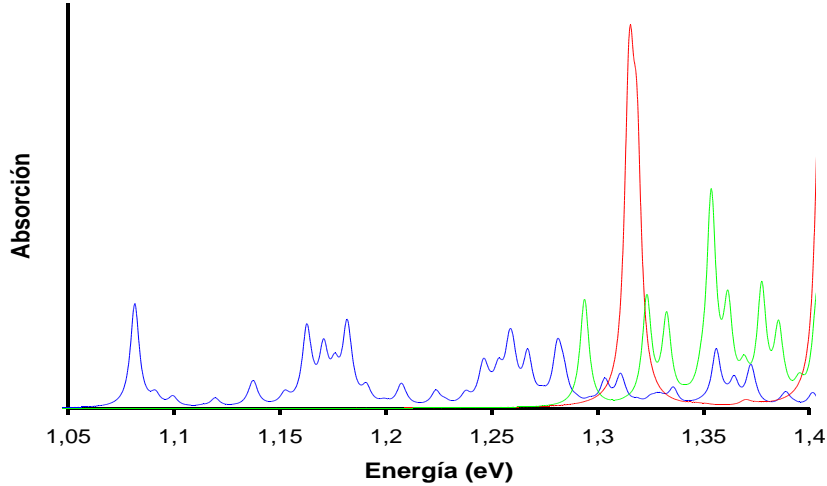


Figura 4.20: Momento de absorción en la región de baja energía de transiciones interbanda de un anillo auto-ordenado (línea roja), un punto auto-ordenado (línea azul) y un punto de fuerte confinamiento vertical y gran extensión lateral (línea verde).[38]

de selección de transiciones interbanda, δ_{m,m_h} . Por este motivo, las transiciones en el espectro de las Figuras 4.19 y 4.20 aparecen como bandas relativamente anchas. La banda espectral relacionada con la transición fundamental del QD se origina por transiciones entre estados próximos de la BV y el estado $|n = 1, m = 0\rangle$ de la BC (flecha azul). La banda espectral de la primera transición excitada tiene lugar por transiciones entre estados de la BV y los estados $|n = 1, m = \pm 1\rangle$ de la BC, que se encuentran unos 90 meV por encima del estado fundamental de electrones (flechas moradas). Finalmente, la banda espectral de la segunda transición excitada se debe a transiciones entre estados de la BV y los estados de la BC degenerados $|n = 1, m = \pm 2\rangle, |n = 2, m = 0\rangle$, que se encuentran unos 90 meV por encima del primer estado excitado de electrones (flechas rosas).

En el QR (Figura 4.21 derecha), la BV también está compuesta por una serie de estados muy próximos en energía. Además, los estados electrónicos con diferente número cuántico principal están separados unos 90 meV, pero los estados azimutales consecutivos de igual n están próximos entre sí. Así, la banda espectral relacionada con la transición fundamental de anillos se origina por transiciones entre estados de la BV y los estados electrónicos $|n = 1, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\rangle$ (flechas azules). De forma similar, la banda espectral excitada se debe a transiciones a estados electrónicos $|n = 2, m =$

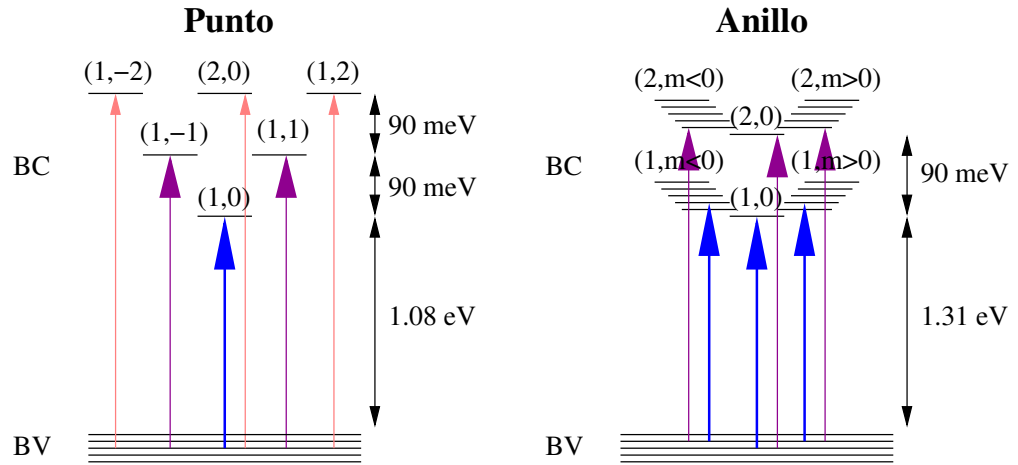


Figura 4.21: Esquema de las transiciones interbanda $e-h$ en el punto y el anillo que dan lugar al espectro de absorción de la Ref. [79]. Las flechas azules corresponden a la transición fundamental, las moradas a la primera excitada y las rosas a la segunda excitada. Los estados electrónicos están etiquetados por (n,m) .

$0, \pm 1, \pm 2, \dots >$ (flechas moradas).

Los principales aspectos de nuestra simulación están en acuerdo con el espectro experimental:

1. En el experimento las transiciones fundamentales del punto y del anillo aparecen algo por debajo de 1.1 eV y a 1.31 eV, respectivamente. Los valores que nosotros calculamos son 1.082 eV para el punto y 1.314 eV para el anillo.
2. En el experimento se observan tres bandas de transiciones para el punto y tres para el anillo. En nuestra simulación también se observan tres bandas para el punto, pero sólo una para el anillo. A este respecto, cabe decir que experimentos posteriores de magneto-PL[81] sugieren que los picos de alta energía no corresponden a transiciones excitadas del anillo que estudiamos, sino a transiciones fundamentales de un segundo tipo de anillo. Esta interpretación estaría además de acuerdo con los resultados de nuestro modelo en transiciones intrabanda (Sección 4.3.2).
3. La intensidad experimental de la primera transición excitada en el QD es el doble de la fundamental. En nuestros cálculos es 2.2 veces mayor.

4. La intensidad experimental de la transición fundamental en el QR es bastante mayor que la del punto. También nosotros predecimos este incremento, aunque la razón entre las fuerza de oscilador según nuestro modelo es 4.5, algo mayor que el valor experimental de 2.9.

En la Figura 4.20 también presentamos (línea verde) el espectro de absorción de un QD con las mismas dimensiones del anillo (excepto por la ausencia de cavidad). Los resultados revelan que la fuerza de oscilador de la transición fundamental de este punto sería mucho menos intensa que la observada en el experimento. Así pues, nuestro modelo da soporte a la geometría de anillo como la responsable de la absorción experimental en el NIR, a la vez que descarta la hipótesis de un punto cuántico bajo de grandes dimensiones laterales.

Es interesante remarcar que, mientras en el experimento se apunta a los efectos excitónicos como posibles causantes de la mayor intensidad de las transiciones del anillo, nuestra interpretación explica este hecho simplemente en términos de confinamiento. En efecto, la cavidad central repulsiva en el QR confina la función de onda del electrón y del hueco en una región de anchura decreciente a medida que el radio interior se aproxima al exterior. En el caso límite de un anillo unidimensional (un anillo sin anchura), la función de onda del estado fundamental del electrón exhibiría una localización de tipo función delta sobre la posición del hueco, dando así un solape y una fuerza de oscilador máximos. Un anillo auto-ordenado realista se encuentra en el límite entre un QD y un anillo unidimensional, por lo que su fuerza de oscilador también es intermedia.[223] Por supuesto, la correlación excitónica podría jugar algún papel adicional pero, al igual que en QDs, debe esperarse que este efecto sea menos importante que el del potencial confinante.[229, 230]

El espectro de la Figura 4.19 también fue simulado teóricamente por otros autores utilizando un potencial confinante parabólico bidimensional y un modelo de una banda para huecos.[76] A diferencia de lo que sucede en dicho trabajo, nuestro modelo se ajusta bien a los datos experimentales sin necesidad de ajustar arbitrariamente los parámetros del potencial confinante parabólico ni realizar asunciones arbitrarias sobre la razón entre la contribución procedente de estados de HH y la de LH. Además, el ajuste de parámetros llevado a cabo en la Ref. [76] parte de la premisa que los picos de alta energía del anillo corresponden a transiciones excitadas del mismo QR que da lugar al pico más bajo. Como hemos mencionado anteriormente, esta es una asignación que no se sostiene en la actualidad.

4.6.2 Espectro de magneto-fotoluminiscencia

Debido a las propiedades diamagnéticas de los pares $e-h$, puede esperarse que la acción de un campo magnético perpendicular al plano del anillo conlleve oscilaciones AB en el espectro NIR. Actualmente existen dudas sobre la posibilidad de observar efectos AB en excitones neutros de anillos nanoscópicos, aunque la mayoría de autores opina que la amplitud de las oscilaciones en partículas neutras y anillos de anchura finita debe ser exponencialmente pequeña.[207, 215, 222, 224, 231] Haft *et al.*[81] midieron recientemente la emisión de PL de un excitón neutro en un anillo auto-ordenado en presencia de un campo magnético. En esta subsección simulamos su espectro experimental calculando las energías de transiciones magneto-ópticas entre el estado fundamental de la BV y el de la BC (con espín \uparrow y \downarrow) en un QR de InGaAs. Los estados de huecos se calculan con el Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ y el Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_L$ para comparar. Los resultados pueden verse en la Figura 4.22, donde se compara el espectro calculado con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ (izquierda), el experimental (centro) y el calculado con $\hat{\mathcal{H}}_L$ (derecha).

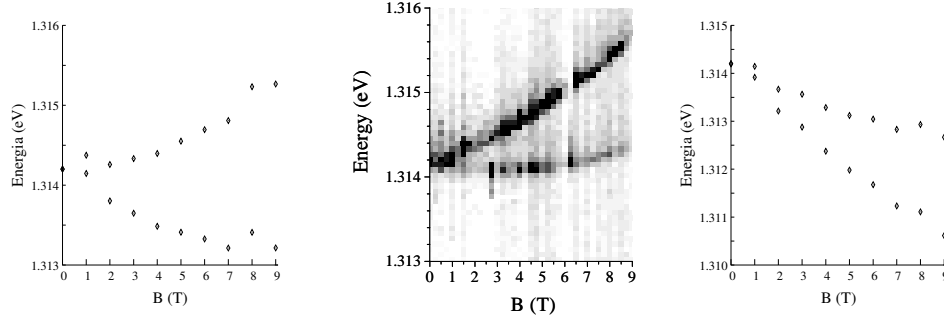


Figura 4.22: Espectro de magneto-PL de un anillo auto-ordenado de InGaAs calculado con $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ (izquierda), con \mathcal{H}_L (derecha)[38] y el correspondiente espectro experimental (centro)[81].

De la Figura 4.22 se infiere que $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ reproduce el experimento mejor que $\hat{\mathcal{H}}_L$. El comportamiento diamagnético que predice $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ está mucho más próximo al experimento que el estimado por $\hat{\mathcal{H}}_L$. De hecho, $\hat{\mathcal{H}}_L$ predice una fuerte estabilización del estado fundamental de huecos a medida que se incrementa el campo magnético. Esto se refleja en la PL calculada como una estabilización energética que no está conforme con el experimento. Por contra, $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ predice una ligera inestabilización energética de la señal de PL, en razonable acuerdo con el experimento. El mejor ajuste de la rama superior (que la inferior) de la Figura 4.22 izquierda respecto a la tendencia observada

en el experimento tal vez indique que la contribución cuadrática del término magnético en nuestro modelo esté ligeramente subestimada. La Figura 4.22 también confirma la bondad de los coeficientes másicos empleados en la Tabla 1.2.

4.6.3 Efecto Aharonov-Bohm óptico

Recientemente se ha señalado una manifestación del efecto AB detectable incluso en excitones neutros. La clave reside en que los excitones confinados en anillos cuánticos (y en QDs con alineamiento de bandas de tipo II), a pesar de su carga neutra, están polarizados. Como es sabido, la aplicación de un campo magnético induce sucesivos cambios de simetría en el estado fundamental del electrón y el del hueco. Ahora bien, estos cambios suceden a un ritmo diferente para electrones y para huecos, debido a sus distintas masas efectivas y separación lateral (polarización). Como consecuencia, en ciertas regiones del campo magnético es previsible que el estado fundamental del excitón no cumpla la regla de selección de transiciones interbanda. Esto supondría la supresión de la emisión de PL en dichas ventanas del campo.[218, 219, 220] Este efecto, bautizado como el “efecto AB óptico”, tiene la ventaja adicional de que puede estudiarse incluso en nanoestructuras aisladas, puesto que la espectroscopía PL de puntos cuánticos aislados es ya una técnica extendida.[101] En QDs de tipo II el efecto AB óptico ha sido confirmado,[225, 232] si bien en anillos auto-ordenados experimentos de magneto-PL en campos de hasta 9 T no han revelado este fenómeno.[81] Para entender este último resultado, investigamos el efecto AB óptico en un anillo auto-ordenado de InGaAs. Debe notarse que los modelos teóricos utilizados para introducir el concepto del efecto AB óptico no son apropiados para un estudio realista. Estos modelos son quasiunidimensionales, con aproximación de una banda para estados de huecos.[218, 219, 220] Los modelos quasiunidimensionales no pueden rendir cuenta de la compresión de los electrones y anillos con campos magnéticos crecientes, que puede ser significativa en anillos de InGaAs. Además, la aproximación de una banda para huecos no considera algunos de los canales permitidos de transiciones dipolares.

Nosotros utilizamos para el estudio el modelo desarrollado en esta Tesis, que carece de estos dos inconvenientes. Calculamos los estados electrónicos con la Ecuación 4.5 y los de huecos con el Hamiltoniano de la Tabla 1.2, pues es el que mejor ha descrito el espectro de magneto-PL en la sección anterior. Despreciamos el desdoblamiento Zeeman atómico para este estudio cualitativo. La Figura 4.23 muestra los pares $e-h$ más bajos en energía frente

a un campo magnético externo. La simetría de cada estado viene dada por la etiqueta (m, F_z) , donde m es el momento angular azimutal del electrón y F_z la proyección z del momento angular total F del hueco.

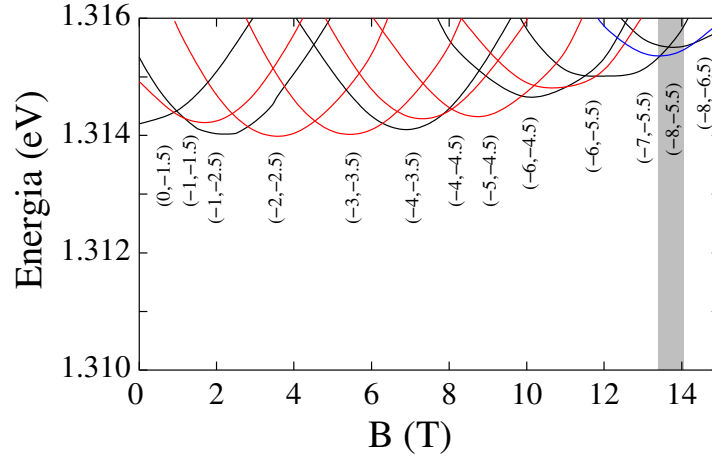


Figura 4.23: Espectro energético de los niveles más bajos de pares $e-h$ vs. un campo magnético. Sólo aquellos niveles que participan del estado fundamental están representados. Los estados están etiquetados por (m, F_z) . Las líneas negras (rojas) corresponden a estados en los que una componente de HH (LH) cumple la regla de transición interbanda. La línea azul corresponde a un estado fundamental “oscuro”. La ventana de campo magnético en la que este estado es el fundamental está sombreada.[38]

La Figura revela una clara aperiodicidad en la secuencia de momentos angulares del estado fundamental. Para campos menores de 0.9 T, la simetría del estado fundamental es $(0, -1.5)$. Esta simetría cambia a $(-1, -1.5)$ entre 0.9 y 1.5 T, y continúa cambiando a intervalos irregulares a medida que crece el campo magnético.

Los cambios de simetría del electrón y el hueco pueden apreciarse individualmente en la Figura 4.24 izquierda, donde se representa los niveles más estables del electrón (parte superior) y del hueco (parte inferior) frente a campos de hasta 9 T. La masa efectiva de los huecos, mayor que la de electrones, conduce a cambios de simetría del estado fundamental menos frecuentes que en el caso del electrón. También hemos realizado los cálculos con $\hat{\mathcal{H}}_L$. Los resultados se muestran en la Figura 4.24 derecha. Se puede observar que con este Hamiltoniano de huecos no existe casi diferencia entre los periodos de cambio de simetría en electrones y huecos. El motivo es que $\hat{\mathcal{H}}_L$ predice cruzamientos evitados que confieren carácter de LH al estado

fundamental de huecos. De esta manera, la masa efectiva del electrón y la del hueco en su estado fundamental son muy similares ($m^* = 0.05$ vs. $m_{LH} = 0.052$), luego también lo es su respuesta al campo externo.

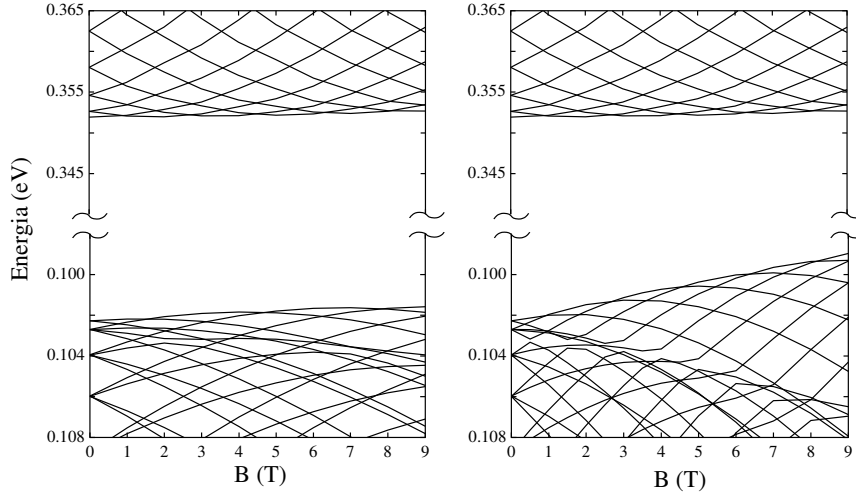


Figura 4.24: Estructura energética de un electrón (parte superior) y un hueco (parte inferior) vs. un campo magnético. $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ ($\hat{\mathcal{H}}_L$) se ha utilizado para el cálculo del panel de la izquierda (derecha). La escala energética está referida al fondo de la BC (electrón) y al tope de la BV (hueco).[38]

El estado fundamental en la Figura 4.23 implica ocasionalmente componentes LH de la función de onda de huecos (líneas rojas). Un modelo simple de una banda no podría reproducir estos estados, lo que confirma la importancia de emplear un Hamiltoniano multibanda, que incluya acoplamiento HH-LH, en estos sistemas.

Todos los pares $e-h$ hasta 9 T cumplen la regla de selección $\delta_{m,F_z - J_z}$, conforme se puede ver en la Figura 4.23. Esto está de acuerdo con el experimento,[81] donde no se ha observado ninguna supresión de la emisión PL para anillos y campos como los que estudiamos aquí. Nosotros hemos ido un poco más allá y hemos explorado la simetría de los pares $e-h$ en valores del campo magnético mayores que los del experimento, en busca de una posible traza del efecto AB óptico. Nuestros cálculos revelan un estado fundamental formado por un par $e-h$ “oscuro” (esto es, prohibido por la regla de selección dipolar), $(-8, -5.5)$, en los alrededores de 14 T (línea azul en la Figura 4.23). La ventana de campo magnético de este estado oscuro es bastante estrecha (0.8 T) y la diferencia energética con el primer

estado excitado (que ya no es oscuro) es de sólo 1 meV. Así pues, la inclusión de refinamientos en el modelo puede implicar un reordenamiento de niveles que reemplace este estado oscuro. Sin embargo, la conclusión que se puede extraer de nuestro resultado es que, utilizando un modelo realista con el que hemos conseguido reproducir la magneto-PL de anillos auto-ordenados, predecimos *la posibilidad* de estados fundamentales oscuros para campos magnéticos relativamente bajos.

Capítulo 5

Control eléctrico de las propiedades magnéticas de puntos cuánticos semiconductores III-V magnéticos diluidos

Los semiconductores magnéticos diluidos (DMS) son compuestos semiconductores en los que una fracción de los iones constituyentes ha sido reemplazada por iones magnéticos. Los DMS constituyen un campo de experimentación atractivo para la espintrónica[233] porque combinan una estructura de bandas simple con propiedades magneto-ópticas y de transporte excelentes,[45] lo cual les hace especialmente adecuados para estudiar los efectos de espín y magnetismo en semiconductores.[234]

Las propiedades más interesantes de los DMS, aquellas que les hacen diferentes de los semiconductores no magnéticos, provienen de la fuerte interacción entre los espines de los portadores de carga de las bandas sp (conducción y valencia) y el de los electrones de la capa d de los iones magnéticos. Esta interacción se conoce como intercambio $sp-d$. La interacción de intercambio $sp-d$ actúa como un campo magnético (interno) efectivo y es responsable de la aparición de desdoblamientos Zeeman gigantes, así como propiedades ópticas y de transporte dependientes del espín.[45, 235, 236, 237, 238]

La mayor parte del trabajo inicial sobre DMS se ha realizado en cristales semiconductores II-VI macroscópicos (*bulk*). La elección de semiconductores II-VI estaba parcialmente dictada por los límites de solubilidad de

las impurezas magnéticas en semiconductores III-V. Sin embargo, los recientes logros en la captura cinética de iones Mn en estructuras III-V ha puesto en evidencia algunas ventajas de estos DMS en relación a los de tipo II-VI, incluyendo ferromagnetismo, elevadas temperaturas de Curie y libertad para manipular la carga electrónica.[239] El confinamiento de iones magnéticos en QDs en lugar de en un cristal macroscópico también presenta ventajas adicionales. Por un lado, el confinamiento espacial refuerza las interacciones de corto alcance, reforzando así los efectos de la interacción *sp-d*. [240] Por otro lado, el número de electrones y huecos confinados en el punto puede controlarse a voluntad.[241] Estas propiedades han motivado recientes intentos por confinar impurezas magnéticas en QDs semiconductores,[242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250] así como diversos estudios teóricos sobre estos sistemas.[251, 252, 253, 254, 255, 256] Entre las propiedades más interesantes observadas en QDs DMS se encuentran una menor contribución de la interacción antiferromagnética Mn-Mn que en el *bulk*, una energía de emisión dependiente de la temperatura debido a la formación de polarones magnéticos tridimensionales[245, 246] y desdoblamientos Zeeman gigantes.[242, 246]

El control de la interacción de intercambio *sp-d* en QDs DMS es de gran interés para potenciales aplicaciones en espintrónica. Aunque un campo magnético externo tiene cierto efecto sobre la interacción de intercambio *sp-d*, éste es muy pequeño.[253] Muy recientemente se ha demostrado que el número de electrones confinados en un QD semiconductor II-VI dopado con iones Mn permite un fuerte grado de control sobre la interacción de intercambio *sp-d* del sistema (y, por tanto, sobre su magnetización).[256] En este capítulo demostramos que un control similar también es posible en QDs semiconductores III-V dopados con un ion Mn cambiando el número de huecos confinados.[46]

5.1 Interacción magnética entre un hueco y un ion Mn

En ausencia de un voltaje externo, el ion sustitucional Mn^{+2} en un semiconductor III-V presenta una configuración electrónica $3d^5$ y está débilmente ligado a un hueco de valencia, formando un aceptor neutro Mn^0 . [257, 258, 259, 260, 261] El Hamiltoniano del complejo Mn^0 en un campo magnético aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento es:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{Mn}^0} = g \mu_B B S_z - \mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S} + \hat{\mathcal{H}}_{ac}, \quad (5.1)$$

donde g es el factor de Landé del ion Mn, μ_B el magnetón de Bohr, B el campo magnético externo y \vec{S} el espín del ion Mn ($S = 5/2$). El primer término describe el Hamiltoniano de un espín Mn aislado. El segundo término, $\hat{\mathcal{H}}_{ex} = -\mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S}$, corresponde a la interacción de intercambio $sp-d$ entre el espín del hueco, $\vec{\sigma}$, y los electrones de la capa d del ion Mn, siendo $\mathcal{J}(r)$ una función que decrece rápidamente al alejarse de la impureza magnética.[252] El tercer término se corresponde con el Hamiltoniano de un hueco con un potencial coulombico aceptor. Por sencillez, asumimos que la impureza se encuentra en el centro del disco cuántico. Debido a la naturaleza cualitativa de este estudio, no incluimos la corrección de celda central¹ en $\hat{\mathcal{H}}_{ac}$. Las autofunciones de $\hat{\mathcal{H}}_{ac}$ pueden etiquetarse por $|F_z, \nu, k\rangle$, donde $F_z = J_z + m$ es la proyección z del momento angular total del hueco, ν es su paridad y k hace referencia al k -ésimo estado con un F_z y ν dados (ver Apéndice A).

El Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}$ es función de las coordenadas del hueco y del espín de la impureza. Aunque estrictamente la energía no es aditiva, sí podemos indicar que en un disco cuántico suficientemente pequeño la separación energética entre estados de huecos es mucho mayor que la separación entre estados del ion Mn. Además, en ausencia de campo magnético, el nivel fundamental de huecos está doblemente degenerado, diferenciándose los respectivos estados por su paridad (Apéndice A). La aplicación de un campo magnético externo rompe esta degeneración, pero asumimos que la separación energética entre estos estados será mucho menor que la separación respecto de estados más excitados. Por ello, para describir adecuadamente los estados más bajos del complejo Mn^0 basta con utilizar una base construida como producto directo de una base de funciones de espín del Mn por una base compuesta por los dos estados más bajos del hueco. Por otra parte, conforme se detalla en el Apéndice B, los elementos de matriz del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}$ que mezclan estos dos estados de huecos son nulos. Así pues, los únicos elementos no nulos de la representación de $\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}$ en la mencionada base, una vez integradas las coordenadas del hueco, son los diagonales:

$$\langle i | \hat{\mathcal{H}}_{Mn^0} | i \rangle = g\mu_B B \hat{S}_z - \langle i | \mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S} | i \rangle + E_i, \quad (5.2)$$

donde $|i\rangle$ representa cada uno de los dos estados más bajos de huecos, de energía E_i . El elemento de matriz $\langle i | \mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S} | i \rangle$, como también se detalla en el Apéndice B, tiene una forma especialmente simple si la impureza se sitúa

¹Se ha observado que impurezas de distinto tipo dotadas con la misma carga producen efectos eléctricos diferentes en el semiconductor que dopan. Para poder incorporar este efecto, a menudo se corrige el potencial coulombico con un término aditivo denominado *corrección de celda central*. Éste depende de parámetros empíricos característicos de la impureza en la matriz semiconductor.

en el centro del disco y reemplazamos $\mathcal{J}(r)$ por una función delta, $\delta(r)$. En tal caso, sólo sobrevive la componente z del espín del Mn:

$$\langle i | \hat{\mathcal{H}}_{Mn^0} | i \rangle = E_i + (g\mu_B B + \beta B_{ef}^0(i)) \hat{S}_z, \quad (5.3)$$

donde el término $\beta B_{ef}^0(i)$ se obtiene como resultado de la integración sobre las coordenadas del hueco. β es una constante que resulta de la integración sobre la parte periódica de la función de onda y $B_{ef}^0(i)$ es un *campo magnético efectivo* ejercido por el hueco sobre el ion Mn, que resulta de integrar sobre la envolvente. Este último puede escribirse como (Apéndice B):

$$B_{ef}^0(i) = -\frac{1}{WR^2} \left(\delta_{\nu,\uparrow} \sum_{J_z=\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} \mathcal{F}_{i,J_z}(0) + \delta_{\nu,\downarrow} \sum_{J_z=\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} \mathcal{F}_{i,J_z}(0) \right), \quad (5.4)$$

donde W y R son la altura y el radio del disco respectivamente,² J_z es la componente z del momento angular de Bloch y $\mathcal{F}_{i,J_z}(0)$ un factor de forma relacionado con la densidad de carga del estado de huecos $|i\rangle$ en la posición de la impureza.

A temperaturas finitas, los estados excitados de huecos están poblados. Para tener en cuenta este hecho, simulamos el comportamiento experimental a $T \neq 0$ mediante la denominada aproximación *de campo promedio*, que consiste en calcular $\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}$ incorporando los estados excitados ponderados por un factor de Boltzmann, $e^{-\Delta E/k_B T}$, el cual proporciona la población relativa del estado. Si el disco cuántico es pequeño, a temperaturas suficientemente bajas solamente los dos estados más bajos de huecos se hallan significativamente poblados. Así, el Hamiltoniano de Mn^0 queda:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}^{CP} = g\mu_B B \hat{S}_z + \sum_i \varrho(E_i) \left(E_i + \beta B_{ef}^0(i) \hat{S}_z \right), \quad (5.5)$$

donde $\varrho(E_i) = Z e^{-\frac{(E_i - E_{EF})}{k_B T}}$ es el factor de Boltzmann normalizado y E_{EF} la energía del estado fundamental del hueco. En la ecuación anterior, el sumatorio corre entre los dos estados más bajos del hueco.

A fin de ilustrar el efecto de un hueco sobre los niveles energéticos del ion Mn, calculamos el espectro Zeeman de un complejo Mn^0 en un disco cuántico de grosor $W = 2$ nm y radio $R = 5$ nm en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. Utilizamos los parámetros de

²Debe notarse la dependencia del campo magnético efectivo con las dimensiones del QD. Este aspecto está de acuerdo con las observaciones teóricas de otros autores.[240, 242]

material apropiados para InAs: un factor de Landé del ion Mn $g = 2.02$, parámetros de Luttinger $\gamma_1 = 19.67$, $\gamma_2 = 8.37$ y $\gamma_3 = 9.29$, y una constante dieléctrica efectiva $\epsilon = 12.4$. Los estados de huecos en presencia de un potencial coulombico aceptor se expanden en una base de funciones de onda radiales de hasta $n = 15$ y se diagonaliza la representación matricial del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{ac}$ (Apéndice A). En ausencia de un campo magnético externo, los estados de menor energía son $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ y $|3/2, \uparrow, 1\rangle$, que se encuentran degenerados. Cuando se aplica un campo magnético, los dos niveles se separan energéticamente, siendo $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ el estado fundamental. Para campos magnéticos accesibles en el laboratorio, la magnitud de esta separación es mucho menor que la separación entre $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ y el próximo estado excitado. Esto corrobora que la base de funciones de huecos que hemos considerado para obtener el Hamiltoniano efectivos de Mn es adecuada.

El valor de β puede inferirse a partir de datos espectroscópicos característicos de cada material semiconductor. Aunque no disponemos de los datos necesarios para InAs, sí los tenemos para GaAs.[258] Podemos entonces determinar el valor de $\beta(\text{GaAs})$ y asumir que $\beta(\text{InAs})$ será similar. Siguiendo el procedimiento descrito en la Ref.[252], pero reemplazando $\mathcal{J}(r)$ por $\delta(r)$, obtenemos $\beta(\text{GaAs}) = -17.08 \text{ eV } \text{\AA}^3$. Para InAs tomamos un valor próximo, $\beta(\text{InAs}) = -17 \text{ eV } \text{\AA}^3$.

En la Figura 5.1 se ilustra el espectro Zeeman del complejo Mn^0 , donde se ha establecido como energía de referencia la del nivel fundamental de huecos a $B = 0$. Las líneas discontinuas muestran el resultado para el caso en que, arbitrariamente, hemos eliminado la interacción de intercambio, $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$. Puesto que el espín de Mn es $S = 5/2$ y sólo consideramos los dos estados más bajos de huecos, formamos un conjunto de doce funciones de base, $|F_z, \nu, k; S_z\rangle$, con $F_z = 3/2(-3/2)$, $\nu = \uparrow (\downarrow)$, $k = 1$ y $S_z = 5/2, 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, -5/2$. Éstas resultan degenerados a $B = 0$ y se desdoblan en doce niveles en presencia de un campo magnético externo, con los niveles $|3/2, \uparrow, 1; S_z\rangle$ y $|-3/2, \downarrow, 1; S_z\rangle$ creciendo y decreciendo en energía, respectivamente.

Las líneas continuas representan este mismo espectro incluyendo $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$. Consideramos una temperatura finita $T = 4 \text{ K}$, de modo que ponderamos en $\hat{\mathcal{H}}_{Mn^0}^{CP}$ las poblaciones de los dos estados de huecos. Las funciones propias de este Hamiltoniano efectivo se etiquetan simplemente como $|S_z\rangle$, con $S_z = 5/2, \dots, -5/2$. En ausencia de un campo magnético externo, los dos estados de huecos están degenerados y, por ello, igualmente poblados. Consecuentemente, el campo magnético efectivo ejercido sobre el Mn por el

estado par, $\nu = \uparrow$, cancela exactamente el ejercido por el estado impar, $\nu = \downarrow$, en la Ecuación 5.5. Así pues, no hay interacción *neto* y los seis estados de espín del ion Mn resultan degenerados.

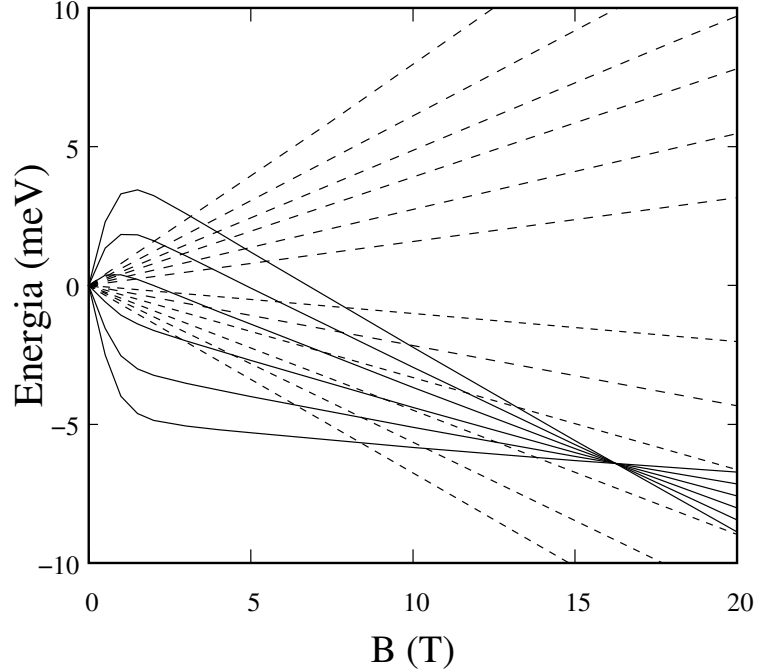


Figura 5.1: Espectro Zeeman de un complejo Mn^0 en un disco cuántico de InAs. Las líneas continuas representan los niveles con interacción de intercambio $sp-d$, calculados con $\hat{\mathcal{H}}_{\text{Mn}^0}^{CP}$ a $T = 4$ K. Las líneas discontinuas representan los niveles sin interacción de intercambio.

En cambio, cuando aplicamos un campo magnético externo, la interacción de intercambio $sp-d$ altera visiblemente el espectro. A campos bajos ($B < 2$ T), se observa un desdoblamiento Zeeman mucho mayor que en el caso en que se excluye $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$. Este fenómeno se conoce como *desdoblamiento Zeeman gigante* y es una manifestación del campo magnético efectivo, B_{ef}^0 . [45]

En efecto, al aplicar un campo externo, la degeneración entre los estados más bajos de huecos, $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ y $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$, se rompe y el estado fundamental viene dado exclusivamente por $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$. Esto hace que la población relativa de $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ sea mayor que la de $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ y, por

tanto, también lo es su contribución sobre el campo magnético efectivo neto. Así pues, el campo magnético efectivo neto deja de ser nulo. Además, a medida que crece el campo externo crece también la separación energética entre los dos estados de huecos, por lo que se va acentuando el efecto de B_{ef}^0 . Hacia $B \approx 2$ T, el estado de huecos está completamente polarizado (sólo $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ está significativamente poblado), por lo que B_{ef}^0 es máximo.

A campos magnéticos externos mayores ($B > 2$ T), los niveles de Mn^0 decrecen en energía, forman un estado múltiplemente degenerado a un valor especial del campo ($B \approx 16.2$ T en la Figura 5.1) y posteriormente invierten su orden. El origen de esta degeneración es la cancelación entre los campos magnéticos externo e interno (efectivo),[253] debido al signo positivo del factor de Landé de Mn y el carácter antiferromagnético del parámetro de intercambio de InAs ($\beta < 0$).³

5.2 Interacción magnética entre dos huecos y un ion Mn

Si cargamos el disco cuántico con un segundo hueco obtenemos un complejo formado por una impureza de Mn más dos huecos interactuantes, es decir, un aceptor positivamente cargado, Mn^+ . El Hamiltoniano de este complejo es:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Mn^+} = g \mu_B B S_z + \hat{\mathcal{H}}_{ex}(1, 2) + \hat{\mathcal{H}}_{hh}(1, 2), \quad (5.6)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_{ex}(1, 2) = \hat{\mathcal{H}}_{ex}(1) + \hat{\mathcal{H}}_{ex}(2)$ representa la interacción de intercambio $sp-d$ entre los espines de los dos huecos y el del ion Mn, y $\hat{\mathcal{H}}_{hh}(1, 2)$ es el Hamiltoniano de dos huecos que interactúan coulómbicamente en presencia de un potencial aceptor. Con el fin de obtener un Hamiltoniano efectivo para el ion Mn, integramos las coordenadas de los huecos en la ecuación anterior. Resolvemos $\hat{\mathcal{H}}_{hh}(1, 2)$ mediante un método CI, utilizando como base las soluciones del Hamiltoniano de un hueco en un potencial aceptor, $\hat{\mathcal{H}}_{ac}$. [44]

³A campos magnéticos débiles, $|-3/2, \downarrow, 1; S_z = +5/2\rangle$ es el estado fundamental de Mn^0 debido a la interacción de intercambio $sp-d$. En un disco cuántico pequeño, la densidad de carga del estado fundamental de huecos es poco sensible al campo magnético externo. Por ello, el campo externo incrementa el efecto Zeeman pero deja el campo magnético efectivo prácticamente constante. Como consecuencia, a $B \approx 16.2$ T el efecto Zeeman ya compensa por el campo magnético efectivo y, a campos todavía mayores, $|-3/2, \downarrow, 1; S_z = -5/2\rangle$ reemplaza a $|-3/2, \downarrow, 1; S_z = +5/2\rangle$ como estado fundamental.

En un QD pequeño como el que estudiamos, la separación energética entre el estado fundamental de dos huecos, $|0\rangle$, y el primer estado excitado sobrepasa los 200 meV. Así pues, el Hamiltoniano efectivo del ion Mn en el campo ejercido por dos huecos puede escribirse como:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Mn^+} = E_0 + (g\mu_B B + \beta B_{ef}^+) \hat{S}_z, \quad (5.7)$$

donde E_0 es la energía del estado fundamental de dos huecos y el término entre paréntesis es la suma de una campo magnético externo más uno interno, siendo $\beta B_{ef}^+ \hat{S}_z = \langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | 0 \rangle$. El valor de B_{ef}^+ viene determinado por la suma de las contribuciones provenientes de cada uno de los estados de un hueco que constituyen $|0\rangle$, ponderadas por los coeficientes que resultan de la CI. El signo de estas contribuciones depende de la paridad y la proyección z del momento angular total de cada estado de un hueco.[46] Cuando la configuración electrónica es de capa cerrada, las contribuciones de huecos con paridad $\nu = \uparrow$ cancelan las de huecos con paridad $\nu = \downarrow$.

Obtenemos los autovalores y autovectores de H_{Mn^+} mediante una CI en una base que contiene los dos estados más bajos de un hueco con paridad $\nu = \uparrow$ y $F_z = -3/2, \dots, +9/2$, y con paridad $\nu = \downarrow$ y $F_z = -9/2, \dots, 3/2$. El estado fundamental resultante, en el rango de campo magnético estudiado (0-20 T), presenta un momento angular total $F_{zT} = F_{z1} + F_{z2} = 0$ y una paridad total singulete, $\nu_T = \nu_1 + \nu_2 = 0$. La Figura 5.2 representa el espectro Zeeman del complejo Mn^+ calculado con los mismos parámetros que en la sección anterior, considerando y sin considerar la interacción de intercambio $sp-d$ (líneas azules continuas y negras discontinuas, respectivamente).

Los resultados muestran que, en ausencia de un campo magnético externo, el campo magnético efectivo debido a la interacción $sp-d$ es cero. El motivo es que, a $B = 0$, la contribución sobre B_{ef}^+ de los términos con paridad $\nu = \uparrow$ cancela exactamente la de los términos con paridad $\nu = \downarrow$. Cuando se aplica un campo magnético externo, el campo magnético interno efectivo aumenta ligeramente, si bien permanece despreciable incluso a campos externos tan fuertes como 15 T. Este hecho puede observarse claramente en la Figura 5.3, donde se ilustra la energía de de intercambio $sp-d$ del nivel $|0; S_z = -5/2\rangle$ frente a un campo magnético externo. A pesar de que esta energía crece con el campo magnético externo, a $B = 15$ T el desdoblamiento de energía debido al campo efectivo es tan solo del orden de decenas de μeV .

El valor no nulo de la energía de intercambio a campos magnéticos finitos puede explicarse en términos de la estructura energética del hueco independiente. El campo magnético externo incrementa más el acoplamiento entre

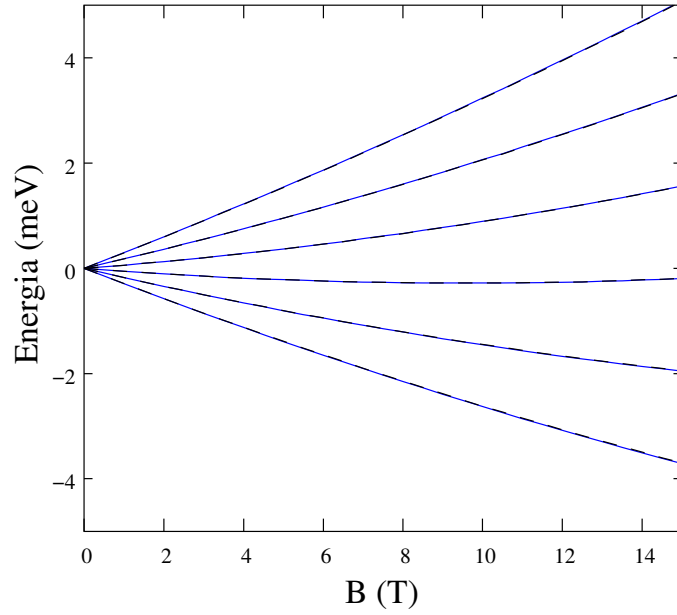


Figura 5.2: Espectro Zeeman de un complejo Mn^+ en un disco cuántico de InAs, con (líneas azules) y sin (líneas negras discontinuas) interacción de intercambio $sp-d$.

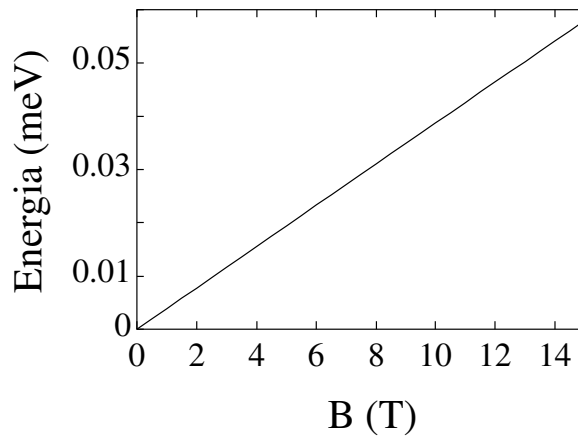


Figura 5.3: Energía de intercambio $sp-d$ del nivel $|0; S_z = -5/2\rangle$ frente a un campo magnético externo.[46]

subbandas en los estados de paridad $\nu = \downarrow$ que en los estados de paridad $\nu = \uparrow$. [43] Así pues, en presencia de un campo magnético externo el peso de las componentes de paridad $\nu = \downarrow$ en el estado fundamental de dos huecos aumenta en detrimento de las componentes de paridad $\nu = \uparrow$. Como consecuencia, la magnitud de la contribución de las componentes $\nu = \downarrow$ sobre B_{ef}^+ excede ligeramente la de las componentes $\nu = \uparrow$, resultando una energía de intercambio *sp-d* neta finita a pesar de la configuración singulete del estado de dos huecos. Para campos externos mayores ($B \gg 15$ T), se espera que la paridad del estado fundamental de dos huecos cambie a triplete. En ese momento la contribución de los dos huecos a la energía de intercambio será del mismo signo, por lo que el campo magnético efectivo se incrementará abruptamente y el espectro se asemejará cualitativamente al del complejo Mn^0 .

5.3 Dispositivo de control eléctrico de las propiedades magnéticas

Los resultados anteriores demuestran que el número de huecos confinados en un disco cuántico semiconductor III-V dopado con un ion Mn modifica sensiblemente la interacción de intercambio *sp-d* y, por tanto, la magnetización del sistema. Basándonos en estos resultados, en esta sección sugerimos un modelo de dispositivo eléctrico que permitirá el control de las propiedades magnéticas en QDs semiconductores III-V a través del control del número de huecos confinados en el punto.

La estructura esquemática del dispositivo se ilustra en la Figura 5.4a. Se sitúa una capa de QDs, dopados cada uno con una impureza Mn, entre una puerta metálica y un contacto de tipo *p*. El potencial aplicado a la puerta, V_g , cambia la posición de los niveles del QD con respecto al nivel de Fermi del contacto y, en conjunción con el bloqueo coulombico (*Coulomb blockade*), permite un control preciso del número de huecos en cada punto. [74] Cuando se aplica un voltaje positivo, el QD está libre de huecos (Figura 5.4b izquierda) y el espectro Zeeman es el de un ion Mn libre. En ausencia de voltaje, el sistema presenta un hueco ligado al ion Mn para formar un aceptor neutro (Figura 5.4b centro). El espectro Zeeman en esta situación está fuertemente influenciado por la interacción de intercambio *sp-d*, conforme se ha mostrado en la Figura 5.1. Por último, cuando se aplica un voltaje negativo se confina un segundo hueco dentro del QD (Figura 5.4b derecha). El espín del segundo hueco cancela el espín del primero y modifica fuertemente el espectro Zeeman del complejo que ambos forman con el ion Mn, conforme

se ha mostrado en la Figura 5.3.

La fabricación de QDs auto-ordenados con forma de disco puede conseguirse mediante la técnica de flujo de indio.[15] La realización de QDs auto-ordenados con una única impureza en el interior ya es tecnológicamente posible.[250] La presencia simultánea de electrones de conducción y huecos de valencia en el punto, formando magnetopolarones, no debería influir cualitativamente nuestras predicciones, ya que los efectos excitónicos son despreciables en un disco de InAs en la escala nanoscópica (como el que nosotros estudiamos) y el parámetro de intercambio $sp-d$ del electrón es mucho menor que el del hueco.[234]

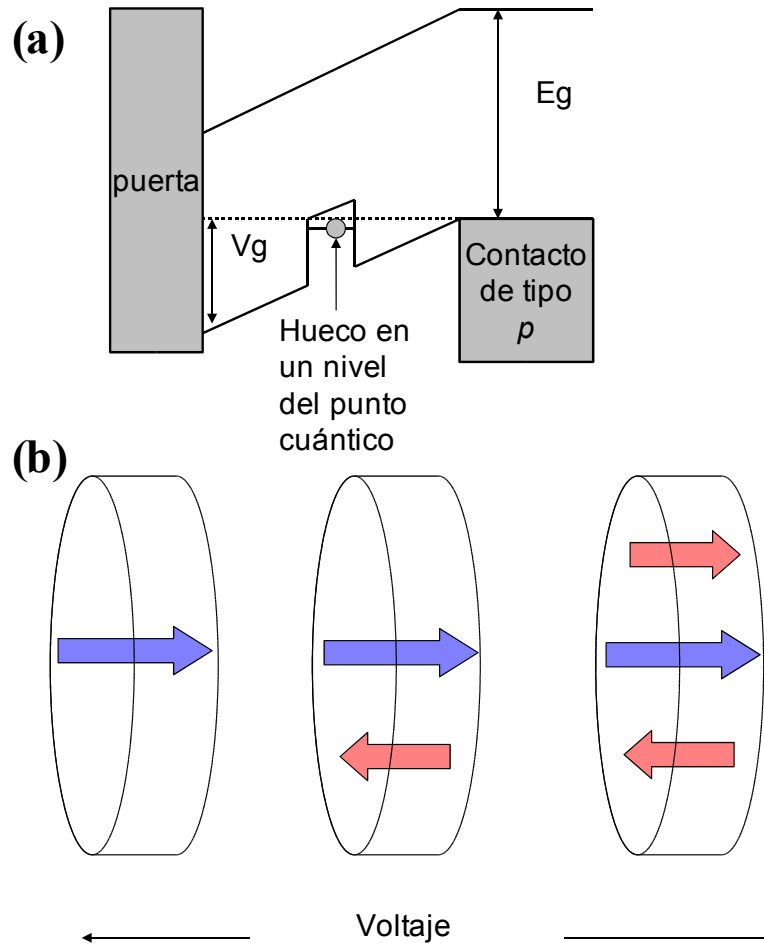


Figura 5.4: (a) Ilustración esquemática de la estructura dispositivo que permite controlar el número de huecos en un QD a través del voltaje. (b) Espines interactuantes en un disco cuántico semiconductor III-V con un ion Mn bajo un voltaje positivo (izquierda), ausencia de voltaje (centro) y voltaje negativo (derecha). Las flechas azules corresponden al espín del Mn y las rojas al espín de los huecos.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta Tesis hemos construido un modelo teórico para el estudio de la estructura energética y las propiedades ópticas de QDs semiconductores con simetría axial. El modelo utiliza la aproximación $k \cdot p$ -EFA para describir los estados de electrones y de huecos independientes en las proximidades de la Zona de Brillouin. Los estados de electrones de conducción se calculan con un Hamiltoniano de una banda, considerando efectos de no parabolicidad y la dependencia de la masa efectiva con la posición en la heteroestructura. Los estados de huecos se estudian con un Hamiltoniano de cuatro bandas que incluye el acoplamiento entre subbandas de HH y LH. Los Hamiltonianos incluyen además otros potenciales, como campos magnéticos externos y fuerzas de tensión elástica.

La simetría axial nos permite integrar analíticamente la coordenada angular del Hamiltoniano, lo cual aprovechamos para reducir los Hamiltonianos $k \cdot p$ tridimensionales a Hamiltonianos efectivos bidimensionales en el plano ρz . Representamos el confinamiento espacial en dicho plano mediante el uso de un potencial finito, escalonado y de forma arbitraria. De esta manera, se puede rendir cuenta de los detalles (a menudo importantes) del confinamiento de QDs, que escaparían a modelos con potenciales confinantes simplificados.

La integración de los Hamiltonianos se realiza numéricamente en un esquema de diferencias finitas. Hemos obtenido las expresiones del coeficiente de absorción de transiciones intra e interbanda. Asimismo, hemos desarrollado un método CI numérico para el cálculo de sistemas bielectrónicos.

En conjunto, el modelo teórico construido combina una descripción realista de los estados poco excitados de las BC y BV de QDs con un coste computacional moderado. Hemos programado los códigos informáticos nece-

sarios para la resolución numérica del modelo y los hemos empleado para abordar, con éxito, la investigación de diversos sistemas que no quedan bien descritos con los modelos más simples tradicionalmente utilizados en la literatura.

En primer lugar, hemos estudiado el efecto de un campo magnético axial sobre la estructura energética de electrones y huecos en QDs esféricos multicapa, así como el efecto sobre el espectro óptico correspondiente a transiciones interbanda. Aunque la aplicación de un campo magnético rompe la simetría esférica y, por tanto, debe originar un espectro óptico más rico, hemos observado que en realidad el confinamiento magnético sólo constituye una perturbación sobre el confinamiento espacial, por lo que las reglas de transición de simetría esférica son aproximadamente válidas incluso en campos magnéticos fuertes. Además, la superposición de los efectos del campo magnético con el confinamiento ejercido por las capas de los QDs origina fenómenos físicos interesantes:

- En QDQBs, el confinamiento magnético da lugar a saltos de densidad de carga electrónica a través de la barrera de potencial.
- En QDQWs, el campo magnético origina cambios consecutivos en la simetría del estado fundamental de electrones y huecos. Para electrones, éste fenómeno es análogo a las oscilaciones Aharonov-Bohm de QRs. Además, a campos muy fuertes el confinamiento magnético llega a distribuir la densidad de carga electrónica en los polos superior e inferior del nanocristal esférico a lo largo del eje de aplicación del campo, formando así un doble pozo de potencial unidimensional.

En segundo lugar, hemos investigado el efecto que tiene una capa fina de AlAs inmersa en una matriz de GaAs sobre la estructura energética de un QD auto-ordenado de In(Ga)As. Hemos estudiado la influencia de la capa de AlAs en función de su posición y su proximidad respecto del QD. Comparando con diversos trabajos experimentales relacionados, nuestros resultados indican que:

- Cuando la barrera de AlAs se deposita sobre el QD, su principal efecto es el de actuar como una barrera de potencial confinante más alta que la de GaAs. Esto da lugar a pequeños efectos hipsocrómicos (escasas decenas de meV).
- Cuando la barrera de AlAs se deposita en el material sustrato sobre el que se crece el QD, su principal efecto es la contaminación de la WL

y, consecuentemente, del QD. Esto da lugar a efectos hipsocrómicos de hasta varias centenas de meV.

En tercer lugar, hemos analizado la estructura energética y el espectro magneto-óptico de QRs auto-ordenados. El principal objetivo era determinar si estas nanoestructuras preservan la geometría anular cuando son completamente recubiertas en una matriz semiconductora. A tal fin, hemos comparado diversos espectros experimentales (monoelectrónicos, bielectrónicos y excitónicos) con nuestros cálculos para QRs y QDs. Hemos concluido que, asumiendo la geometría y las dimensiones de los anillos que se observan por AFM en muestras previas al recubrimiento, es posible obtener un acuerdo cualitativo con los experimentos espectroscópicos realizados sobre muestras recubiertas. En cambio, no sucede lo mismo si asumimos topologías simplemente conectadas (QDs). Así pues, nuestros resultados indican que realmente se conserva la topología de QRs. En particular, nuestro modelo consigue la primera asignación completa de las resonancias de los experimentos de magneto-absorción en el FIR de QRs auto-ordenados. Adicionalmente, hemos demostrado que experimentos de magnetización permitirían determinar de manera sencilla y unívoca la topología de nanoestructuras auto-ordenadas enterradas. También en este apartado hemos llevado a cabo una validación empírica del Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda de huecos en el que el término de interacción magnética se introduce *antes* de realizar la aproximación $k \cdot p$.

En cuarto lugar, hemos demostrado la posibilidad de controlar la magnetización de QDs de semiconductores magnéticos diluidos III-V mediante el número de huecos confinados en su interior. Para ello hemos asumido un QD auto-ordenado con forma de disco con una impureza magnética (Mn) confinada en su centro y paredes de potencial confinante infinitas, lo cual permite una resolución semianalítica del Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda de huecos. Cuando un solo hueco se confina en el QD, el complejo Mn^0 presenta un espectro Zeeman diferente del de un ion Mn aislado, como consecuencia de la interacción de intercambio $sp-d$. Cuando se introduce un segundo hueco, el complejo Mn^+ presenta un nuevo cambio importante del espectro Zeeman, debido a la cancelación de la interacción de intercambio $sp-d$ por la formación de un estado fundamental de huecos con configuración singulete.

Finalmente, hemos completado esta Tesis con un trabajo en el que se derivan las expresiones requeridas para el cálculo de los tensores de deformación de QDs auto-ordenados con forma arbitraria en el marco de la teoría

de elasticidad isotrópica.

Los principales resultados que hemos obtenido han sido incluidos en los artículos que acompañan a la presente memoria. La mayoría de estos artículos han sido ya publicados, siendo previsible que todos lo estén en la fecha de la defensa de la Tesis Doctoral.

Apéndice A

Funciones de onda de huecos en un disco

En este apéndice desarrollamos las expresiones de las funciones de onda de huecos empleadas en el Capítulo 5. Éstas describen los estados de huecos confinados en un disco cuántico de altura W y radio R . Suponemos que el confinamiento vertical del disco es mucho mayor que el lateral, $W \ll R$.

Los estados se describen haciendo uso de un Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas, por lo que podrán expresarse como una suma de cuatro componentes:

$$|i\rangle = \sum_{J_z=-3/2}^{3/2} f_{J_z}(x, y, z) |v, \frac{3}{2}, J_z\rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde J_z es la proyección z del momento angular de Bloch, $f_{J_z}(x, y, z)$ es una componente de la función envolvente (de forma por ahora desconocida) y $|v, \frac{3}{2}, J_z\rangle$ es la parte periódica de la función de Bloch (Ecuaciones 1.32).

Aparte de su dependencia de las coordenadas, el Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas depende de los denominados parámetros máxicos de Luttinger: γ_1 , γ_2 y γ_3 (ver, p.ej. Tabla 1.1). Para determinar la forma que debe tener una componente (por separado) de la función envolvente de huecos, imponemos artificialmente la condición $\gamma_2 = \gamma_3 = 0$. De esta manera, el Hamiltoniano queda diagonal (con cuatro elementos iguales) y la función propia sólo tiene una componente.

El disco presenta simetría axial, por lo que podemos expresar el Hamiltoniano en coordenadas cilíndricas y factorizar $f(x, y, z)$ como un producto $f(\rho, z) \cdot e^{im\theta}$, donde m es el momento angular azimutal. Además, dado que el

confinamiento vertical y el lateral son muy desiguales, podemos factorizar de manera aproximada la parte radial de la envolvente como $f(\rho, z) \approx f(\rho) \xi(z)$. Si asumimos que el potencial confinante del disco es infinito, $f(\rho) = f_{n,m}(\rho)$ es una función Bessel de primera clase con orden m y n nodos. $\xi(z)$ son las soluciones de un pozo cuántico, que pueden escribirse como funciones trigonométricas.

El Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas es invariante bajo el operador de inversión, debido a que todos sus operadores son productos de componentes del momento lineal o de sus cuadrados (Ecuación 1.21). Por tanto, sus autofunciones (y cada una de sus componentes por separado) tienen una paridad definida. En coordenadas cilíndricas, el operador de inversión deja la coordenada radial inalterada, cambia de signo z y añade una fase π a la coordenada angular. La paridad de la función envolvente completa, pues, viene dada por el producto de la paridad de la parte angular por la de la parte vertical. $\xi(z)$ es par para funciones tipo coseno e impar para funciones tipo seno. Dado que el confinamiento vertical del disco es muy superior al lateral, para describir la región energéticamente baja de huecos basta con tomar las soluciones en z más bajas de cada paridad:

$$\xi_{l=1}(z) = \sqrt{\frac{2}{W}} \cos\left(\frac{\pi z}{W}\right) \quad \xi_{l=2}(z) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{2\pi z}{W}\right). \quad (\text{A.2})$$

Por otra parte, $e^{im\theta}$ es par (impar) si m es par (impar). De los razonamientos anteriores concluimos que cada componente de la función envolvente de huecos viene dada por $|m, \nu, n\rangle = f_{n,m}(\rho) e^{im\theta} \xi_l(z)$, donde ν es la paridad de la componente. En funciones envolventes pares (impares), si m es par l debe ser 1 (2), y si m es impar l debe ser 2 (1).

Si ahora relajamos las imposiciones efectuadas sobre los coeficientes másicos y permitimos que γ_2 sea no nulo (manteniendo $\gamma_3 = 0$), el Hamiltoniano 4×4 pasa a ser suma directa de dos bloques 2×2 iguales. Los operadores extradiagonales acoplan componentes con distintos momentos angulares m y números cuánticos radiales n . En cambio, se conservan l y la proyección z del momento angular total, $F_z = m + J_z$. Las funciones de onda tienen ahora dos componentes no nulas: aquellas asociadas a $m = F_z - 3/2, F_z + 1/2$, o aquellas asociadas a $m = F_z - 1/2, F_z + 3/2$. Además, cada componente puede expresarse como producto de una superposición de funciones radiales, $\sum_n A_n f_{n,m}(\rho)$, por una parte angular $e^{im\theta}$ y por una función $\xi_l(z)$. Para que la paridad de la función envolvente esté

definida, puesto que la parte angular de las dos componentes no nulas tiene igual paridad, ambas deben presentar la misma función $\xi_l(z)$.

Si ahora permitimos que $\gamma_2 \neq 0$, los nuevos operadores extradiagonales mezclan funciones con distinto l y con $m = F_z - 3/2, \dots, F_z + 3/2$. Teniendo en cuenta este hecho, es posible escribir una función de onda completa del Hamiltoniano 4×4 que conserve F_z y la paridad. Incluyendo la parte periódica, ésta es:

$$|F_z, \nu = \uparrow(\downarrow), k\rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-3/2}(\rho) e^{i(F_z-3/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+1/2}(\rho) e^{i(F_z+1/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-1/2}(\rho) e^{i(F_z-1/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+3/2}(\rho) e^{i(F_z+3/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

para $F_z - 3/2$ par, y

$$|F_z, \nu = \uparrow(\downarrow), k\rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-3/2}(\rho) e^{i(F_z-3/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+1/2}(\rho) e^{i(F_z+1/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-1/2}(\rho) e^{i(F_z-1/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+3/2}(\rho) e^{i(F_z+3/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

para $F_z - 3/2$ impar. En las ecuaciones anteriores, k etiqueta los estados distintos de momento angular total F_z y paridad ν .

Alternativamente, podemos etiquetar las funciones de onda no por su simetría respecto a la inversión sino respecto al plano de simetría horizontal del disco cuántico. De esta manera, la “paridad” de los estados viene determinada únicamente por la parte vertical de la función envolvente. La expresión de la función de un hueco queda entonces:[43, 44]

$$|F_z, \nu = \uparrow(\downarrow), k\rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-3/2}(\rho) e^{i(F_z-3/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+1/2}(\rho) e^{i(F_z+1/2)\theta} \xi_{1(2)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z-1/2}(\rho) e^{i(F_z-1/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{F_z,\uparrow(\downarrow),k} f_{n,F_z+3/2}(\rho) e^{i(F_z+3/2)\theta} \xi_{2(1)}(z)|v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

sin restricciones sobre el valor de F_z . La ventaja de esta nomenclatura (que es la que empleamos en el Capítulo 5) reside en que, en presencia de campos magnéticos axiales fuertes, los estados de una misma “paridad” convergen al mismo nivel de Landau.[43]

La paridad de un hueco de valencia, descrito con el Hamiltoniano $k \cdot p$ de cuatro bandas, es un número cuántico isomorfo al espín electrónico. Los paralelismos entre ambos números cuánticos pueden observarse al estudiar la estructura energética de un hueco confinado en un disco en presencia de un campo magnético. La Figura A.1 muestra esta estructura para un hueco en un disco de InAs con $W = 2$ nm y $R = 5$ nm, en presencia de una impureza aceptora central de Mn. Los parámetros utilizados en los cálculos son los mostrados en la Sección 5.1. En ausencia de campo magnético, encontramos una serie de niveles doblemente degenerados, con los respectivos estados diferenciándose por su paridad. La aplicación de un campo magnético rompe la degeneración entre estados de distinta paridad, resultando en un desdoblamiento análogo al del efecto Zeeman electrónico.

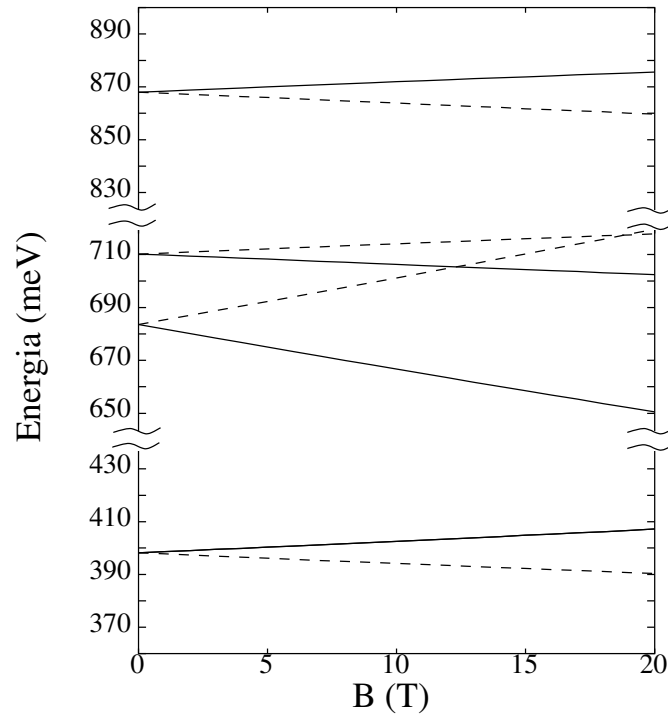


Figura A.1: Estructura energética de un hueco en un disco cuántico de InAs con una impureza aceptora central de Mn vs. un campo magnético. Las líneas continuas representan estados con paridad (en z) $\nu = \uparrow$, y las discontinuas con paridad (en z) $\nu = \downarrow$.

Apéndice B

Elementos de matriz del Hamiltoniano de intercambio $sp-d$ en un disco

El Hamiltoniano de interacción de intercambio $sp-d$ viene dado por $\hat{\mathcal{H}}_{ex} = -\mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S}$ (Sección 5.1), donde $\vec{\sigma}$ es el espín del hueco, \vec{S} el espín de la impureza magnética y $\mathcal{J}(r)$ una función de muy corto alcance centrada en la posición de la impureza que podemos aproximar por una función delta $\delta(r)$. Reescribimos $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ en términos de creadores/aniquiladores como:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ex} = -\delta(r) \left[\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_+ \hat{S}_- + \hat{\sigma}_- \hat{S}_+) + \hat{\sigma}_z \hat{S}_z \right]. \quad (\text{B.1})$$

Si la impureza está ubicada en el centro de un disco cuántico, la función de onda de un hueco confinado en el mismo puede describirse por $|F_z, \nu, k\rangle$, donde F_z es la componente z del momento angular total y ν la “paridad en z ” (definida por el plano horizontal de simetría del disco, ver Apéndice A). En general, el elemento de matriz $\langle i | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | j \rangle$ puede escribirse como producto de una integral sobre la parte envolvente por una integral sobre la parte periódica de la función del hueco:

$$\begin{aligned} \langle i | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | j \rangle &= \sum_{J_z, J'_z} \langle f_{F_z - J_z}^{\nu, k}(\rho, z, \theta) | \delta(r) | f_{F'_z - J'_z}^{\nu', k'}(\rho, z, \theta) \rangle \\ &\times \langle v, \frac{3}{2}, J_z | \delta(r) \left(\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_+ \hat{S}_- + \hat{\sigma}_- \hat{S}_+) + \hat{\sigma}_z \hat{S}_z \right) | v, \frac{3}{2}, J'_z \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

En un disco cuántico suficientemente pequeño, los dos estados más bajos del hueco son:

$$|1\rangle = \left| \frac{3}{2}, \uparrow, 1 \right\rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{3/2,\uparrow,1} f_{n,m=0}(\rho) e^{i0\theta} \xi_1(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{3/2,\uparrow,1} f_{n,m=2}(\rho) e^{i2\theta} \xi_1(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{3/2,\uparrow,1} f_{n,m=1}(\rho) e^{i1\theta} \xi_2(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{3/2,\uparrow,1} f_{n,m=3}(\rho) e^{i3\theta} \xi_2(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

y

$$|2\rangle = \left| -\frac{3}{2}, \downarrow, 1 \right\rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{-3/2,\downarrow,1} f_{n,m=-3}(\rho) e^{-i3\theta} \xi_2(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{-3/2,\downarrow,1} f_{n,m=-1}(\rho) e^{-i1\theta} \xi_2(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{-3/2,\downarrow,1} f_{n,m=-2}(\rho) e^{-i2\theta} \xi_1(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{-3/2,\downarrow,1} f_{n,m=0}(\rho) e^{i0\theta} \xi_1(z) |v, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

El resto de estados se encuentran a energías muy superiores, por lo que están prácticamente despoblados a temperaturas bajas. En estas condiciones, es una buena aproximación diagonalizar el Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{ex}$ en una base que considere únicamente los estados de huecos $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

Podemos concluir que el elemento de matriz que mezcla $|1\rangle$ y $|2\rangle$ es nulo por razones de simetría. En efecto, $|1\rangle$ y $|2\rangle$ son funciones par e impar, respectivamente, bajo el operador de inversión (Apéndice A). Puesto que $\delta(r)$ es una función par, la parte envolvente del elemento de matriz $\langle 1 | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | 2 \rangle$ se desvanece y el elemento de matriz es nulo.

Calculamos ahora el valor expectación $\langle i | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | i \rangle$, donde $|i\rangle = 1, 2$. En este caso, la integral sobre la envolvente no se anula necesariamente por razones de simetría. Ahora bien, puesto que $\xi_2(z)$ es impar, su valor en la posición de la impureza ($z = 0$) es cero. Esto hace que únicamente las dos primeras (o las dos segundas, dependiendo de ν) componentes de $|i\rangle$ contribuyan al elemento de matriz. Las integrales sobre la parte periódica de las componentes que sobreviven son, por tanto, $\langle v, \frac{3}{2}, J_z | \hat{\sigma}_\pm | v, \frac{3}{2}, J'_z \rangle$ y $\langle v, \frac{3}{2}, J_z | \hat{\sigma}_z | v, \frac{3}{2}, J'_z \rangle$, con $J'_z = J_z, J_z \pm 2$. Puesto que el operador $\hat{\sigma}_\pm$ sólo mezcla funciones con $J'_z = J_z \pm 1$, las integrales $\langle v, \frac{3}{2}, J_z | \hat{\sigma}_\pm | v, \frac{3}{2}, J'_z \rangle$ son siempre nulas. Por otra parte, las integrales $\langle v, \frac{3}{2}, J_z | \hat{\sigma}_z | v, \frac{3}{2}, J'_z \rangle$ sólo son no nulas cuando $J'_z = J_z$. En tal caso, con un desarrollo algebraico simple obtenemos:

$$\langle v, \frac{3}{2}, J_z | \delta(r) \hat{\sigma}_z | v, \frac{3}{2}, J_z \rangle = \frac{J_z}{3} \langle v, \frac{3}{2}, J_z | \delta(r) | v, \frac{3}{2}, J_z \rangle = \frac{J_z}{3} \beta, \quad (\text{B.5})$$

donde β es el denominado parámetro de intercambio p - d . Finalmente, la parte radial de la envolvente (función Bessel $f_{n,m}(\rho)$) sólo es no nula en $\rho = 0$ cuando $m = 0$, luego la única componente de la función envolvente que sobrevive en el origen es aquella etiquetada con $m = 0$. Puesto que los dos estados de huecos considerados presentan $F_z = \pm 3/2$, las partes periódicas correspondientes a las componentes no nulas de la envolventes están asociadas con $J_z = \pm 3/2$. Con todos estos razonamientos, concluimos que:

$$\begin{aligned} \langle i | \hat{\mathcal{H}}_{ex} | i \rangle &= \left(\delta_{\nu,\uparrow} \sum_{J_z=3/2,-1/2} \langle f_{F_z-J_z}^{\nu,k}(\rho, z, \theta) | \delta(r) | f_{F_z-J_z}^{\nu,k}(\rho, z, \theta) \rangle \frac{J_z}{3} \beta \right. \\ &\quad \left. + \delta_{\nu,\downarrow} \sum_{J_z=1/2,-3/2} \langle f_{F_z-J_z}^{\nu,k}(\rho, z, \theta) | \delta(r) | f_{F_z-J_z}^{\nu,k}(\rho, z, \theta) \rangle \frac{J_z}{3} \beta \right) \hat{S}_z \\ &= \beta B_{ef}^0(i) \hat{S}_z. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

En la ecuación anterior hemos definido el campo magnético efectivo,

$$B_{ef}^0(i) = -\frac{1}{WR^2} \left(\delta_{\nu,\uparrow} \sum_{J_z=\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} \mathcal{F}_{i,J_z}(0) + \delta_{\nu,\downarrow} \sum_{J_z=\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} \mathcal{F}_{i,J_z}(0) \right), \quad (\text{B.7})$$

donde W y R son la altura y el radio del disco, respectivamente, y $\mathcal{F}_{i,J_z}(0)$ es un factor de forma relacionado con la densidad de carga del estado de huecos $|i\rangle$ en la posición de la impureza,

$$\mathcal{F}_{i,J_z}(0) = \delta_{m,0} \frac{J_z}{|J_z|} \left(\sum_n \frac{A_{J_z,n}^i}{|J_1(\alpha_0^n)|} \right)^2. \quad (\text{B.8})$$

Apéndice C

Curriculum Vitae

Datos personales

Nombre y apellidos: Juan Ignacio Climente Plasencia.
Fecha y lugar de nacimiento: 27 de marzo de 1978, Segorbe, España.
Estado civil: soltero. Nacionalidad: español.
DNI: 44795725M

Lugar de trabajo actual

Departament de Ciències Experimentals,
Universitat Jaume I,
12080 Avda. Sos Banyat sn, Castelló de la Plana, España.
Tfno.: +34 964728075 E-mail: climente@exp.uji.es

Principales áreas de interés

Propiedades opto-electrónicas de puntos y anillos cuánticos semiconductores. Puntos cuánticos coloidales y auto-ordenados. Efecto de campos magnéticos en nanoestructuras. Espintrónica.

Formación

- Graduado en Química por la Universitat Jaume I, año 2000 (*Premio Extraordinario de Licenciatura*).
- Tesis doctoral (en desarrollo) en Universitat Jaume I (2001-): “Inte-

gración del Hamiltoniano $k \cdot p$ multibanda en simetría axial". Supervisor: Prof. J. Planelles.

- Diploma de Estudios Avanzados correspondiente al programa interuniversitario de doctorado en "Química Teórica y Computacional", Universitat Jaume I (2002).
- Asistencia a European Summer School in Quantum Chemistry, University of Lund, (Tjörnap, Suecia, Agosto 2001).

Idiomas

Castellano, valenciano e inglés fluidos. Polaco regular.

Experiencia profesional

- 2001-2005: Becario del programa de Formación de Profesorado Universitario, del Ministerio de Educación y Ciencia. Universitat Jaume I.
- 2001: Estancia corta en el Instytut Fizyki de Uniwersytet Mikołaja Kopernika (Toruń, Polonia), trabajando con el Prof. W. Jaskólski en simulaciones numéricas de la estructura electrónica de puntos cuánticos coloidales multicapa. (3 meses).
- 2002: Estancia corta en el Instytut Fizyki de Uniwersytet Mikołaja Kopernika (Toruń, Polonia), trabajando con el Prof. W. Jaskólski en simulaciones numéricas de la estructura electrónica de anillos cuánticos auto-ordenados. (3 meses).
- 2003: Estancia corta en el Insitute of Microstructural Sciences - National Research Council of Canada (Ottawa, Canadá), trabajando con el Prof. P. Hawrylak en el estudio de las propiedades magnéticas de puntos cuánticos semiconductores III-V dopados con iones magnéticos. (3.5 meses).
- 2004: Estancia corta en AGH University of Science and Technology (Kraków, Polonia), trabajando con el Prof. J. Adamowski en el estudio de correlaciones electrónicas en anillos cuánticos (2 meses).

Conocimientos informáticos

Sistemas operativos: usuario experimentado de Linux (SuSe y RedHat) y Windows XP.

Lenguajes de programación: experiencia en FORTRAN, Matlab y Mathematica. Iniciado en Python.

Programas de diseño, etc.: Microsoft Office Package, Xfig, Gimp, Corel-Draw, Freehand, LaTeX.

Experiencia en simulación numérica de la estructura energética de puntos cuánticos mediante la teoría $k \cdot p$, cálculo de tensores de deformación con el modelo elástico isotrópico y métodos de iteración de configuraciones.

Referencias

1. Dr. J. Planelles. Catedrático de Química Física y líder del Grupo de Química Cuántica de la Universitat Jaume I.
E-mail: planelle@exp.uji.es
2. Dr. P. Hawrylak. Líder del Grupo de Teoría Cuántica en el Institute of Microstructural Sciences, National Research Council of Canada.
E-mail: pawel.hawrylak@nrc.ca
3. Dr. W. Jaskólski. Catedrático y líder del Grupo de Estructuras de Baja Dimensión de la Uniwersytet Mikołala Kopernika.
E-mail:wj@phys.uni.torun.pl

Contribuciones en conferencias y seminarios

1. Presentación de un póster en 4th Seminar Bachotek: Nanostructures, Research and Applications (Bachotek, Polonia). Título: “Energy structure of nanostructures in a magnetic field”. Mayo 2001.
2. Presentación oral en la XVII Reunió de la Xarxa de Química Teórica y Computacional, Universitat Rovira i Virgili (Tarragona, España). Título: “Estructura energética de puntos cuánticos en un campo magnético”. Julio 2001.

3. Presentación de un póster en International Workshop and Seminar on Cooperative Phenomena and Transport in Nanostructures, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme (Dresden, Alemania). Título: "Two interacting electrons in a self-assembled quantum ring". Junio 2004.
4. Seminario: "Self-assembled quantum rings", en AGH University of Science and Technology (Kraków, Polonia, Septiembre 2004) y Universitat de Barcelona (Barcelona, España, Noviembre 2004).

Lista de publicaciones

1. J. Planelles, J.G. Díaz, J. Climente, y W. Jaskólski, "Semiconductor nanocrystals in a magnetic field", *Physical Review B* **65**, 245302 (2002).
2. J. Planelles, J. Climente, J.G. Díaz, y W. Jaskólski, "Hole energy structure of multishell nanocrystals in a magnetic field", *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 12537 (2002).
3. J.I. Climente, J. Planelles, W. Jaskólski, y J.I. Aliaga, "Magneto-optical transitions in multilayer semiconductor nanocrystals", *Journal of Physics: Condensed Matter* **15**, 3593 (2003).
4. J.I. Climente, J. Planelles, y W. Jaskólski, "Magneto-optical transitions in nanoscopic rings", *Physical Review B* **68**, 075307 (2003).
5. J.L. Movilla, J.I. Climente, y J. Planelles, "Effects of a thin AlAs layer on InAs quantum dot electronic structure", *Journal of Applied Physics* **94**, 4515 (2003).
6. J.I. Climente, J. Planelles, y J.L. Movilla, "Magnetization of nanoscopic quantum rings and dots", *Physical Review B* **70**, 081301(R) (2004).
7. J. Planelles, y J.I. Climente, "Far-infrared absorption of self-assembled semiconductor rings", *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, aceptado en Noviembre 2004. (Ver también cond-mat/0412552).
8. J.I. Climente, J. Planelles, y F. Rajadell, "Energy structure and far-infrared spectroscopy of two electrons in a self-assembled quantum ring", pendiente de publicación.
9. J.I. Climente, M. Korkusiński, P. Hawrylak, y J. Planelles, "Voltage control of the magnetic properties of charged semiconductor quantum dots containing magnetic ions", pendiente de publicación.

10. F. Rajadell, J. Planelles, y J.I. Climente, “Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras”, pendiente de publicación.

Libros

1. J.Planelles, J.I. Climente y J.G. Díaz, *Espectroscòpia*, Col·lecció Ciències Experimentals, Universitat Jaume I, 2002, ISBN 84-8021-393-0.

Bibliografía

- [1] M. Reed, R.T. Bate, K. Bradshaw, W.M. Duncan, W.M. Frensley, J.W. Lee, y H.D. Smith, “Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots”, *J. Vacuum Sci. Technol. B* **4**, 358 (1986).
- [2] M.A. Reed, J.N. Randal, R.J. Aggarwal, R.J. Matyi, T.M. Moore, y A.E. Wetsel, “Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 535 (1988).
- [3] R.C. Ashoori, “Electrons in artificial atoms”, *Nature (London)* **379**, 413 (1996).
- [4] L. Jacak, P. Hawrylak, y A. Wójs, *Quantum dots*, (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [5] M.A. Reed, “Quantum dots”, *Scientific American*, 118 (January 1993).
- [6] S. Bandyopadhyay, N. Kouklin, L. Menon, *Quantum dots and nanowires*, (American Scientific Publishers, 2002).
- [7] D.D. Awschalom, D. Loss, N. Samarth (eds.), *Semiconductor spintronics and quantum computation*, (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
- [8] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, (Les Éditions de Physique, Les Ulis, 1988).
- [9] J.M. Luttinger, y W. Kohn, “Motion of electrons and holes in Perturbed Periodic Field”, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [10] D.G. Austing, S. Sasaki, S. Tarucha, S. Reimann, M. Koskinen, y M. Manninen, “Ellipsoidal deformation of vertical quantum dots”, *Phys. Rev. B* **60**, 11514 (1999).

- [11] U. Banin, Y. Cao, D. Katz, y O. Millo, “Identification of atomic-like electronic states in indium arsenide nanocrystal quantum dots”, *Nature (London)* **400**, 542 (1999).
- [12] C. Priester, y M. Lannoo, “Growth aspects of quantum dots”, *Curr. Opin. Solid St. M. Sci.* **2**, 716 (1997).
- [13] Al.L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D.J. Norris, y M. Bawendi, “Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: Dark and bright exciton states”, *Phys. Rev. B* **54**, 4843 (1996).
- [14] X.Z. Liao, J. Zou, X.F. Duan, D.J.H. Cockayne, R. Leon, y C. Lobo, “Transmission-electron microscopy study of the shape of buried $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots”, *Phys. Rev. B* **58**, R4235 (1998).
- [15] Z.R. Wasilewski, S. Fafard, y J.P. McCaffrey, “Size and shape engineering of vertically stacked self-assembled quantum dots”, *J. Cryst. Growth* **201**, 1131 (1999).
- [16] J.M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J.L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, y P.M. Petroff, “Intermixing and shape changes during the formation of InAs self-assembled quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [17] T. Raz, D. Ritter, y G. Bahir, “Formation of InAs self-assembled quantum rings on InP”, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003).
- [18] T. Chakraborty, *Quantum dots*, (Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1999).
- [19] F. Geerinckx, F.M. Peeters, J.T. Devreese, “Effect of the confining potential on the magneto-optical spectrum of a quantum dot”, *J. Appl. Phys.* **68**, 3435 (1990).
- [20] M. Korkusiński, *Correlations in semiconductor quantum dots*, Memoria de Tesis Doctoral, (University of Ottawa, Ottawa, 2004).
- [21] J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, y S. Bednarek, “Electron pair in a Gaussian confining potential”, *Phys. Rev. B* **62**, 4234 (2000).
- [22] M. Bayer, A. Schmidt, A. Forchel, F. Faller, T. L. Reinecke, P. A. Knipp, A. A. Dremin, y V. D. Kulakovskii, “Electron-hole transitions between states with nonzero angular momenta in the magnetoluminescence of quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3439 (1995).

- [23] M. Bayer, O. Schilling, A. Forchel, T. L. Reinecke, P. A. Knipp, Ph. Pagnod-Rossiaux, y L. Goldstein, “Splitting of electronic levels with positive and negative angular momenta in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum dots by a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **53**, 15810 (1996).
- [24] M. Califano, y P. Harrison, “Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots”, *Phys. Rev. B* **61**, 10959 (2000).
- [25] S. Le Goff, y S. Stébé, “Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors”, *Phys. Rev. B* **47**, 1383 (1993).
- [26] G.W. Bryant, y W. Jaskólski, “Designing quantum dots and quantum-dot solids”, *Physica E (Amsterdam)* **11**, 72 (2001).
- [27] A.J. Williamson, y A. Zunger, “ InAs quantum dots: Predicted electronic structure of free-standing versus GaAs -embedded structures”, *Phys. Rev. B* **59**, 15819 (1999).
- [28] C. Pryor, “Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations”, *Phys. Rev. B* **57**, 7190 (1998).
- [29] V. Fonoberov, *Electronic and optical properties of quantum wires and dots*, Memoria de Tesis Doctoral, (State University of Moldova, 2002).
- [30] A. Mews, A. Eychmüller, M. Giersig, D. Schoos, y H. Weller, “Preparation, characterization, and photophysics of the quantum-dot quantum-well system $\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$ ”, *J. Phys. Chem.* **98**, 934 (1994).
- [31] A. Mews, A.V. Kadavanich, U. Banin, y A.P. Alivisatos, “Structural and spectroscopic investigations of $\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$ quantum-dot quantum wells”, *Phys. Rev. B* **53**, R13242 (1996).
- [32] R.B. Little, M.A. El-Sayed, G.W. Bryant, y S. Burke, “Formation of quantum-dot quantum-well heteronanostructures with large lattice mismatch: $\text{ZnS}/\text{CdS}/\text{ZnS}$ ”, *J. Chem. Phys.* **114**, 1813 (2001).
- [33] J. Planelles, J.G. Díaz, J. Climente, y W. Jaskólski, “Semiconductor nanocrystals in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **65**, 245302 (2002).
- [34] J. Planelles, J. Climente, J.G. Díaz, y W. Jaskólski, “Hole energy structure of multishell nanocrystals in a magnetic field”, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 12537 (2002).

- [35] J.I. Climente, J. Planelles, W. Jaskólski, y J.I. Aliaga, “Magneto-optical transitions in multilayer semiconductor nanocrystals”, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 3593 (2003).
- [36] J.L. Movilla, J.I. Climente, y J. Planelles, “Effects of a thin AlAs layer on InAs quantum dot electronic structure”, *J. Appl. Phys.* **94**, 4515 (2003).
- [37] A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, y P.M. Petroff, “Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [38] J.I. Climente, J. Planelles, y W. Jaskolski, “Magneto-optical transitions in nanoscopic rings”, *Phys. Rev. B* **68**, 075307 (2003).
- [39] J.I. Climente, J. Planelles, y F. Rajadell, “Energy structure and far-infrared spectroscopy of two electrons in a self-assembled quantum ring”, pendiente de publicación.
- [40] J. Planelles, y J.I. Climente, “Far-infrared absorption of self-assembled semiconductor rings”, *Collect. Czech. Chem. C.*, aceptado (Noviembre 2004).
- [41] J.I. Climente, J. Planelles, y J.L. Movilla, “Magnetization of nanoscopic quantum rings and dots”, *Phys. Rev. B* **70**, 081301(R) (2004).
- [42] J. Planelles, y W. Jaskólski, “ $k \cdot p$ Hamiltonians for quantum dots in a magnetic field”, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, L67 (2003).
- [43] L.G.C. Rego, P. Hawrylak, J.A. Brum, y A. Wojs, “Interacting valence holes in p -type SiGe quantum disks in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **55**, 15694 (1997).
- [44] L.G.C. Rego, J.A. Brum, y P. Hawrylak, “Multi-charged acceptor centers in p -doped Si/Si_{1-x}Ge_x/Si quantum wells in the presence of a magnetic field”, *Physica E (Amsterdam)* **2**, 785 (1998).
- [45] J.K. Furdyna, “Magnetic diluted semiconductors”, *J. Appl. Phys.* **64**, R29 (1988).
- [46] J.I. Climente, M. Korkusiński, P. Hawrylak, y J. Planelles, “Voltage control of the magnetic properties of charged semiconductor quantum dots containing magnetic ions”, pendiente de publicación.

- [47] <http://www3.uji.es/~planelle/strain.pdf>
- [48] J.R. Downes, D.A. Faux, y E.P. O'Reilly, "A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures", *J. Appl. Phys.* **81**, 6700 (1997).
- [49] J.H. Davies, "Elastic and piezoelectric fields around a buried quantum dot: A simple picture", *J. Appl. Phys.* **84**, 1358 (1998).
- [50] F. Rajadell, J. Planelles, y J.I. Climente, "Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras", pendiente de publicación.
- [51] J.P. Loehr, *Physics of strained quantum well lasers*, (Boston Kluwer Academic cop. 1998).
- [52] M. Grundmann, O. Stier, y D. Bimberg, "InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure", *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995).
- [53] M.A. Cusack, P.R. Briddon, y M. Jaros, "Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots", *Phys. Rev. B* **54**, 2300 (1996).
- [54] E.O. Kane, "Band structure of indium antimonide", *J. Phys. Chem. Sol.* **1**, 249 (1957).
- [55] E.O. Kane, *Narrow Gap Semiconductors. Physics and Applications*, editado por W. Zawadzki, *Lect. Notes Phys.*, Volume 133 (Springer Verlag, Berlin) 1980.
- [56] N. Nishiguchi, y K. Yoh, "Energy-dependent effective mass approximation in one-dimensional quantum dots", *Jpn. J. Appl. Phys., Part I* **36**, 3928 (1997).
- [57] L. Dekar, L. Chetouani, y T.F. Hammann, "An exactly soluble Schrödinger equation with smooth position-dependent mass", *J. Math. Phys.* **39**, 2551 (1998).
- [58] D.J. BenDaniel, y C.B. Duke, "Space-charge effects on electron tunneling", *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- [59] M.G. Burt, "The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures", *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 6651 (1992).

- [60] M.G. Burt, “Direct derivation of effective-mass equations for microstructures with atomically abrupt boundaries”, *Phys. Rev. B* **50**, 7518 (1994).
- [61] B.A. Foreman, “Connection rules versus differential equations for envelope functions in abrupt heterostructures”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3823 (1998).
- [62] G.W. Bryant, “Excitons in quantum boxes: Correlation effects and quantum confinement”, *Phys. Rev. B* **37**, 8763 (1988).
- [63] Al.L. Efros, y M. Rosen, “Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of band coupling”, *Phys. Rev. B* **58**, 7120 (1998).
- [64] P.C. Sercel, y K.J. Vahala, “Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band structure in multiband envelope-function approximation”, *Phys. Rev. B* **42**, 3690 (1990).
- [65] A. Wójs, P. Hawrylak, S. Fafard, y L. Jacak, “Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **54**, 5604 (1996).
- [66] W. Kohn, “Theory of Bloch electrons in a magnetic field - The effective Hamiltonian”, *Phys. Rev.* **115**, 1460 (1959).
- [67] W. Kohn, “Cyclotron resonance and de Haas-van Alphen oscillations of an interacting electron gas”, *Phys. Rev.* **123**, 1242 (1961).
- [68] L. Brey, N.F. Johnson, y B.I. Halperin, “Optical and magneto-optical absorption in parabolic quantum wells”, *Phys. Rev. B* **40**, 10647.
- [69] S.K. Yip, “Magneto-optical absorption by electrons in the presence of parabolic confinement potentials”, *Phys. Rev. B* **43**, 1707 (1991).
- [70] Ch. Sikorski, y U. Merkt, “Spectroscopy of electronic states in InSb quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2164 (1989).
- [71] A. Lorke, J.P. Kotthaus, y K. Ploog, “Coupling of quantum dots on GaAs”, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2559 (1990).
- [72] B. Meurer, D. Heitmann, y K. Ploog, “Single-electron charging of quantum-dot atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1371 (1992).

- [73] R.C. Ashoori, H.L. Störmer, J.S. Weiner, L.N. Pfeiffer, S.J. Pearton, K.W. Baldwin, y K.W. West, “Single-electron capacitance spectroscopy of discrete quantum levels”, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3088.
- [74] H. Drexler, D. Leonard, W. Hansen, J.P. Kotthaus, y P.M. Petroff, “Spectroscopy of quantum levels in charge-tunable InGaAs quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2252 (1994).
- [75] F.M. Peeters, y V.A. Schweigert, “Two-electron quantum disks”, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [76] H. Hu, G.M. Zhang, J.L. Zhu, y J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **63**, “Low-energy exciton states in a nanoscopic semiconducting ring”, 045320 (2001).
- [77] T. Chakraborty, y P. Pietiläinen, “Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring”, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994).
- [78] S.S. Li, y J.B. Xia, “Electronic states of InAs/GaAs quantum ring”, *J. Appl. Phys.* **89**, 3434 (2001).
- [79] H. Petterson, R. J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, y P. M. Petroff, “Excitons in self-assembled quantum ring-like structures”, *Physica E (Amsterdam)* **6**, 510 (2000).
- [80] R. J. Warburton, B. Urbaszek, E. J. McGhee, C. Schulhauser, A. Hoge, K. Karrai, A.O. Govorov, J. A. Barker, B. D. Gerardot, P.M. Petroff, y J. M. Garcia, “Spectroscopy of self-assembled quantum rings”, *26th International Conference on the Physics of Semiconductors Proceedings*, (Institute of Physics, Edinburgh, 2002).
- [81] D. Haft, C. Schulhauser, A.O. Govorov, R.J. Warburton, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schoenfeld, P.M. Petroff, “Magneto-optical properties of ring-shaped self-assembled InGaAs quantum dots”, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 165 (2002).
- [82] Y. Kayanuma, “Wannier excitons in low-dimensional microstructures: Shape dependence of the quantum size effect”, *Phys. Rev. B* **44**, 13085 (1991).
- [83] J.G. Díaz, y J. Planelles, “Chains of artificial atoms in a magnetic field”, *J. Phys. Chem. B* **108**, 2873 (2004).

- [84] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmüller, y H. Weller, “Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment”, *Phys. Rev. B* **49**, 17072 (1994).
- [85] G.W. Bryant, “Theory for quantum-dot quantum wells: Pair correlation and internal quantum confinement in nanoheterostructures”, *Phys. Rev. B* **52**, R16997 (1995).
- [86] M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, y S. Bednarek, “Modelling of confinement potentials in quantum dots”, *Physica E (Amsterdam)* **15**, 261 (2002).
- [87] A. Zrenner, L. V. Butov, M. Hagn, G. Abstreiter, G. Böhm, y G. Weimann, “Quantum dots formed by interface fluctuations in AlAs/GaAs coupled quantum well structures”, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3382 (1994).
- [88] J.M. Luttinger, “Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory”, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [89] O. Voskoboynikov, Y. Li, H.M. Lu, C.F. Shih, y C.P. Lee, “Energy states and magnetization in nanoscale quantum rings”, *Phys. Rev. B* **66**, 155306 (2002).
- [90] M. Pacheco, y Z. Barticevic, “Spectra of acceptors in quantum dots: the effect of a magnetic field”, *J. Phys.: Cond. Matter* **11**, 1079 (1999).
- [91] D. Bimberg, M. Grundmann, y N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (John Wiley & Sons, Guilford, 1999).
- [92] G.L. Bir, y G.E. Pikus, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, (John Wiley & Sons, Jerusalem, 1974).
- [93] R.L. Burden, J. Douglas Faires, *Análisis numérico*, (Iberoamericana cop., México D.F., 1996).
- [94] http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/BCs_Hi.caixa.pdf
- [95] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, (John Wiley & Sons, Guilford, 2000).
- [96] W.E. Arnoldi, “The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem”, *Quart. J. Applied Mathematics* **9**, 17 (1951); Y. Saad, *Numerical Methods for large Scale Eigenvalue*

- Problems* (Halsted Press, New York, 1992); R.B. Morgan, “On restarting the Arnoldi method for large nonsymmetric eigenvalue problems”, *Math. Comp.* **65**, 1213 (1996).
- [97] R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, P.A. Vu, y C. Yang, *ARPACK: Fortran subroutines for solving large scale eigenvalue problems, Release 2.1*; R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, y C. Yang, *ARPACK User’s Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (SIAM, Philadelphia, 1998).
- [98] M. Fricke, A. Lorke, J.P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, y P.M. Petroff, “Shell structure and electron-electron interaction in self-assembled InAs quantum dots”, *Europhys. Lett.* **36**, 197 (1996).
- [99] B.T. Miller, W. Hansen, S. Manus, R.J. Luyken, A. Lorke, J.P. Kotthaus, y S. Huant, “Few-electron ground states of charge-tunable self-assembled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **56**, 6764 (1997).
- [100] M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, y A. Forchel, “Hidden symmetries in the energy levels of excitonic ‘artificial atoms’”, *Nature (London)* **405**, 923 (2000).
- [101] R.J. Warburton, C. Schafflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, y P.M. Petroff, “Optical emission from a charge-tunable quantum ring”, *Nature (London)* **405**, 926 (2000).
- [102] A. Lorke, y R.J. Luyken, “Many-particle ground states and excitations in nanometer-size quantum structures”, *Physica B (Amsterdam)* **256-258**, 424 (1998).
- [103] L.P. Kouwenhoven, T.H. Oosterkamp, M.W.S. Danoesastro, M. Eto, D.G. Austing, T. Honda, y S. Tarucha, “Excitation spectra of circular, few-electron quantum dots”, *Science* **278**, 1788 (1997).
- [104] U. Meirav, y E.B. Foxman, “Single-electron phenomena in semiconductors”, *Semicond. Sci. Technol.* **11** 255 (1996).
- [105] B.Szafran, S.Bednarek, y J.Adamowski, “Magnetic-field-induced transformations of Wigner molecule symmetry in quantum dots”, *Phys. Rev. B* **67** 045311 (2003).
- [106] M. Wagner, U. Merkt, y A.V. Chaplik, “Spin-singlet-spin-triplet oscillations in quantum dots”, *Phys. Rev. B* **45**, 1951 (1992).

- [107] A. Wójs, y P. Hawrylak, “Charging and infrared spectroscopy of self-assembled quantum dots in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **53**, 10841 (1996).
- [108] O. Olendski, C.S. Kim, O.H. Chung, y C.S. Lee, “Persistent current of a two-electron quantum disk”, *Phys. Rev. B* **55**, 9834 (1997).
- [109] J.L. Zhu, Z.Q. Li, J.Z. Yu, K. Ohno, y Y. Kawazoe, “Size and shape effects of quantum dots on two-electron spectra”, *Phys. Rev. B* **55**, 15819 (1997).
- [110] J.L. Zhu, Z. Zhu, Y. Kawazoe, y T. Yao, “Interactions and oscillations in quantum dots”, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 229 (1999).
- [111] M. Dineykhani, y R.G. Nazmitdinov, “Ground state spin oscillations of a two-electron quantum dot in a magnetic field”, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, L83 (1999).
- [112] J.T. Lin, y T.F. Jiang, “Two interacting electrons in a vertical quantum dot with magnetic fields”, *Phys. Rev. B* **64**, 195323 (2001).
- [113] B. Szafran, J. Adamowski, y S. Bednarek, “Electron-electron correlation in quantum dots”, *Physica E (Amsterdam)* **5**, 185 (2000).
- [114] M. El-Said, “The spectral properties of two-electron quantum dot”, *Physica E (Amsterdam)* **14**, 323 (2002).
- [115] W. Xie, “Two interacting electrons in a Gaussian confining potential quantum dot”, *Solid State Commun.* **127**, 401 (2003).
- [116] N.F. Johnson, “Quantum dots: few-body, low-dimensional systems”, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 965 (1995).
- [117] V. Gudmundsson, y R.R. Gerhardtts, “Self-consistent model of magnetoplasmons in quantum dots with nearly parabolic confinement potentials”, *Phys. Rev. B* **43**, 12098 (1991).
- [118] D. Pfannkuche, y R.R. Gerhardtts, “Quantum-dot helium: Effects of deviations from a parabolic confinement potential”, *Phys. Rev. B* **44**, 13132 (1991).
- [119] D. Pfannkuche, V. Gudmundsson, y P.A. Maksym, “Comparison of a Hartree, a Hartree-Fock, and an exact treatment of quantum-dot helium”, *Phys. Rev. B* **47**, 2244 (1993).

- [120] J.L. Movilla, y J. Planelles, “Off-centering of hydrogenic impurities in quantum dots”, aceptado por *Phys. Rev. B* (Diciembre 2004).
- [121] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, y B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77*, (Cambridge University Press, 1992).
- [122] <http://www.netlib.org/lapack/double/dsyevx.f>
- [123] C.B. Murray, C.R. Kagan, y M.G. Bawendi, “Synthesis and characterization of monodisperse nanocrystals and close-packed nanocrystal assemblies”, *Annual Review of Materials Science* **30**, 545 (2000).
- [124] A.P. Alivisatos, “Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots”, *Science* **271**, 933 (1996).
- [125] *J. Lumin* **70**, 1 (Número especial sobre espectroscopia de nanocristales semiconductores aislados y organizados).
- [126] D. Norris, y M.G. Bawendi, “Measurement and assignment of the size-dependent optical spectrum in CdSe quantum dots”, *Phys. Rev. B* **53**, 16338 (1996).
- [127] U. Banin, C.J. Lee, A.A. Guzelian, A.V. Kadavanich, A.P. Alivisatos, W. Jaskólski, G.W. Bryant, Al.L. Efros, y M. Rosen, “Size-dependent electronic level structure of InAs nanocrystal quantum dots: Test of multiband effective mass theory”, *J. Chem. Phys.* **109**, 2306 (1998).
- [128] J.W. Haus, H.S. Zhou, I. Honma, y H. Komiyama, “Quantum confinement in semiconductor heterostructure nanometer-size particles”, *Phys. Rev. B* **47**, 1359 (1993).
- [129] K. Chang, y J.B. Xia, “Spatially separated excitons in quantum-dot quantum well structures”, *Phys. Rev. B* **57**, 9780 (1998).
- [130] M. Bylicki, y W. Jaskólski, “Binding of resonant states in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **60**, 15924.
- [131] S.J. Prado, C. Trallero-Giner, A.M. Alcalde, V. López-Richard, y G.E. Marques, “Magneto-optical properties of nanocrystals: Zeeman splitting”, *Phys. Rev. B* **67**, 165306 (2003).
- [132] J. Planelles, W. Jaskólski, y J.I. Aliaga, “Energy structure of quantum rings in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **65**, 033306 (2001).

- [133] A. Baldereschi, y N.O. Lipari, “Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors”, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [134] R. Rosas, R. Riera, J.L. Marin, y H. León, “Energy spectrum of a confined two-dimensional particle in an external magnetic field”, *Am. J. Phys.* **68**, 835 (2000).
- [135] O. Madelung (editor), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 17 (Springer-Verlag, Berlin, 1982).
- [136] J.B. Xia, “Electronic structures of zero-dimensional quantum wells”, *Phys. Rev. B* **40**, 8500 (1989).
- [137] W. Jaskólski y G.W. Bryant, en *Optical Properties of Semiconductor Nanostructures*, editado por M.L. Sadowski, M. Potemski, y M. Grynberg, NATO Science Series 3, Vol. 81 (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000).
- [138] I.N. Stranski, L. von Krastanow, y K. Sitzungsber, *Akad. Wiss. Wien, Math.-Naturwiss. Klasse* **146**, 797 (1937).
- [139] P.M. Petroff, y S.P. DenBaars, “MBE and MOCVD growth and properties of self-assembling quantum dot arrays in III-V semiconductor structures”, *Superlatt. Microstruct.* **15**, 15 (1994).
- [140] P. Ballet, J.B. Smaters, H. Yang, C.L. Workman, y G.J. Salamo, “Control of size and density of InAs/(Al, Ga)As self-organized islands”, *J. Appl. Phys.* **90**, 481 (2001).
- [141] P.B. Joyce, T.J. Krzyzewski, G.R. Bell, B.A. Joyce, y T.S. Jones, “Composition of InAs quantum dots on GaAs(001): Direct evidence for (In,Ga)As alloying”, *Phys. Rev. B* **58**, R15981 (1998).
- [142] P. Ballet, J.B. Smathers, y G.J. Salamo, “Morphology of InAs self-organized islands on AlAs surfaces”, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 337 (1999).
- [143] J.M. Garcia, T. Mankand, T. Holtz, P.J. Wellmann, y P.M. Petroff, “Electronic states tuning of InAs self-assembled quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **72** (1998) 3172.
- [144] M. Meixner, *Simulation of self-organized growth kinetics of quantum dots*, Memoria de Tesis Doctoral, (Technischen Universität Berlin, Berlin, 2002).

- [145] J.M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. André, y O. Vatel, “Self-organized growth of regular nanometer-scale InAs dots on GaAs”, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 196 (1994).
- [146] Y. Masumoto, y T. Takagahara, *Semiconductor Quantum Dots* (Springer, Berlin, 2002).
- [147] Y. Arakawa, y H. Sakaki, “Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current”, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 939 (1982).
- [148] V. Rhyzii, I. Khmyrova, V. Mitin, M. Stroschio, y M. Willander, “On the detectivity of quantum-dot infrared photodetectors”, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3523 (2001).
- [149] J. Phillips, “Evaluation of the fundamental properties of quantum dot infrared detectors”, *J. Appl. Phys.* **91**, 4590 (2002).
- [150] H.C. Liu, J.-Y. Duboz, R. Dudek, Z.R. Wasilewski, S. Fafard, y P. Finnie, “Quantum dot infrared photodetectors”, *Physica E (Amsterdam)* **17**, 631 (2003).
- [151] M. Grundmann, N.N. Ledentsov, O. Stier, D. Bimberg, V.M. Ustinov, P.S. Kop’ev, y Z.I. Alferov, “Excited states in self-organized InAs/GaAs quantum dots: Theory and experiment”, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 979 (1996).
- [152] G. Wang, S. Fafard, D. Leonard, J.E. Bowers, J.L. Merz, y P.M. Petroff, “Time-resolved optical characterization of InGaAs/GaAs quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2815 (1994).
- [153] Y.S. Kim, U.H. Lee, D. Lee, S.J. Rhee, Y.A. Leem, H.S. Ko, D.H. Kim, y J.C. Woo, “Energy-level engineering of self-assembled quantum dots by using AlGaAs alloy cladding layers”, *J. Appl. Phys.* **87**, 241 (2000).
- [154] M.-Y. Kong, X.-L. Wang, D. Pan, Y.-P. Zeng, J. Wang, y W. Ge, “A comparison of photoluminescence properties of InGaAs/GaAs quantum dots with a single quantum well”, *J. Appl. Phys.* **86**, 1456 (1999).
- [155] C. Lobo, R. Leon, S. Fafard, y P.G. Piva, “Intermixing induced changes in the radiative emission from III-V quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2850 (1998).

- [156] H.C. Liu, M. Gao, J. McCaffrey, Z.R. Wasilewski, y S. Fafard, “Quantum dot infrared photodetectors”, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 79 (2001).
- [157] J. Phillips, K. Kamath, X. Zhou, N. Chervela, y P. Bhattacharya, “Photoluminescence and far-infrared absorption in Si-doped self-organized InAs quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2079 (1997).
- [158] R. Leon, S. Fafard, D. Leonard, J.L. Merz, y P.M. Petroff, “Visible luminescence from semiconductor quantum dots in large ensembles”, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 521 (1995).
- [159] A. Polimeni, A. Patané, M. Henini, L. Eaves, y P.C. Main, “Temperature dependence of the optical properties of InAs/Al_yGa_{1-y}As self-organized quantum dots”, *Phys. Rev. B* **59**, 5064 (1999).
- [160] Z. Ma, K. Pierz, U.F. Keyser, y R.J. Haug, “Photoluminescence of self-assembled InAs/AlAs quantum dots as a function of density”, *Physica E (Amsterdam)* **17**, 117 (2003).
- [161] U.H. Lee, D. Lee, H.G. Lee, S.K. Noh, J.Y. Leem, y H.J. Lee, “Visible photoluminescence from self-assembled InAs quantum dots embedded in AlAs cladding layers”, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1597 (1999).
- [162] J.S. Kim, P.W. Yu, J.-Y. Leem, M. Jeon, S.K. Noh, J.I. Lee, G.H. Kim, S.-K. Kang, J.S. Kim, y S.G. Kim, “Effects of high potential barrier on InAs quantum dots and wetting layer”, *J. Appl. Phys.* **91**, 5055 (2002).
- [163] F. Ferdos, S. Wang, Y. Wei, M. Sadeghi, Q. Zhao, y A. Larsson, “Influence of initial GaAs and AlAs cap layers on InAs quantum dots grown by molecular beam epitaxy”, *J. Crys. Growth* **251**, 145 (2003).
- [164] M. Arzberger, U. Käsberg, G. Bohm, y G. Abstreiter, “Influence of a thin AlAs cap layer on optical properties of self-assembled InAs/GaAs quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3968 (2002).
- [165] L. Rebohle, F.F. Schrey, S. Hofer, G. Strasser, y K. Unterrainer, “Energy level engineering in InAs quantum dot nanostructures”, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2079 (2002).
- [166] K.W. Berryman, S.A. Lyon, y M. Segev, “Mid-infrared photoconductivity in InAs quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1861 (1997).

- [167] K.W. Berryman, S.A. Lyon, y M. Segev, “Electronic structure and optical behavior of self-assembled InAs quantum dots”, *J. Vac. Sci. Technol. B* **15**, 1045 (1997).
- [168] S.Y. Wang, S.D. Lin, H.W. Wu, y C.P. Lee, “Low dark current quantum-dot infrared photodetectors with an AlGaAs current blocking layer”, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1023 (2001).
- [169] A.D. Stiff, S. Krishna, P. Bhattacharya, y S.W. Kennerly, “Normal-incidence, high-temperature, mid-infrared, InAs-GaAs vertical quantum-dot infrared photodetector”, *IEEE J. Quantum Electron.* **37**, 1412 (2001).
- [170] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, y L.R. Ram-Mohan, “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [171] S.S. Li, J.B. Xia, Z.L. Yuan, Z.Y. Xu, W. Ge, X.R. Wang, Y. Wang, J. Wang, y L.L. Chang, “Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **54**, 11575 (1996).
- [172] B. Kochman, A.D. Stiff-Roberts, S. Chakrabarti, J.D. Phillips, S. Krishna, J. Singh, y P. Bhattacharya, “Absorption, carrier lifetime, and gain in InAs-GaAs quantum-dot infrared photodetectors”, *IEEE J. Quantum Electron.* **39**, 459 (2003).
- [173] Y.Q. Wei, S.M. Wang, F. Ferdos, J. Vukusic, Q.X. Zhao, M. Sadeghi, y A. Larsson, “Aluminium incorporation for growth optimization of 1.3μ emission InAs/GaAs quantum dots by molecular beam epitaxy”, *J. Cryst. Growth* **251**, 172 (2003).
- [174] O. Baklenov, D.L. Huffaker, A. Anselm, D.G. Deppe, y B.G. Streetman, “Influence of Al content on formation of InAlGaAs quantum dots grown by molecular beam epitaxy”, *J. Appl. Phys.* **82**, 6362 (1997).
- [175] M. Büttiker, Y. Imry, y R. Landauer, “Josephson behavior in small normal one-dimensional rings”, *Phys. Lett.* **96A**, 365 (1983).
- [176] A.G. Aronov, y Yu. V. Sharvin, “Magnetic flux effects in disordered conductors”, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 755 (1987).
- [177] L. Wendler, y V.M. Fomin, “Persistent currents in finite-width mesoscopic rings - the role of the interchannel coupling and of the electron-electron interaction”, *Phys. Status Solidi (b)* **191**, 409 (1995).

- [178] A. Fuhrer, S. Luescher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, y M. Bichler, “Energy spectra of quantum rings”, *Nature (London)* **413**, 822 (2001).
- [179] S. Viefers, P. Koskinen, P. Singha Deo, M. Maninen, “Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents”, *Physica E (Amsterdam)* **21**, 1 (2004).
- [180] Y. Aharonov, y D. Bohm, “Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory”, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [181] S. Olariu, y II. Popescu, “The quantum effects of electromagnetic fluxes”, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 339 (1985).
- [182] V. Chandrasekhar, R.A. Webb, M.J. Brady, M.B. Ketchen, W.J. Gallagher, y A. Kleinsasser, “Magnetic response of a single, isolated gold loop”, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3578 (1991).
- [183] M. Bayer, M. Korkusiński, P. Hawrylak, T. Gutbrod, M. Michel, y A. Forchel, “Optical detection of the Aharonov-Bohm effect on a charged particle in a nanoscale quantum ring”, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 186801 (2003).
- [184] M.S. Skolnick, y D.J. Mowbray, “Recent developments in the physics and applications of self-assembled quantum dots”, *Physica E (Amsterdam)* **21**, 155 (2004).
- [185] A. Lorke, R. Blossey, J.M. Garcia, M. Bichler, y G. Abstreiter, “Morphological transformation of InGaAs islands, fabricated by Stranski-Krastanov growth”, *Mater. Sci. Eng., B* **88**, 225 (2002).
- [186] R. Blossey, y A. Lorke, “Wetting droplet instability and quantum ring formation”, *Phys. Rev. E* **65**, 021603 (2002).
- [187] J.A. Barker, R.J. Warburton, y E.P. O’Reilly, “Electron and hole wave functions in self-assembled quantum rings”, *Phys. Rev. B* **69**, 035327 (2004).
- [188] A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, y A. Lorke, “Far-infrared spectroscopy of nanoscopic InAs rings”, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- [189] J.M. Garcia, D. Granados, J.P. Silveira, y F. Briones, “In segregation effects during quantum dot and quantum ring formation on GaAs(001)”, *Microelectronics J.* **35**, 7 (2004).

- [190] H. Hu, J.L. Zhu, y J.J. Xiong, “Energy levels and far-infrared spectroscopy for two electrons in a nanoscopic semiconductor ring”, *Phys. Rev. B* **62**, 16777 (2000).
- [191] J. Even, y S. Loualiche, “Exact analytical solutions describing quantum dot, ring and wire wavefunctions”, *J.Phys. A: Math. Gen.* **37**, L289 (2004).
- [192] W.-C. Tan, y J.C. Inkson, “Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots”, *Phys. Rev. B* **60**, 5626 (1999).
- [193] O. Voskoboynikov, y C.P. Lee, “Magnetization and magnetic susceptibility of InAs nano-rings”, *Physica E (Amsterdam)* **20**, 278 (2004).
- [194] Z. Barticevic, M. Pacheco, y A. Laté, “Quantum rings under magnetic fields: Electronic and optical properties”, *Phys. Rev. B* **62**, 6963 (2000).
- [195] M. Tadić, F.M. Peeters, K.L. Janssens, M. Korkusiński, y P. Hawrylak, “Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **92**, 5819 (2002).
- [196] P.D. Wang, N.N. Ledentsov, C.M. Sotomayor Torres, P.S. Kop’ev, y V.M. Ustinov, “Optical characterization of submonolayer InAs structures grown in a GaAs matrix on (100) and high-index surfaces”, *Appl.Phys.Lett.* **64**, 1526 (1994).
- [197] V. Fock, “Bemerkung zur Quantelung des harmonischen Oszillators im Magnetfeld”, *Z. Phys.* **47**, 446 (1928).
- [198] C.G. Darwin, “The diamagnetism of the free electron”, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **27**, 86 (1930).
- [199] L.A. Lavenere-Wanderley, A. Bruno-Alfonso, y A. Latge, “Electronic states in quantum rings: electric field and eccentricity effects”, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 259 (2002).
- [200] J.M. Llorens, C. Trallero-Giner, A. Garcia-Cristobal, y A. Cantarero, “Electronic structure of a quantum ring in a lateral electric field”, *Phys. Rev. B* **64**, 035309 (2001).

- [201] A. Puente, y Ll. Serra, “Ground state and far-infrared absorption of two-electron rings in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **63**, 125334 (2001).
- [202] K. Niemelä, P. Pietiläinen, P. Hyvönen, y T. Chakraborty, “Fractional oscillations of electronic states in a quantum ring”, *Europhys. Lett.* **36**, 533 (1996).
- [203] V. Halonen, P. Pietiläinen, y T. Chakraborty, “Optical-absorption spectra of quantum dots and rings with a repulsive scattering centre”, *Europhys. Lett.* **33**, 377 (1996).
- [204] M. Manninen, M. Koskinen, S.M. Reimann, y B. Mottelson, “Magnetic properties of quantum dots and rings”, *Eur. Phys. J. D.* **16**, 381 (2001).
- [205] L. Wendler, V.M. Fomin, A.V. Chaplik, y A.O. Govorov, “Optical properties of two interacting electrons in quantum rings: Optical absorption and inelastic light scattering”, *Phys. Rev. B* **54**, 4794 (1996).
- [206] H. Pan, y J.L. Zhu, “Impurity effects on energy levels and far-infrared spectra of nanorings”, *J.Phys.: Condens. Matter*, **15** 7287 (2003).
- [207] J.B. Xia, y S.S. Li, “Electronic structure and transport properties of quantum rings in a magnetic field”, *Phys. Rev. B* **66**, 035311 (2002).
- [208] V. Gudmundsson, S.I. Erlingsson, y A. Manolescu, “Magnetization in short-period mesoscopic electron systems”, *Phys. Rev. B* **61**, 4835 (2000).
- [209] T.H. Oosterkamp, S.F. Godijn, M.J. Uilenreef, Y.V. Nazarov, N.C. van der Vaart, y L.P. Kouwenhoven, “Changes in the magnetization of a double quantum dot”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4951 (1998).
- [210] M.P. Schwarz, D. Grundler, M. Wilde, Ch. Heyn, y D. Heitmann, “Magnetization of semiconductor quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **91**, 6875 (2002).
- [211] P.A. Maksym, y T. Chakraborty, “Effect of electron-electron interactions on the magnetization of quantum dots”, *Phys. Rev. B* **45**, 1947 (1992).
- [212] P.S. Drouvelis, P. Schmelcher, y F.K. Diakonov, “Probing the shape of quantum dots with magnetic fields”, *Phys. Rev. B* **69**, 155312 (2004).

- [213] P.S. Drouvelis, P. Schmelcher, y F.K. Diakonov, “Effects of anisotropy and magnetic fields on two-electron parabolic quantum dots”, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 3633 (2004).
- [214] W. Sheng, y H. Xu, “Quantum dots with interacting electrons: Energy spectra and magnetization”, *Physica B*, **256-258**, 152 (1998).
- [215] R.A. Romer, y M.E. Raikh, “Aharonov-Bohm effect for an exciton”, *Phys. Rev. B* **62**, 7045 (2000).
- [216] M. Korkusiński, P. Hawrylak, y M. Bayer, “Negatively charged exciton in a quantum ring”, *Phys. Status Solidi B* **234**, 273 (2002).
- [217] H. Hu, D.J. Li, J.L. Zhu, y J.J. Xiong, “Size effects on excitons in nano-rings”, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 9145 (2000).
- [218] A.O. Govorov, A.V. Kalameitsev, R.J. Warburton, K. Karrai, y S.E. Ulloa, “Excitons in quantum-ring structures in a magnetic field: optical properties and persistent currents”, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 297 (2002).
- [219] S.E. Ulloa, A.O. Govorov, A.V. Kalameitsev, R.J. Warburton, y K. Karrai, “Magnetoexcitons in quantum ring structures: a novel magnetic interference effect”, *Physica E (Amsterdam)* **12**, 790 (2002).
- [220] A.O. Govorov, S.E. Ulloa, K. Karrai, y R.J. Warburton, “Polarized excitons in nanorings and the optical Aharonov-Bohm effect”, *Phys. Rev. B* **66**, 081309(R) (2002).
- [221] I. Galbraith, F.J. Braid, y R.J. Warburton, “Magneto-excitons in semiconductor quantum rings”, *Phys. Status Solidi A* **190**, 781 (2002).
- [222] J. Song, y S.E. Ulloa, “Magnetic field effects on quantum ring excitons”, *Phys. Rev. B* **63**, 125302 (2001).
- [223] B. Szafran, J. Adamowski, y S. Bednarek, “Effect of the repulsive core on the exciton spectrum in a quantum ring”, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 73 (2002).
- [224] H. Hu, J.L. Zhu, D.J. Li, y J.J. Xiong, “Aharonov-Bohm effect of excitons in nanorings”, *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001).
- [225] L.G.G.V. Dias da Silva, S.E. Ulloa, y A.O. Govorov, “Impurity-enhanced Aharonov-Bohm effect in neutral quantum ring magnetoexcitons”, cond-mat/0403071.

- [226] S.S. Li, y J.B. Xia, “Valence band structures of the InAs/GaAs quantum ring”, *J. Appl. Phys.* **91**, 3227 (2002).
- [227] B. Szafran, S. Bednarek, y J. Adamowski, “Parity symmetry and energy spectrum of excitons in coupled self-assembled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **64**, 125301 (2001).
- [228] W. Que, “Excitons in quantum dots with parabolic potential”, *Phys. Rev. B* **45**, 11036 (1992).
- [229] R.J. Warburton, C.S. Dürr, K. Karrai, J.P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, y P.M. Petroff, “Charged excitons in self-assembled semiconductor quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5282 (1997).
- [230] R.J. Warburton, B.T. Miller, C.S. Dürr, C. Bödefeld, K. Karrai, J.P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro, P.M. Petroff, y S. Huant, “Coulomb interactions in small charge-tunable quantum dots: a simple model”, *Phys. Rev. B* **58**, 16221 (1998).
- [231] A.V. Chaplik, “Magnetoexcitons in quantum rings and in antidots”, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **62**, 885 (1995) [*JETP Lett.* **62**, 900 (1995)].
- [232] E. Ribeiro, G. Medeiros-Ribeiro, W. Carvalho Jr., y A.O. Govorov, “Aharonov-Bohm signature for neutral excitons in type-II quantum dot ensembles”, *cond-mat/0304092*.
- [233] S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. von Molnár, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, “Spintronics: a spin-based electronics vision for the future”, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [234] P. Kacman, “Spin interactions in diluted magnetic semiconductors and magnetic semiconductor structures”, *Semicond. Sci. Technol.* **16**, R25 (2001).
- [235] D.D. Awschalom, J. Warnock, y S. von Molnár, “Low-temperature magnetic spectroscopy of a dilute magnetic semiconductor”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 812 (1987).
- [236] P.A. Wolff, en *Semiconductor and Semimetals, Diluted Magnetic Semiconductors*, editado por J.K. Furdyna y J. Kossut (Academic, New York, 1988), Vol. **25**, p.413.

- [237] H. Krenn, K. Kaltenecker, T. Dietl, J. Spalek, y G. Bauer, “Photoinduced magnetization in dilute magnetic (semimagnetic) semiconductors”, *Phys. Rev. B* **39**, 10918 (1989).
- [238] V.V. Rossin, F. Henneberger, y J. Puls, “Magnetic-field-induced formation of exciton magnetic polarons in ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe quantum-well structures”, *Phys. Rev. B* **53**, 16444 (1996).
- [239] H. Ohno, F. Matsukura, y Y. Ohno, “Spin-dependent properties of ferromagnetic/nonmagnetic GaAs heterostructures”, *Materials Sci. and Engineering* **B84**, 70 (2001).
- [240] A.I.L. Efros, y M. Rosen, “The electronic structure of semiconductor nanocrystals”, *Annual Review of Materials Science* **30**, 475 (2000).
- [241] T. Lundstrom, W. Schoenfeld, H. Lee, y P.M. Petroff, “Exciton Storage in Semiconductor Self-Assembled Quantum Dots”, *Science* **286**, 2312 (1999).
- [242] D.M. Hoffman, B.K. Meyer, A.I. Ekimov, I.A. Merkulov, A.I.L. Efros, M. Rosen, G. Couino, T. Gacoin, y J.P. Boilot, “Giant internal magnetic fields in Mn doped nanocrystal quantum dots”, *Solid State Commun.* **114**, 547 (2000).
- [243] Y. Wang, N. Herron, K. Moller, y T. Bein, “Three-dimensionally confined diluted magnetic semiconductor clusters: Zn_{1-x}Mn_xS”, *Solid State Commun.* **77**, 33 (1991).
- [244] R.N. Bhargava, D. Gallagher, X. Hong, y A. Nurmikko, “Optical properties of manganese-doped nanocrystals of ZnS”, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 416 (1994).
- [245] A.A. Maksimov, G. Bacher, A. McDonald, V.D. Kulakovskii, A. Forchel, C.R. Becker, G. Landwehr, y L.W. Molenkamp, “Magnetic polarons in a single diluted magnetic semiconductor quantum dot”, *Phys. Rev. B* **62**, R7767 (2000).
- [246] G. Bacher, H. Schömig, M.K. Welsch, S. Zatischev, V.D. Kulakovskii, A. Forchel, S. Lee, M. Dobrowolska, J.K. Furdyna, B. König, y W. Ossau, “Optical spectroscopy on individual CdSe/ZnMnSe quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 524 (2001).

- [247] S. Lee, D.Y. Shin, H.S. Lee, J.Y. Lee, L.V. Titoro, M. Kutrowski, J.K. Furdyna, y M. Dobrowolska, “Structural and magneto-optical studies on multiple quantum dots containing magnetic semiconductors”, *Phys. Stat. Sol. (c)* **0**, 1283 (2003).
- [248] Y.K. Zhou, H. Asahi, J. Asakura, S. Okumura, K. Asami, y S. Gonda, “Magnetic and optical properties of Mn-including InAs dots grown by metalorganic molecular beam epitaxy”, *J. Crystal Growth* **221**, 605 (2000).
- [249] C.A. Stowell, R.J. Wiacek, A.E. Saunders, y B.A. Korgel, “Synthesis and Characterization of Dilute Magnetic Semiconductor Manganese-Doped Indium Arsenide Nanocrystals”, *NanoLetters* **3**, 1441 (2003).
- [250] L. Besombes, Y. Léger, L. Maingault, D. Ferrand, H. Mariette, y J. Cibert, “Probing the spin state of a single magnetic ion in an individual quantum dot”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 207403 (2004).
- [251] A.K. Bhattacharjee, y C. Benoit à la Guillaume, “Exciton magnetic polaron in semimagnetic semiconductor nanocrystals”, *Phys. Rev. B* **55**, 10613 (1997).
- [252] A.K. Bhattacharjee, y C. Benoit à la Guillaume, “Model for the Mn acceptor in GaAs”, *Solid State Commun.* **113**, 17 (2000).
- [253] K. Chang, J.B. Xia, y F.M. Peeters, “Magnetic field tuning of the effective g factor in a diluted magnetic semiconductor quantum dot”, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2661 (2003).
- [254] A.O. Govorov, “Optical probing of the spin state of a single magnetic impurity in a self-assembled quantum dot”, *Phys. Rev. B* **70**, 035321 (2004).
- [255] K. Chang, S.S. Li, J.B. Xia, y F.M. Peeters, “Electron and hole in diluted magnetic semiconductor quantum dots”, *Phys. Rev. B* **69**, 235203 (2004).
- [256] J. Fernández-Rossier, y L. Brey, “Ferromagnetism mediated by few electrons in a semimagnetic quantum dot”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 117201 (2004).
- [257] J. Schneider, U. Kaufman, W. Wilkening, M. Bauer, y F. Köhl, “Electronic structure of the neutral manganese acceptor in gallium arsenide”, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 240 (1987).

- [258] M. Linnarsson, E. Janzén, B. Monemar, M. Klevermann, y A. Thilderkvist, “Electronic structure of the GaAs:Mn_{Ga} center”, *Phys. Rev. B* **55**, 6938 (1997).
- [259] V.F. Sapega, M. Moreno, M. Ramsteiner, L. Däweritz, y K. Ploog, “Electronic structure of Mn ions in (Ga,Mn)As diluted magnetic semiconductor”, *Phys. Rev. B* **66**, 075217 (2002).
- [260] V.F. Sapega, T. Ruf, y M. Cardona, “Spin-flip Raman scattering in Mn-doped GaAs: exchange interaction and g factor renormalization”, *Solid State Commun.* **114**, 573 (2000).
- [261] A.M. Yakunin, A. Yu. Silov, P.M. Koenraad, W. Van Roy, J. De Boeck, y J.H. Wolter, “Imaging of the (Mn²⁺3d⁵ + hole) complex in GaAs by cross-sectional scanning tunneling microscopy”, in *Proceedings of the 11th International Conference on Modulated Semiconductor Structures*, (Nara, 2003), p.357.

Artículos

Semiconductor nanocrystals in a magnetic fieldJ. Planelles, J. G. Díaz, and J. Climente
*Departament de Ciències Experimentals, UJI, Castelló, Spain*W. Jaskólski
Instytut Fizyki UMK, Grudziądzka 5, 87-100 Toruń, Poland
(Received 9 January 2002; published 28 May 2002)

The influence of a magnetic field on the electron and hole energy spectra of spherical uniform and multilayer semiconductor nanocrystals is investigated. The calculations are performed within the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method and envelope function approximation. The valence subband mixing is taken into account by considering a two-band Hamiltonian for the hole states. It is shown that the magnetic-field dependence of the energy spectrum varies strongly with the size and composition of the nanocrystals. Several interesting phenomena, like spatial polar separation of the one-electron charge density in quantum dot–quantum well structures or crossover from confinement in the external shell to the internal core in quantum dot–quantum barrier systems under the influence of a magnetic field are reported.

DOI: 10.1103/PhysRevB.65.245302

PACS number(s): 73.21.La

I. INTRODUCTION

Semiconductor nanocrystals synthesized in colloidal solutions are the smallest quantum dots with the strongest three-dimensional confinement.^{1–6} Their sizes can vary from 1 to 10 nm, they have frequently spherical shapes and can be fabricated as multishell structures, i.e., built of concentric layers (shells) of different semiconductors with the shell thickness down to a single monolayer. The size of the nanocrystals and the composition of layers can be easily manipulated in the process of fabrication, which makes it possible to tailor to a large extent their discrete energy spectra.^{7,8} This makes them attractive for applications in novel optoelectronic devices.

The influence of a magnetic field on the energy structure of quantum dots has been studied so far almost exclusively for quasi-two-dimensional semiconductor islands, disks, and rings.^{9–14} In the majority of works only electron states have been investigated and the calculations performed within the one-band effective-mass approximation with parabolic confining potentials. In such cases the resulting energy spectra are of the well-known Fock-Darwin type. However, when the effective-mass approach and the envelope function approximation are used, the confining potentials are far from being parabolic. They have a well defined steplike character at interfaces separating two different media: the rectangular steps are determined by the corresponding band offsets. Very recently, steplike potentials have been used to investigate and successfully explain¹⁴ the energy spectra of InAs rings grown on GaAs substrate.^{12,15} Such potentials have been also used in the study of resonance states of multilayer spherical nanocrystals, where an interesting phenomenon, the transformation of resonant states into bound states under the influence of a magnetic field, has been reported.^{16,17}

In this paper we study the influence of a magnetic field on both the electron and hole energy levels of uniform and multishell spherical nanocrystals. The one-band effective-mass approach is used in the calculations of electron states. For the

hole states the valence subband mixing is taken into account by considering a two-band Hamiltonian.^{14,18} In multilayer structures, like quantum dot–quantum wells or quantum dot–quantum barriers, the charge density of some electron and hole states can be localized inside thin spherical layers.^{7,8} We show that application of a magnetic field can lead in such structures to effects not observed for homogeneous spherical or two-dimensional quantum dots.

II. THEORY AND COMPUTATIONAL DETAILS

The one-band effective-mass equation for an electron in a spherical quantum dot potential $V_e(\rho, z)$ and magnetic field $\mathbf{B}=(0,0,B)$ is (in cylindrical coordinates ρ, z)

$$\left(\frac{1}{2m^*} \Delta - \frac{B^2}{8m^*} \rho^2 - \frac{BM}{2m^*} + V_e(\rho, z) - E_{n,M} \right) \Phi_{nM} = 0, \quad (1)$$

where $M=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number of the projection of the angular momentum \mathbf{L} onto the magnetic-field (B) axis, m^* is the effective mass, and n is the main quantum number. For comparison with the spherically symmetric states of the $B=0$ case, we will label the consecutive states by $\tilde{n}L_M$, where \tilde{n} labels the consecutive states of a given spherical symmetry case at $B=0$.

For the proper description of the valence-band states, the valence-subband mixing has to be taken into account by considering at least the four-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonian, that couples the heavy hole and light hole subbands.¹⁹ The four-band Hamiltonian represented in the conventional Luttinger-Kohn basis depends on two Luttinger parameters γ and γ_1 , which determine the heavy-hole and light-hole effective masses $m_{hh}=1/(\gamma-2\gamma_1)$ and $m_{lh}=1/(\gamma+2\gamma_1)$. When zero-dimensional nanostructures are considered, in which the electrons and holes can be totally confined in three dimen-

sions, the envelope function approximation is applied and the elements of the Hamiltonian become the operators acting on the components f_i of the envelope function.

For spherical nanostructures, such as the ones investigated in this paper, the Hamiltonian is usually written in spherical coordinates and results in two coupled differential equations in the radial variable.¹⁹ When the external magnetic field is applied the spherical symmetry is broken and the Hamiltonian commutes only with the operator F_z of the projection of the total angular momentum $\mathbf{F}=\mathbf{L}+\mathbf{J}$ onto the field axis (\mathbf{J} is the Bloch angular momentum ($J=3/2$) and \mathbf{L} is the envelope angular momentum). In such a case cylindrical coordinates (ρ, z, ϕ) are more convenient.²⁰ When the Hamiltonian is written down in cylindrical coordinates and integration over the ϕ angle is performed, it results in four coupled differential equations for the envelope function components (i) $f_{F_z}^i(\rho, z)$.¹⁴

The diagonal elements of the Hamiltonian include also (i) the potential energy $V_h(\rho, z)$, that depends on the actual geometry and structure of the studied system, and (ii) the interaction with an external uniform magnetic field $\mathbf{B}=(0,0,B)$ (linear Zeeman and quadratic terms). It is worthwhile to note that the cylindrical representation is also useful in the study of nonspherical nanocrystals (hemispherical, lens-shape, quantum rings,^{14,12} two or more aligned and interacting nanocrystals²¹) or when additionally an external electric field is applied.

In looking for the bound states of the investigated systems all the envelope function components are required to vanish for large ρ and z . For multishell structures, V_h and V_c are formed by the valence-band and conduction-band offsets, respectively. Since the electron and hole effective masses are different in different layers, appropriate matching conditions should in general be applied at the corresponding interfaces. In this paper, for simplicity, uniform electron effective masses and Luttinger parameters are considered for all the investigated systems.

The electron [Eq. (1)] and hole¹⁴ equations have been solved numerically using the finite-difference method on the two-dimensional grid (ρ, z) in cylindrical coordinates. The discretization of the differential equations yields eigenvalue problems of asymmetric huge and sparse matrices that have been solved by employing the iterative Arnoldi factorizations²² implemented in the ARPACK package.²³

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Uniform nanocrystals

1. Electron states

Chemically synthesized InAs nanocrystals are known of having almost spherical shapes.^{2,24} Their typical sizes are 2–10 nm (in diameter). The particularly small electron effective mass of InAs, $m^*=0.024$, opens a possibility to study the magnetic-field effects in *artificial atoms*, that cannot be investigated in real atoms for the fields attainable in the laboratory. In this section we study the influence of a magnetic field on the electron energy structure of uniform InAs nano-

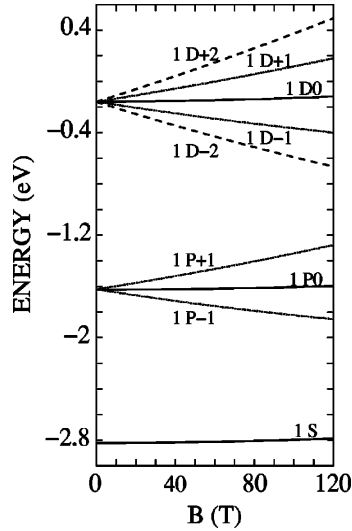


FIG. 1. Electron energy levels, $\bar{n}LM$, for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d=6$ nm vs magnetic field.

crystals. We have performed the calculations for two nanocrystals of very different size, namely 6 and 23 nm in diameter, both surrounded by a 4-eV rectangular barrier modeling the vacuum, water solution, or polymer medium. The electron energy levels of the smaller nanocrystal versus magnetic

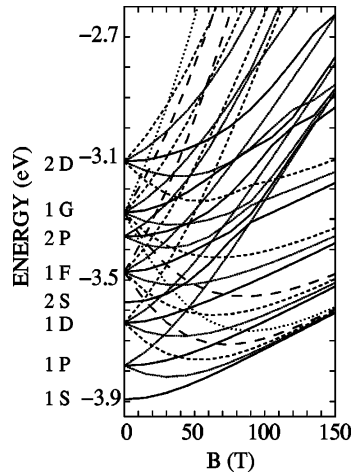


FIG. 2. Several lowest electron energy levels for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d=23$ nm vs magnetic field. Degenerate \bar{n} levels for $B=0$ T are marked. $M=0$ solid lines, $M=\pm 1$ dotted lines, $M=\pm 2$ short dashed lines, $M=\pm 3$ dashed lines.

field are presented in Fig. 1. Figure 2 shows the lower part of the energy spectrum of the wider quantum dot. The zero of energy scale is at the top of the external barrier.

For small nanocrystals the field dependence of the energy levels is, like in atoms, almost exclusively linear even for fields as strong as 100 T. In quantum dots of diameter $d \sim 10$ nm the quadratic dependence of the energy levels on the field starts to be seen at fields > 70 T. In large nanocrystals, i.e., for $d > 20$ nm, the quadratic dependence is seen already for laboratory fields (Fig. 2). The beginning of the formation of the first few Landau levels for fields greater than 100 T is also seen. For a very strong magnetic field the energy levels contributing to each Landau level form the spectrum of a one-dimensional rectangular potential well (in the z direction) of size d and depth 4 eV.

It is the ratio between ρ_0 and r_{max} , where $\rho_0 = [(2|M| + 1)(\hbar/eB)]^{1/2}$ is the radius of the maximum charge density in the lowest Landau level, and r_{max} is the maximum of the radial charge density in a given quantum dot state that decides whether only the linear Zeeman term or also the quadratic term in the Hamiltonian (1) are significant. For $B = 100$ T, $\rho_0 = 2.4$ nm. In nanocrystals of diameter $d = 6$ nm, $r_{max} \approx 1.5$ nm and compression of the radial charge density in the plane perpendicular to the field axis does not occur ($\rho_0 > r_{max}$). In this case only the linear term is significant. However, in large dots, e.g., for $d = 23$ nm, $r_{max} \approx 10$ nm and is much larger than ρ_0 even for $B = 10$ T. In this case the field confinement in the (x, y) plane is, for $B > 10$ T, stronger than the quantum dot confinement and the quadratic term becomes important.

The states, which for $B = 0$ have at least one radial node and thus significant charge density in the outer part of the nanocrystal, are more affected by the field than the nodeless states. This causes several anticrossings of the energy levels of a given symmetry M that can be observed for a larger nanocrystal at $B > 70$ T.

2. Hole states

In this section we study the influence of a magnetic field on the valence-band energy structure of uniform InAs nanocrystals. Luttinger parameters, $\gamma_1 = 19.7$ and $\gamma = 8.4$, corresponding to heavy hole and light hole effective masses $m_{hh} = 0.345$, $m_{lh} = 0.027$, are used.²⁵ When there is no magnetic field, the calculations are usually performed in spherical coordinates and the valence-band states are labelled by Q_F , where Q denotes the spectroscopic notation for the lowest value of L in the wave function.¹⁸ When the magnetic field is on and the calculations are performed in cylindrical coordinates, the states are labeled by F_z . To identify these states by their spherical notation at $B = 0$ we have performed, for $B = 0$, two sets of calculations in both coordinates. This allows us to label the states in cylindrical coordinates as $\tilde{n}Q_F, F_z$, where \tilde{n} is the main quantum number corresponding to a given spherical symmetry Q_F .

The valence-band energy levels for a InAs nanocrystal of diameter $d = 6$ nm are shown in Fig. 3. The height of the external barrier is, like for electrons, 4 eV. Since even for

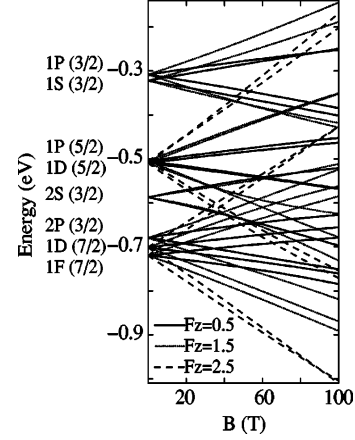


FIG. 3. Hole energy levels for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d = 6$ nm vs magnetic field. Degenerate $\tilde{n}Q(F)$ levels at $B = 0$ T are marked.

$F_z = \frac{1}{2}$ the radius ρ_0 of the maximum charge density in the corresponding Landau level is, for $B = 100$ T, greater than 3 nm, the field dependence of the hole energy levels is for small nanocrystals again exclusively linear. One can see that the behavior of different pairs $\pm F_z$ of states of a given $|F_z|$ is different versus increasing magnetic field. For example, at $B = 50$ T the energy difference $\Delta(1S_{\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}}, 1S_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}})$ is greater than $\Delta(1P_{\frac{5}{2}, +\frac{1}{2}}, 1P_{\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}})$; the energy difference

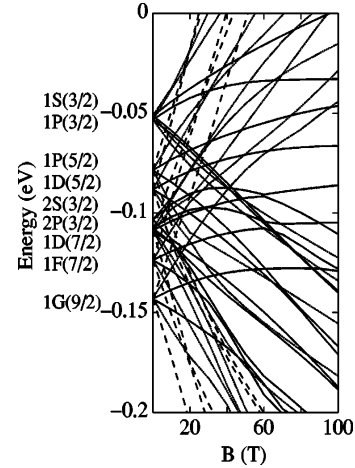


FIG. 4. Hole energy levels for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d = 16$ nm vs magnetic field. $F_z = \pm \frac{1}{2}$ solid lines, $F_z = \pm \frac{3}{2}$ dotted lines, $F_z = \pm \frac{5}{2}$ dashed lines. Degenerate $\tilde{n}Q(F)$ levels at $B = 0$ T are marked.

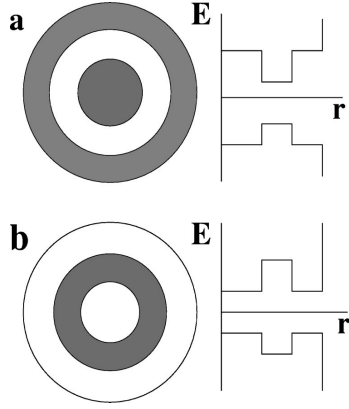


FIG. 5. The investigated multishell nanocrystals and the corresponding schematic layouts of conduction-band and valence-band edges. (a) quantum dot–quantum well, (b) quantum dot–quantum barrier.

$\Delta(1S_{\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}}, 1S_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}})$ is smaller than $\Delta(1P_{\frac{5}{2}, +\frac{3}{2}}, 1P_{\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}})$. Another example: the energy difference $\Delta(2S_{\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}}, 2S_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}})$ is the same as $\Delta(2S_{\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}}, 2S_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}})$. This is because different pairs $\pm F_z$ of states correspond to two valence subbands of different effective masses resulting from mixed light and heavy hole subbands.

Figure 4 shows the energy levels versus magnetic field of a larger InAs nanocrystal of diameter $d=16$ nm. For the

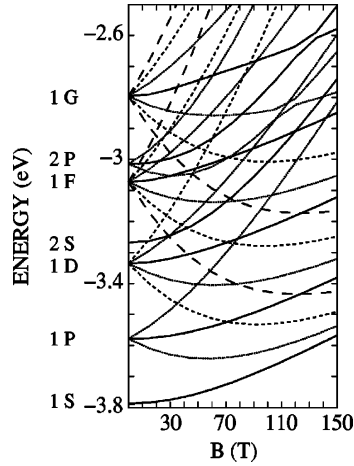


FIG. 6. Several lowest electron energy levels of a InAs(7 nm)/GaAs(1 nm)/InAs(2 nm) quantum dot–quantum barrier vs magnetic field. Degenerate $\tilde{n}L$ levels for $B=0$ T are marked. $M=0$ solid lines, $M=\pm 1$ dotted lines, $M=\pm 2$ short dashed lines, $M=\pm 3$ dashed lines.

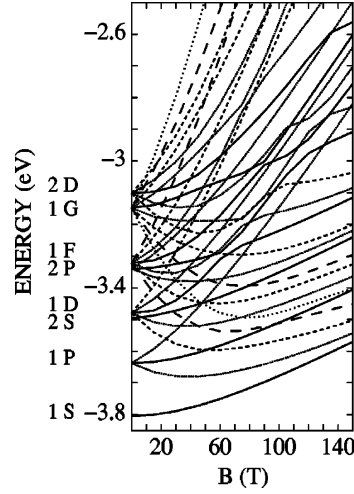


FIG. 7. The same as in Fig. 3, but for InAs(7 nm)/GaAs(1 nm)/InAs(3.5 nm).

states of $F_z = \pm \frac{1}{2}$ the quadratic term in the Hamiltonian now becomes significant even at laboratory fields, while for $F_z = \pm \frac{3}{2}$ the linear term is still dominant, even at fields as strong as 50 T. The states of a given F_z , that for $B=0$ have a different number of nodes since they belong to different spherical symmetries, evolve in a different way versus increasing magnetic field. This causes several anticrossings well seen in Fig. 4. However, no anticrossings of F_z states belonging to the same spherical symmetry Q_F are seen, as is observed for semiconductor quantum rings.¹⁴

B. Quantum dot–quantum barrier

Let us consider a three-layer nanocrystal built of an internal InAs core of radius 7 nm, middle GaAs shell of thickness 1 nm, and external InAs clad. Since the forbidden energy gap of GaAs is wider than the gap of InAs, the middle shell acts for the conduction-band electrons as a 1-eV barrier separating two spherical InAs wells.²⁶ The surrounding medium is modeled by a 4-eV external potential barrier. The system and the corresponding band structure are shown schematically in Fig. 5(b).

The electron energy levels (versus magnetic field) of two nanostructures with an external InAs clad of thickness (a) 2 nm and (b) 3.5 nm are shown in Figs. 6 and 7. Only the states, which for $B=0$ have energies below the GaAs barrier, are shown (except for the 1G states of the smaller nanocrystal that have also been included in Fig. 3). Since the total diameters of these nanocrystals are 20 and 23 nm, respectively, the energy spectrum is similar to the spectrum of the uniform quantum dot studied in the previous section.

For $B=0$ a rearrangement of some energy levels (1D, 2S) and (1F, 2P) with the increasing thickness of the ex-

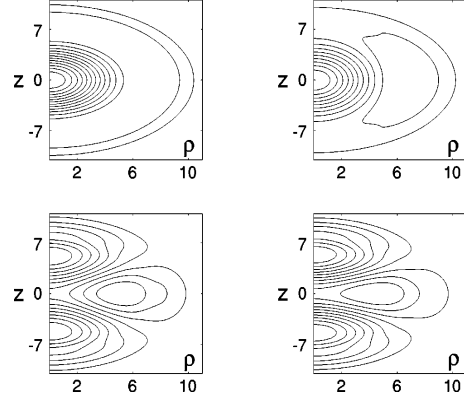


FIG. 8. InAs(7 nm)/GaAs(1 nm)/InAs(2 nm) quantum dot–quantum barrier. Charge-density contours of electron states $2S_0$ (top) and $1D_0$ (bottom) for $B=0$ T (left) and $B=40$ T (right). z and ρ in nm.

ternal shell, reported previously for CdS/ZnS/CdS nanocrystals,⁷ is also observed here. Since the radial part of the $2S$ ($2P$) state has a node, this state is favorable for building a significant charge density in the external clad in comparison to the nodeless $1D$ ($1F$) state. It causes faster decrease of the energy of the $2S$ ($2P$) state when the clad thickness increases.

On the other hand, since $1D_0$ and $1F_0$ states contribute to the lowest Landau level when the field is on, while $2S_0$ and $2P_0$ states contribute to second Landau level, more anti-crossing points are observed for the wider-clad nanocrystal (Fig. 7). This is also illustrated in Figs. 8 and 9, where the contours of the charge densities of the $2S_0$ and $1D_0$ states

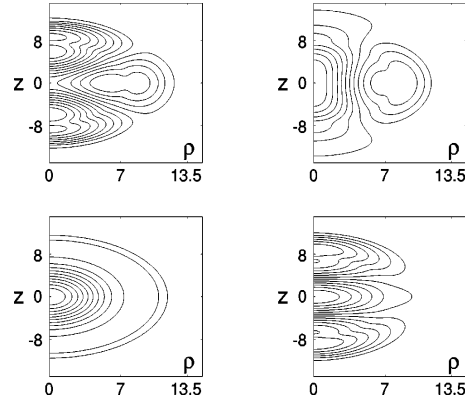


FIG. 9. The same as in Fig. 5, but for 3.5-nm external InAs clad. $B=0$ T (left) before $2S_0$ and $1D_0$ levels anticrossing; $B=40$ T (right) after anticrossing.

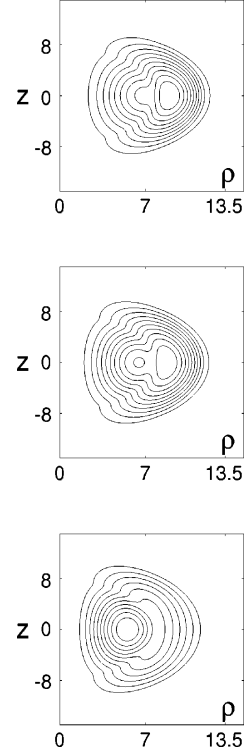


FIG. 10. Charge-density contours of $1F_3$ state of the larger quantum dot–quantum barrier system in a magnetic field $B=0$, $B=50$, and $B=100$ T (from top to bottom). z and ρ in nm. 1-nm wide GaAs barrier begins at $r=7$ nm.

for $B=0$ and $B=40$ T are shown for the cases with a thinner and thicker clad, respectively.

Some of the excited states can have, for $B=0$, the maximum of charge density localized in the external InAs clad. The $1F_3$ state (of the thicker nanocrystal) is one of the examples, in which the charge-density maximum is localized on a ring ($\rho_{ext}, z \approx 0$), where ρ_{ext} is the radius of the external clad. A strong enough magnetic field can push the electron charge density from the external clad to the internal core. This is shown in Fig. 10. For nanocrystals with a larger core this can happen even for laboratory fields. This crossover from confinement in the external shell to confinement in the internal core can be used to modify the transition rates in the magneto-optical absorption spectra or binding strength of quantum dot molecules and quantum dot solids.²¹

C. Quantum dot–quantum well

Let us consider now a three-layer nanocrystal built of a internal barrier acting GaAs core, a middle well acting InAs

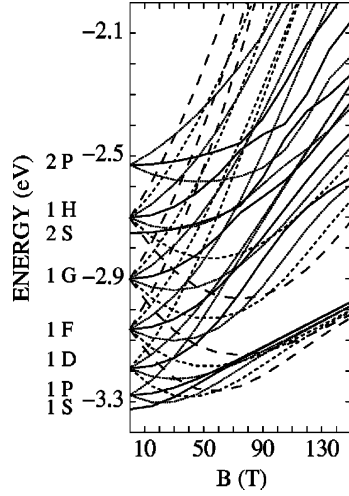


FIG. 11. Several electron energy levels for a GaAs(8 nm)/InAs(2 nm)/GaAs(2 nm) quantum dot-quantum well. Degenerate $\bar{n}L$ levels for $B=0$ are marked. $M=0$ solid lines, $M=\pm 1$ dotted lines, $M=\pm 2$ short dashed lines, $M=\pm 3$ dashed lines.

shell, and an external barrier acting GaAs clad. The radius of the core is 8 nm, the thickness of the InAs and GaAs shells is 2 nm, and the height of the surrounding barrier is 4 eV (from the bottom of the InAs well). The system is schematically shown in Fig. 5(a). The electron energy levels versus magnetic field are shown in Fig. 11.

Although the energy spectrum looks, at first sight, similar to the ones of the uniform and quantum dot-quantum barrier structures, it differs in the change of the ground state symmetry with the increase of the magnetic field. Thus for $B < 20$ T the ground state is $1S_0$, for $20 < B < 40$ T it is a $1P_{-1}$ state, for $40 < B < 60$ T it is $1D_{-2}$, next $1F_{-3}$, etc. This behavior is similar to the one observed in two-dimensional quantum rings.^{12,14} In both cases, the wave function of the first state of each symmetry F_z (or M) has most of the electron charge density localized in the well (or ring). Therefore all such states have similar expectation value of $\langle \rho^2 \rangle$ and thus similar quadratic behavior in a magnetic field. Since at $B=0$ the corresponding energy levels are close, the linear term in the Hamiltonian causes the progressive change of the ground state versus increasing magnetic field.

Another interesting feature of this spectrum is that the first two energy levels of each symmetry approach each other as the magnetic field increases, so that they become almost degenerate at high fields. One can see it for $(1S_0, 1P_0)$, $(1P_{-1}, 1D_{-1})$, $(1D_{-2}, 1F_{-2})$, $(1P_{+1}, 1D_{+1})$ and $(1D_{+1}, 1F_{+1})$ pairs. Moreover, for very high fields, all the

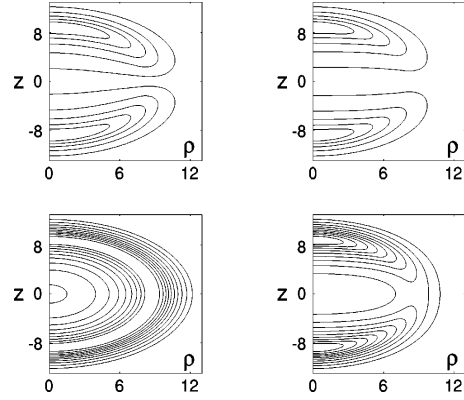


FIG. 12. Quantum dot-quantum well. Charge-density contours of electron state $1P_0$ (top) and $1S_0$ (bottom) for $B=0$ T (left) and $B=100$ T (right). z and ρ in nm.

energy levels contributing to the lowest Landau level group into a single level bound below the GaAs barrier. To explain these effects the contours of charge densities for the pair of states $(1S_0, 1P_0)$ at $B=0$ and $B=100$ T are plotted in Fig. 12.

The $1P_0$ state has, for $B=0$, a symmetry similar to a p_z atomic orbital. The increasing magnetic field tries to *squeeze* the charge into the small Landau orbit, but since it bounces the wide internal GaAs barrier, the charge concentrates finally in two spots, at which the z axis crosses the well acting InAs sphere. The same happens to the $1S_0$ state with the only difference that the wave function of the $1S_0$ state has the same sign in all the space, while the $1P_0$ state has a nodal plane at $z=0$.

In a very strong magnetic field the Landau states are *squeezed* so much that only confinement in the z direction survives from the initial three-dimensional (3D) confinement in the quantum dot. The resulting confining potential becomes almost one-dimensional with two narrow (2-nm wide) wells (1 eV deep) separated by a wide 16-nm barrier and $(1S_0, 1P_0)$ states being the *even* and *odd* solutions of such a double 1D well. Since the 1D well is very narrow, only a single bound state exists below the GaAs barrier edge (see Fig. 11). This transformation of one-electron states from uniform charge distribution to a distribution of one-electron charge on two spatially separated regions may appear interesting for quantum computing applications.

ACKNOWLEDGMENTS

Financial support from MSC Fund II, KBN-8T11B06218, DGEIC-MEC PIB97-0397, and UJI-Bancaixa-PIB97-23 is acknowledged. J.G.D. thanks Generalitat Valenciana and J.C. thanks MEC for the financial support.

- ¹A. Mews, A. Eychmüller, M. Giersig, D. Schoos, and H. Weller, *J. Phys. Chem.* **98**, 934 (1994).
- ²A. P. Alivisatos, *Nature (London)* **271**, 933 (1996).
- ³A. Mews, A. V. Kadavanich, U. Banin, and A. P. Alivisatos, *Phys. Rev. B* **53**, R13 242 (1996).
- ⁴R. B. Little, M. A. El-Sayed, G. W. Bryant, and S. Burke, *J. Chem. Phys.* **114**, 1813 (2001).
- ⁵D. Norris and M. G. Bawendi, *Phys. Rev. B* **53**, 16 338 (1996).
- ⁶J. Lumin. **70**, 1 (1996) (Special Issue on Spectroscopy of Isolated and Assembled Semiconductor Nanocrystals).
- ⁷W. Jaskólski and G. W. Bryant, in *Optical Properties of Semiconductor Nanostructures*, edited by M. L. Sadowski, M. Potemski, and M. Grynberg, NATO Science Series 3, Vol. 81 (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000).
- ⁸G. W. Bryant and W. Jaskólski, *Phys. Status Solidi B* **224**, 751 (2001).
- ⁹L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998).
- ¹⁰T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier, Amsterdam, 1999).
- ¹¹R. C. Ashoori, *Nature (London)* **379**, 413 (1996).
- ¹²A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- ¹³Z. Barticevic, M. Pacheco, and A. Latgé, *Phys. Rev. B* **62**, 6963 (2000).
- ¹⁴J. Planelles, W. Jaskólski, and I. Aliaga, *Phys. Rev. B* **65**, 033306 (2001).
- ¹⁵A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, and A. Lorke, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- ¹⁶M. Bylicki and W. Jaskólski, *Phys. Rev. B* **60**, 15 924 (1999).
- ¹⁷W. Jaskólski, M. Bosek, M. Bylicki, and J. Planelles, *Vacuum* **63**, 185 (2001).
- ¹⁸A. Baldeschi and N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973); G. B. Gregorian, E. M. Kazaryan, Al. L. Efros, and T. V. Yazeva, *Sov. Phys. Solid State* **32**, 1031 (1990); Al. L. Efros and M. Rosen, *Phys. Rev. B* **58**, 7120 (1998).
- ¹⁹P. C. Sercel and K. J. Vahala, *Phys. Rev. B* **42**, 3690 (1990).
- ²⁰For $B \neq 0$, the axial approximation could be used instead of the spherical approximation, but for a more adequate comparison with the results obtained for $B=0$, the spherical approximation is employed in all the cases.
- ²¹W. Jaskólski, G. W. Bryant, J. Planelles, and M. Zieliński, *Int. J. Quantum Chem.* (to be published).
- ²²W. E. Arnoldi, *Q. Appl. Math.* **9**, 17 (1951); Y. Saad, *Numerical Methods for Large Scale Eigenvalue Problems* (Halsted Press, New York, 1992); R. B. Morgan, *Math. Comput.* **65**, 1213 (1996).
- ²³R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, P. A. Vu, and C. Yang, ARPACK: Fortran subroutines for solving large scale eigenvalue problems, Release 2.1; R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang, *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (SIAM, Philadelphia, 1998).
- ²⁴U. Banin, C. J. Lee, A. A. Guzelian, A. V. Kadavanich, A. P. Alivisatos, W. Jaskólski, G. W. Bryant, Al. L. Efros, and M. Rosen, *J. Chem. Phys.* **109**, 2306 (1998).
- ²⁵*Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, edited by O. Madelung, Landolt-Börnstein, New Series, Group III (Springer-Verlag, Berlin, 1982), Vol. 17.
- ²⁶Y. W. Cao and U. Banin, *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 9692 (2000).

Hole energy structure of multishell nanocrystals in a magnetic field

J Planelles¹, J Climente¹, J G Díaz¹ and W Jaskólski²

¹ Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080, Castelló, Spain

² Instytut Fizyki UMK, Grudziądzka 5, 87-100 Toruń, Poland

Received 18 March 2002

Published 15 November 2002

Online at stacks.iop.org/JPhysCM/14/12537

Abstract

The influence of a magnetic field on the hole energy spectra of uniform and multilayer semiconductor nanocrystals is studied. The calculations are performed within the $k \cdot p$ method and envelope function approximation. The valence subband mixing is taken into account by considering a four-band Hamiltonian. It is found that the influence of a magnetic field depends strongly on the nanocrystal size and composition. Several phenomena, reported recently for electrons in multishell nanocrystals in a magnetic field, like crossover from confinement in the external shell to the internal core in quantum dot quantum barrier structures or spatial polar separation of the charge density in quantum dot quantum well systems, are also observed for holes. The calculated optical electron–hole transitions in small uniform spherical nanocrystals reveal that the δ_{LL} selection rule, forbidding at $B = 0$ electron–hole transitions between states of different orbital angular momentum, is also approximately fulfilled, even at strong magnetic fields.

1. Introduction

Zero-dimensional semiconductor nanostructures have been intensively studied for the last two decades [1]. Different techniques for the fabrication of quantum dots allow for far-reaching manipulation of their sizes, shapes and compositions. To a large extent this permits the tailoring of their discrete energy levels and consequently their electronic and optical properties.

Of special interest is the investigation of magnetic field effects in such systems. This is because the weaker quantum confinement and lighter electron effective mass than in atomic physics makes it possible to observe effects that, for natural atoms, would require magnetic fields many orders of magnitude stronger than those accessible in the laboratory [1–5].

The ease of fabrication of quasi-two-dimensional quantum dots (by techniques of deep etching or electrostatic confinement applied to thin quantum wells or doped interfaces) and its close relation to the quantum Hall effect has resulted in magnetic field studies being almost exclusively limited to such systems [1]. Two-dimensional systems offer additional facilities

when the magnetic field is perpendicular to the structure and confinement is modelled by a parabolic potential. It has to be noticed that, since transport and capacitance spectroscopy experiments have been most widely used in the experimental study of the energy structure of single- and many-electron 2D quantum dots, the electron states have mostly been modelled theoretically.

Very little has been done so far in the study of the influence of a magnetic field on three-dimensional quantum dots. Some of them, like semiconductor nanocrystals grown in colloidal solutions by methods of wet chemistry, are particularly interesting. They can be synthesized as multishell nanocrystals, i.e. built of concentric layers (shells) of different semiconductors with the shell thickness down to a single monolayer [6–9]. In such structures, electrons and holes can be localized within very thin spherical-like wells, which greatly enhances the possibilities of tailoring their optical spectra. Recently, an interesting phenomenon of the transformation of electron resonant states of multilayer nanocrystals into bound states under the influence of a magnetic field has been reported [2, 3]. An exhaustive study of the magnetic field effects on the electron states of such nanocrystals has also been carried out very recently [10].

In this paper we study the influence of a magnetic field on the hole energy levels of uniform and multishell nanocrystals. To account for the valence subband mixing all the calculations are performed using the four-band $k \cdot p$ Hamiltonian. For very high magnetic fields the eight-band model should probably be more suitable. However, since the split-off band is separated from the heavy and light hole band by about 400 meV, it is reasonable to analyse the topmost valence discrete energy levels in the presence of a magnetic field by employing the four-band model as we do in the present paper.

Since the hole states are determined by the coupling of the p-type Bloch factors with envelope functions (defined by the nanocrystal shape and external field), the hole energy spectrum is usually denser than the electron one, with the states of high total angular momentum being energetically close to the ground state. We show that, unlike the electron case, the symmetry of the hole ground state of large nanocrystals changes rapidly with increasing magnetic field. We demonstrate that several interesting phenomena, like crossover from confinement in the external shell to the internal core in quantum dot quantum barrier systems or spatial polar separation of the single-particle charge density in quantum dot quantum well (QDQW) structures, found previously for electron states occur also for hole states.

For uniform quantum dots we also present preliminary results of calculations of the electron–hole transition rates. In multishell structures the field dependence of the electron [10] and hole energy levels and thus of optical transitions is less trivial and requires a separate investigation that is beyond the scope of this paper.

2. Theory and computational details

Let us consider the four-band $k \cdot p$ Hamiltonian that couples the heavy hole and light hole subbands [11]. This Hamiltonian, represented in the conventional Luttinger–Kohn basis $|J, J_z\rangle$ [12], is

$$\begin{array}{c|cccc}
 & |3/2, 3/2\rangle & |3/2, 1/2\rangle & |3/2, -1/2\rangle & |3/2, -3/2\rangle \\
 \hline
 |3/2, 3/2\rangle & -(P+Q) & -iL & -M & 0 \\
 |3/2, 1/2\rangle & iL^* & -(P-Q) & 0 & -M \\
 |3/2, -1/2\rangle & -M^* & 0 & -(P-Q) & iL \\
 |3/2, -3/2\rangle & 0 & -M^* & -iL^* & -(P+Q)
 \end{array} \quad (1)$$

When zero-dimensional nanostructures are considered, in which the holes can be totally confined in three dimensions, the envelope function approximation is applied and the elements

of the Hamiltonian become the operators acting on the components, f_i , of the envelope function of $\Psi = \sum u_i f_i$. In the spherical approximation these operators are (in atomic units)

$$\begin{aligned} P &= \frac{\gamma_1}{2} p^2, & Q &= \frac{\gamma}{2} (p_{\perp}^2 - 2p_z^2), & L &= -i\sqrt{3}\gamma p_z p_{-}, \\ M &= \frac{\sqrt{3}\gamma}{2} p_{-}^2, & p_{\pm} &= p_x \pm i p_y, & p_{\perp}^2 &= p_x^2 + p_y^2, \\ p^2 &= p_{\perp}^2 + p_z^2, & p_{\alpha} &= -i\nabla_{\alpha}, \end{aligned} \quad (2)$$

where γ, γ_1 are Luttinger parameters [12], $\alpha = x, y$ or z , and u_i are the Bloch functions.

When there is no magnetic field, this Hamiltonian is usually written in spherical coordinates and results in two coupled differential equations in the radial variable [12]. In such a case the valence band states are labelled by nQ_F , where Q denotes the spectroscopic notation for the lowest value of the envelope angular quantum number L in the wavefunction Ψ ; F is the quantum number of the total angular momentum $F = L + J$, where J is the Bloch angular momentum, $J = 3/2$, and n labels consecutive states of a given Q and F .

When the external magnetic field is applied the spherical symmetry is broken and the Hamiltonian (derived in cylindrical coordinates) commutes only with the operator F_z of the projection of F onto the field axis. The states are labelled by F_z . To identify these states by their spherical notation at $B = 0$ we have performed, for $B = 0$, two sets of calculations in both coordinates. This allows us to label the states, in cylindrical coordinates, as nQ_F, F_z .

For $B \neq 0$ the axial approximation could be used to derive the Hamiltonian in cylindrical coordinates. However, for a more adequate comparison with the results obtained for $B = 0$, the so-called spherical approximation with only two Luttinger parameters is employed in all the cases.

Transforming the Hamiltonian to cylindrical coordinates (ρ, z, ϕ) and integrating over the ϕ angle yields four coupled differential equations (see table 1) for the envelope function components $(i) f_M^i(\rho, z)$ [13]. The diagonal elements of the equations in table 1 include the potential energy $V(\rho, z)$, that depends on the actual geometry, composition and structure of the studied system, and the interaction with an external uniform magnetic field $\mathbf{B} = (0, 0, B)$.

In looking for the bound states of the investigated systems all the envelope function components are required to vanish for large ρ and z . For multishell structures, V is formed by the valence band off-sets. Since the hole effective masses and thus γ, γ_1 parameters are different in different layers, appropriate matching conditions should in general be applied at the corresponding interfaces. In this paper, for simplicity, uniform Luttinger parameters are considered for all the investigated systems.

The equations presented in table 1 have been solved numerically using the finite-difference method on a two-dimensional grid (ρ, z) in cylindrical coordinates. The discretization of the differential equations yields eigenvalue problems of asymmetric huge and sparse matrices that have been solved by the iterative Arnoldi solver [14] implemented in the ARPACK package [15].

Optical transition rates between the conduction and valence-band states are calculated excluding exciton effects. Including Coulomb interaction yields just a parallel rearrangement of the spectrum (see, e.g., [16]), after a far more complex calculation. In cylindrical coordinates the electron $\Psi_{F_z}^e$ and hole $\Psi_{F_z}^h$ wavefunctions can be written as

$$\Psi_{F_z}^e = f_m^e(\rho, z) e^{im\phi} |S, \sigma\rangle, \quad (3)$$

³ Magnetic field enters the diagonal terms of the multiband Hamiltonian as $-\frac{F_z B}{2m^*} - \frac{B^2 \rho^2}{8m^*}$, where m^* is the heavy-hole or light-hole effective mass and F_z is the quantum number of F_z . One could consider a magnetic field present also in off-diagonal elements due to the term $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$, where $\mathbf{A} = (-y/2, x/2, 0)B$ is the vector potential. The preliminary analysis shows, however, that the results will not differ significantly.

Table 1. Two-band $k \cdot p$ Hamiltonian in cylindrical coordinates.

$\frac{(\gamma+\gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - (F_z-1.5)^2 \right] + \frac{(\gamma_1-2\gamma)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - (\gamma_1-2\gamma) \left[\frac{B^2 \rho^2}{8} + \frac{F_z B}{2} \right] + V(\rho, z)$	$\sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z-0.5}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$-\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + F_z(F_z-1)-0.75 \right]$	0
$\sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z-0.5}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$\frac{(\gamma_1-\gamma)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - (F_z-0.5)^2 \right] + \frac{(\gamma_1+2\gamma)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - (\gamma_1+2\gamma) \left[\frac{B^2 \rho^2}{8} + \frac{F_z B}{2} \right] + V(\rho, z)$	0	$-\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(F_z+1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + F_z(F_z+1)-0.75 \right]$
$-\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(F_z-1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + F_z(F_z-1)-0.75 \right]$	0	$\frac{(\gamma_1-\gamma)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - (F_z+0.5)^2 \right] + \frac{(\gamma_1+2\gamma)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - (\gamma_1+2\gamma) \left[\frac{B^2 \rho^2}{8} + \frac{F_z B}{2} \right] + V(\rho, z)$	$-\sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} + \frac{F_z+1.5}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$
0	$-\sqrt{3}\frac{\gamma}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2F_z}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + F_z(F_z+1)-0.75 \right]$	$-\sqrt{3}\gamma \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho \partial z} - \frac{F_z+0.5}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right]$	$\frac{(\gamma+\gamma_1)}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - (F_z+1.5)^2 \right] + \frac{(\gamma_1-2\gamma)}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - (\gamma_1-2\gamma) \left[\frac{B^2 \rho^2}{8} + \frac{F_z B}{2} \right] + V(\rho, z)$

$$\Psi_{F_z}^h = \sum_{M=F_z-3/2}^{F_z+3/2} f_M^h(\rho, z) e^{iM\phi} |3/2, (F_z - M)\rangle, \quad (4)$$

where $|S, \sigma\rangle$ and $|3/2, (F_z - M)\rangle$ are the electron and hole Bloch functions, respectively, $\sigma = \pm 1/2$, and $(m + \sigma) = F_z$. The optical transition matrix element

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_{F_z}^e | \mathbf{p} | \Psi_{F_z}^h \rangle|^2 &= \left| \sum_M \int f_m^e f_M^h \rho \, d\rho \, dz \, \delta_{mM} \langle S, \sigma | \mathbf{p} | 3/2, (F_z - M) \rangle \right|^2 \\ &= S_{eh}^2 |\langle S, \sigma | \mathbf{p} | 3/2, (F_z - m) \rangle|^2 \delta_{mM} \end{aligned} \quad (5)$$

is a product of the electron-hole overlap S_{eh}^2 and the angular part. The δ_{mM} symbol has been kept in equation (5) to make sure that the transition is forbidden when m is different from any M in the sum. The angular factor is calculated in terms of the square of the Kane parameter $P^2 = |\langle S | p_x | X \rangle|^2$, after explicitly writing the Bloch factors in terms of the eight band-edge basis functions $\{|S, 1/2\rangle, |S, -1/2\rangle, |X, 1/2\rangle, \dots, |Z, -1/2\rangle\}$ [17].

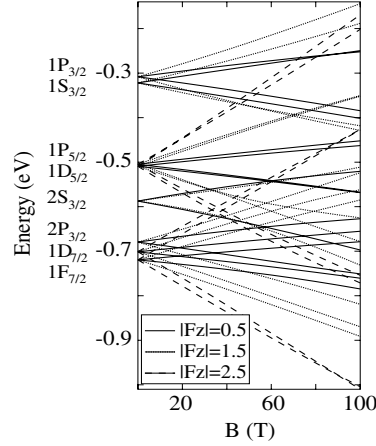


Figure 1. Hole energy levels, nQ_F , for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d = 6$ nm versus magnetic field. Only components $|F_z| = 0.5$ (full line), $|F_z| = 1.5$ (dotted line) and $|F_z| = 2.5$ (broken line) are shown.

3. Results

3.1. Uniform nanocrystal

Although the main aim of this paper is the study of the influence of a magnetic field on the energy structure of multishell nanocrystals, for the sake of comparison we also include some results for uniform nanocrystals [10]. We consider InAs nanocrystals. They can be grown by methods of wet chemistry as clusters of almost spherical shapes and sizes of 2–10 nm [18]. In our formulation they are modelled by a finite spherical rectangular potential well (4 eV). Luttinger parameters, $\gamma_1 = 19.7$ and $\gamma = 8.4$, corresponding to heavy hole and light hole effective masses $m_{hh} = 0.345$ and $m_{lh} = 0.027$, are used [19].

We investigate the influence of a magnetic field on the hole energy spectra of two different InAs nanocrystals of radii 3 and 8 nm. The results are shown in figures 1 and 3(c), respectively. In the absence of a magnetic field the energies of the ground and first excited states are very close: for the smaller nanocrystal the ground state is $1P_{3/2}$, while for the large one it is $1S_{3/2}$. The field dependence of the hole energy levels for the smaller nanocrystal (figure 1) is almost linear in the whole range of the magnetic field investigated. The quadratic term in the Hamiltonian (table 1) becomes significant for the larger nanocrystal (see figure 3(c)).

Since the linear term is proportional to F_z , the higher F_z the lower the relative weight of the quadratic term to the linear one. Thus, for the states of $F_z = \pm\frac{1}{2}$ the quadratic term becomes significant even at laboratory fields, while for the states of $|F_z| = \frac{5}{2}$, the linear term is still dominant even at fields as strong as 50 T. It is the ratio $t = \rho_0/r_{max}$ between the radius of the maximum charge density in the lowest Landau orbit, ρ_0 , and the radius of the maximum charge density in a given state, r_{max} , that decides whether only the linear Zeeman term or also the quadratic term in the Hamiltonian (table 1) is observed. If $t > 1$ then only the linear term is significant.

For the hole states the Landau levels, and thus the corresponding Landau orbits, are not well defined, since the heavy-hole and light-hole subbands are mixed even at strong magnetic fields. One can, however, estimate ρ_0 as $[(2|F_z| + 1)\frac{\hbar}{eB}]^{1/2}$ [2]. Since for the states with

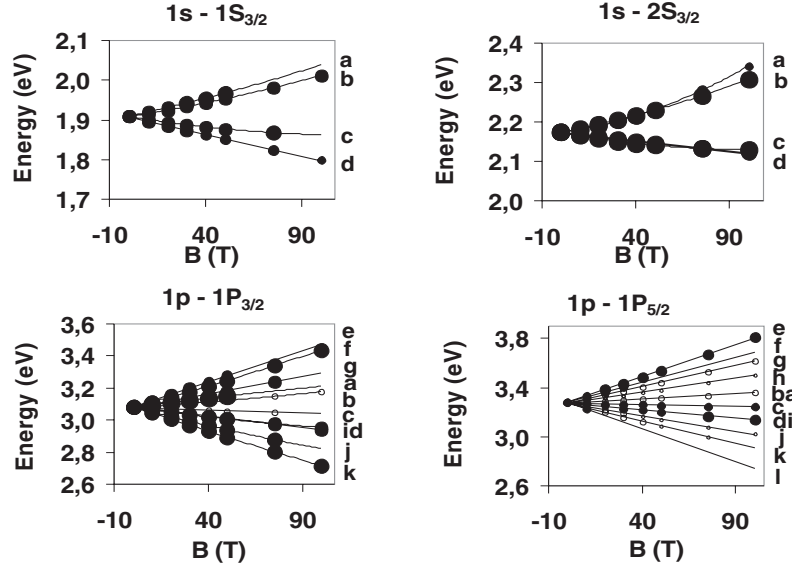


Figure 2. Electron-hole, $m \rightarrow F_z$, optical transition rates for a uniform InAs nanocrystal of diameter $d = 6$ nm. $m = 0$: $F_z = 1.5$ (a), $F_z = 0.5$ (b), $F_z = -0.5$ (c), $F_z = -1.5$ (d); $m = 1$: $F_z = 2.5$ (e), $F_z = 1.5$ (f), $F_z = 0.5$ (g), $F_z = -0.5$ (h); $m = -1$: $F_z = 0.5$ (i), $F_z = -0.5$ (j), $F_z = -1.5$ (k), $F_z = -2.5$ (l). For the overlapping spots the order corresponds to the transition strengths. The spot size is proportional to the calculated transition moment.

$|F_z| = 1/2$, $\rho_0 > 3$ nm (even at $B = 100$ T), only the linear term is significant for these states in the case of the smaller nanocrystal. All the same, $\rho_0 = 7$ nm at $B = 25$ T and this explains why the quadratic term becomes significant for the larger quantum dot.

Several anticrossings that are seen in figure 3(c) come from a different evolution (in the magnetic field) of the states of a given F_z , having for $B = 0$ a different number of nodes. A closer inspection of figures 1 and 3(c) shows that the splitting of the energy levels belonging to a given pair $\pm F_z$ can be very different for the pairs of states of the same $|F_z|$. It can also happen that the splitting of pairs belonging to different F_z is very similar. $E(2S_{3/2}, +\frac{1}{2}) - E(2S_{3/2}, -\frac{1}{2})$ and $E(2S_{3/2}, +\frac{3}{2}) - E(2S_{3/2}, -\frac{3}{2})$ is one of the examples. This behaviour is a consequence of a strong heavy-hole and light-hole subband mixing.

The optical transition rates for transitions between the lowest conduction band and the highest valence band states for the case of the smaller nanocrystal are shown in figure 2. At $B = 0$, the δ_{mM} selection rule (see equation (5)) must be supplemented by δ_{lL} [20], where l , L are the orbital angular momentum quantum numbers of the electron wavefunctions and hole wavefunction components, respectively. In the presence of a magnetic field, the spherical symmetry is broken: l and L are no longer good quantum numbers. However, the calculated matrix elements of transitions that are forbidden at $B = 0$ (like $1s-1P_{3/2}$, $1s-1P_{5/2}$, $1p-1S_{3/2}$, etc) are very small even at magnetic fields as strong as 50 T. These transitions are not shown in figure 2. When the magnetic field is about 60 T some of the strong transitions become negligible. It happens, for example, to the component $m = 0$ to $F_z = 1.5$ of the transition $1s \rightarrow 1S_{3/2}$ (see ‘a’ at the top left part of figure 2). Simultaneously the same component of the transition $1s \rightarrow 1P_{3/2}$, negligible below $B = 60$ T, becomes very strong. This is due to

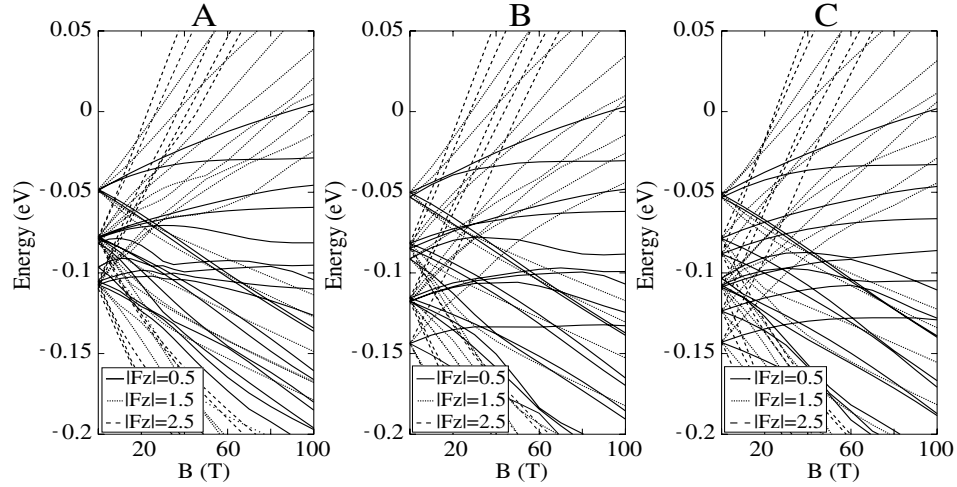


Figure 3. Hole energy levels versus magnetic field of (A) a spherical multilayer InAs(7 nm)/InP(1 nm)/InAs(3.5 nm) QDQB, (B) the same as A but with a 2 nm external InAs cladding and (C) a uniform InAs nanocrystal of diameter $d = 16$ nm.

the anticrossing of the hole states $1P_{3/2}(F_z = 1.5)$ and $1S_{3/2}(F_z = 1.5)$ that happens about this field (see figure 1), where the states exchange their wavefunctions.

3.2. Quantum dot quantum barrier (QDQB)

In this section we consider three-layer nanocrystals built of an internal InAs core of radius 7 nm, a middle InP shell of thickness 1 nm and an external InAs cladding. Two different nanocrystals having an external InAs cladding of thickness 2 and 3.5 nm have been studied. Since the forbidden energy gap of InAs is narrower than the gap of InP, the middle shell acts as a 0.42 eV barrier separating two spherical InAs wells [18]. The surrounding medium is modelled by a 4 eV external potential barrier. Since we are mainly interested in the states having energies below the InP barrier and thus small charge density in the barrier region, the Luttinger parameters of InAs are used in the whole nanocrystal.

The energy levels closest to the top of the InAs valence band edge ($F_z = \pm 0.5, \pm 1.5, \pm 2.5$) of the two studied nanocrystals versus magnetic field are presented in figure 3. The energy levels of the homogeneous InAs QD of radius 8 nm are shown for comparison. For $B = 0$, a rearrangement of some energy levels with increasing thickness of the external cladding, reported previously for electrons [10], is also observed here. The states having radial nodes are favourable for building a significant charge density in the external cladding in comparison to the nodeless states. This is illustrated in figure 4, where the contours of the charge densities (in the absence of magnetic field) of the $2S_{3/2}$, $2P_{3/2}$ and $3S_{3/2}$ states corresponding to the nanocrystal with thicker external cladding are shown. The $2S_{3/2}$ state builds a large part of the density in the internal core, while $2P_{3/2}$ and $3S_{3/2}$ states have most of their density localized in the external cladding.

Figure 3 shows that, except for $F_z = \pm 0.5$, the field dependence of the energy levels of the studied nanocrystals is nearly linear. In both cases many anticrossings can be seen.

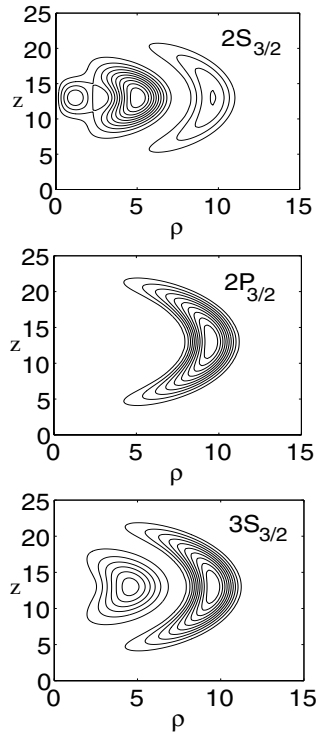


Figure 4. Charge density contours of $2S_{3/2}$, $2P_{3/2}$ and $3S_{3/2}$ hole states of a spherical multishell InAs(7 nm)/InP(1 nm)/InAs(3.5 nm) QDQB.

The magnetic confinement is more pronounced for the $F_z = \pm 0.5$ states, since the radius of the maximum charge density in the corresponding lowest Landau level is the smallest. The magnetic confinement is particularly strong for the nodal states of the nanocrystal having the thicker external clad, like the $2P_{3/2}$ and $3S_{3/2}$ states, that can build most of their charge density in the external cladding (see figure 4). These states show the most pronounced quadratic field dependence and are responsible for many anticrossings that happen even at low magnetic field (figure 5). A crossover from confinement in the external shell to the internal core produced by the magnetic field, reported previously for electron states [10], is also observed for the hole states.

Since the field dependence of the energy levels with $|F_z| \geq 3/2$ is almost linear, it happens that the excited states with very high negative z components of the angular momentum turn into the ground state when the magnetic field increases. We have calculated this dependence for F_z up to $-41/2$. In figure 6 several energy levels with high F_z versus magnetic field, for the nanocrystal with the thicker external cladding, are shown. The $F_z = -3/2$ component of $P_{3/2}$ is the ground state up to the magnetic field of about 13 T. Then, the state of $F_z = -19/2$ becomes the ground state; next $F_z = -27/2$, and later, at about 20 T, $F_z = -33/2$ (which is already unbound at $B = 0$ T). For the quantum barrier nanocrystal with the thinner external cladding and for the homogeneous InAs nanocrystal this behaviour is similar, although it happens at higher magnetic fields.

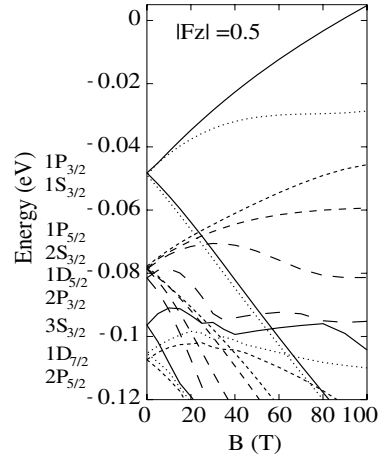


Figure 5. Hole energy levels versus magnetic field, $|F_z| = 0.5$, components of a spherical multishell InAs(7 nm)/InP(1 nm)/InAs(3.5 nm) QDQB nanocrystal.

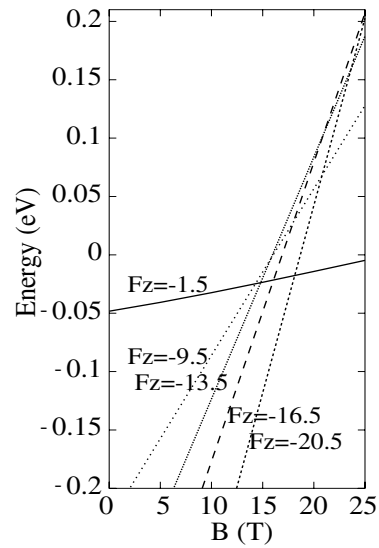


Figure 6. Ground state energy and symmetry changes versus magnetic field for a multishell InAs(7 nm)/InP(1 nm)/InAs(3.5 nm) QDQB nanocrystal.

3.3. Quantum dot quantum well

Let us consider now a three-layer nanocrystal built of an internal barrier-acting InP core, a middle well-acting InAs shell and an external barrier-acting InP cladding. The radius of the core is 8 nm, the thickness of the InAs and InP shells is 2 nm, the conduction band offset is 0.42 eV [18] and the height of the surrounding barrier is assumed as 4 eV (from the bottom of

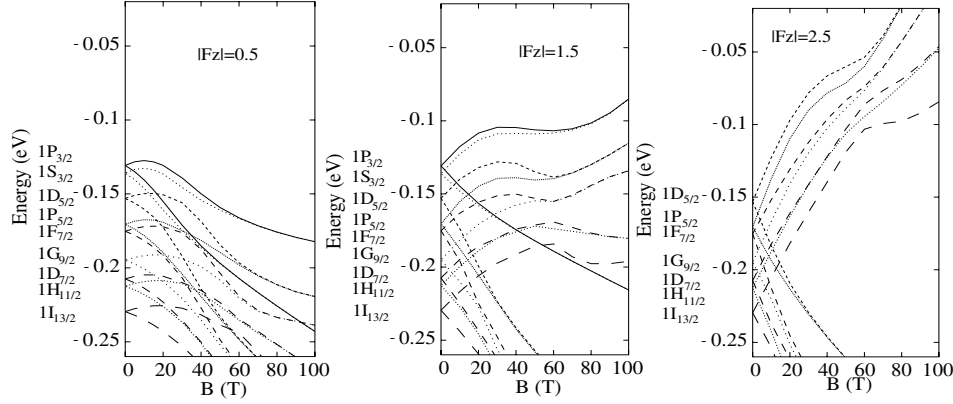


Figure 7. Hole energy levels versus magnetic field of a spherical multilayer InP(8 nm)/InAs(2 nm)/InP(2 nm) QDQW nanocrystal. (A) $|F_z| = 0.5$, (B) $|F_z| = 1.5$ and (C) $|F_z| = 2.5$ components.

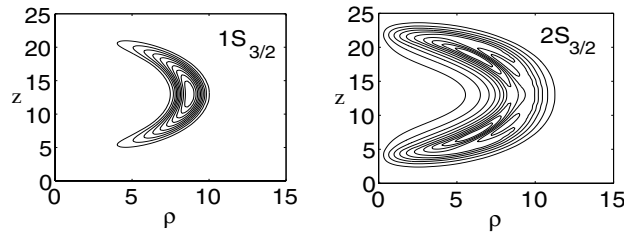


Figure 8. Charge density contours of the $1S_{3/2}$ and $2S_{3/2}$ hole states of a QDQW nanocrystal.

the InAs well). Since we are investigating the bound states having charge densities localized mainly in the middle shell, the valence band Luttinger parameters of InAs are used in the whole structure ($\gamma = 8.4$ and $\gamma_1 = 19.7$).

In figure 7 the lowest energy levels for $F_z = \pm 0.5, \pm 1.5$ and ± 2.5 versus the magnetic field are presented. In contrast to what has been observed for the QDQB systems, the energies of all the states of the QDQW structure show a quadratic field dependence, even at a relatively weak magnetic field. This behaviour is similar to that observed in quantum rings [4, 13]. In both cases the wavefunction of the first state of each symmetry has most of its density localized in the well or ring (see figure 8). The radius of the maximum of its radial density is, even at low fields, larger than the radius of the maximum charge density in the lowest Landau level. This causes a strong enhancement of the quadratic dependence of the energy levels on the magnetic field.

Comparing the hole energy spectra of the QDQW (figure 7) and QDQB (figure 5) systems, one can see the absence of the second state of each symmetry in the case of QDQW within the energy plot range. This effect can be easily explained: in the case of the QDQB, the second state of each symmetry has a nodal surface in the barrier region. As a consequence its charge density can localize freely in an internal and/or external InAs well, not leading to any extra increase of the energy. In the case of the QDQW, the nodal surface is located in a rather thin

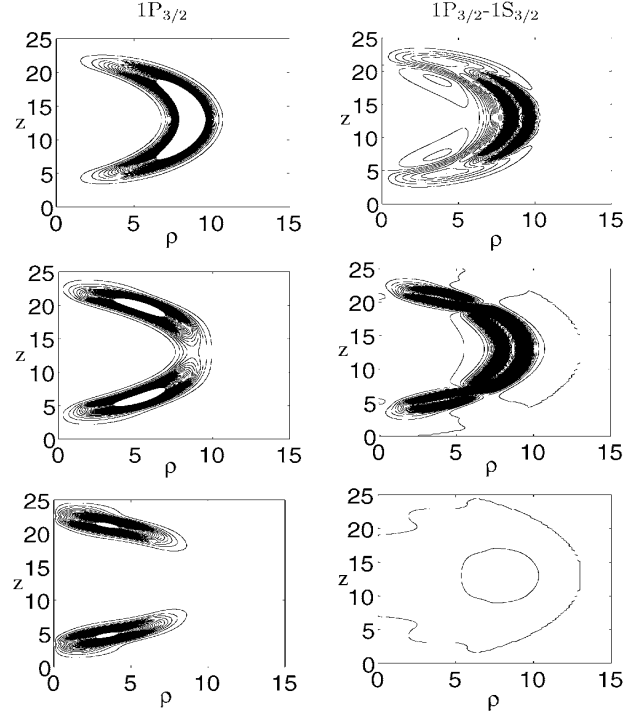


Figure 9. Charge density contours of the $1P_{3/2}$ hole state and density differences ($1P_{3/2} - 1S_{3/2}$) for a QDQW nanocrystal. Magnetic fields: $B = 0, 50$ and 100 T (from top to bottom).

InAs well, so that the charge density has to localize outside of the well, leading to an increase in the energy of this state (down from the InAs valence band edge). The lowest $n = 2$ state is $2D_{7/2}$ with the energy -0.307 eV.

Another interesting feature of this energy spectrum is that, as for electrons [10], the two consecutive states of the same F_z approach each other as the magnetic field increases. Thus, at high fields the spectrum consists of a series of two-fold quasi-degenerate energy levels. In figure 7 one can see how the pairs $(1P_{3/2}, 1/2, 1S_{3/2}, 1/2)$, $(1P_{3/2}, -1/2, 1S_{3/2}, -1/2)$, $(1P_{3/2}, 3/2, 1S_{3/2}, 3/2)$, $(1P_{3/2}, -3/2, 1S_{3/2}, -3/2)$, $(1D_{5/2}, 5/2, 1P_{5/2}, 5/2)$, $(1D_{5/2}, -5/2, 1P_{5/2}, -5/2)$, $(1D_{5/2}, 3/2, 1P_{5/2}, 3/2)$, $(1D_{5/2}, -3/2, 1P_{5/2}, -3/2)$, $(1D_{5/2}, 1/2, 1P_{5/2}, 1/2)$, $(1D_{5/2}, -1/2, 1P_{5/2}, -1/2)$, etc become quasi-degenerate at a high magnetic field. To understand these effects, the contours of the charge densities for the state $1P_{3/2}$, and the density difference of the $1P_{3/2}$ and $1S_{3/2}$ states, at $B = 0, 50$ and 100 T are plotted in figure 9. When the magnetic field increases, the difference in the charge densities of these two states drops down to zero. The increasing magnetic field tries to *squeeze* the charge into the small Landau orbit, but since it bounces the wide internal InP barrier, the charge concentrates finally in the two polar regions of the InAs well (see figure 9). In an extremely strong field, in which the Landau orbit is much smaller than the radius of the internal well, one can consider these pairs of states as *even* and *odd* solutions for a kind of almost 1D double well created by a cross section of the QDQW potential along the field axis. As an indirect consequence of this

singular behaviour of the energy levels, the number of anticrossings that occur in QDQW is much lower than in the QDQB or homogeneous nanocrystals.

Finally we point out that, similar to the QDQBs and homogeneous nanocrystals, the energy levels with very high $|F_z|$ values undergo a strong $\pm F_z$ splitting caused by the linear magnetic term in the Hamiltonian. This leads to sequential changes of the ground state symmetry as the magnetic field increases. However, these changes do not occur for consecutive values of F_z (unit by unit), as happens for the electron states in the QDQW [10] or for electron and hole states in quantum rings [13].

3.4. Concluding remarks

The influence of a magnetic field on the hole energy spectra of uniform and multishell nanocrystals has been studied. The results of calculations performed for quantum dot quantum barrier and QDQW structures reveal fundamental differences between barrier-like and well-like nanocrystals. Several interesting phenomena, like crossover from confinement in the external shell to the internal core (in QDQB systems) or spatial polar separation of single-particle charge density (in QDQW structures), are reported. Calculated optical transitions for small uniform spherical nanocrystals indicate that the selection rule δ_{IL} , which forbids electron–hole transitions between different angular momenta at $B = 0$, is also even approximately true in the presence of a strong magnetic field.

Acknowledgments

Financial support from DGESIC-P1B97-0397, UJI-P1B97-23, MSC Fund II and KBN-8T11B06218 is gratefully acknowledged. MCT-FPU (JC) and Generalitat Valenciana FPI grants (JD) are also acknowledged.

References

- [1] For review see, e.g.,
Jacak L, Hawrylak P and Wójs A 1998 *Quantum Dots* (Berlin: Springer)
Chakraborty T 1999 *Quantum Dots* (Amsterdam: Elsevier)
- [2] Bylicki M and Jaskólski W 1999 *Phys. Rev. B* **60** 15924
- [3] Jaskólski W, Bosek M, Bylicki M and Planelles J 2001 *Vacuum* **63** 185
- [4] Lorke A, Luyken R J, Govorov A O, Kotthaus J P, Garcia J M and Petroff P M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2223
- [5] Lieb E H, Solovej J P and Yngvason J 1995 *Phys. Rev. B* **51** 10646
- [6] Mews A, Eychmüller A, Giersig M, Schoos D and Weller H 1994 *J. Phys. Chem.* **98** 934
- [7] Mews A, Kadavanich A V, Banin U and Alivisatos A P 1996 *Phys. Rev. B* **53** R13242
- [8] Little R B, El-Sayed M A, Bryant G W and Burke S 2001 *J. Chem. Phys.* **114** 1813
- [9] Woggon U 1997 *Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots* (Berlin: Springer)
- [10] Planelles J, Diaz J, Climente J and Jaskólski W 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245302
- [11] Baldereschi A and Lipari N O 1973 *Phys. Rev. B* **42** 2697
Gregorian G B, Kazaryan E M, Efros A I L and Yazeva T V 1990 *Sov. Phys.–Solid State* **32** 1031
- [12] Sercel P C and Vahala K J 1990 *Phys. Rev. B* **42** 3690
- [13] Planelles J, Jaskólski W and Aliaga I 2001 *Phys. Rev. B* **65** 033306
- [14] Arnoldi W E 1951 *Quart. J. Appl. Math.* **9** 17
Saad Y 1992 *Numerical Methods for Large Scale Eigenvalue Problems* (New York: Halsted)
Morgan R B 1996 *Math. Comput.* **65** 1213
- [15] Lehoucq R B, Sorensen D C, Vu P A and Yang C *ARPACK: Fortran Subroutines for Solving Large Scale Eigenvalue Problems, Release 2.1* (Philadelphia, PA: SIAM)
Lehoucq R B, Sorensen D C and Yang C 1998 *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (Philadelphia, PA: SIAM)

-
- [16] Raymond S, Fafard S, Poole P J, Wójs A, Hawrylak P, Charbonneau S, Leonard D, Leon R, Petroff P M and Merz J L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11548
Raymond S, Hawrylak P, Gould P, Fafard S, Sachradja A, Potemski M, Wójs A, Charbonneau S, Leonard D, Petroff P M and Merz J L 1997 *Solid. State Commun.* **101** 883
- [17] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Ulis: Les Éditions de Physique)
- [18] Banin U, Lee C J, Guzelian A A, Kadavanich A V, Alivisatos A P, Jaskólski W, Bryant G W, Efros Al L and Rosen M 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2306
- [19] Madelung O (ed) *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology (Landolt-Börnstein New Series Group III)* (Berlin: Springer)
- [20] Xia J B 1989 *Phys. Rev. B* **40** 8500

Magneto-optical transitions in multilayer semiconductor nanocrystals

J Climente¹, J Planelles¹, W Jaskólski² and J I Aliaga³

¹ Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

² Instytut Fizyki UMK, Grudziądzka 5, 87-100 Toruń, Poland

³ Departament d'Enginyeria i Ciència dels Computadors, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

E-mail: planelle@exp.uji.es

Received 6 February 2003, in final form 31 March 2003

Published 19 May 2003

Online at stacks.iop.org/JPhysCM/15/3593

Abstract

Absorption spectra of chemically synthesized uniform and multilayer semiconductor nanocrystals in a magnetic field are investigated theoretically. The nanocrystals are modelled by spherical barrier/well potentials. The electron states are calculated within the effective mass model. A four-band $k \cdot p$ Hamiltonian, accounting for the valence subband mixing, is used to obtain the hole states. The magneto-optical transition spectrum depends strongly on the size and composition of the nanocrystals. In the case of small uniform quantum dots, only the linear Zeeman splitting of the electron and hole energy levels is observed even for very strong magnetic fields. In larger nanocrystals, the quadratic magnetic interaction turns out to be important and the transition spectrum becomes complicated. The most complicated influence of the magnetic field is found in quantum dot–quantum well systems in which the lowest electron and hole states are localized in a thin spherical layer. It is shown that transitions that are optically active when no magnetic field is applied remain strong even in very strong fields.

1. Introduction

The investigation of magnetic field effects in semiconductor quantum dots is of universal interest because the weaker quantum confinement and lighter electron effective mass than in atomic physics make it possible to observe effects that for natural atoms would require magnetic fields many orders of magnitude stronger than those accessible in the laboratory [1–6]. Such investigations are also of practical importance: magnetic fields can be used to tune quantum dot lasers and other optical nanodevices [7–10]. The application of external magnetic field to quantum dots, considered as qubits for quantum information processing [11], is thought of as a way to perform one-gate operations (spin rotations) and also to manipulate the tunnel barrier between coupled dots to perform multigate operations [12, 13].

Theoretical studies of magnetic field effects and magneto-optical transitions in quantum dots have dealt so far almost exclusively with two-dimensional disc-like or ring-like systems. In the majority of works, parabolic confining potentials and one-band models for both electrons and holes have been employed [1, 2]. The reason is twofold: both self-organized dots and rings proposed as quantum dot lasers and electrically gated dots proposed as qubits for quantum computing have rather planar geometry. On the other hand, two-dimensional models with parabolic potentials are particularly easy as regards numerical calculations.

Chemically synthesized nanocrystals have several advantages over other kinds of quantum dot. They are the smallest dots fabricated with the highest uniformity of sizes achieved in a given sample (only very recently has a size distribution as low as 2% for self-assembled PbSe quantum dots on PbTe quasisubstrates been reported [14]). They often have spherical shapes and are most similar to atoms. They can be synthesized as multilayer nanocrystals, i.e. built of concentric layers (shells) of different semiconducting materials with the shell thicknesses down to a single monolayer [9, 15, 16]. Electrons and holes can be localized in such structures within very thin spherical-like wells, which enhances the possibilities of tailoring their optical spectra. Two-dimensional and three-dimensional arrays of such nanocrystals reveal the highest density of nanoparticles and the strongest interactions between the neighbouring quantum dots [17, 18]. Such quantum dots are also considered as possible building blocks for future optoelectronic nanodevices and quantum computers.

In our previous works an extensive study of the magnetic field effects on the electron and hole energy levels of uniform and multilayer nanocrystals has been performed using a four-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model that accounts for the valence subband mixing [19, 20]. To our knowledge, so far no detailed studies of e–h magneto-optical transition rates using this model have been made. In this paper we use the above-mentioned model to calculate e–h transitions for homogeneous and multilayer quantum dot–quantum barrier (QDQB) and quantum dot–quantum well (QDQW) nanocrystals, for a wide range of applied magnetic field.

2. Theory

In our model the conduction band states (electrons) are described by means of the one-band effective mass equation. For spherical nanostructures the electron wavefunction can be explicitly written as $\Psi_e = f_n^{lm}(r)|l, m\rangle|S\sigma\rangle$, where $f_n^{lm}(r)$ is the radial and $|l, m\rangle$ the angular part of the envelope function and $|S\sigma\rangle = |S\rangle|\sigma\rangle$ is the Bloch function, with $\sigma = \alpha$ or β . When an external magnetic field $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ is applied, the spherical symmetry is lowered to axial symmetry and the electron wavefunction, written in cylindrical coordinates, is

$$\Psi_{F_z}^e = f_m^e(\rho, z)e^{im\phi}|S\sigma\rangle. \quad (1)$$

The proper treatment of the valence band states (holes) requires taking into account the valence subband mixing. To this end we use the four-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian, that couples the heavy-hole (HH) and light-hole (LH) subbands, and employ the envelope function approximation [21–24]. The use of the heavy-hole–light-hole (HH–LH) coupling opens new channels for dipole transitions in comparison to the single-band approximation. In the spherical case (no magnetic field present) the valence band states are eigenstates of the total angular momentum $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{J}$, where \mathbf{J} is the Bloch angular momentum (the Bloch angular momentum quantum number for holes is $J = 3/2$) and \mathbf{L} is the envelope angular momentum [25]. In axial symmetry, the Hamiltonian commutes only with the operator F_z of the projection of the total angular momentum \mathbf{F} onto the field axis and the states are labelled only by F_z . To identify these states by their spherical notation at $B = 0$ we label them as (nQ_F, F_z) , where Q denotes the spectroscopic notation for the lowest value of the envelope angular momentum L for a

given F [26]. The four-component hole function is [24]

$$\Psi_{F_z}^h = \sum_{M=F_z-3/2}^{F_z+3/2} f_M^h(\rho, z) e^{iM\phi} |3/2, J_z\rangle \delta_{J_z, (F_z-M)}, \quad (2)$$

where $|3/2, J_z\rangle$ are the Bloch functions for holes. The Hamiltonian eigenvalue problem reduces to the solution of coupled partial differential equations for the envelope function components $f_M^h(\rho, z)$ (or a single-differential equation for f_m^e). Finite-difference methods allow us to numerically solve these equations by transforming them into eigenvalue equations of huge, sparse, and asymmetric matrices. These matrices are diagonalized by the iterative Arnoldi solver [27] implemented in the ARPACK package [28].

Rates of optical transitions between the conduction and valence band states are calculated, excluding exciton effects⁴. The optical transition matrix element,

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_{F_z}^e | \mathbf{p} | \Psi_{F_z}^h \rangle|^2 &= \left| \sum_M \int f_m^e f_M^h \rho \, d\rho \, dz \, \delta_{mM} \langle S\sigma | \mathbf{p} | 3/2, (F_z - M) \rangle \right|^2 \\ &= S_{eh}^2 |\langle S\sigma | \mathbf{p} | 3/2, (F_z - M) \rangle|^2 \delta_{mM}, \end{aligned} \quad (3)$$

is a product of the electron-hole overlap, S_{eh}^2 , and the angular factor. The angular factor is calculated in terms of the square of the Kane parameter $P^2 = |\langle S | p_x | X \rangle|^2$ after explicitly writing the Bloch factors in terms of the eight band-edge basis functions $\{|S, 1/2\rangle, |S, -1/2\rangle, |X, 1/2\rangle, \dots, |Z, -1/2\rangle\}$ [31].

Note that the symmetry selection δ_{mM} -rule selects, if any, only one of the four components of the hole function. Thus, for instance the transition between

$$\Psi^e = f_m^e |m = 1\rangle |S, \alpha\rangle \quad (4)$$

and

$$\Psi_{F_z=3/2}^h = \sum_{M=F_z-3/2}^{F_z+3/2} f_M^h(\rho, z) |M\rangle |3/2, (F_z - M)\rangle, \quad (5)$$

in z -polarized light, leaves only one term,

$$S_{eh}^2 |\langle S\alpha | z | 3/2, 1/2 \rangle|^2 = S_{eh}^2 \frac{2}{3} P^2, \quad (6)$$

of equation (3).

If we consider unpolarized light (i.e., we add all three (x -, y -, and z -) components of \mathbf{p}) and consider transition to both $|S\alpha\rangle$ and $|S\beta\rangle$, then the transition rate is just the overlap integral times the Kane parameter ($S_{eh}^2 P^2$).

We perform the calculations for nanocrystals as large as 24 nm in diameter. The hole energy levels are closely spaced in such dots and a large number of hole states have to be taken into account to reliably model even the low-energy part of the magneto-optical transitions. In the case of the QDQB system, the total number of transitions that we calculate is 640 (128×5 field values). The hole wavefunctions, equation (2), have four components, each one being obtained on a two-dimensional (200×399) grid in a $\rho \times z$ array, thus being defined on 314424 grid points. This requires parallel computation to get the solutions in a reasonable time. This is why we limit our calculations to the four-band approach. We have checked nonparabolicity effects on the conduction band in the case of small and large uniform quantum dots. The results obtained show a shift of the electron energy levels towards lower values and

⁴ Although the e-h Coulomb interaction can yield some rearrangement of the energy levels, the main effect is a parallel shift of the entire spectrum toward lower energies [29]. In the case of the ground transition, this excitonic shift can be estimated using the Brus formula [30], that for the largest QD investigated yields ≈ 20 meV.

a moderate reduction of the splitting of the degenerate states produced by the magnetic field. However, these effects do not lead to essentially different results and conclusions and we have not considered nonparabolicity effects in the calculations.

3. Uniform nanocrystal

3.1. Small nanocrystals

In this section we study the evolution, versus magnetic field, of the low-energy electron–hole transition spectra for a small uniform (3 nm radius) InAs quantum dot. Such nanocrystals are routinely synthesized by wet chemistry methods and have almost spherical shapes with sizes in the range 2–10 nm [32]. In our study the surrounding medium is modelled by a 4 eV external potential barrier for both electrons and holes. The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ parameters that we use are: effective electron mass $m^* = 0.024$; Luttinger parameters $\gamma_1 = 19.7$ and $\gamma = 8.4$ [34]. Although the magnetic field breaks the spherical symmetry, we use only two Luttinger parameters (spherical approximation) in order to make a proper comparison with the results obtained at zero magnetic field. The magnetic fields considered here range from $B = 0$ to 40 T in 10 T steps. Since the density of the hole energy levels is higher than the density of electron levels, we calculate transitions only between the 1s electron ground state and the five low-lying hole states, namely $1P_{3/2}$, $1S_{3/2}$, $1P_{5/2}$, $1D_{5/2}$, $2S_{3/2}$. This represents 24 doubly degenerate transitions to the electron states $1s|S\alpha\rangle$ and $1s|S\beta\rangle$.

When $B = 0$, the axial symmetry selection δ_{mM} -rule is supplemented by the spherical symmetry selection δ_{lL} -rule. Then, only the $1s \leftarrow 1S_{3/2}$ and $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ transitions are allowed in the energy region studied (in spherical symmetry the hole wavefunctions have two components with angular momenta L and $L + 2$).

When the magnetic field is on, the degenerate F_z -components of the $nS_{3/2}$ hole state split and the two transition bands ($n = 1, 2$), allowed at $B = 0$, also split into four components ($3/2, 1/2, -1/2, -3/2$). Figure 1 shows the calculated e–h transitions versus magnetic field. For $B = 0$, only 8 transitions (out of the total number of 24 transitions calculated) are nonzero, yielding two sets of fourfold-degenerate $1s \leftarrow 1S_{3/2}$ and $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ transitions. Since the nanocrystal studied is very small, the quantum confinement is strong, the energy levels are well separated, and one can easily follow the evolution of the spectrum with the magnetic field in figure 1. It is worthwhile emphasizing that transitions forbidden at $B = 0$ by the symmetry selection δ_{lL} -rule remain basically forbidden also for $B \neq 0$. For B as strong as 30 T, two additional very weak transitions (ten times weaker than the $1s \leftarrow 1(2)S_{3/2}$ ones) are seen at energies 2146 and 2048 meV. They correspond to $1s \leftarrow 1D_{5/2}$ ($F_z = \pm 1.5$). At $B \sim 30$ T the $1D_{5/2}$ ($F = 1.5$) state anticrosses with $1P_{5/2}$ ($F = 1.5$) and for $B = 40$ T a slightly stronger $1s \leftarrow 1P_{5/2}$ ($F_z = 1.5$) transition is seen in between the $\pm F_z$ -components of the $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ transition.

Note that when $B \neq 0$, just 20 out of the 24 calculated transitions corresponding to $1P_{3/2}$, $1S_{3/2}$, $1P_{5/2}$, $1D_{5/2}$, $2S_{3/2}$ hole states are allowed by the symmetry selection δ_{mM} -rule, but even at $B = 40$ T, only 8 of them (those fulfilling the δ_{lL} -rule) are strong. This is because in small nanocrystals the radius of the maximum charge density is much smaller than the radius of the lowest Landau orbit, $[2|F_z + 1|\frac{\hbar}{eB}]^{1/2}$, for the fields considered. Thus, only the linear Zeeman, and not the quadratic term, is important (see figure 1) and the quantum dot states are negligibly influenced by the field.

3.2. Large nanocrystals

Let us consider now a larger homogeneous InAs nanocrystal of radius 8 nm. The weaker confinement yields a higher density of electron and hole energy levels, which now start to cross

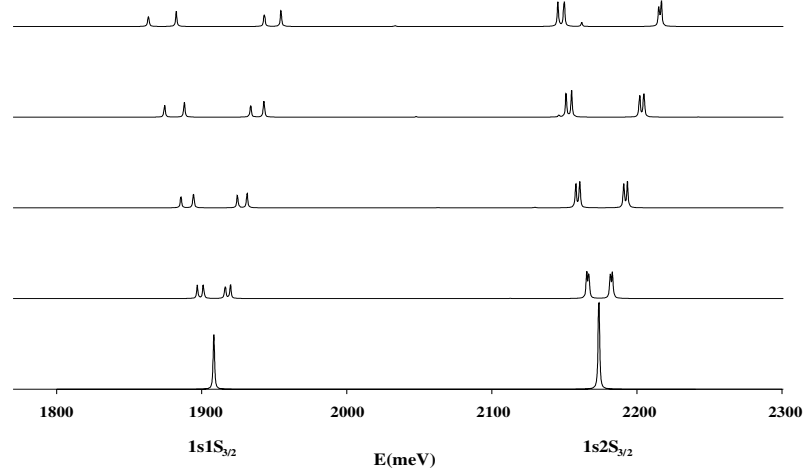


Figure 1. The low-energy part of the magneto-optical spectrum of the spherical uniform InAs nanocrystal of radius 3 nm. The spectra at different fields, from $B = 0$ (bottom) up to $B = 40$ T (top) in 10 T steps, are offset. Transitions at $B = 0$ are explicitly labelled. Transition positions are given in millielectronvolts, while the absorption intensity is given in arbitrary units. The spectrum is modelled by adding 1 meV wide Lorentzian envelopes to the transition strengths.

and mix for weaker fields. Thus, we include in the calculations of the transition rates not only the $1s$ ground electron state but also the first excited state, $1p$ (components $1p_{-1}$, $1p_0$, $1p_{+1}$), and the $m = -2$ component of the second excited $1d$ state. We consider 12 hole states in the transitions to the $1s$ electron ground state and 5 hole states in transitions to the excited $1p$ and $1d_{-2}$ electron states. Thus, we take into account 74 transitions to the $1s$ electron state (they come from $1S_{3/2}$, $1P_{3/2}$, $1P_{5/2}$, $1D_{5/2}$, $2S_{3/2}$, $2P_{3/2}$, $1D_{7/2}$, $1F_{7/2}$, $1F_{9/2}$, $3S_{3/2}$, $1G_{9/2}$, and $2D_{5/2}$ hole states). However, the symmetry selection δ_{mM} -rule reduces this number to 48 transitions (twelve low-lying hole states of the four allowed $F_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ components). Adding the number of the possible transitions to the $1p$ and $1d_{-2}$ electron state, we end up with the total number of 128 transitions calculated.

Figure 2 shows the evolution of the low-energy spectrum of the e-h transitions for five values of the magnetic field (0, 10, 20, 30, and 40 T). At $B = 0$, only five transitions are seen; from left to right they are: $1s \leftarrow 1S_{3/2}$, $1s \leftarrow 2S_{3/2}$, $1s \leftarrow 3S_{3/2}$, $1p \leftarrow 1P_{3/2}$, and $1p \leftarrow 1P_{5/2}$. When the magnetic field is on, both the electron and hole levels split into $2k + 1$ components ($k = l$ for the electrons and F for holes). Thus, the $1s \leftarrow nS_{3/2}$ transition splits into four components, while $1p \leftarrow 1P_{3/2}$ splits into ten components (not 12, because $1p_1(m = +1) \leftarrow 1P_{3/2}$ ($F_z = -3/2$) and $1p_1(m = -1) \leftarrow 1P_{3/2}$ ($F_z = 3/2$) are forbidden by the symmetry selection δ_{mM} -rule). Finally, $1p \leftarrow 1P_{5/2}$ splits into 12 components (not 18, for similar reasons). At $B = 10$ T the components of $1s \leftarrow nS_{3/2}$, $n = 1, 2, 3$, are well separated. This is not the case for the $1p \leftarrow 1P_{3/2}$ and $1p \leftarrow 1P_{5/2}$ transitions, whose components appear mixed in the energy region considered.

Looking at figure 2 we can see that, at $B = 10$ T, there are six transitions in the region between 720 and 750 meV (in fact there are seven transitions located at 721, 725, 727, 732, 742, 743, and 744 meV, but the ones arising at 742 and 743 overlap, so only one wider transition is seen). Only four of them can arise from the $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ transition. They

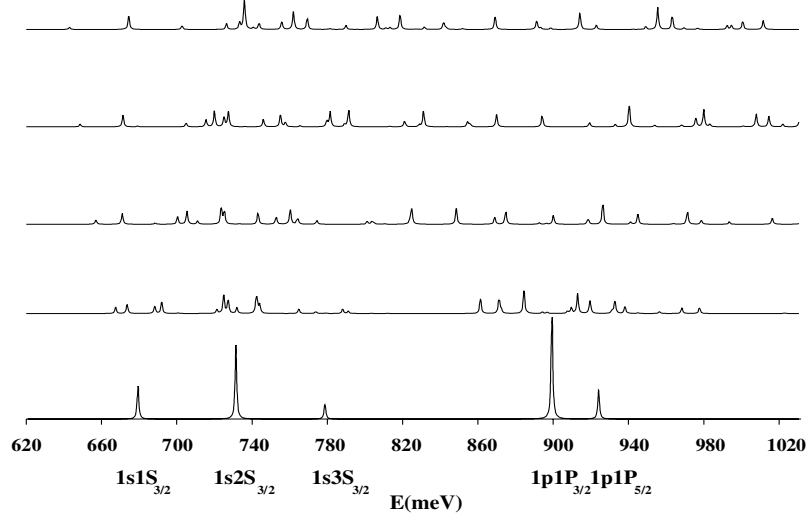


Figure 2. As figure 1, but for a large InAs nanocrystal of radius 8 nm.

appear at 721, 725, 742, and 743 meV for the F_z -components equal to $-1.5, -0.5, 0.5, 1.5$ of $1s \leftarrow 2S_{3/2}$, respectively. The first one is weak and the others are strong. The additional three optically active transitions in this region are: $1s \leftarrow 1D_{7/2}$ ($F = -1.5$) at 727 meV, $1s \leftarrow 1D_{5/2}$ ($F = 1.5$) at 732 meV and $1s \leftarrow 2P_{3/2}$ ($F = 0.5$) at 744 meV. The latter two transitions are weak but the $1s \leftarrow 1D_{7/2}$ ($F = -1.5$) is strong. This is due to a strong interaction between the $2S_{3/2}$ ($F_z = -1.5$) and $1D_{7/2}$ ($F_z = -1.5$) hole states that anticross at $B = 10$ T and to a large extent ‘exchange’ their wavefunctions.

For B between 20 and 40 T, more transitions appear to be optically active in the energy range investigated. The hole states $1D_{5/2}$ ($F = 1.5$) and $2P_{3/2}$ ($F = 0.5$) undergo anticrossings with $1P_{5/2}$ ($F = 1.5$) and $1D_{7/2}$ ($F = 0.5$) and the transitions from these states to $1s$ become stronger. Simultaneously, the components $F_z = 1.5$ and 0.5 of the transition $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ become weaker.

In summary, the most remarkable feature of the evolution of the transition spectrum versus magnetic field is that, except for a few weak transitions, the transitions that are strong for $B \neq 0$ correspond basically to the ones that split from the transitions allowed at $B = 0$. In some cases, when the hole levels of the same symmetry (the same F_z) anticross, the labelling of the corresponding transitions can change, as happens at $B = 10$ T for the $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ and $1s \leftarrow 1D_{7/2}$ ($F = -1.5$) transitions discussed above. Another remarkable anticrossing and ‘exchange’ of the hole wavefunctions occurs for $1S_{3/2}$ ($F_z = -1.5$) and $1P_{3/2}$ ($F_z = -1.5$), which for $B > 10$ T becomes the lowest transition. The strength of this transition decreases as the field increases and its energy distance to the next optically active transition increases simultaneously (see figure 2). This effect should be seen in an experiment as a dark or weak magnetoexciton.

Since tracing the evolution of the different components in the transition spectrum shown in figure 2 is difficult, we present in figure 3 the same spectrum but for z -polarized light and including only transitions to the $|S\alpha\rangle$ electron component. Under these conditions only transitions from the hole ($F_z = 1/2$) component are allowed, so the $1s \leftarrow nS_{3/2}$, $n = 1, 2, 3$,

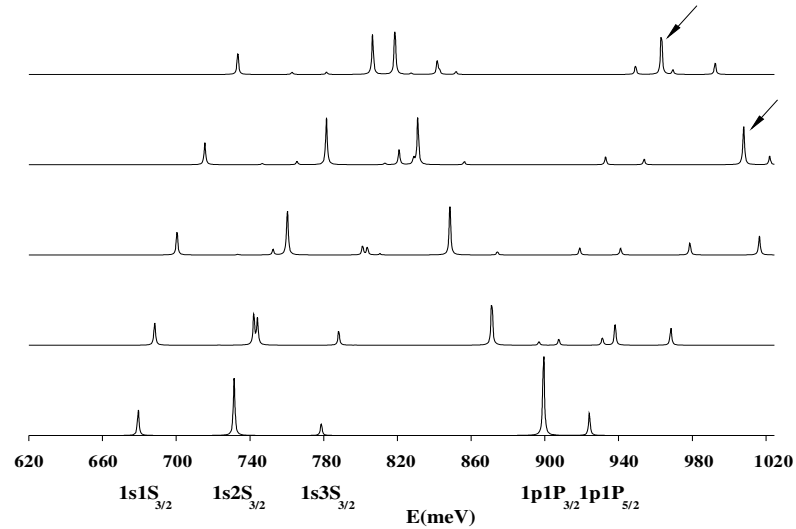


Figure 3. The low-energy part of the magneto-optical spectrum of a spherical uniform InAs nanocrystal of radius 8 nm for z -polarized light and including only transitions to the $|S\alpha\rangle$ electron components.

do not split and the $1s \leftarrow 1P_{3/2}$, $1s \leftarrow 1P_{5/2}$ split into three components (p_0 , p_{+1} , and p_{-1}). The resulting spectrum is simple enough for one to see how it evolves with the field and that the transitions forbidden at $B = 0$ continue to be very weak for the increasing field. Two strong transitions indicated by arrows in figure 3 correspond to $1d_{-2} \leftarrow 1D_{5/2}$ ($F_z = -2.5$), a high-energy transition allowed at $B = 0$, that significantly lowers in energy when the field increases.

4. Quantum dot–quantum barrier systems

In this section we consider a three-layer nanocrystal built of an internal InAs core of radius 7 nm, a middle InP shell of thickness 1 nm, and an external 3.5 nm InAs cladding. Since the forbidden energy gap of InAs is narrower than the gap of InP, the middle shell acts as a barrier separating two spherical InAs wells (barrier height [33]: 0.52 eV for electrons and 0.42 eV for holes). As before, the surrounding medium is modelled by a 4 eV external potential barrier. Since we are mainly interested in the states having energies below the InP barrier and thus expect a small charge density in the barrier region, the effective mass and Luttinger parameters of InAs are used for the whole nanocrystal.

As in the case of a large homogeneous nanocrystal, the weak confinement leads also here to a dense distribution of the energy levels. Then, excited transitions enter into the low-energy region of the spectrum as the magnetic field increases. In this case we have included in the calculations the $1s$, $1p$ (+1, 0, -1), and $1d$ (-2, -1) electron states and eight low-lying hole states for the four allowed F_z -components. Thus, since the δ_{mM} -rule yields $M = m = 0$ for all transitions to the ground electron state $1s$ ($m = 0$), the allowed F_z -values are: 1.5, 0.5, -0.5, and -1.5 (see equation (2)), and the eight low-lying hole states included in the calculations are: $1P_{3/2}$, $1S_{3/2}$, $1P_{5/2}$, $2S_{3/2}$, $1D_{5/2}$, $2P_{3/2}$, $3S_{3/2}$, and $1D_{7/2}$. In a similar way, we calculate

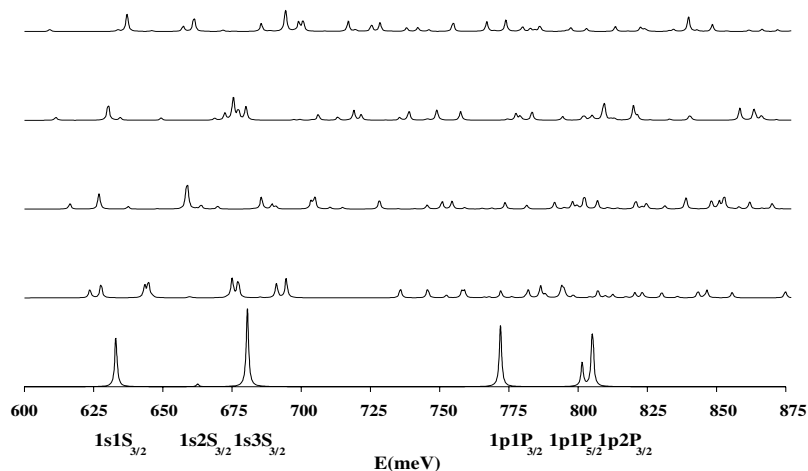


Figure 4. The low-energy part of the magneto-optical spectrum of a spherical multishell InAs (7 nm)/InP (1 nm)/InAs (3.5 nm) QDQB nanocrystal. The spectra at different fields, from $B = 0$ (bottom) up to $B = 40$ T (top) in 10 T steps, are offset. Transitions at $B = 0$ are explicitly labelled. The transition positions are given in millielectronvolts, while the absorption intensity is in arbitrary units. The spectrum is modelled by adding 1 meV wide Lorentzian envelopes to the transition strengths.

all allowed transitions to the excited electron states. For example, all the hole states involved in transitions to the $1p_{-1}$ electron state are the $F_z = 0.5, -0.5,$ and -1.5 components of the above hole states and, additionally, the $F_z = -2.5$ component of $1P_{5/2}, 1D_{5/2}, 1D_{7/2}, 2P_{5/2}, 2D_{5/2}, 1F_{7/2}, 1F_{9/2},$ and $2F_{7/2}$ states. Altogether, there are 320 transitions, but only 184 are allowed in axial symmetry and must be calculated for each value of the magnetic field.

Figure 4 summarizes the evolution of the low-energy part of the e-h transition spectrum of the QDQB system versus the magnetic field. At $B = 0$ only six allowed transitions are seen. They are: $1s \leftarrow 1S_{3/2}, 1s \leftarrow 2S_{3/2}, 1s \leftarrow 3S_{3/2}, 1p \leftarrow 1P_{3/2}, 1p \leftarrow 1P_{5/2},$ and $1p \leftarrow 2P_{3/2}$.

At first glance the magnetic field dependence of the QDQB transition spectrum goes along similar lines to that for the homogeneous nanocrystal (figure 2): the $1s \leftarrow nS_{3/2}$ transitions are well separated at low magnetic field and the $1p \leftarrow nP_{k/2}$ ones are mixed, even for very small B -values. However, there are several differences caused by the presence of a thin InP barrier in the QDQB system. First, the $1p \leftarrow 2P_{3/2}$ transition appears very close to the $1p \leftarrow 1P_{5/2}$ one. This is because the $2P_{3/2}$ hole state builds its charge density mainly in the external InAs cladding with a node in the region of the InP barrier, while the charge density of the $1P_{5/2}$ state is mostly localized in the internal well, which allows for similar energies of the corresponding energy levels [19]. The second and most striking difference is a reversal of the relative intensities of the $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ and $1s \leftarrow 3S_{3/2}$ transitions. Again, it can be explained by the presence of the InP barrier in the QDQB structure: the intensities are proportional to the overlap integral for the electron envelope function and one of the components of the hole envelope. Figure 5 shows the $L = 0$ component of the $1S_{3/2}, 2S_{3/2},$ and $3S_{3/2}$ states for both the homogeneous nanocrystal and the QDQB system. The corresponding electron envelope functions are also shown. One can see how the barrier influences the shape of the hole wavefunction, being responsible for the weak $1s \leftarrow 2S_{3/2}$ and strong $1s \leftarrow 3S_{3/2}$ transitions in the QDQB system. It is also worthwhile to note that although in this case the lowest transition,

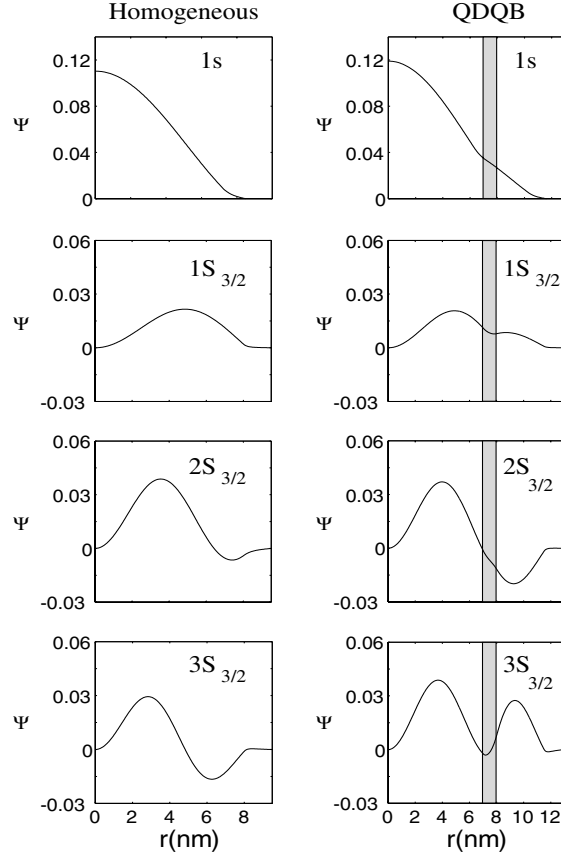


Figure 5. The envelope component with $L = 0$ of the hole states $1S_{3/2}$, $2S_{3/2}$, $3S_{3/2}$ of both the spherical uniform InAs nanocrystal of radius 8 nm and the spherical multishell InAs (7 nm)/InP (1 nm)/InAs (3.5 nm) QDQB nanocrystal. The corresponding $1s$ electron envelope functions are also shown.

$1s \leftarrow 1S_{3/2}$ ($F_z = -1.5$), does not cross with the $1p \leftarrow 1P_{3/2}$ transition, its intensity decreases when the magnetic field increases.

Some of the hole states, which at $B = 0$ build significant parts of their charge densities in the external cladding, may undergo crossovers to the internal core in the strong magnetic field [19]. Since this usually does not happen for the corresponding electron state in a given transition, such a transition progressively lowers in intensity, as happens, for example, to the $1p \leftarrow 2P_{3/2}$ transition. Another difference, also caused by a density crossover, is the ordering of the split components of the $1s \leftarrow 3S_{3/2}$ transition. In homogeneous nanocrystals the ordering (versus increasing energy) is $F_z = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ (as it is for every $F = 3/2$ splitting in the homogeneous nanocrystal). This is not the case in the QDQB system. At $B = 10$ T the sequence of the levels in the QDQB structure is $F_z = -3/2, -1/2, 3/2, 1/2$. This reordering can be understood by looking at the hole wavefunctions. At $B = 0$ T the $3S_{3/2}$ ($F_z = 3/2$) state has the maximum of its charge density localized in the external

cladding, while this is not the case for the $3S_{3/2}$ ($F_z = 1/2$) state. When $B < 10$ T the energy of the $3S_{3/2}$ ($F_z = 3/2$) state almost does not increase, since its charge density in the external cladding does not change much (it only slightly concentrates in two regions close to the z -axis). For $B > 10$ T a crossover occurs and the $3S_{3/2}$ ($F_z = 3/2$) state starts to increase in energy faster than the $3S_{3/2}$ ($F_z = 1/2$) state (as is the rule for uniform dots).

5. Quantum dot–quantum well systems

Let us consider now a three-layer nanocrystal built of an internal barrier-acting InP core, a middle well-acting InAs shell, and an external barrier-acting InP cladding. The radius of the core is 8 nm, the thickness of the InAs shell is 2 nm, and the external InP cladding is 2 nm thick. The band offset is 0.52 eV for electrons and 0.42 eV for holes [33], and the height of the surrounding barrier is assumed to be 4 eV (from the bottom of the InAs well). Since we are investigating the bound states having charge densities localized mainly in the middle shell, the electron effective mass and valence band Luttinger parameters of InAs are, for simplicity, used for the whole structure.

In the QDQW system investigated, the density of the electron and holes states is even higher than in the structures studied in the previous sections. Additionally, the effect of a periodic change of the electron ground state energy versus magnetic field induces changes in the low-energy part of the spectrum as the field strength increases. Therefore, in order to study the evolution of the low-energy part of the e–h transition spectrum, we include the $1s$, $1p$ ($m = 1, 0, -1$), and $1d$ ($m = -2, -1$) electron states. For each electron state we consider transitions from the five low-lying hole states for all the allowed F_z -components. The total number of transitions that we deal with is 236, but the symmetry selection δ_{mM} -rule reduces the number of calculations to 120 transitions for each value of the magnetic field.

In order to give insight into the complication of the transition spectrum, we plot in figure 6 the transition energies of all the transitions studied, disregarding the fact that many of them may have negligible intensity. This can be seen in figure 7, where all transition energies are represented by vertical bars, while the spectrum is modelled by adding 1 meV wide Lorentzian envelopes to the transition strengths. Figure 6 helps us to see how the transition energies cross as the magnetic field increases and, in particular, how the energies of the excited transitions decrease. The numerous crossings observed and the progressive change of the symmetry of the lowest transition are direct consequences of the behaviour of the electron and hole energy levels of QDQW structures in a magnetic field, reported by us in [19, 20].

As seen in figure 7, the transitions $1s \leftarrow nS_{3/2}$, for $n > 1$, do not appear in the low-energy region. This is because the second state of each symmetry is pushed towards higher energies, since it must have a node in the well (just the opposite to what happens in the QDQB system). When the field is on, the multiplets split and even at $B = 10$ T the spectrum becomes complicated. At $B = 30$ T the transition that is the lowest one at $B = 0$, i.e. $1s \leftarrow 1S_{3/2}$ ($F_z = -1.5$), is exceeded by two other transitions: weak $1p_1 \leftarrow 1P_{5/2}$ ($F_z = -2.5$) and strong $1p_1 \leftarrow 1P_{3/2}$ ($F_z = -1.5$) transitions, and overlaps with two strong transitions, namely $1d_{-2} \leftarrow 1D_{5/2}$ ($F_z = -2.5$) and $1p_1 \leftarrow 1P_{3/2}$ ($F_z = -0.5$). It is worth pointing out an important difference between the QDQW system and all the other nanocrystals studied: while for the uniform and the QDQB nanocrystals the low-energy part of the transition spectrum reflects the behaviour of the hole energy levels in a magnetic field, the structure of the QDQW transition spectrum is governed mainly by the evolution of the electron ground state symmetry versus B .

Since tracing the evolution of the different components in the QDQW transition spectra shown in figure 7 is extremely difficult, we present in figure 8 the same spectrum but for

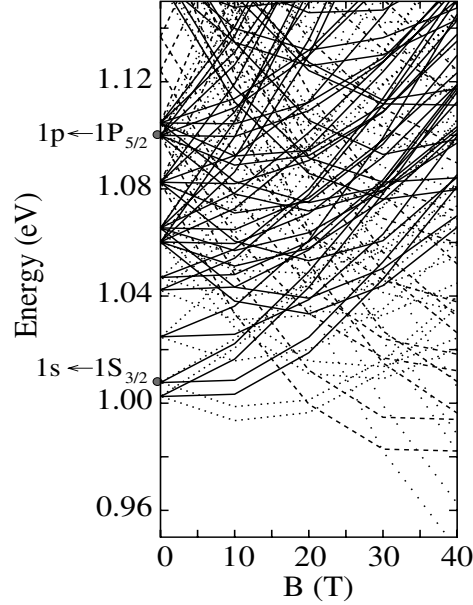


Figure 6. Transition energies (meV) versus magnetic field (T) for a spherical multilayer InP (8 nm)/InAs (2 nm)/InP (3 nm) QDQW nanocrystal. Full curves: $|F_z| = 0.5$; dashed curves: $|F_z| = 1.5$; densely dotted curves: $|F_z| = 2.5$; and dotted curves: $F_z = -3.5$. Allowed transitions at $B = 0$ are explicitly labelled.

z -polarized light and including only transitions to the electron $|S\alpha\rangle$ components. Under these conditions only transitions from the hole ($F_z = 1/2$) component are allowed, so the $1s \leftarrow 1S_{3/2}$ state does not split and both $1p \leftarrow 1P_{3/2}$ and $1p \leftarrow 1P_{5/2}$ split into three components (p_0 , p_{+1} , and p_{-1}). The quadratic effect is so pronounced in the QDQW structure that even in this very simplified spectrum it is difficult to trace the evolution of the transitions. In order to help the reader, the lines connecting the same states for different fields are included. This figure confirms again that the strong signals observed at high fields are basically the ones that split from the transitions allowed at $B = 0$.

6. Concluding remarks

We have investigated magneto-optical transitions in uniform InAs and multilayer InAs/InP nanocrystals by using a one-band model for the electron states and a four-band $k \cdot p$ approach to describe the hole states. We have shown that in the case of small uniform quantum dots, the linear Zeeman splitting of the electron and hole energy levels alone determines the structure of the transition spectrum in magnetic fields up to 40 T, leading to linear and symmetric splitting of the transition components of similar strengths. In a large uniform nanocrystal the quadratic magnetic effects also becomes important. With increasing magnetic field the strong splitting of the energy levels, degenerate at $B = 0$, yields a mixing of the components belonging to different transitions and the magnetoabsorption spectrum becomes complicated. It has been found that in high magnetic fields the lowest energy component ($F_z = -1.5$) of the ground state

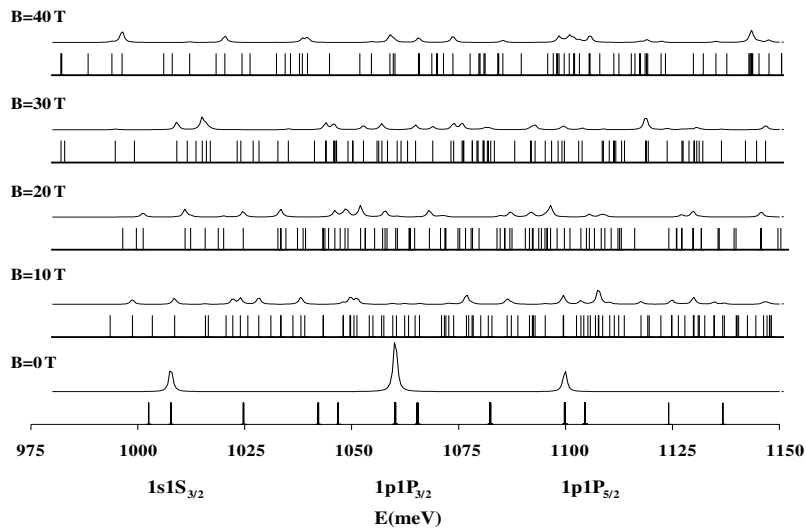


Figure 7. As figure 4, but for a spherical multishell InP (8 nm)/InAs (2 nm)/InP (3 nm) QDQW nanocrystal.

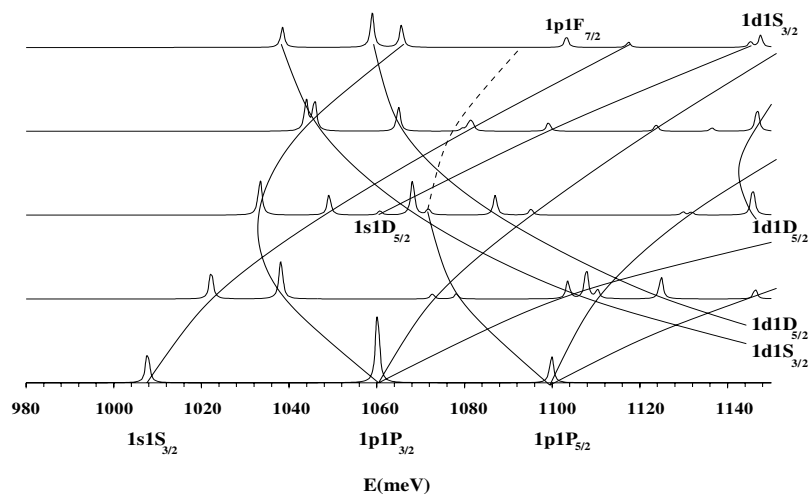


Figure 8. The low-energy part of the magneto-optical spectrum of a spherical multishell InP (8 nm)/InAs (2 nm)/InP (3 nm) QDQW nanocrystal with z -polarized light and including only transitions to the $|S\alpha\rangle$ electron components. The spectrum is modelled by adding 1 meV wide Lorentzian envelopes to the transition strengths.

transition ($1s \leftarrow 1S_{3/2}$) becomes very weak and increases its distance to the next optically active transition, which should be seen in experiment as a dark magnetoexciton. We have shown that magneto-optical spectra of chemically synthesized multilayer nanocrystals differ

significantly for nanocrystals of different size, composition, and sequence of layers. Many differences observed between the spectra of uniform and QDQB structures have been explained as results of the presence of a thin InP barrier-acting shell in multishell nanocrystals. We have shown that the transition spectrum depends strongly on whether the thin middle shell is a well-acting or barrier-acting layer. This can be important in the modelling of such nanocrystals as potential building blocks for optoelectronic nanodevices. It has also been found that transitions that are allowed at $B = 0$ are also allowed for higher fields, although their labelling can change due to anticrossings of the energy levels.

Acknowledgments

Financial support from Generalitat Valenciana CTIDIB-2002/189, UJI-Bancaixa P1-B2002-01 and KBN-8T11B06218 is gratefully acknowledged. The MCT-FPU (JC) FPU grant is also acknowledged.

References

- [1] Jacak L, Hawrylak P and Wójs A 1998 *Quantum Dots* (Berlin: Springer)
- [2] Chakraborty T 1999 *Quantum Dots* (Amsterdam: Elsevier)
- [3] Bylicki M and Jaskólski W 1999 *Phys. Rev. B* **60** 15924
- [4] Jaskólski W, Bosek M, Bylicki M and Planelles J 2001 *Vacuum* **63** 185
- [5] Lorke A, Luyken R J, Govorov A O, Kotthaus J P, Garcia J M and Petroff P M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2223
- [6] Lieb E H, Solovej J P and Yngvason J 1995 *Phys. Rev. B* **51** 10646
- [7] Bimberg D, Grundmann M and Ledentsov N N 2001 *Quantum Dot Heterostructures* (Chichester: Wiley)
- [8] Sadowski M L, Potemski M and Gyuberg M 1999 *Optical Properties of Semiconductor Nanostructures (NATO ASI Series vol 81)* (Dordrecht: Kluwer)
- [9] Woggon U 1997 *Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots* (Berlin: Springer)
- [10] Ando T, Arakawa Y, Foruka K, Komiyama S and Nakashima H (ed) 1998 *Mesoscopic Physics and Electronics* (Berlin: Springer)
- [11] Awschalom D D, Los D and Samarth N (ed) 2002 *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Berlin: Springer)
- [12] Loos D and DiVincenzo D P 1998 *Phys. Rev. A* **57** 120
- [13] Burkard G and Loss D 2002 *Europhys. News* **33** 166
- [14] Alchalabi K, Zimin D, Kostorz G and Zogg H 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 026104-1
- [15] Mews A, Eychemüller A, Giersig M, Shoos D and Weller H 1994 *J. Phys. Chem.* **98** 934
Mews A, Kadavanich A V, Banin U and Alivisatos A P 1996 *Phys. Rev. B* **53** R13242
- [16] Little R B, El-Sayed M A, Bryant G W and Burke S 2001 *J. Chem. Phys.* **114** 1813
- [17] Jaskólski W, Bryant G W, Planelles J and Zieliński M 2002 *Int. J. Quantum Chem.* **90** 1075
- [18] Döllefeld H, Weller H and Eychemüller A 2001 *Nano Lett.* **1** 267
Artemyev M V, Bibik A I, Gurinovich L I, Gaponenko S V and Woggon U 1999 *Phys. Rev. B* **60** 1504
Kagan C R, Murray C B, Nirmal M and Bawendi M G 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1517
- [19] Planelles J, Climente J, Díaz J G and Jaskólski W 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 1
- [20] Planelles J, Díaz J G, Climente J and Jaskólski W 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245302
- [21] Bányai L and Koch S W 1993 *Semiconductor Quantum Dots* (Singapore: World Scientific)
- [22] Baldereschi A and Lipari N O 1973 *Phys. Rev. B* **42** 2697
- [23] Gregorian G B, Kazaryan E M, Efros A I L and Yazeva T V 1990 *Sov. Phys.–Solid State* **32** 1031
- [24] Xia J B 1989 *Phys. Rev. B* **40** 8500
- [25] Planelles J, Jaskólski W and Aliaga I 2001 *Phys. Rev. B* **65** 033306
- [26] Sercel P C and Vahala K J 1990 *Phys. Rev. B* **42** 3690
- [27] Efros A I L and Rosen M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 7120
- [28] Arnoldi W E 1951 *Q. J. Appl. Math.* **9** 17
- [29] Saad Y 1992 *Numerical Methods for Large Scale Eigenvalue Problems* (New York: Halsted)
- [30] Morgan R B 1996 *Math. Comput.* **65** 1213

- [28] Lehoucq R B, Sorensen D C, Vu P A and Yang C 1998 ARPACK: Fortran subroutines for solving large scale eigenvalue problems (release 2.1)
Lehoucq R B, Sorensen D C and Yang C 1998 *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (Philadelphia, PA: SIAM)
- [29] Raymond S, Fafard S, Poole P J, Wójs A, Hawrylak P, Charbonneau S, Leonard D, Leon R, Petroff P M and Merz J L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11548
Raymond S, Hawrylak P, Gould P, Fafard S, Sachradja A, Potemski M, Wójs A, Charbonneau S, Leonard D, Petroff P M and Merz J L 1997 *Solid State Commun.* **101** 883
- [30] Brus L E 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 4403
- [31] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Ulis: Les Éditions de Physique)
- [32] Banin U, Lee C J, Guzelian A A, Kadavanich A V, Alivisatos A P, Jaskólski W, Bryant G W, Efros Al L and Rosen M 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2306
- [33] Cao Y W and Banin U 2000 *J. Am. Chem. Soc.* **122** 9692
- [34] Madelung O (ed) 1982 *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, group III, vol 17 Landolt-Börnstein New Series* (Berlin: Springer)

Effects of a thin AIAs layer on InAs quantum dot electronic structure

J. L. Movilla, J. I. Climente, and J. Planelles^{a)}

Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

(Received 16 June 2003; accepted 15 July 2003)

The influence of a thin AIAs layer (1 nm) located at different positions inside a GaAs matrix on the electronic states of nearby deposited InAs quantum dots is theoretically investigated. Calculations are performed within the three-dimensional one-band effective mass model including mass dependence on energy and position. In order to provide a realistic description of the wave function diffusion outside the dot, finite confinement barriers are considered. It is shown that the presence of the AIAs high potential barrier can account for the reported experimental blueshift when the AIAs layer is grown as a capping material, but this is not the case when the AIAs layer is grown in the substrate. An alternative explanation of the experimental data [Kim *et al.*, *J. Appl. Phys.* **91**, 5055 (2002)] based on our calculations is proposed. © 2003 American Institute of Physics.
[DOI: 10.1063/1.1606519]

I. INTRODUCTION

Self-assembled quantum dots (QDs) have attracted considerable attention in recent years because of their excellent properties as active media in semiconductor devices such as QD lasers^{1,2} or infrared photodetectors.^{3–5} The most widely studied self-assembled system, InAs QDs embedded in a GaAs matrix, shows a photoluminescence (PL) peak typically around 1050 nm.⁶ Shifting this spectral channel toward different emission or absorption wavelengths is essential for more extensive applications.

In order to obtain shorter emission wavelengths, the choice of high potential barrier materials has been revealed as a valuable control parameter.¹² It enables shifting the QD energy levels without severe composition fluctuations, in contrast to QD alloying techniques.^{7,8} $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ matrices are the most common choice for practical applications^{9,10} because the corresponding lattice constants, similar to that of GaAs, lead to similar strain conditions for the growth of InAs QDs.¹¹ By using $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ matrices, PL blueshifts as large as 612 meV have been reported.¹² Moreover, other desirable benefits for practical applications, such as high thermal stability^{12,13} and high controllable QDs densities^{14,15} can be obtained by using InAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ systems. However, the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ matrix also shows some drawbacks. The most important are a weaker PL emission as compared to that of InAs/GaAs QDs (because of the presence of low-density nonradiative channels in the barrier)¹⁶ and a higher peak broadening (caused by dot size fluctuations).¹²

Recently, a different technique which incorporates most of the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ matrix advantages while eluding its drawbacks has been introduced: The QDs are embedded in a GaAs matrix, in which one^{17–19} or more^{20,21} thin AIAs layers are deposited near the QD. By tuning the position of the thin AIAs layer, several benefits have been reported. These include, blueshifts as large as 500 meV (Ref. 21), an increased dot density,¹⁸ a higher dot size uniformity derived from a

reduced In segregation,¹⁹ and others. Due to these properties, thin AIAs barriers engineering is an attractive field for practical device design. In the case of infrared photodetector devices, reduced dark currents have been obtained with thin AIAs layers even at room temperature,²² leading to larger detectivities than those observed in the InAs/GaAs system. In spite of the great interest of utilizing thin AIAs layers, no theoretical study has attempted so far to assess the effect of thin high potential barriers on QDs energy levels.

In this work, we investigate the influence of a 1-nm-thick AIAs layer, located inside a GaAs matrix at different but close distances from InAs QDs, on their conduction-band low-lying states. We use the three-dimensional one-band model with position-dependent band extrema and effective masses. The validity of such model for self-assembled QDs has been widely tested with fairly good results.²³ Our model additionally includes nonparabolicity effects, as these play an important role for InAs QDs.^{24,25} Since a realistic description of the electron wave function spread into the barrier material is required to predict the overlap with the AIAs layer, we use an appropriate finite square-well potential.²⁶ The effect of strain on the conduction band is mainly to modify the confining potential, which becomes a function of position, although an average over the QD, as we assume in our calculations, has been proven to work well.^{23,27} The strain also modifies the curvature of the bulk band causing the effective masses to become anisotropic. However, in the case of the conduction band, this anisotropy is rather small and an isotropic electron effective mass can safely be employed.^{23,28} Finally, the change in bulk band curvatures may also cause some variation of the actual value of the effective mass. In our position and energy-dependent effective-mass model, such mass variation is implicitly accounted for by the strain-induced changes in the band gap.

Our results are in reasonable agreement with experimental data of thin AIAs capping layers.¹⁹ However, they cannot account for the large blueshifts observed when the AIAs layer is grown in the GaAs substrate.¹⁷ This fact strongly suggests that the explanation of these blueshifts as due to the

^{a)}Electronic mail: planelle@exp.uji.es

high AlAs potential barrier alone¹⁷ is incomplete. As the substrate is grown at a high temperature, despite the low Al mobility,¹⁴ some Al diffusion toward the wetting layer (WL) is conceivable. Then, since the presence of Al in the QDs would increase the energy band gap, we suggest some Al presence in the QDs as an additional factor enhancing the blueshift. By including small amounts of Al in the QD, a fair agreement with experiment can be achieved.

II. THEORY

The electron states are described by means of the one-band effective-mass Hamiltonian in the envelope function approximation, including mass dependence on energy (nonparabolicity) and position (different masses for different material compositions). Since we consider lens-shaped QDs with axial symmetry, cylindrical coordinates are employed. Therefore, the Schrödinger equation, in atomic units, reads:

$$\left(-\frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m^*(\rho, z; E_{n, m_z})} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(\rho, z; E_{n, m_z})} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V(\rho, z) - E_{n, m_z} \right) \Psi_{n, m_z} = 0, \quad (1)$$

where $m_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number associated with the z component of the angular momentum, n is the main quantum number, $V(\rho, z)$ is the confining potential, and $m^*(\rho, z; E_{n, m_z})$ is the energy and position-dependent electron effective mass. The actual values of $V(\rho, z)$ and $m^*(\rho, z; 0)$ depend upon the underlying material as sketched in Fig. 1(a)–1(c).

The nonparabolic effective mass is given by:²⁹

$$\frac{m^*(\rho, z; E_{n, m_z})}{m^*(\rho, z; 0)} = \frac{(E_{n, m_z} + E_g(\rho, z))(E_{n, m_z} + E_g(\rho, z) + \Delta_{SO}(\rho, z))(E_g(\rho, z) + 2\Delta_{SO}(\rho, z)/3)}{E_g(\rho, z)(E_g(\rho, z) + \Delta_{SO}(\rho, z))(E_{n, m_z} + E_g(\rho, z) + 2\Delta_{SO}(\rho, z)/3)}, \quad (2)$$

where $m^*(\rho, z; 0)$ is the electron effective mass, including strain effects, at the Γ point, while $E_g(\rho, z)$ and $\Delta_{SO}(\rho, z)$ stand for the position-dependent energy band gap and spin-orbit splitting, respectively.

Due to the energy dependence of the electron effective mass, the discretization of Eq. (1) yields pseudoeigenvalue problems of asymmetric, huge, and sparse matrices. Energies and wave functions are obtained by means of self-consistent iterative procedures. The Arnoldi solver³⁰ implemented in the ARPACK package³¹ is employed for diagonalization.

III. RESULTS AND DISCUSSION

We investigate the electron states of QDs embedded in a GaAs matrix including a thin AlAs layer at different locations. The studied systems are referred to as A, B, and C and are sketched in Fig. 1. The aforementioned AlAs layers are 1-nm-thick in all cases. The parameters used in our calculations are given in Table I. All material data are from Ref. 32, unless otherwise specified.

Since the available experimental literature dealing with thin AlAs layers effects on QDs do not provide complete information on the QDs and WL dimensions, we study four

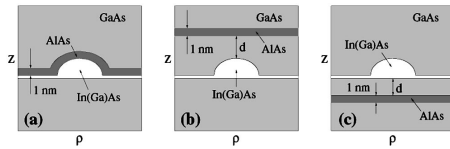


FIG. 1. Schematic sample structures of the systems referred to as A, B, and C [subfigures (a), (b), and (c), respectively].

different models (see Table I). QD1 and QD2 radii (r) are those of QDs grown in Ref. 17 on top of GaAs and AlAs, respectively. We assume these two dots to have a low height/radius ratio (the same in both cases)¹¹ in order to enhance the electron wave function amplitude outside the dot, and, in turn, the effect of the high potential barrier of the AlAs layer on the electron states. QD3 and QD4 have unit ratio. QD3 is a (feasible) voluminous dot, while QD4 represents an ideal dot for photodetection purposes, with only two electron bound states and increased lateral confinement. Note that by having only two bound states (a filled ground state and an empty excited state close to the GaAs conduction band), high photocurrents and long carrier lifetimes can be achieved.^{3,4} Additionally, the increased lateral confinement allows one to improve normal incident radiation detection, which is one of the key advantages of QDs over quantum wells for infrared

TABLE I. Semiconductor material and geometrical parameters employed. All data are from Ref. 32, unless otherwise specified.

	InAs	GaAs	AlAs	
E_g (eV)	0.785 ^a	1.519	3.1	
Δ_{SO} (eV)	0.39	0.34	0.28	
E_p (eV)	21.5	28.8	21.1	
F	-2.9	-1.94	-0.48	
$m^*(E_{n, m_z} = 0)$	0.051	0.067	0.15	
V (eV)	0.0	0.513	1.08 ^b	
	h (nm)	r (nm)	h_{WL} (nm)	
	QD1	2	10	0.5
	QD2	1.65	8.25	0.3
	QD3	6	6	0.5
	QD4	4	4	0.3

^aFrom Ref. 33.

^bFrom Ref. 27.

TABLE II. Energy shifts of the electron ground and first-excited state for different QD models in the sample structure system A.

	ΔE_{gs} (meV)	$\Delta E_{first\ excited}$ (meV)
QD1	21	23
QD3	4	11
QD4	11	31

photodetection.⁵ The shape of the QDs is assumed to be a (semielliptical) lens in all cases.^{17,19} The WL thickness (h_{WL}) is 1.7 monolayer (ML) for QD1 and QD3. A lower value of 1 ML is used for QD2 to simulate the WL reduction when resting upon AlAs,^{14,17} and for QD4 to simulate ideal growth conditions.

When the QD is deposited on AlAs, we assume pure InAs composition. However, during the growth on top of GaAs, interdiffusion of indium and gallium occurs.³⁴ This makes the chemical composition of the QD difficult to assess. Since the diffused Ga concentration decreases from the bottom to the top of the QDs, we model the QD composition with a linear profile including six-graded $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ domains with x decreasing linearly, by steps of 10%, starting from 50% at the base.³⁵ The corresponding material parameters are derived following Ref. 32, and the employed band offset is, for each of the said domains, 70% of the band-gap difference between $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ and GaAs.³⁶

System A has been experimentally studied by Arzberger *et al.*¹⁹ A PL blueshift of about 27 meV was reported when the QD synthesis was carried out at 480 °C, at which In intermixing and segregation are not significant yet (a redshift is observed when carrying it out at 530 °C). Then, the observed blueshift was mostly attributed to the increased potential barrier introduced by the AlAs capping layer.¹⁹ In principle, this increased potential barrier has effects on both electron and hole energy levels. However, the AlAs barriers have the greatest impact on the electron energy levels.²¹ This fact is in agreement with our exploratory calculations on holes, so that, hereafter, we shall only consider electron states in order to account for PL blueshifts.

Table II presents the calculated energy shifts of the electron ground ($n=1, m_z=0$) and first-excited ($n=1, |m_z|=1$) states produced by the addition of a thin AlAs capping layer [sample structure A, see Fig. 1(a)] on different models of QD (see Table I). The shift is calculated as the energy difference between the same electron state in the presence and absence of the AlAs layer.

Table II shows good agreement with the ground-state experimental blueshift¹⁹ in the case of the shortest model (QD1), which gives an idea of the height of the QDs in the experimental sample. Since the states of a lens may qualitatively be related to the $(\ell+m_z)$ odd states of a sphere—so that the ground state builds most of the electron density along the vertical z axis, and the first-excited state accumulates it in between the vertical and in-plane axes—we conclude that the vertical confinement plays the most important role in determining the ground-state shift (the shorter the QD, the stronger the blueshift due to AlAs capping), and that both vertical and lateral confinements determine the shift of

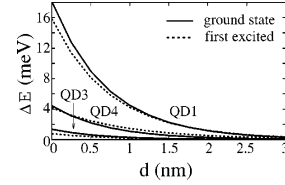


FIG. 2. Energy shifts of the electron ground (solid line) and first-excited (dashed line) states of QD1, QD3, and QD4 in the sample structure system B.

the first-excited state (see Table II). This could be useful to design QDs with enhanced energy spacing between the two lowest-lying states.³⁷

In Fig. 2, we report the predicted energy shifts of the ground and first-excited state for different QDs as a function of the distance between the apex of the dot and a thin AlAs layer deposited in the capping material [system B, see Fig. 1(b)]. In this sample structure, the AlAs layer overlaps only with the density charge that penetrates the region of GaAs near the QD apex. As a consequence, little shift differences between the two lowest-lying states of each QD are obtained. Moreover, only the height of the dot is relevant for determining the magnitude of the energy shift. Thus, QD1 (the shortest dot) shows the strongest blueshift (see Fig. 2).

Recently, Kim *et al.*¹⁷ have experimentally investigated shifts in PL of InAs QDs versus the distance between the WL and a thin (1 nm) AlAs layer grown inside the GaAs substrate [sample structure C, see Fig. 1(c)]. Blueshifts as large as 171 meV with PL intensities, linewidths, and QD shapes comparable to those in the absence of AlAs, are achieved (a small reduction in QD lateral size and WL thickness is reported for QDs grown directly on the AlAs layer). We calculate the energy shifts that the AlAs layer produces on the electron ground and first-excited states of QDs with the same diameter as those of the experimental samples (20 nm and 16.5 nm for QDs grown on GaAs and AlAs, respectively). In our model, the most common WL thicknesses for each substrate material, and very short QD heights enhancing the effect of the AlAs high potential barrier are assumed (see Table I). The results and the reported PL blueshifts¹⁷ are given in Table III.

Table III reveals an apparent disagreement between our theoretical predictions and the experiment.³⁸ The large magnitude of this discrepancy, together with the good agreement of our model with similar experimental systems (e.g., sample structure A), leads us to conclude that the AlAs high poten-

TABLE III. Experimental PL peak shift and calculated energy shifts of the electron ground and first-excited state in the sample structure C as a function of the distance between the WL and a 1-nm-thick AlAs layer in the substrate.

QD model	d (nm)	$\Delta E_{PL\ exp.}$ (meV)	ΔE_{gs} (meV)	$\Delta E_{first\ excited}$ (meV)
QD1	2	25	1	2
QD1	1	55	5	6
QD2	0	171	41	55

tial barrier (including QD size reduction when $d=0$ nm) is not the only source of the experimental PL blueshift (it is worth pointing out that using a more optimistic, somewhat unrealistic, set of parameters such as unstrained InAs mass, homogeneous QD composition and reduced InAs/GaAs band offset does not significantly improve the agreement with the experiment). Since the incorporation of very small amounts of Al in InAs QDs has been identified as a dominant mechanism for Al-related PL blueshift in some QD systems,^{13,39} we suggest that some Al diffusion plays also a role in this case. This mechanism would allow a simple explanation of the enhanced PL blueshift as coming from an enlargement of the QD energy band gap. The presence of Al in the QD would come from the Al atoms existing in the WL when the dot is grown on an AlAs surface.¹⁴ The question is how could Al be incorporated in the dot when the AlAs layer is 1 or 2 nm below the WL, especially considering the low mobility of this cation. Since InAs islands are known to grow by taking material not only from the WL, but also from the substrate if the synthesis is carried out at temperatures over 420 °C,³⁴ and QDs in Ref. 17 are grown at 440° (the substrate being previously grown at 580 °C, what would produce a moderate Al diffusion toward the WL), they may presumably drain small Al quantities from the “contaminated” WL and/or substrate.

This interpretation is in agreement with other experimental studies dealing with thin AlAs layers. Rebohle *et al.*²⁰ designed a sample similar to structure C with $d=1$ nm, but in which the substrate layers were deposited at a temperature of 485 °C in order to reduce Al, Ga, and In intermixing. The resulting PL blueshift was of only 33 meV, smaller than that of Ref. 17 for the same case (but still larger than the theoretical value coming only from confinement potential effects). In addition, related structures where the substrate was deposited at 610 °C yield much larger transition energies.²¹

Our calculations indicate that the PL blueshift observed in Ref. 17, when the QD is directly grown on a thin AlAs layer, is consistent with an average QD composition of roughly $\text{In}_{0.93}\text{Al}_{0.07}\text{As}$. Since the presence of Al in InAs self-assembled QDs produces kinetic changes in the dot formation,³⁹ reflection high-energy electron diffraction studies may be helpful for a definitively assessment of the role of Al in the discussed blueshift.

IV. CONCLUDING REMARKS

We studied the influence of a thin AlAs layer, located inside a GaAs matrix, on the electron energy levels of InAs QDs deposited nearby. Our results show that, in good agreement with experiment, thin AlAs capping layers produce a moderate PL blueshift. In this case, the ground-state energy is mainly affected by the vertical confinement while the first-excited state is additionally sensitive to the lateral one, a result that may be useful to tune the energy spacing between the two lowest-lying QD states. When the AlAs layer is grown in the substrate, the AlAs high potential barrier alone cannot account for the large experimental PL blueshift. Our results suggest that, in this case, small amounts of Al diffuse into the QDs. For QDs grown directly on the AlAs layer, we

estimate an average $\text{In}_{0.93}\text{Al}_{0.07}\text{As}$ QD composition to account for the experimental data of Kim *et al.*¹⁷

ACKNOWLEDGMENTS

Continuous support from Generalitat Valenciana, UJI-Bancaixa, and MEC-FPU grants are acknowledged.

¹Y. Masumoto and T. Takagahara, *Semiconductor Quantum Dots* (Springer, Berlin, 2002).

²Y. Arakawa and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 939 (1982).

³V. Rhyzii, I. Khmyrova, V. Mitin, M. Stroschio, and M. Willander, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3523 (2001).

⁴J. Phillips, *J. Appl. Phys.* **91**, 4590 (2002).

⁵H. C. Liu, J.-Y. Duboz, R. Dudek, Z. R. Wasilewski, S. Fafard, and P. Finnie, *Physica E* **17**, 631 (2003).

⁶M. Grundmann, N. N. Ledentsov, O. Stier, D. Bimberg, V. M. Ustinov, P. S. Kop'ev, and Z. I. Alferov, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 979 (1996).

⁷M.-Y. Kong, X.-L. Wang, D. Pan, Y.-P. Zeng, J. Wang, and W. Ge, *J. Appl. Phys.* **86**, 1456 (1999).

⁸C. Lobo, R. Leon, S. Fafard, and P. G. Piva, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2850 (1998).

⁹H. C. Liu, M. Gao, J. McCaffrey, Z. R. Wasilewski, and S. Fafard, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 79 (2001).

¹⁰J. Phillips, K. Kamath, X. Zhou, N. Chervela, and P. Bhattacharya, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2079 (1997).

¹¹R. Leon, S. Fafard, D. Leonard, J. L. Merz, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 521 (1995).

¹²Y. S. Kim, U. H. Lee, D. Lee, S. J. Rhee, Y. A. Leem, H. S. Ko, D. H. Kim, and J. C. Woo, *J. Appl. Phys.* **87**, 241 (2000).

¹³A. Polimeni, A. Patané, M. Henini, L. Eaves, and P. C. Main, *Phys. Rev. B* **59**, 5064 (1999).

¹⁴P. Ballet, J. B. Smaters, H. Yang, C. L. Workman, and J. Salamo, *J. Appl. Phys.* **90**, 481 (2001).

¹⁵Z. Ma, K. Pierz, U. F. Keyser, and R. J. Haug, *Physica E* **17**, 117 (2003).

¹⁶U. H. Lee, D. Lee, H. G. Lee, S. K. Noh, J. Y. Leem, and H. J. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1597 (1999).

¹⁷J. S. Kim, P. W. Yu, J.-Y. Leem, M. Jeon, S. K. Noh, J. I. Lee, G. H. Kim, S.-K. Kang, J. S. Kim, and S. G. Kim, *J. Appl. Phys.* **91**, 5055 (2002).

¹⁸F. Ferdos, S. Wang, Y. Wei, M. Sadeghi, Q. Zhao, and A. Larsson, *J. Cryst. Growth* **251**, 145 (2003).

¹⁹M. Arzberger, U. Käsberg, G. Bohm, and G. Abstreiter, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3968 (2002).

²⁰L. Rebohle, F. F. Schrey, S. Hofer, G. Strasser, and K. Unterrainer, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2079 (2002).

²¹K. W. Berryman, S. A. Lyon, and M. Segev, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1861 (1997).

²²A. D. Stiff, S. Krishna, P. Bhattacharya, and S. W. Kennerly, *IEEE J. Quantum Electron.* **37**, 1412 (2001).

²³M. Califano and P. Harrison, *Phys. Rev. B* **61**, 10959 (2000).

²⁴Y. Li and O. Voskoboynikov, *Solid State Commun.* **120**, 79 (2001).

²⁵N. Nishiguchi and K. Yoh, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* **36**, 3928 (1997).

²⁶Z. Barticevic, M. Pacheco, and A. Latge, *Phys. Rev. B* **62**, 6963 (2000).

²⁷M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995).

²⁸C. Pryor, *Phys. Rev. B* **57**, 7190 (1998).

²⁹G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Les Ulis, 1990).

³⁰W. E. Arnoldi, *Quart. J. Applied Mathematics* **9**, 17 (1951); Y. Saad, *Numerical Methods for large Scale Eigenvalue Problems* (Halsted, New York, 1992); R. B. Morgan, *Math. Comp.* **65**, 1213 (1996).

³¹R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, P. A. Vu, and C. Yang, *ARPACK: Fortran subroutines for solving large scale eigenvalue problems, Release 2.1*; R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang, *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (SIAM, Philadelphia, 1998).

³²J. Vurgafman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).

³³S. S. Li, J. B. Xia, Z. L. Yuan, Z. Y. Xu, W. Ge, X. R. Wang, Y. Wang, J. Wang, and L. L. Chang, *Phys. Rev. B* **54**, 11575 (1996).

³⁴P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, B. A. Joyce, and T. S. Jones, *Phys. Rev. B* **58**, R15981 (1998).

³⁵This composition profile pushes the electron density toward the top of the

QD, so that the effect of an AlAs barrier in the capping layer is slightly enhanced.

- ³⁶K. Muraki, S. Fukatsu, Y. Shiraki, and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 557 (1992).
- ³⁷Y. Q. Wei, S. M. Wang, F. Ferdos, J. Vukusic, Q. X. Zhao, M. Sadeghi, and A. Larsson, *J. Cryst. Growth* **251**, 172 (2003).
- ³⁸The AlAs barrier has a negligible effect on the hole energy levels. However, if QDs are grown on the AlAs layer ($d=0$ nm), a non-negligible additional 30 meV hole shift, coming from the QD size reduction, should be included.
- ³⁹O. Baklenov, D. L. Huffaker, A. Anselm, D. G. Deppe, and B. G. Streetman, *J. Appl. Phys.* **82**, 6362 (1997).

Magneto-optical transitions in nanoscopic rings

J. I. Climente and J. Planelles*

Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

W. Jaskólski

Instytut Fizyki UMK, Grudziądzka 5, 87-100 Toruń, Poland

(Received 3 March 2003; revised manuscript received 2 June 2003; published 14 August 2003)

Near-infrared spectra of self-assembled quantum rings are calculated using the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method with rectangular band-offset potentials in three dimensions. The effective-mass model with energy-dependent mass is employed for the electron states and the four-band Hamiltonian for the hole states. Two different ways to include the magnetic-field interaction term in the four-band Hamiltonian are compared. Our calculations describe well, qualitatively, the absorption spectrum measured by Petterson *et al.* [H. Petterson, R. J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, *Physica E* **6**, 510 (2000)] and the photoluminescence magnetoresonances recently achieved by Haft *et al.* [D. Haft, C. Schulhauser, A. O. Govorov, R. J. Warburton, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schoenfeld, and P. M. Petroff, *Physica E* **13**, 165 (2002)]. The possibility of finding the “optical” Aharonov-Bohm effect in the state-of-the-art self-assembled InGaAs quantum rings is also discussed.

DOI: 10.1103/PhysRevB.68.075307

PACS number(s): 73.21.-b

I. INTRODUCTION

Recent advances in nanoscopic fabrication techniques have made it possible to grow self-organized InGaAs nanorings with “volcano” shapes.¹⁻⁷ These nanoscopic rings may be the best-suited quantum structures for investigating the electronic and optical properties of nonsimply connected quantum systems in a magnetic field,^{3,8-10} as they are in the scattering-free and few-particle limit. The large body of work, both experimental^{1-7,11-13} and theoretical,^{8-10,14-34} which has investigated these structures since they were first synthesized,¹ reflects the great interest that the possible applications of nanoscopic quantum rings have drawn.

Whereas lots of theoretical study has been devoted to account for far-infrared electron transmission spectra in a magnetic field,^{3,8,9,33,34} little effort has been made so far to provide a theoretical background to the existing experiments on interband transitions.³⁰ This is somewhat surprising if we consider that these transitions are the basis for the application of quantum dots as laser emitters,³⁵ storage devices,³⁶⁻³⁸ fluorescence markers,³⁹ etc. The underlying reason may be connected with the difficulty to explain experimental data with the simple models usually employed in the literature such as the two-dimensional effective-mass model of ring with parabolic^{8,9,18-25} or double-well^{29,30} confining potential. In these models, the characteristic frequency of the radial confinement and the nanostructure radius are fitting parameters, and one cannot control the effects of real lateral width and inner radius of the ring, which has been proved to sensitively change the energy states of both electrons³¹ and holes.³² In the present paper, we use a truly three-dimensional model with an appropriate cylindrical square-well potential,²⁰ which has already described the far-infrared spectroscopy of quantum rings successfully.^{33,34}

The strong nonparabolicity of the InAs conduction band^{40,41} and, then, that of InGaAs, prevent the use of the parabolic band approximation, since it overestimates the

electron states energy by an amount that for the studied quantum rings, is larger than the energy corrections from Coulomb interactions,⁴ lattice mismatch-induced strain, and piezoelectric effects.⁷ Therefore, we will employ energy-dependent mass in the Hamiltonian for electrons.

It should be finally pointed out that although single-band models have been assumed in most cases to study the hole energy levels,^{16,17,19-25,28-30} in nanostructures, unlike in two-dimensional superlattices, the effects of the valence subband mixing between light hole (LH) and heavy hole (HH) are important at the Γ point.⁴² By neglecting the LH-HH coupling in InGaAs, we would introduce a significant error in the estimation of the hole states energies,⁴³ and we would also miss allowed channels for dipole transitions. In our present calculations, we take into account the valence subband mixing by considering a four-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonian.^{34,44}

We carry out calculations of the near-infrared (NIR) spectra of an InGaAs quantum ring in order to qualitatively describe the results reported by Petterson *et al.*¹¹ Moreover, by including a perpendicular magnetic field, we account for the experimental data reported in Ref. 12. Two different ways to insert the magnetic interaction term in the four-band Hamiltonian, namely, the traditional Luttinger approach⁴⁵ (hereafter referred to as H_L) and our recent proposal⁴⁶ (hereafter referred to as H_{ex}) are employed. We find that the calculations performed with the latter are in better agreement with the experiment. Finally, we investigate the possibility of observing the so-called “optical” Aharonov-Bohm effect²¹⁻²³ in the InGaAs quantum ring. Our results show no trace of this effect for the given size of the ring and low values of the magnetic field, which is also in agreement with experiment.¹²

II. THEORY

The electron states are described by means of the one-band effective-mass Hamiltonian with energy-dependent

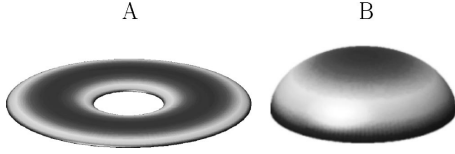


FIG. 1. Shape of the investigated quantum ring (a) and quantum lens (b). The ring height is 2 nm, the internal hole diameter 30 nm, and the external diameter 80 nm. The lens height is 6 nm and the diameter 20 nm. These shapes and sizes correspond to the nanostructures measured in Ref. 11.

(nonparabolic) mass and envelope function approximation. The corresponding equation in cylindrical coordinates, including a magnetic field perpendicular to the ring plane reads, in atomic units,

$$\left(-\frac{1}{2m^*(E_{n,m_z})}\Delta + \frac{(B\rho)^2}{8m^*(E_{n,m_z})} + \frac{Bm_z}{2m^*(E_{n,m_z})} + \frac{1}{2}\mu_B g B \sigma + V(\rho, z) - E_{n,m_z} \right) \int_{n,m_z}^e = 0, \quad (1)$$

where $m_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number of the projection of angular momentum \mathbf{l} onto the magnetic field (B) axis, n is the main quantum number, g is the Landé factor, $V(\rho, z)$ is the quantum dot potential corresponding to the geometry shown in Fig. 1, and $m^*(E_{n,m_z})$ is the energy-dependent electron effective mass defined by⁴⁰

$$\frac{m^*(E_{n,m_z})}{m^*(E_{n,m_z}=0)} = \frac{(E_{n,m_z} + E_g)(E_{n,m_z} + E_g + \Delta_{SO})(E_g + 2\Delta_{SO}/3)}{E_g(E_g + \Delta_{SO})(E_{n,m_z} + E_g + 2\Delta_{SO}/3)}, \quad (2)$$

where $m^*(E_{n,m_z}=0)$ is the electron effective mass in the vicinity of the band edge. E_g and Δ_{SO} stand for the energy band gap and spin-orbit splitting, respectively.

The valence subband mixing is taken into account by considering the two-band (actually four band with spin) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian^{34,44} for the hole states. It results in a set of four coupled partial differential equations in ρ and z . In a recent paper,⁴⁶ we discussed several different ways of including the magnetic-field interaction in the multiband Hamiltonian. In the case of the four-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian, this interaction is enclosed in the diagonal elements of the multiband equations only, so that the usual quadratic plus two linear Zeeman-like terms appear. It is not the case for the higher-number-of-bands Hamiltonians, where nondiagonal elements are also involved.⁴⁶ At the first glance, one would employ the LH and HH masses in the magnetic terms. We also pointed out in Ref. 46 that other mass coefficients may be also considered. In this paper, we show that especially good agreement with

experiment is obtained when using the LH and HH masses ($1/m_{LH/HH} = \gamma_1 \pm 2\gamma_2$) in the quadratic magnetic term and an average of the HH and LH masses ($1/m_{av} = \gamma_1 - 4\gamma_2/\gamma_1$) in the linear terms. The corresponding Hamiltonian H_{ex} is shown in Table I. In these equations, F_z is the quantum number of the projection of the total angular momentum $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{J}$ onto the field axis; \mathbf{J} is the Bloch angular momentum ($J = 3/2$) and \mathbf{L} is the envelope angular momentum. For sake of comparison, we also employ H_L (Ref. 45) (Table 3 of Ref. 46). Equation (1) and the set of equations considered for the hole states have been solved numerically, using the finite-difference method on the two-dimensional grid (ρ, z) in cylindrical coordinates. The discretization of the differential equations yields eigenvalue problems of asymmetric huge and sparse matrices, which have been solved by the iterative Arnoldi solver⁴⁷ implemented in the ARPACK package.⁴⁸

The electron wave function, in cylindrical coordinates, is

$$\Psi_{F_z}^e = f_{m_z}^e(\rho, z) e^{im_z\phi} |S\sigma\rangle, \quad (3)$$

where $f_{m_z}^e(\rho, z)$ is the eigenvector of Eq. (1) and $|S\sigma\rangle = |S\rangle|\sigma\rangle$ is the Bloch function for electrons, with $\sigma = \alpha$ or β .

The hole wave function reads

$$\Psi_{F_z}^h = \sum_{M_z = F_z - 3/2}^{F_z + 3/2} f_{M_z}^h(\rho, z) e^{iM_z\phi} |3/2, J_z\rangle \delta_{J_z(F_z - M_z)}, \quad (4)$$

where $f_{M_z}^h(\rho, z)$ are the components of the four-band Hamiltonian eigenfunction and $|3/2, J_z\rangle$ are the Bloch functions for holes.

Optical transition rates between the conduction- and valence-band states are calculated without including exciton effects.⁴⁹ The optical transition matrix element, if we consider unpolarized light (i.e., we add all three x, y, z components of the transition moment) and transitions to both $|S\alpha\rangle$ and $|S\beta\rangle$ states, is just⁵¹

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_{F_z}^e | \mathbf{p} | \Psi_{F_z}^h \rangle|^2 &= \left| \sum_{M_z} f_{m_z}^e f_{M_z}^h \rho d\rho dz P \right|^2 \delta_{m_z M_z} \\ &= S_{eh}^2 P^2 \delta_{m_z M_z}, \end{aligned} \quad (5)$$

where S_{eh}^2 is the electron-hole overlap and P is the Kane parameter, $P^2 = |\langle S | p_x | X \rangle|^2$. Note that the selection rule $\delta_{m_z M_z}$ selects, if any, only one of the four components of the hole function. In order to obtain a smooth absorption spectrum, we replace $\delta_{m_z M_z}$ in Eq. (5) with a Lorentzian function of energy E , i.e.,

$$|\langle \Psi_{F_z}^e | \mathbf{p} | \Psi_{F_z}^h \rangle|^2 = S_{eh}^2 P^2 \frac{1}{1 + 4 \frac{E - E_{eh}}{\Gamma^2}}, \quad (6)$$

where E_{eh} is the e - h pair energy, $E_{eh} = E_{n', m_z} + E_g + E_{n, F_z = m_z + J_z}$ and Γ is the transition half-width.

TABLE I. Four-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ EFA valence Hamiltonian in cylindrical coordinates.

$\frac{(\gamma_2+\gamma_1)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{(F_z-1.5)^2}{\rho^2}\right]$	$\sqrt{3}\gamma_3\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial z}+\frac{F_z-0.5}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}\right]$	$-\sqrt{3}\frac{\gamma_2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2F_z}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right]$	0
$+\frac{(\gamma_1-2\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{B^2\rho^2}{4}\right]$		$+\frac{F_z(F_z-1)-0.75}{\rho^2}$	
$-\left(\gamma_1-\frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}\right)\frac{(F_z-1)B}{2}+V(\rho,z)$			
$\sqrt{3}\gamma_3\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial z}-\frac{F_z-1.5}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}\right]$	$\frac{(\gamma_1-\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{(F_z-0.5)^2}{\rho^2}\right]$	0	$-\sqrt{3}\frac{\gamma_2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2(F_z+1)}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right]$
	$+\frac{(\gamma_1+2\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{B^2\rho^2}{4}\right]$		$+\frac{F_z(F_z+1)-0.75}{\rho^2}$
	$-\left(\gamma_1-\frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}\right)\frac{(F_z-1/3)B}{2}+V(\rho,z)$		
$-\sqrt{3}\frac{\gamma_2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}-\frac{2(F_z-1)}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right]$	0	$\frac{(\gamma_1-\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{(F_z+0.5)^2}{\rho^2}\right]$	$-\sqrt{3}\gamma_3\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial z}+\frac{F_z+1.5}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}\right]$
$+\frac{F_z(F_z-1)-0.75}{\rho^2}$		$+\frac{(\gamma_1+2\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{B^2\rho^2}{4}\right]$	
		$-\left(\gamma_1-\frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}\right)\frac{(F_z+1/3)B}{2}+V(\rho,z)$	
0	$-\sqrt{3}\frac{\gamma_2}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}-\frac{2F_z}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right]$	$-\sqrt{3}\gamma_3\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial z}-\frac{F_z+0.5}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}\right]$	$\frac{(\gamma_2+\gamma_1)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{(F_z+1.5)^2}{\rho^2}\right]$
	$+\frac{F_z(F_z+1)-0.75}{\rho^2}$		$+\frac{(\gamma_1-2\gamma_2)}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{B^2\rho^2}{4}\right]$
			$-\left(\gamma_1-\frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1}\right)\frac{(F_z+1)B}{2}+V(\rho,z)$

III. RESULTS

A. Absorption spectrum

Although the ring morphology has been confirmed by different microscopy techniques,¹ the question about a possible shape change after the quantum rings are covered to complete the necessary layer structure deserves to be assessed.² Far-infrared spectra have been thoroughly evaluated and they seem to support ringlike electronic properties.³ Recently, Petterson *et al.*¹¹ carried out NIR measurements of quantum rings in order to confirm the ringlike geometry. Comparison of neutral exciton energy structure of covered rings with that of lens-shaped quantum dots¹¹ was qualitatively consistent with the expected properties of a quantum ring (but it could still be argued that all their ring data corresponded to dots with smaller vertical dimension and larger lateral extent). We simulate their transmission spectrum in this section by calculating the e - h interband transitions of a quantum ring and a lens-shaped quantum dot.

The shape of the ring we investigate is a cut torus [see Figure 1(a)]. This geometry corresponds to that observed in

the atomic force micrograph of uncapped quantum rings.⁷ According to Ref. 11, an 80 nm outer diameter, a 30 nm inner diameter, and a 2 nm height have been used. We also investigate a lens-shaped quantum dot of 6 nm height and 20 nm diameter [see Figure 1(b)]. Both ring and lens are made of InGaAs embedded in a GaAs matrix. The electron band-edge effective mass employed, $m(E_{n,m_z=0})=0.05$ (Ref. 34), is close to the average effective masses predicted for InGaAs cut-torus shaped rings³³ and lens-shaped dots.⁵² The conduction-band offset is set to 0.77 eV, roughly 70% of the band-gap difference between pure InAs and GaAs.⁵³ For the valence band, the InGaAs Luttinger parameters are⁴¹ $\gamma_1=11.01$, $\gamma_2=4.18$, and $\gamma_3=4.84$. The corresponding valence-band offset is 0.38 eV, and splitoff Δ_{SO} , 0.36 eV. For simplicity, the electron and hole effective masses are considered homogeneous in the entire structure. Since the InAs energy band gap is 0.42 eV and that of GaAs 1.52 eV, a reasonable value of 0.86 eV is used for the InGaAs nanostructures studied.

Figure 2 shows the calculated absorption spectrum for the quantum ring (thick solid line) and the quantum lens (dotted

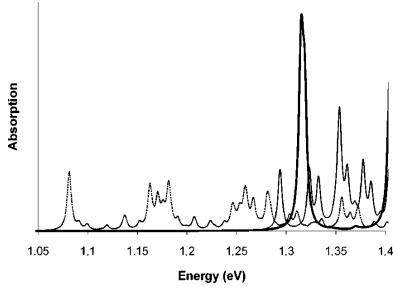


FIG. 2. Calculated absorption spectrum of an InGaAs quantum ring (thick solid line) and quantum lens (dotted line) with sizes same as those measured in Ref. 11, and absorption spectrum of a nearly flat InGaAs quantum lens (thin solid line).

line). A broadening parameter $\Gamma=5$ meV has been used to account for the size distribution in actual InGaAs self-assembled nanostructures.

For the quantum lens, the leftmost peak arises at 1.082 eV. This peak corresponds to the transition to the electron ground state ($n=1$, $m_z=0$) from the lowest dipole-allowed hole states (all the low-lying hole states with $F_z=-1.5, -0.5, 0.5, 1.5$). As the energy increases, we observe other groups of peaks nearly evenly spaced (the energy distance between two consecutive groups being about 90 meV). Each group includes transitions from holes to a given electron state. The different groups correspond to electron states with increasing values of $|m_z|$ but the same n , i.e., transitions to ($n=1$, $m_z=0$) appear at about 1.08 eV, ($n=1$, $|m_z|=1$) at about 1.17 eV, ($n=1$, $|m_z|=2$) at about 1.26 eV, etc. Transitions involving electron states with $n=2$ are usually weaker. Some of these transitions appear in the same energy region as the group of peaks corresponding to transitions to ($n=1$, $|m_z|=1$) electron states. For example, the transitions corresponding to the ($n=2$, $m_z=0$) electron state appear at about 1.24 eV.

In the case of the quantum ring, we only see a strong single peak at 1.314 eV. This peak originates from transitions involving the electron ground and the lowest azimuthal excited states ($n=1$, $m_z=0, \pm 1, \dots$). The first transition to the $n=2$ electron state appears at 1.406 eV. However, this peak cannot be detected in the experiment, due to the tunneling of carriers into the wetting layer produced by photons with energies beyond 1.4 eV.

The main features of our simulated spectrum agree very well with experiment (Fig. 2 of Ref. 11).

(i) In the experiment, the fundamental transition arises at 1.31 eV for rings, and slightly below 1.1 eV for lenses. This is consistent with our calculated values of 1.314 eV and 1.082 eV, respectively.

(ii) In the experiment, first excited transition for the lens is about twice as intense as the fundamental transition. In our calculations, the ratio between first excited and fundamental transitions intensity is 2.2 for the lens.

(iii) In the experiment, the oscillator strength corresponding to the fundamental transition of the rings is quite stronger

than that of the lens. We also predict this increment, although our estimated oscillator strength ratio of 4.5, a bit larger than the experimental value of 2.9, is close to other calculations on related systems.²⁸ A better fit would probably be achieved by including strain forces, e - h Coulomb interaction, or ring eccentricity effects, which have been proved to modify the wave function distribution.^{7,24,26}

An apparent discrepancy between our calculation and the experimental data for excited states of the ring comes across. However, we should point out that recent evidences^{7,12} strongly suggest that the high-energy peaks of the experimental ring spectrum do not really belong to excited-state transitions of the ring, but to the ground-state transitions of a *second type* of ring. This is most likely due to a bimodal distribution in the vertical confinement of the grown rings.⁵⁴

In Fig. 2 we also present the calculated absorption spectrum for a lens-shaped quantum dot (thin solid line) with the same outer diameter and height as the quantum ring, namely, 2 nm height and 80.0 nm diameter. The results reveal that the oscillator strength of the fundamental transition of this lens would be far less intense than the peak which is observed in the experiment. Therefore, our model supports a ringlike morphology, discarding a simple oblate lens, as the one giving rise to the experimental data in the near infrared.

It is worth mentioning that our model, in contrast to the one used in Ref. 30, does not need to arbitrarily fit confinement ω parameter, or make assumptions on the ratio of contributions from the HH and LH states in order to correctly describe the ring energy structure. It should be additionally stressed that the parameter fitting carried out in Ref. 30 assumed that the rightmost peaks of the ring spectrum originate from transitions to excited states, an assignment no longer believed.^{7,12}

B. Magnetophotoluminescence spectrum

The switch on of a magnetic field perpendicular to the growth plane of the quantum rings is of special interest because the diamagnetic properties of e - h pairs confined in such a topology are expected to lead to Aharonov-Bohm (AB) effects. However, there is still some uncertainty on the possibility of observing these AB phenomena in quantum ring excitons.^{10,15-17,25,29} Recently, Haft *et al.*¹² measured the photoluminescence emission of quantum ring neutral excitons as a function of the applied magnetic field. We simulate this experimental spectrum using the same ring parameters as in the previous calculations. The Landé factor we employ is the estimated average for the lowest state of a cut torus, with sizes similar to that we investigate,⁵⁵ when no magnetic field is applied, $g = -3.94$.³³ Such a value of the Landé factor yields very small Zeeman spin splitting. Then, we do not need further refinements on the Landé factor description to qualitatively reproduce experimental data. For the valence-band hole states calculations, we use the above-mentioned Hamiltonians H_{ex} (Table I) and H_L (Table 3 of Ref. 46). The resulting e - h pair energies are shown in Figs. 3(a) and 3(b), respectively. It comes from Fig. 3 that H_{ex} describes the experiment (Fig. 1 of Ref. 12) better than H_L . Thus, H_{ex} yields diamagnetic behavior for the e - h pair states in agree-

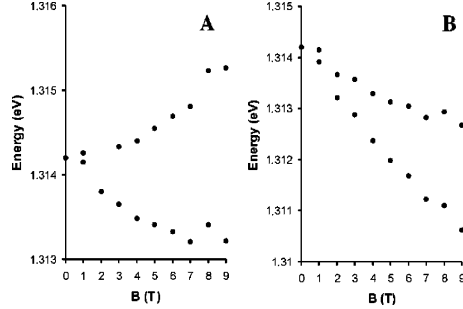


FIG. 3. Calculated photoluminescence (PL) emission spectra of a quantum ring vs a perpendicular magnetic field. (a) PL spectrum obtained with H_{ex} . (b) PL spectrum obtained with H_L .

ment with the experiment, which is not the case for H_L . The latter Hamiltonian predicts a strong stabilization of the lowest-lying hole states with increasing values of the magnetic field. This is reflected in the calculated photoluminescence (PL) emission as a peak redshift, which is not observed in the experiment. In contrast, H_{ex} yields a small blue shift for the PL peak, in fairly good agreement with the experiment.¹² As a matter of fact, the measured experimental PL peak exhibits a slightly stronger diamagnetic shift than the calculated one,⁵⁶ shown in Fig. 3(a). The inclusion of e - h Coulomb interaction and other minor effects might account for this discrepancy. Nevertheless, it should be stressed that this difference in diamagnetic shifts is just several $\mu\text{eV}/\text{T}^2$. Therefore, no matter what the number of refinements we would introduce in our theoretical model, the actual inaccuracy on the experimental determination of nanostructures sizes and shapes is the accuracy limiting factor of the results.

C. Optical Aharonov-Bohm effect

Figure 3 encloses the calculated ring PL energy transitions versus magnetic field given by both H_{ex} and H_L Hamiltonians. In both cases, the slope of the calculated PL energy transitions is almost constant with the field, so that no clear evidence of AB oscillations in the PL spectrum is predicted. This is in agreement with previous theoretical studies, which also predict negligible AB effect amplitudes for the actual nanorings radii and fields.^{16,25,29} However, an optical consequence of the AB oscillations has been recently pointed out.²¹⁻²³ The “optical” AB effect holds when the magnetic field induces successive symmetry changes in the electron and hole ground states. In general, these symmetry changes occur at a different rate for electron and hole states, due to their distinct masses and lateral separation, so that certain values of the magnetic field may lead to ground-state excitons not fulfilling the interband selection rules. This would turn into a suppression of the PL emission in certain magnetic-field windows. Unlike other AB phenomena, the optical AB effect is expected to be detectable with single-dot PL spectroscopy. The theoretical model used so far to justify

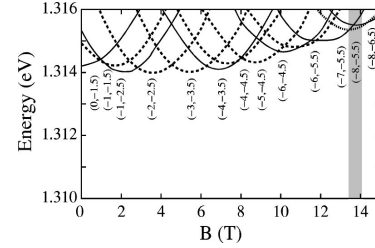


FIG. 4. Energy spectrum of the lowest-lying e - h pairs vs magnetic field. Only the states which become fundamental for some value of the field are represented. The states are labeled by (m_z, F_z) . Solid lines correspond to states involving heavy hole components of the hole function. Dashed lines correspond to transitions involving light hole components. The dotted line corresponds to a “dark” ground state. The magnetic-field interval for which this one is the ground state is grey shaded.

the optical AB effect is a quasi-one-dimensional model with one-band approximation for the hole states.²¹⁻²³ The quasi-one-dimensional model cannot account for the electron and hole wave functions compression in ρ with increasing magnetic field,⁵¹ which we have checked to be significant for InGaAs nanorings. Moreover, the one-band approximation for the hole states misses some of the allowed channels for dipole transitions. Therefore, we employ here a more realistic model that takes into account both ring thickness and HH-LH coupling.

We investigate the optical AB effect in a ring of the same size and defining parameters as used in the preceding sections. The electron states are calculated by means of Eq. (1) and the hole states are calculated using H_{ex} . The electron spin splitting would equally affect all the low-lying energy levels, leaving results qualitatively unaltered. Thus, the electron spin-splitting term is dropped in these calculations. Figure 4 shows the lowest-lying e - h -pair energy-levels versus the applied magnetic field. The symmetry of the states is represented by (m_z, F_z) , where m_z is the azimuthal quantum number of the electron state and F_z is the z projection of the total angular momentum F of the hole. In the figure, a clear aperiodicity in the ground-state angular momenta sequence, for increasing values of the field, can be seen. For magnetic-field values below 0.9 T, the ground-state symmetry is $(0, -1.5)$. This symmetry changes into $(-1, -1.5)$ between 0.9 T and 1.5 T and then keeps on changing at irregular intervals as the magnetic field increases. We illustrate this ground-state symmetry change in Fig. 5(a), where the electron (upper part) and hole (lower part) lowest-lying energy levels are depicted for magnetic field values up to 9 T. The mass of holes, heavier than the mass of electrons, leads to magnetic-field windows, for a given ground-state symmetry, wider than those of electrons. We have also carried out calculations using H_L . They show almost no width difference between the windows of electron and hole ground states [see Fig. 5(b)]. The underlying reason is that H_L leads to anticrossings for the hole states which provide LH character to the hole

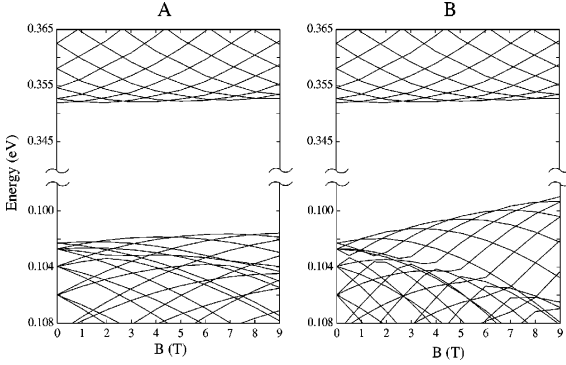


FIG. 5. Electron (upper part) and hole (lower part) energy structure vs magnetic field. H_{ex} (H_L) is used for holes in part (a) (b). The energy scale is referred to the bottom of the conduction band (electron) and to the top of the valence band (hole).

ground states (the mass of an InGaAs LH is 0.052, very close to the electron mass, 0.05). Conversely, H_{ex} does not yield such anticrossings and the hole ground states mainly show HH character in this case. As a consequence, Fig. 5(a) shows significant width differences between the electron and hole magnetic-field windows for a given ground-state symmetry. In what follows, we will only consider H_{ex} since it better describes the PL spectrum. The ground state in Fig. 4 occasionally involves LH components of the hole wave function (dashed lines). A simple one-band model with HH mass cannot account for these states. The suitability of a multiband Hamiltonian, which includes the HH-LH coupling, is hence confirmed.

All the e - h pairs follow, up to 9 T, the δ_{m_z, M_z} selection rule, as can be seen in Fig. 4. This is in agreement with the experiment,¹² where no magnetic-field induced quenching of the PL was detected for the same ring radii and fields as those we study here. Additionally, we explored the e - h pair ground-state symmetry for higher values of the magnetic field, looking for a trace of the optical AB effect. Our calculations reveal a dipole-forbidden (dark) e - h pair ground state, $(-8, -5.5)$, in the vicinity of 14 T (dotted line in Fig. 4). Notice that the magnetic-field window of this “dark” state is quite narrow (about 0.8 T) and that its energy difference with the first excited states is lower than 1 meV. The inclusion of further refinements in the theoretical model may imply a rearrangement of the energy levels and this rearrangement might, in turn, remove the dark ground state. However, the major effects we have not considered in our model are the Coulomb interaction and the strain and piezoelectric potentials. The Coulomb interaction has been theoretically proved to reduce the e - h separation.²⁵ In principle, this effect could shift the predicted dark ground state towards higher magnetic-field values. On the contrary, the strain and piezoelectric potentials can drastically increase the e - h vertical and lateral separation in a quantum ring.^{7,13} This lateral separation would be larger than the one we estimate (barely 0.5 nm for the ground state at $B=0$ T), leading to an enhancement of the e - h symmetry change rate difference. The compensation between the Coulomb interaction and strain/piezoelectrical potentials could be partly responsible for the accuracy and reliability of our calculations, as can be seen in

the PL of Fig. 3. On the other hand, the proximity between the predicted “dark” ground state and “bright” (dipole-allowed) state energies may conceal the optical AB effect due to phonon-induced energy levels coupling. However, at the temperature of experimental quantum ring PL measurements ($T=4.2$ K), these phonon-induced phenomena should not be important. We then expect that the optical AB effect could be detected in InGaAs quantum rings for relatively low magnetic fields.

IV. CONCLUDING REMARKS

We calculated near-infrared spectra of an InGaAs nanoring, modeled as a cut torus, by using the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method with rectangular band-offset potentials in three dimensions. For the electron states, the one-band effective mass model with energy-dependent mass and, for the hole states, a four-band Hamiltonian was employed.

We provided theoretical understanding to a number of quantum rings NIR experimental observations. First, the absorption spectrum of the quantum ring was calculated in absence of magnetic field. Two different lens-shaped quantum dots spectra were also included for comparison. Our results show excellent agreement with a recent experiment carried out by Petterson *et al.*¹¹ We confirm that the intense peaks they observed at high photon energies cannot be assigned to a flat quantum dot, giving then support to ringlike geometry. Second, the PL emission spectrum of the quantum ring versus perpendicular magnetic field was calculated. We compared two different ways of including the magnetic-field term in the valence-band Hamiltonian: the traditional one, reported by Luttinger^{34,45} and our recent proposal.⁴⁶ We found that the latter gives better agreement with the experiment.¹² We investigated the optical AB effect²¹⁻²³ in the quantum ring. No trace of this effect was detected for magnetic-field values up to 9 T, which is in agreement with a recent experimental PL spectrum.¹² Finally, our model predicts that the optical AB effect may be seen for currently realizable quantum rings and moderate magnetic-field strengths.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank R. J. Warburton for helpful comments. Financial support from Generalitat Valenciana Grant No. CTIDIB-

2002/189, UJI-Bancaixa Grant No. P1-B2002-01 and KBN-8T11B06218 are gratefully acknowledged. The Spanish MEC FPU grant is also acknowledged by J.I.C.

- *Electronic address: planelle@exp.uji.es
- ¹J.M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J.L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P.M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- ²A. Lorke and R.J. Luyken, *Physica B* **256-258**, 424 (1998).
- ³A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, and P.M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- ⁴R.J. Warburton, C. Schaflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Nature (London)* **405**, 926 (2000).
- ⁵R.J. Warburton, C. Schaflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **9**, 124 (2001).
- ⁶A. Lorke, R.J. Luyken, J.M. Garcia, and P.M. Petroff, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1* **40**, 1857 (2001).
- ⁷R.J. Warburton, B. Urbaszek, E.J. McGhee, C. Schulhauser, A. Hogege, K. Karrai, A.O. Govorov, J.A. Barker, B.D. Gerardot, P.M. Petroff, and J.M. Garcia, in *Physics of Semiconductors 2002*, edited by J.H. Davies and A.R. Long (Institute of Physics Conference Series, Edinburgh, 2003).
- ⁸A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, and A. Lorke, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- ⁹H. Hu, J.L. Zhu, and J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **62**, 16 777 (2000).
- ¹⁰J.B. Xia and S.S. Li, *Phys. Rev. B* **66**, 035311 (2002).
- ¹¹H. Pettersson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **6**, 510 (2000).
- ¹²D. Haft, C. Schulhauser, A.O. Govorov, R.J. Warburton, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 165 (2002).
- ¹³C. Schulhauser, D. Haft, C. Schaflein, K. Karrai, R.J. Warburton, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 161 (2002).
- ¹⁴R. Blossy, and A. Lorke, *Phys. Rev. E* **65**, 021603 (2002).
- ¹⁵A.V. Chaplik, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **62**, 885 (1995) [*JETP Lett.* **62**, 900 (1995)].
- ¹⁶R.A. Romer, and M.E. Raikh, *Phys. Rev. B* **62**, 7045 (2000).
- ¹⁷M. Korkusinski, P. Hawrylak, and M. Bayer, *Phys. Status Solidi B* **234**, 273 (2002).
- ¹⁸V. Halonen, P. Pietilainen, and T. Chakraborty, *Europhys. Lett.* **33**, 377 (1996).
- ¹⁹H. Hu, D.J. Li, J.L. Zhu, and J.J. Xiong, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 9145 (2000).
- ²⁰Z. Barticevic, M. Pacheco, and A. Latge, *Phys. Rev. B* **62**, 6963 (2000).
- ²¹A.O. Govorov, A.V. Kalameitsev, R.J. Warburton, K. Karrai, and S.E. Ulloa, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 297 (2002).
- ²²S.E. Ulloa, A.O. Govorov, A.V. Kalameitsev, R.J. Warburton, and K. Karrai, *Physica E (Amsterdam)* **12**, 790 (2002).
- ²³A.O. Govorov, S.E. Ulloa, K. Karrai, and R.J. Warburton, *Phys. Rev. B* **66**, 081309(R) (2002).
- ²⁴I. Galbraith, F.J. Braid, and R.J. Warburton, *Phys. Status Solidi A* **190**, 781 (2002).
- ²⁵J. Song and S.E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 125302 (2001).
- ²⁶L.A. Lavenere-Wanderley, A. Bruno-Alfonso, and A. Latge, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 259 (2002).
- ²⁷J.M. Llorens, C. Trallero-Giner, A. Garcia-Cristobal, and A. Cantarero, *Phys. Rev. B* **64**, 035309 (2001).
- ²⁸B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 73 (2002).
- ²⁹H. Hu, J.L. Zhu, D.J. Li, and J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001).
- ³⁰H. Hu, G.M. Zhang, J.L. Zhu, and J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **63**, 045320 (2001).
- ³¹S.S. Li and J.B. Xia, *J. Appl. Phys.* **89**, 3434 (2001).
- ³²S.S. Li and J.B. Xia, *J. Appl. Phys.* **91**, 3227 (2002).
- ³³O. Voskoboinikov, Y. Li, H.M. Lu, C.F. Shih, and C.P. Lee, *Phys. Rev. B* **66**, 155306 (2002).
- ³⁴J. Planelles, W. Jaskolski, and J.I. Aliaga, *Phys. Rev. B* **65**, 033306 (2002).
- ³⁵D. Bimberg, M. Grundmann, and N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures* (Wiley, Chichester, 1998).
- ³⁶G. Yusa and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 345 (1997).
- ³⁷J.J. Finley *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2618 (1998).
- ³⁸T. Lundstrom, W. Schoenfeld, H. Lee, and P.M. Petroff, *Science* **286**, 2312 (1999).
- ³⁹M. Bruchez, M. Moronne, P. Gin, S. Weiss, and A.P. Alivisatos, *Science* **281**, 2013 (1998).
- ⁴⁰G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Les Ulis, 1990).
- ⁴¹I. Vurgaftman, J.R. Meyer, and L.R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001) and references therein.
- ⁴²S.S. Li, J.B. Xia, Z.L. Yuan, Z.Y. Xu, W. Ge, X.R. Wang, Y. Wang, J. Wang, and L.L. Chang, *Phys. Rev. B* **54**, 11 575 (1996).
- ⁴³J.B. Xia, *Phys. Rev. B* **40**, 8500 (1989).
- ⁴⁴A. Baldereschi and N.O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- ⁴⁵J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956); M. Pacheco and Z. Barticevic, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 1079 (1999).
- ⁴⁶J. Planelles and W. Jaskolski, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, L67 (2003).
- ⁴⁷W.E. Arnoldi, *Q. J. Mech. Appl. Math.* **9**, 17 (1951); Y. Saad, *Numerical Methods for large Scale Eigenvalue Problems* (Halsted Press, New York, 1992); R.B. Morgan, *Math. Comput.* **65**, 1213 (1996).
- ⁴⁸R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, P.A. Vu, and C. Yang, *ARPACK: Fortran subroutines for solving large scale eigenvalue problems*, Release 2.1 (Rice University, Houston, 1995); R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, and C. Yang, *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicit Restarted Arnoldi Methods* (SIAM, Philadelphia, 1998).
- ⁴⁹The role of the Coulomb interaction in a quantum ring has been extensively investigated.^{18,24,25} Its main effect on the lowest energy levels is a parallel shift.¹⁸ A simple perturbation theory treatment of Coulomb interaction can successfully account for experimental data even in rings of the size we study.⁴ Moreover, in InGaAs self-assembled quantum dots spectra, the effects of such a Coulomb interaction are blurred by inhomogeneous

broadening⁵⁰ and we can qualitatively describe the ring spectra without taking exciton effects into account.

⁵⁰M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, and A. Forchel, *Nature (London)* **405**, 923 (2000).

⁵¹J. Climente, J. Planelles, W. Jaskolski, and J.I. Aliaga, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 3593 (2003).

⁵²B. Szafran, S. Bednarek, and J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **64**, 125301 (2001).

⁵³P.D. Wang, N.N. Ledentsov, C.M. Sotomayor Torres, P.S. Kop'ev, and V.M. Ustinov, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1526 (1994).

⁵⁴H. Petterson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, and P.M. Petroff (private communication).

⁵⁵The Landé factor depends only weakly on the ring parameters, and is similar for the lowest electron states in quantum rings of the size and shape we study.

⁵⁶The better agreement of the upper branch with the experimental trends than that of the lower one might suggest that the quadratic magnetic term contribution to the energy given by our model is slightly underestimated.

Magnetization of nanoscopic quantum rings and dots

J. I. Climente, J. Planelles,* and J. L. Movilla

Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

(Received 21 May 2004; published 10 August 2004)

The magnetization of one- and two-electron quantum dots and a series of quantum rings with increasingly larger inner radii is calculated using a three-dimensional model with realistic finite confining potential, including strain and Coulomb effects. A change in topology leads to a sharp response in the calculated magnetization. The magnetization is also extremely sensitive to changes in the length of the inner radius of the ring. These results suggest the use of magnetization as a tool, complementary to far-infrared spectroscopy, for probing the topology of nanocrystals. Our calculations also reveal that atomic Zeeman splitting and, more especially, electron-electron interaction induce significant changes in the magnetic moment of a quantum ring of nanoscopic size.

DOI: 10.1103/PhysRevB.70.081301

PACS number(s): 73.21.-b, 75.75.+a, 71.70.Ej

Magnetization measurements provide direct access to the quantum electronic structure of semiconductor nanocrystals, often outperforming transport or far-infrared absorption experiments.^{1,2} For example, in few-electron parabolic quantum dots the generalized Kohn theorem prevents dipole-allowed transitions from revealing many-body effects.³ In contrast, magnetization studies have been useful to observe some of these effects, such as the spin-singlet-spin-triplet transitions of the ground state.⁴ In mesoscopic quantum rings, magnetization has also been used to investigate the electronic properties of these nonsimply connected quantum systems.^{5,6}

Recently, self-assembled InAs/GaAs rings, which are in the nano-scale, have been synthesized.⁷ These nanocrystals have been imaged by atomic force microscopy,⁸ but the question of whether they preserve the ring-like topology after being covered with GaAs or not is difficult to assess. Far-infrared experiments of one- and two-electron nanoscopic rings in a magnetic field have been carried out in order to clarify this issue.^{9,10} Although the results seem to agree well with theoretical predictions for ring structures,⁹⁻¹¹ the low resolution of the reported absorption spectra makes any complementary confirmation highly desirable. Very recently it has been reported that magnetization can be used as a tool for probing the reduction of symmetry in quantum dots.¹²⁻¹⁴ In this work we show that magnetization also reveals the topology of a nanocrystal.

The predicted response of nanoscopic rings to homogeneous magnetic fields seems to be different to that of mesoscopic rings,¹⁵ then the effect of electron-electron interactions may also be different. In the case of mesoscopic few-electron rings where only the lowest Landau level is populated, electron-electron interactions do not play a significant role in magnetization.⁶ Since, to our knowledge, the only theoretical study on the magnetization of few-electron nanoscopic rings that has been performed so far only considers independent particles,¹⁶ we include in this note the study of the magnetization of two-electron rings and dots with and without Coulomb interactions in order to assess the role of electron-electron interaction in nanoscopic sized rings.

The model we use is that in Ref. 11. The one-band effective mass Hamiltonian for the electron states, including a

magnetic field perpendicular to the ring plane, can be written in atomic units as

$$\mathcal{H}_e = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \left(\frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \nabla^2 \right) + \frac{(B\rho)^2}{8m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{Bm}{2m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{1}{2} \mu_B g(E_{n,m}; \rho, z) B \sigma + V_c(\rho, z) + a_c \varepsilon_{hyd}(\rho, z) \right), \quad (1)$$

where $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number of the projection of the angular momentum onto the magnetic field (B) axis, n is the main quantum number, $V_c(\rho, z)$ is the finite confinement potential corresponding to the geometries shown in the insets of Fig. 1, and $m^*(E_{n,m}; \rho, z)$ and $g(E_{n,m}; \rho, z)$ stand for the energy- and position-dependent mass and Landé factor, respectively.¹⁶ a_c denotes the hydrostatic deformation potential for the conduction band, and ε_{hyd} is the hydrostatic strain, which we calculate within the framework of the isotropic elastic theory.^{17,18} It should be underlined that V_c must be a step-like, finite confinement potential in order to achieve a realistic description of the effect of the inner hole and the magnetic field penetration into the ring region.^{15,19} Finally, since exchange and correlation effects are known to have a strong influence on the magnetization of quantum dots with interacting electrons,^{4,20} a configuration interaction procedure is used to calculate the two-electron eigenstates and eigenenergies. The two-electron states can be labeled by the z projection of the total angular momentum $M=m_1+m_2$, total spin $S=\sigma_1+\sigma_2$, and main quantum number N .¹¹ The total magnetization of the nanocrystals at zero temperature is defined by

$$M = -\frac{\partial E_{tot}}{\partial B}, \quad (2)$$

where E_{tot} is the total energy for a given N -electron system.

We investigate self-assembled InAs quantum dots and rings embedded in a GaAs matrix. The dot is lens-shaped and the shape of the rings is a cut torus. The cross sections of

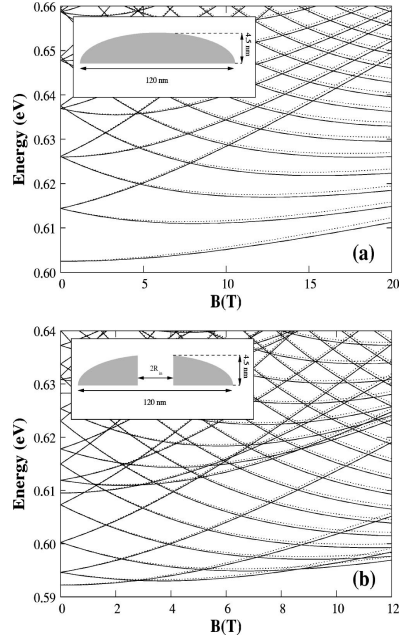


FIG. 1. Energy levels vs magnetic field of one electron in a quantum dot (a) and in a quantum ring with $R_{in}=5$ nm (b). Solid lines denote spin α levels, and dotted lines spin β levels. The insets show the cross section of the investigated dot (upper panel) and ring (lower panel).

the dot and rings can be seen in the insets of Figs. 1(a) and 1(b), respectively. Following recent measurements,⁸ we take the height at the inner edge of the cross section of the rings to be 4.5 nm and then we let it decrease as a spherical caplet. The outer radius of the rings is fixed at the approximate experimental value of 60 nm and the inner radius (R_{in}) is varied from 0 to 10 nm. The same material parameters as in Ref. 11 are used here. We have assumed the InAs/GaAs band-offset, $V_c(\text{matrix})=0.77$ eV, to be the confinement potential. Such a potential has successfully described the experimental far-infrared resonances of InAs rings.¹¹ However, its finite magnitude allows some electron density charge to spread over the inner hole of the ring, so that introducing an inner hole does not actually change the topology of the electronic density distribution from a simple to a twofold connected one. Instead, it produces a rather gradual transition. Assuming higher confinement barriers would lead to a further enhanced quantum ring-like electronic structure,²¹ but again it is worthwhile noting that our conclusions are obtained for a realistic, finite, value of the confinement potential. Equation (1) is integrated numerically by employing finite differences in a two-dimensional grid (ρ, z) . The

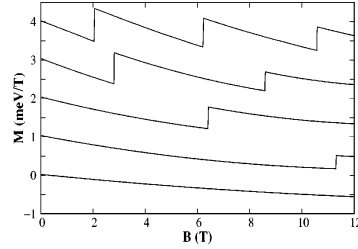


FIG. 2. Magnetization of one-electron nanocrystals with increasing inner radius. From bottom to top the curves correspond to $R_{in}=0$ nm, $R_{in}=1$ nm, $R_{in}=2$ nm, $R_{in}=5$ nm and $R_{in}=10$ nm. The curves are offset by 1.0 meV/T.

configuration interaction calculations include all the single-particle states up to 35 meV away from the ground state for the ring structures and up to 50 meV for the quantum dot. We have checked that the use of larger basis sets does not significantly change the low-lying two-electron states within the range of the magnetic field that is studied.

Figure 1 shows the electronic structure vs a magnetic field for nanocrystals with $R_{in}=0$ (a), and $R_{in}=5$ nm (b). Solid lines are used for spin up and dotted lines for spin down levels. It can be seen that the changes induced by the presence of the inner hole of the ring in the mono-electronic energy structure are dramatic. It significantly reduces the energy spacing between consecutive azimuthal levels ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) at $B=0$. As a result, changes in the z component of the ground state angular momentum, from $m=0$ to $m=-1$ and from $m=-1$ to $m=-2$, take place at 2.8 and 8.6 T, respectively, while the quantum dot ground state is $m=0$ over the whole range under study, 0–20 T. Indeed, these angular momentum changes in the ground state never occur in the one-electron dot, where the low-lying levels converge to the first Landau level without crossings.³ Although differences between quantum dot and ring energy structure were expected from the topological change of the potential, their magnitude is worth highlighting. Typical InAs self-assembled rings have an inner radius ranging between 10 and 15 nm.^{8,9} Therefore, the evolution of their energy levels with a magnetic field will show a behavior that is clearly different to that of a quantum dot. This can be seen in Fig. 2, where the magnetization curves of a quantum dot and quantum rings with increasingly larger inner radii are depicted. The magnetization curves are offset by 1.0 meV/T for clarity. In the quantum dot limit ($R_{in}=0$), magnetization is smooth over the entire range of studied magnetic fields. However, an inner radius as small as $R_{in}=1$ nm already leads to a discontinuity (or step) at 11.3 T. Such a step is related to the change in ground state angular momentum in the quantum ring, as described above. By increasing the inner radius, the step shifts toward weaker magnetic fields and becomes sharper. This is because the slope of the energy levels in a magnetic field gets steeper as the ring becomes narrower.¹⁶ An inner radius of $R_{in}=5$ nm already yields two steps that can be seen at 2.8 and 8.6 T. These steps correspond to the

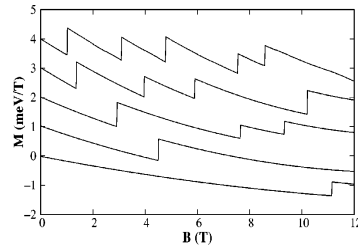


FIG. 3. Magnetization of two-electron nanocrystals with increasing inner radius. From bottom to top the curves correspond to $R_{in}=0$ nm, $R_{in}=1$ nm, $R_{in}=2$ nm, $R_{in}=5$ nm and $R_{in}=10$ nm. The curves are offset by 1.0 meV/T.

level crossings in the ground state shown in Fig. 1(b). An inner radius of $R_{in}=10$ nm yields three steps at about 2, 6.2, and 10.6 T. It should be noted that the magnetization curves are not periodic. This is due to the penetration of the magnetic field into the ring region.^{5,13} Finally, by increasing the magnetic field the additionally arising steps gradually become flatter due to the smaller changes in slope at the crossing points (see Fig. 1(b)). It can be concluded from Fig. 2 that the magnetization of a one-electron quantum dot is markedly different to that of any quantum ring. These differences can be traced at relatively low magnetic fields, even for inner holes as small as $R_{in}=1$ nm.

In quantum dots, electron-electron interaction pushes the magnetization steps toward lower values of the magnetic field.²⁰ Hence, we calculate the magnetization of a two-

electron dot and rings with various inner radii to investigate whether it is possible to distinguish them by means of fields that are even weaker than in the one-electron case. The corresponding results are plotted in Fig. 3, the curves being offset by 1.0 meV/T. A major difference with respect to one-electron magnetization can be found in the magnetization curve of the quantum dot: whereas in Fig. 2 no step was present in the $R_{in}=0$ curve, in Fig. 3 a step shows up at 11.15 T. The origin of this new step is the spin-singlet-spin-triplet transition that the exchange energy induces in the ground state of two-electron dots.²² Such spin oscillations are also present in the ground state of two-electron quantum rings,¹¹ and thus a step can be also seen in the $R_{in}=1$ nm curve, but at a magnetic field that is much lower than that of the dot. Further steps appear when the size of the inner hole increases. In general, the steps of the two-electron quantum ring magnetization show up at weaker fields than in the one-electron case. This is mostly due to the exchange interaction. Our results highlight the fact that low-field magnetization measurements unambiguously reveal the topology of covered InAs/GaAs nanocrystals with one or two electrons. It should be stressed that ring morphology is evidenced by the presence and the position of the magnetization steps. This probe can be complemented with estimates of the circular symmetry also performed using magnetization data, since asymmetry leads to variations in the size of the steps, rather than in their positions.^{12,13}

In order to study the influence of Coulomb interaction on the magnetization of nanoscopic rings, in Fig. 4 we illustrate the magnetization curves of a one- and two-electron quantum ring with $R_{in}=5$ nm, and those of the one- and two-electron quantum dots, which are shown for comparison. Figures 4(a) and 4(b) show the magnetization of the one-electron dot and

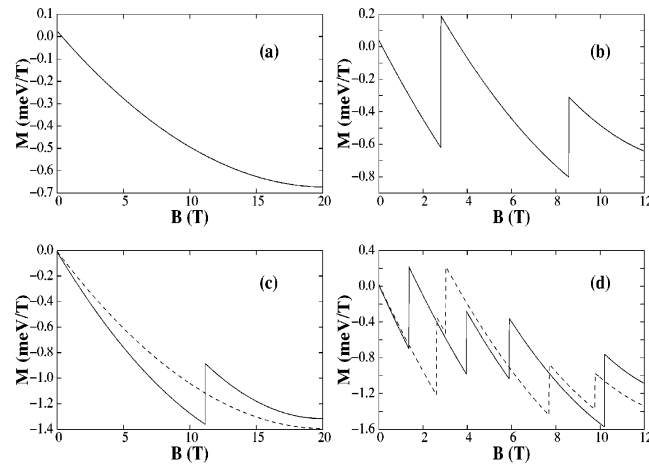


FIG. 4. Magnetization of a one-electron quantum dot (a), a one-electron quantum ring with $R_{in}=5$ nm (b), a two-electron quantum dot (c) and a two-electron quantum ring with $R_{in}=5$ nm (d). In (c) and (d), solid lines represent interacting electrons and dashed lines non-interacting electrons.

ring, and Figs. 4(c) and 4(d) and show the magnetization of the two-electron dot and ring, respectively. In Figs 4(c) and 4(d), solid lines are used for interacting electrons and dashed lines for non-interacting electrons. The two-electron magnetization without Coulomb interaction can be constructed from the single-particle levels of Fig. 1 assuming single occupancy of the two lowest one-electron spin-orbitals (which are not degenerated exactly due to Zeeman splitting) at each value of the magnetic field. Therefore, for the quantum dot the magnetization of non-interacting electrons is the same as that of the one-electron case but about twice as big in magnitude. Only when Coulomb interaction is included a step can be found in the magnetization curve. This originates from the possibility of spin oscillations, which is in turn induced by the electron-electron interaction. Moreover, it can be seen that the electron-electron interaction increases the magnitude of magnetization in the field region $B < 11$ T. The underlying reason is that the repulsive Coulomb interaction makes the ground state of interacting electrons be more extended than that of non-interacting ones.²⁰ For the quantum ring, the two-electron magnetization is clearly different than that of the one-electron case even in the absence of Coulomb interaction. This can be explained in terms of the contribution of the atomic Zeeman term to the one-electron energy structure. In the absence of an atomic Zeeman term, $\sigma = \alpha$ and $\sigma = \beta$ states in Fig. 1(b) would be degenerate and the magnetization of the non-interacting electrons should be similar to that of the one-electron case but with sharper steps. However, the atomic Zeeman term lifts the degeneracy of $\sigma = \alpha$ and $\sigma = \beta$ states at $B \neq 0$. This originates short magnetic field domains where the two-electron ground state is a triplet (around 2 and 8 T in Fig.1(b)), and such triplet ground states

give rise to the additional magnetization steps which do not appear in the one-electron case. Moreover, the triplet states domains' grow wider as the magnetic field increases because of its larger Zeeman contribution to the energy. On the other hand, when the Coulomb interaction is considered very important changes take place in the quantum ring magnetization: the position of the steps is very different than that of the non-interacting picture due to variations in the electron inter-level spacing and to exchange interactions, which in turn favor the triplet ground state configuration. The exchange interaction also accounts for the sharper steps coming from the triplet ground state. It is therefore concluded that both atomic Zeeman splitting, which is often neglected in InAs rings calculations (on the grounds that it makes a relatively small contribution to the energy),^{9,23} and the Coulomb interaction are essential for a realistic description of the magnetic properties of nanoscopic rings. The role of electron-electron interaction in few-electron nanoscopic rings is thus remarkably different to that predicted for mesoscopic rings using a two-dimensional model with parabolic-like confinement.⁶

In summary, we have studied the magnetization of one- and two-electron nanoscopic dots and rings with different inner radii. Magnetization is very sensitive to the presence and size of an inner hole. Thus, it can be used to probe the topology of a nanocrystal using relatively weak magnetic fields. We have also found that atomic Zeeman splitting and electron-electron interaction cannot be neglected in calculations of magnetic properties of few-electron nanoscopic rings.

Financial support from a MEC-FPU grant and UJI-Bancaixa project P1-B2002-01 are gratefully acknowledged.

*Electronic address: planelle@exp.uji.es

¹V. Gudmundsson, S. I. Erlingsson, and A. Manolescu, Phys. Rev. B **61**, 4835 (2000).

²T. H. Oosterkamp, S. F. Godijn, M. J. Uilenreef, Y. V. Nazarov, N. C. van der Vaart, and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. **80**, 4951 (1998); M. P. Schwarz, D. Grundler, M. Wilde, Ch. Heyn, and D. Heitmann, J. Appl. Phys. **91**, 6875 (2002).

³T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier Science, Amsterdam, 1999).

⁴P. A. Maksym and T. Chakraborty, Phys. Rev. B **45**, 1947 (1992).

⁵W.-C. Tan and J. C. Inkson, Phys. Rev. B **60**, 5626 (1999).

⁶T. Chakraborty and P. Pietiläinen, Phys. Rev. B **50**, 8460 (1994).

⁷J. M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. **71**, 2014 (1997).

⁸J. A. Barker, R. J. Warburton, and E. P. O'Reilly, Phys. Rev. B **69**, 035327 (2004).

⁹A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000).

¹⁰A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, and A. Lorke, Phys. Rev. B **62**, 4573 (2000).

¹¹J. I. Climente, J. Planelles, F. Rajadell (unpublished).

¹²P. S. Drouvelis, P. Schmelcher, and F. K. Diakonov, Phys. Rev. B **69**, 155312 (2004).

¹³P. S. Drouvelis, P. Schmelcher, and F. K. Diakonov, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 3633 (2004).

¹⁴I. Magnúsdóttir and V. Gudmundsson, Phys. Rev. B **61**, 10229 (2000).

¹⁵O. Voskoboynikov and C. P. Lee, Physica E (Amsterdam) **20**, 278 (2004).

¹⁶O. Voskoboynikov, Y. Li, H. M. Lu, C. F. Shih, and C. P. Lee, Phys. Rev. B **66**, 155306 (2002).

¹⁷J. R. Downes, D. A. Faux, and E. P. O'Reilly, J. Appl. Phys. **81**, 6700 (1997).

¹⁸J. H. Davies, J. Appl. Phys. **84**, 1358 (1998).

¹⁹S. S. Li and J. B. Xia, J. Appl. Phys. **89**, 3434 (2001).

²⁰W. Sheng and H. Xu, Physica B **256-258**, 152 (1998).

²¹A. Puente and Ll. Serra, Phys. Rev. B **63**, 125334 (2001).

²²M. Wagner, U. Merkt, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **45**, 1951 (1992).

²³H. Hu, J. L. Zhu, and J. J. Xiong, Phys. Rev. B **62**, 16777 (2000); J. B. Xia and S. S. Li, *ibid.* **66**, 035311 (2002); J. Planelles, W. Jaskolski, and J. I. Aliaga, *ibid.* **65**, 033306 (2002); J. I. Climente, J. Planelles, and W. Jaskolski, *ibid.* **68**, 075307 (2003).

Far-infrared absorption of self-assembled semiconductor rings‡

J. Planelles* and J.I. Climente

Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

(Dated: December 21, 2004)

We report a theoretical description of far-infrared spectroscopy experiments on self-assembled quantum rings in a magnetic field [A. Lorke *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000)] which, for the first time, accounts for the full set of experimental resonances. In our calculations we use a 3D effective-mass model with a realistic finite step-like confinement potential, including strain and Coulomb effects. We assume a bimodal distribution of ring sizes.

‡We dedicate this paper to Josef Paldus in celebration of his 70th anniversary and his many outstanding contributions to quantum chemistry.

Keywords: Quantum ring, Quantum dot, Magnetic properties, Absorption spectroscopy, Coulomb integrals.

PACS numbers: 73.21.-b

I. INTRODUCTION

Quantum rings have received a great deal of attention from researchers in the condensed matter field, over the last two decades.^{1,2,3,4,5} It is mainly the magnetic properties of these systems that make them so interesting. When a quantum ring is pierced by a magnetic field perpendicular to the plane of the ring, the Aharonov-Bohm effect⁶ leads to a persistent current of the charge as well as to oscillations of its energy.⁷ Experimental evidence for Aharonov-Bohm oscillations is available from metallic and semiconductor rings in the mesoscopic regime.^{5,8} However, mesoscopic rings may be subject to electron-electron, electron-impurity and electron-phonon scattering. Thus, the recent realization of nanoscopic disorder-free few-electron quantum rings is acknowledged as a major development in the low-dimensional domain where new physics driven by confinement, electron correlations and the influence of an external applied field can be explored.⁹

Nanosopic rings can be synthesized either by means of self-assembly¹⁰ or lithographic techniques.¹¹ One advantage of self-assembled structures over their lithographic counterparts is a superior optical quality, which makes them especially attractive for device applications.¹² Although atomic force micrographs of self-assembled rings evidence their ringlike geometry,¹⁰ such images are taken before the rings sample is covered with matrix material. Since embedding these structures in a semiconductor matrix is essential for practical applications, spectroscopy experiments were performed on covered samples to confirm whether the ringlike geometry is still preserved or not.^{13,14,15,16,17} Far-infrared (FIR) absorption spectroscopy on a macroscopic number of self-assembled rings, each of which charged on average with one¹⁶ and two¹⁷ electrons, was measured as a function of an ex-

ternal magnetic field. Characteristic spectral features at about $B = 8$ T were attributed to the change, from 0 to -1 , of the ground state z -projection of angular momentum.^{16,17,18} This interpretation of the experiments relies on two-dimensional effective mass models with a parabolic-like confinement potential (the potential typically used to investigate mesoscopic rings³). Indeed, these models yield reasonable agreement with most of the experimental data, but they also involve a few issues not completely understood, namely:

- (i) Different *characteristic frequencies* of the confinement potential are needed to fit the corresponding experiment if the rings contain one or two electrons, even though the ring sample is actually the same.^{16,18}
- (ii) An *effective radius* $R = 14$ nm is needed to fit the experiment.^{16,17,18} This is somewhat surprising because atomic force micrographs show the inner radius to be $R_{in} = 10-15$ nm and the outer radius $R_{out} \approx 60$ nm.^{17,19}
- (iii) The calculated relative intensities of the low-lying and high-lying sets of resonances differ by at least one order of magnitude,^{16,18} whereas, experimentally, they are found to have similar oscillator strength.¹⁷
- (iv) The highest energy resonances which are calculated in the presence of a magnetic field overestimate the energy position of the corresponding experimental peaks (marked with dots in Figures 3 and 6 of Ref.16).^{16,18}
- (v) A few experimental resonances (marked with crosses in Figures 3 and 6 of Ref.16) cannot be explained.^{16,18}

The first and second issues are inherent shortcomings of two-dimensional models with parabolic-like confinement potential, which require precise knowledge on the energy spectrum beforehand to fit several parameters. The third and fourth issues were overcome in a later work by Puente and Serra using a two-dimensional model with an improved form of the parabolic-like potential barrier

for the inner radius of the ring.²⁰ However, their model brought about a new interpretation of the FIR experiments suggesting that a mixture of high- and low-barrier rings must be contained in the sample of Ref.17. Moreover, the change in transition energy at $B = 8$ T was no longer attributed to an Aharonov-Bohm oscillation but to a crossing between the energy levels of the two different types of quantum ring. This hypothesis of a bimodal distribution of ring sizes agrees with recent observations on near-infrared spectroscopy of self-assembled rings.^{15,21,22} Ref.20 calculations also received strong support from our recent work.²³ In this work, by describing a two-electron self-assembled ring with a truly, fittings-free, three-dimensional model, we obtained results which are very similar to their predictions for high-barrier rings.

In this paper, we calculate the energy levels and FIR absorption spectra of one- and two-electron InAs/GaAs dots and rings with two different inner radii. The model used is the same as in Ref.23, which includes strain and Coulomb effects, as well as, a realistic finite confinement potential to describe the semiconductor heterostructure interface. Our results show that the combined absorption spectra of the two rings agree qualitatively well with the experimental data and overcome all the aforementioned shortcomings of two-dimensional models. To our knowledge, this is the first theoretical description which is able to account for all the experimental FIR resonances of Ref.17, including those marked with crosses.

II. THEORY AND CALCULATION METHODS

The one-band effective mass Hamiltonian for the electron states, including a magnetic field perpendicular to the ring plane, can be written in atomic units as

$$\mathcal{H}_e = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \left(\frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \nabla^2 \right) + \frac{(B \rho)^2}{8m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{B m}{2m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{1}{2} \mu_B g(E_{n,m}; \rho, z) B \sigma + V_c(\rho, z) + a_c \varepsilon_{hyd}(\rho, z) \right), \quad (1)$$

where $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number of the projection of the angular momentum onto the magnetic field (B) axis, n is the main quantum number, $V_c(\rho, z)$ is the finite confinement potential corresponding to the geometries shown in Figure 1, and $m^*(E_{n,m}; \rho, z)$ and $g(E_{n,m}; \rho, z)$ stand for the energy- and position-dependent mass and Landé factor, respectively.²⁴ a_c denotes the hydrostatic deformation potential for the conduction band, and ε_{hyd} is the hydrostatic strain, which we calculate within the framework of the isotropic elastic theory.^{25,26} It should be underlined that V_c must be a step-like, finite confinement potential in order to achieve a realistic description of the effect of the inner radius and the magnetic field penetration into the ring region.^{27,28}

A configuration interaction procedure is used to calculate the two-electron eigenstates and eigenenergies. The two-electron states can be labeled by the z projection of the total angular momentum $M = m_1 + m_2$, total spin $S = \sigma_1 + \sigma_2$, and main quantum number N . The optical absorption intensities for intraband transitions between electron states are calculated within the electronic dipole approximation.²⁹ We assume non-polarized light, although most of the intensity arises from the in-plane light components. We also assume $T = 0$ K, and therefore only transitions from the ground state are calculated. In order to obtain smooth spectra, the transition probabilities are represented employing Lorentzian curves of half-width $\Gamma = 0.5$ meV. Further details about the theoretical model are given in Ref.23.

III. RESULTS AND DISCUSSION

We investigate three self-assembled InAs quantum structures embedded in a GaAs matrix. Their cross-sections on the (ρ, z) plane are represented in Figure 1.

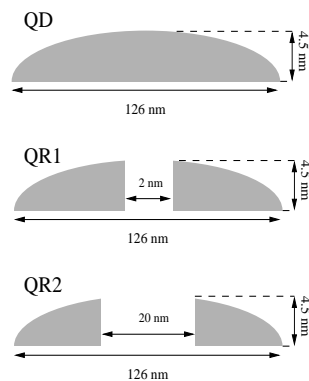


FIG. 1: Schematic cross-section of the three structures under study.

The first structure (QD) is a compact quantum dot, the second one (QR1) is a quantum ring with a small inner radius of $R_{in} = 1$ nm and the third structure (QR2) is a quantum ring with an inner radius of the size measured by atomic force microscopy, $R_{in} = 10$ nm. All three structures have an (outer) radius of 63 nm and a height of 4.5 nm, which are close to the experimental dimensions observed in uncovered self-assembled rings.^{17,19} The three structures can be seen as different stages of development of a quantum ring. The dot is lens-shaped and the shape of the rings is a cut torus with sheer inner wall. Experimentally, it has not been established if the quantum rings are made of pure InAs or an InGaAs alloy. However, we assume pure InAs composition for all

three structures and use the same material parameters as in Ref.23. An InGaAs alloy is expected to yield similar results to those we predict here because the increased electron effective mass due to the presence of Ga would be compensated by the weaker strain effects, which in turn would lead to a smaller strain-induced increase of the effective mass.

Equation (1) is integrated numerically by employing finite differences in a two-dimensional grid (ρ, z) . The configuration interaction calculations include all the single-particle states up to 35 meV away from the ground state. We have determined that the use of larger basis sets does not significantly change the low-lying two-electron states within the range of the magnetic field that is studied.

A. Single-electron systems

Figure 2 illustrates the monoenergetic energy levels of QD, QR1 and QR2 vs. a magnetic field. Solid and dotted lines are used for spin up and spin down levels, respectively. As we already discussed for very similar structures,³⁰ the presence of the hole in the ring significantly reduces the energy spacing between consecutive azimuthal levels ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) at $B = 0$. As a result, changes in the z -component of the ground state angular momentum of QR1 and QR2 take place in the magnetic field range under study, 0-12 T. The ground state of QR1 undergoes a change in angular momentum from $m = 0$ to $m = -1$ at about 11.6 T, whereas QR2 changes from $m = 0$ to $m = -1$ at about 1.9 T, from $m = -1$ to $m = -2$ at about 5.8 T, etc. In contrast, no angular momentum changes occur in the ground state of the one-electron dot, where the low-lying levels converge to the first Landau level without crossings.⁹ The oscillations in the ground state energy due to angular momentum changes are a manifestation of the Aharonov-Bohm effect and may be used as evidence of ring geometry.

Figure 3 shows the low-energy FIR absorption of one electron in QD, QR1 and QR2 for $B = 0, 0.5, 1, 1.5, \dots, 12$ T. The intensities are displayed in arbitrary units and they are offset for clarity.

The spectra of QD show a single visible peak at 9.1 meV for $B = 0$. This peak stems from the $\Delta n = 0, \Delta m = \pm 1$ transitions. When the magnetic field is switched on, the spectra split into two branches. One branch decreases in energy and intensity with the increasing external field. This branch is connected with the $\Delta m = -1$ transition. The other branch, connected with the $\Delta m = +1$ transition, increases in energy and remains intense even for strong magnetic fields. The spectra of QR1 are similar to those of QD except for two important features. First, at 12.0 T both the $\Delta m = 1$ and the $\Delta m = -1$ branches are abruptly shifted toward higher energies. This is a consequence of the ground state change from $m = 0$ to $m = -1$ which takes place at 11.6 T. Second, a new peak stemming from the $\Delta n = 1, \Delta m = \pm 1$ transitions arises at 26.1 meV in the

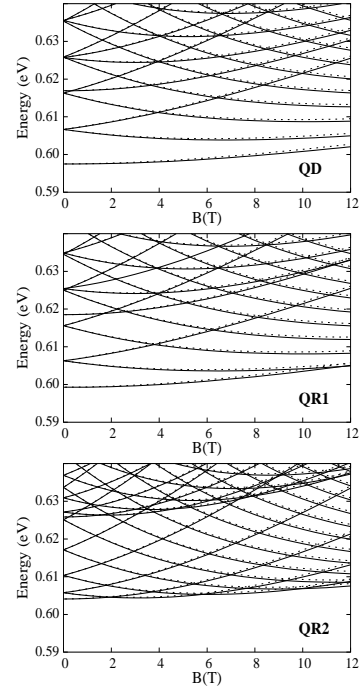


FIG. 2: Energy levels vs. magnetic field of one electron in QD (upper panel), QR1 (middle panel) and QR2 (lower panel). Solid lines denote spin up and dotted lines spin down levels.

absence of a magnetic field. This peak, pointed by an arrow in Figure 3, is still very small (only 4% of the $\Delta n = 0$ peak intensity). However, it is an order of magnitude stronger than the corresponding transition resonance in the QD case. Both features (the abrupt shift in resonance energies as the magnetic field increases and the presence of an intensity-enhanced $\Delta n = 1$ resonance) are distinctive of ringlike geometry. This is confirmed in view of the spectra of QR2, where the two peaks at $B = 0$ are already of comparable intensity. These two peaks split into $\Delta m = 1$ and $\Delta m = -1$ branches in the presence of a field. The energies of the $\Delta n = 0$ resonances follow a zig-zag course which reveals the underlying Aharonov-Bohm oscillations in the energy structure (see QR2 panel in Fig. 2). The energies of the most intense $\Delta n = 1$ resonances also exhibit abrupt shifts in energy connected with Aharonov-Bohm oscillations in energy, but now they decrease the energy of the resonance. Unlike in the QD and QR1 cases, the rapid oscillations in the ground state of QR2 prevent the resonances from reaching energies between 5 and 20 meV. This energy gap seems to be characteristic of well-developed rings.²⁰

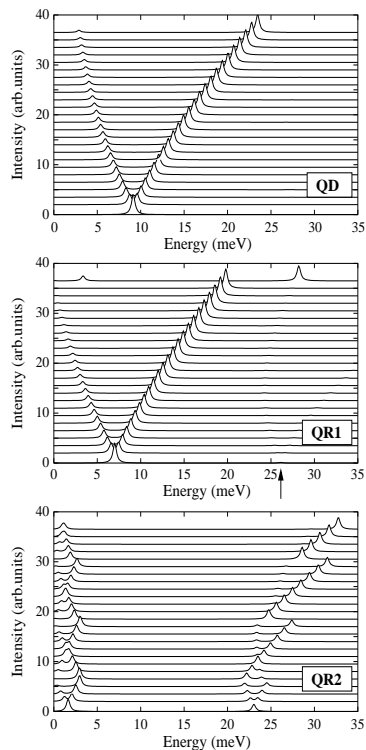


FIG. 3: FIR absorption of one electron in QD (upper panel), QR1 (middle panel) and QR2 (lower panel) at $T = 0$ K. The spectra are calculated for magnetic fields $B = 0 - 12$ T in steps of 0.5 T. The intensities are in arbitrary units and the curves have been offset for clarity. The arrow in QR1 points the position of the $\Delta n = 1$ resonance.

A comparison with the experimental FIR absorption of one-electron self-assembled rings considering only QR2 would reproduce some experimental features while disregarding others. It has been suggested that the experimental sample may contain a mixture of well-developed rings plus partially-developed rings²⁰ or even large quantum dots which have not developed into rings.¹⁷ We study these possibilities by representing the combined spectra of QR1 and QR2 and comparing it with the one-electron experimental resonances. The result is illustrated in Figure 4, where solid lines stand for the absorption of QR1 and dashed ones for that of QR2. The experimental resonances are denoted by the same symbols as in Ref.16, which show the way the resonances were originally grouped. It should be mentioned here that in the experiments,^{16,17} an insufficient signal-to-noise ratio at low energies does not allow the detection of the res-

onances under 10 meV. It can be seen in Figure 4 that the dots are reasonably well described by QR2. Only the dot located at $B = 6$ T significantly deviates from the corresponding calculated resonance. However, it is quite close to the calculated peak at $B = 5.5$ T, so that one may easily achieve a better agreement if only the ground state change (from $m = -1$ to $m = -2$) we predict at $B = 5.8$ T would be postponed to $B > 6$ T. The agreement of QR1 with the crosses and triangles is more questionable. The $\Delta m = 1$ branch of QR1 lies in intermediate energies between those of the crosses and those of the triangles. Although the slope of this branch agrees with the slope of both types of experimental resonances, it is difficult to determine if the branch reproduces qualitatively the crosses or the triangles. In any event, it seems that only one of these two types of experimental resonances may be explained by the $\Delta m = 1$ branch. A very similar picture to Figure 4 would arise by including QD in the mixture, since its absorption is very similar to that of QR1. We will come back to this issue later in the paper.

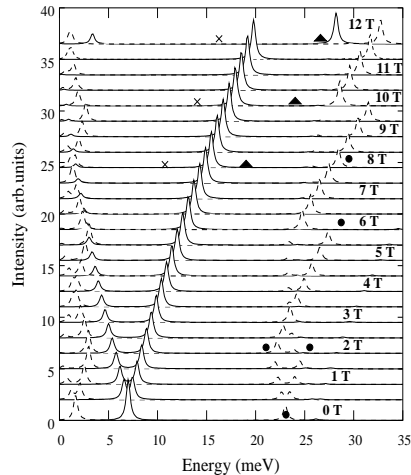


FIG. 4: Combined FIR absorption of one electron in QR1 and QR2 at $T = 0$ K. The spectra are calculated for magnetic fields $B = 0 - 12$ T in steps of 0.5 T. The intensities are in arbitrary units and the curves have been offset for clarity. Solid lines are used for QR1 and dashed lines for QR2. The symbols represent the experimental resonances.

B. Two-electron systems

Next, we calculate the two-electron energy levels and FIR absorption of QD, QR1 and QR2. The energy levels of the two-electron QD, QR1 and QR2 systems vs. a magnetic field are depicted in Figure 5. Only the levels

which become ground state within the 0-12 T range are displayed. The quantum numbers (M, S) of each level are also indicated (all the levels shown have $N = 1$).

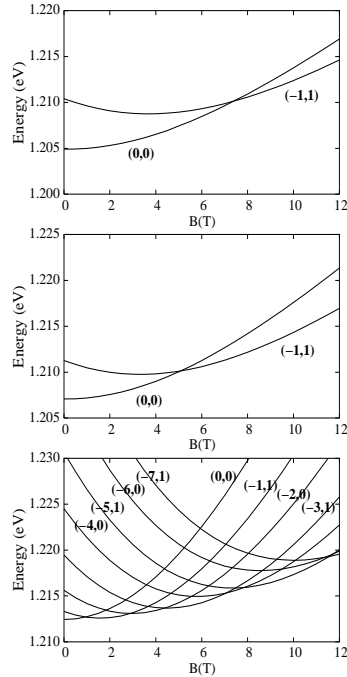


FIG. 5: Energy levels vs. magnetic field of two electrons in QD (upper panel), QR1 (middle panel) and QR2 (lower panel). Only levels that become the ground state in a given magnetic field window are shown. (M, S) labels denote the total angular momentum z -projection and total spin of each level.

In the absence of a magnetic field, the ground state in QD is $(0, 0)$ and remains so for magnetic fields as strong as 7.5 T.³¹ When $B > 7.5$ T, the first spin-singlet-spin-triplet transition of the ground state takes place³² and it becomes $(-1, 1)$. In QR1, the spin-singlet-spin-triplet transition occurs at a weaker magnetic field than in the QD case. This is due to the hole in the ring, which has a strong effect on the magnetization even if it is small.³⁰ This first crossing in the ground state is found at a lower field than in the single-electron case (Figure 2). This is due to the direct and exchange Coulomb energies.²³ The impact of the hole becomes dramatic for QR2, where up to six singlet-triplet crossings occur within the 0-12 T range. One can also compare this with the single-electron QR2 case, where only three crossings occur in the ground state for the same magnetic field range. The increase in the number of crossings again is a reflection

of the electron-electron interactions.

Figure 6 shows the low-energy FIR absorption of two electrons in QD, QR1 and QR2, for $B = 0, 0.5, 1, 1.5 \dots, 12$ T.

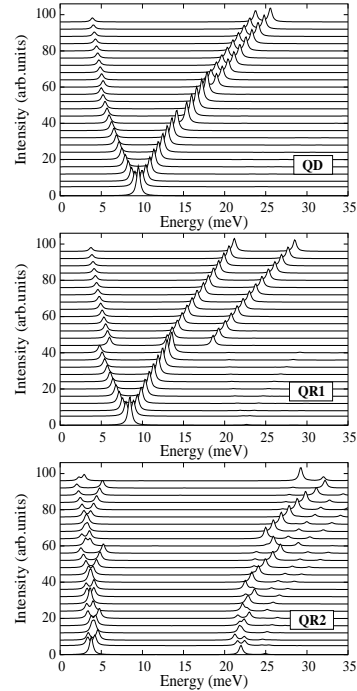


FIG. 6: FIR absorption of two electrons in QD (upper panel), QR1 (middle panel) and QR2 (lower panel) at $T = 0$ K. The spectra are calculated for magnetic fields $B = 0 - 12$ T in steps of 0.5 T. The intensities are in arbitrary units and the curves have been offset for clarity.

It can be seen that the two-electron QD absorption is very similar to the single-electron one, except for a significantly higher intensity and a small (< 1.5 meV) splitting of the $\Delta M = 1$ branch above 7.5 T.³³ This result was to be expected since self-assembled dots are well described by parabolic potentials, and hence the generalized Kohn theorem prevents many-electron effects from being revealed by excitation spectroscopy.⁹ Conversely, the hole of the rings breaks down the generalized Kohn theorem, so that the two-electron absorption spectra of QR1 and QR2 exhibit interesting differences with respect to the one-electron cases. At low magnetic fields ($B \leq 5.0$ T), the spectra of QR1 resemble those of the one-electron case. However, the ground state crossing at about $B = 5.1$ T brings about a very different picture. First, an abrupt shift in the $\Delta M = -1$ branch is seen at

$B \geq 5.5$ T (which is a lower value of B than in the one-electron case). Second, the $\Delta M = 1$ branch splits into two parallel branches, similar to the QD case but with a significantly larger energy spacing of about 5.5 meV. One of the branches is a prolongation of the $\Delta M = 1$ branch observed before $B = 5.1$ T and the other one is abruptly shifted toward higher energies. The low-energy and high-energy $\Delta M = 1$ branches originate from the $\Delta N = 0$ and $\Delta N = 1$ transitions, respectively. We would like to point out that this double $\Delta M = 1$ branch feature was not found in previous calculations of low-barrier rings.²⁰ The influence of the increased hole on the spectra of QR2 is even greater: both the low-lying $\Delta N = 0$ set of resonances and the high-lying $\Delta N = 1$ resonances are visible at $B = 0$, and the rapid Aharonov-Bohm oscillations give rise to many small shifts in the energies of the resonances, as well as to an energy gap between 7 meV and 20 meV. The most visible effect of the electron-electron interaction on the FIR absorption of QR2 is an increase in the number of oscillation-induced energy shifts.

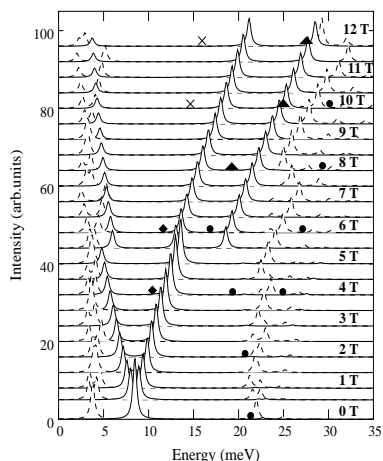


FIG. 7: Combined FIR absorption of two electrons in QR1 and QR2 at $T = 0$ K. The spectra are calculated for magnetic fields $B = 0 - 12$ T in steps of 0.5 T. The intensities are in arbitrary units and the curves have been offset for clarity. Solid lines are used for QR1 and dashed lines for QR2. The symbols represent the experimental resonances.

Figure 7 illustrates the combined two-electron absorption spectra of QR1 and QR2. Dashed lines are used for QR2 and solid lines for QR1. The experimental data are displayed using the original symbols of Ref.17. Due to the improved signal-to-noise ratio, a larger number of experimental resonances are available for the two-electron systems. A remarkable agreement between our calculations and the experimental resonances is observed. The dots are qualitatively described by the absorption of QR2. An

exception is the low-energy dot at $B = 6$ T, which we do not assign to QR2 but to the high-lying $\Delta M = 1$ branch of QR1. The triangles are also well described by the high-lying $\Delta M = 1$ branch of QR1. Finally, the low-lying $\Delta M = 1$ branch of QR1 accounts for the diamonds and the crosses. We point out that the intensities of the low-lying and high-lying sets of resonances in Figure 7 are of the same order of magnitude, as found experimentally. Even if some experimental points are only qualitatively described by our calculations, it can be concluded that our model suggests an alternative assignment of experimental resonances to that of Ref.17. This assignment is similar to that suggested by other authors.²⁰ However, we also offer an explanation for the experimental resonances marked with crosses, which were not understood to date.^{16,17,18,20}

We want to stress that if we assume a mixture of QD and QR2 we would not account for the triangles in Figure 7, since the high-lying $\Delta N = 1, \Delta M = 1$ branch of QD is too close in energy to the $\Delta N = 0, \Delta M = 1$ one (see Figure 6). Moreover, the two-electron results lead us to propose the crosses in the one-electron system (Figure 4) to be assigned to the $\Delta n = 0, \Delta m = 1$ branch of QR1, and the triangles to a $\Delta n = 1, \Delta m = 1$ branch which is not allowed at $T = 0$ K, but would be allowed at finite temperature when the first excited level is partially populated. As in Ref.20, our calculations indicate that the characteristic spectral features found in the experiment at $B = 8$ T are not due to an Aharonov-Bohm oscillation but to a crossing between resonances of two types of quantum rings. Therefore, the true signature of a quantum ring (with the geometry revealed by atomic force microscopy, QR2) in the FIR absorption experiments of Ref.17 is the presence of an intense resonance at about 20-23 meV and $B = 0$. Such a resonance was theoretically predicted by previous works using three-dimensional models and describing similar structures to QR2.^{23,24,34} We also find a very close agreement between the energy of this experimental resonance (the dot at $B = 0$ T) and the high-energy resonance of QR2 in both the one-electron and the two-electron spectra. This fact points out that our model gives a correct estimate of the Coulomb energy, as opposed to two-dimensional models which overestimate it due to the missing vertical motion.²³

IV. CONCLUSIONS

We have studied the FIR absorption of one and two electrons in a quantum dot, in a quantum ring with a small hole and in a quantum ring with the dimensions measured by atomic force microscopy. Our calculations show that it is possible to reproduce the FIR absorption experiments on self-assembled rings in a magnetic field by using our realistic three-dimensional model and assuming a mixture of the two rings with different inner radii. We provide an alternative assignment of the experimental resonances to that suggested in Refs.16,17. This is the

first theoretical description which accounts for the entire set of experimental resonances.

project P1-B2002-01 are gratefully acknowledged.

Acknowledgments

Financial support from a MEC-FPU grant, MEC-DGI project CTQ2004-02315/BQU, and UJI-Bancaixa

-
- * Electronic address: planelle@exp.uji.es
- ¹ M. Büttiker, Y. Imry, and R. Landauer, *Phys. Lett.* **96A**, 365 (1983).
 - ² A.G. Aronov, and Yu. V. Sharvin, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 755 (1987).
 - ³ T. Chakraborty, and P. Pietiläinen, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994).
 - ⁴ L. Wendler, and V.M. Fomin, *Phys. Status Solidi (b)* **191**, 409 (1995).
 - ⁵ A. Fuhrer, S. Luescher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichler, *Nature (London)* **413**, 6858 (2001).
 - ⁶ Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
 - ⁷ S. Olariu, and II. Popescu, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 339 (1985).
 - ⁸ V. Chandrasekhar, R.A. Webb, M.J. Brady, M.B. Ketchen, W.J. Gallagher, A. Kleinsasser, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3578 (1991).
 - ⁹ T. Chakraborty, *Quantum dots*, (Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1999).
 - ¹⁰ J.M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J.L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P.M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997); T. Raz, D. Ritter, and G. Bahir, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 17 06 (2003).
 - ¹¹ M. Bayer, M. Korkusinski, P. Hawrylak, T. Gutbrod, M. Michel, and A. Forchel, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 186801 (2003).
 - ¹² M.S. Skolnick, and D.J. Mowbray, *Physica E (Amsterdam)* **21**, 155 (2004).
 - ¹³ R.J. Warburton, C. Schafflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Nature (London)* **405**, 926 (2000).
 - ¹⁴ H. Pettersson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **6**, 510 (2000).
 - ¹⁵ D. Haft, C. Schulhauser, A.O. Govorov, R.J. Warburton, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld, and P.M. Petroff, *Physica E (Amsterdam)* **13**, 165 (2002).
 - ¹⁶ A. Emperador, M. Pi, M. Barranco, and A. Lorke, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
 - ¹⁷ A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, and P.M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
 - ¹⁸ H. Hu, J.L. Zhu, J.J. Xiong, *Phys. Rev. B* **62**, 16777 (2000).
 - ¹⁹ J.A. Barker, R.J. Warburton, E.P. O'Reilly, *Phys. Rev. B* **69**, 035327 (2004).
 - ²⁰ A. Puente, and Ll. Serra, *Phys. Rev. B* **63**, 125334 (2001).
 - ²¹ R. J. Warburton, B. Urbaszek, E. J. McGhee, C. Schulhauser, A. Hoge, K. Karrai, A.O. Govorov, J. A. Barker, B. D. Gerardot, P.M. Petroff, and J. M. Garcia, *26th International Conference on the Physics of Semiconductors Proceedings*, (Institute of Physics, Edinburgh, 2002).
 - ²² J.I. Climente, J. Planelles, and W. Jaskolski, *Phys. Rev. B* **68**, 075307 (2003).
 - ²³ J.I. Climente, J. Planelles, and F. Rajadell, unpublished.
 - ²⁴ O. Voskoboynikov, Y. Li, H.M. Lu, C.F. Shih, and C.P. Lee, *Phys. Rev. B* **66**, 155306 (2002).
 - ²⁵ J.R. Downes, D.A. Faux, and E.P. O'Reilly, *J. Appl. Phys.* **81**, 6700 (1997).
 - ²⁶ J.H. Davies, *J. Appl. Phys.* **84**, 1358 (1998).
 - ²⁷ S.S. Li, J.B. Xia, *J. Appl. Phys.* **89**, 3434 (2001).
 - ²⁸ O. Voskoboynikov, C.P. Lee, *Physica E* **20**, 278 (2004).
 - ²⁹ J.P. Loehr, *Physics of strained quantum well lasers*, (Boston Kluwer Academic cop. 1998).
 - ³⁰ J.I. Climente, J. Planelles, and J.L. Movilla, *Phys. Rev. B* **70**, 081301(R) (2004).
 - ³¹ The (0, 0) symmetry window is even wider (0 – 11 T) in a ring with a slightly smaller outer radius of 60 nm.³⁰ This difference arises from the stronger confinement in the latter structure, which leads to larger energy spacing between electron states at $B = 0$.
 - ³² M. Wagner, U. Merkt, and A.V. Chaplik, *Phys. Rev. B* **45**, 1951 (1992).
 - ³³ This splitting should not be observed in a perfect parabolic dot.
 - ³⁴ J. Planelles, W. Jaskolski, and J.I. Aliaga, *Phys. Rev. B* **65**, 033306 (2002).

Energy structure and far-infrared spectroscopy of two electrons in a self-assembled quantum ring

J.I. Climente, J. Planelles and F. Rajadell

Departament de Ciències Experimentals, UJI, Box 224, E-12080 Castelló, Spain

E-mail: planelle@exp.uji.es

Abstract.

The energy levels and far-infrared absorption spectra of a self-assembled InAs ring with one and two electrons in an external magnetic field are calculated numerically. We use a truly three-dimensional effective mass model which considers finite potential barriers, mass dependence on the energy and position, and includes strain effects. The results obtained indicate that far-infrared spectroscopy of self-assembled rings is very sensitive to electron-electron interactions. The exchange energy leads to aperiodic fractional Aharonov-Bohm oscillations of electronic states and rapid narrowing of the magnetic field windows corresponding to the spin singlet ground state. Our results also suggest that the symmetric form of parabolic confinement potential, which has been widely employed to describe quantum rings, is unsuitable for self-assembled rings as it poorly describes the relevant effects of the inner radius.

PACS numbers: 73.21.-b

1. Introduction

Recent advances in nanoscopic fabrication techniques have made it possible to grow self-organized InAs nanorings with “volcano” shapes.[1, 2] These nanoscopic rings may be the best-suited quantum structures for investigating the electronic and optical properties of quantum rings, because they are in the scattering-free and few-particle limit.[4] Two of the most interesting properties of quantum rings are their response to external magnetic fields and their multi-particle excitation spectra. In the presence of a magnetic field, perpendicular to the plane of the ring, the interaction between the charge of a particle confined in the ring and the magnetic flux induces successive changes of the carrier ground state symmetry (i. e. the Aharonov-Bohm (AB) effect[3]). In addition, the ringlike confinement breaks down the generalized Kohn theorem so that, unlike in quantum dots, the excitation spectrum of quantum rings may reveal electron-electron interaction effects.

In order to study these properties Lorke and co-workers measured the far-infrared (FIR) magneto-absorption spectra of a macroscopic number of self-assembled quantum rings, each of them charged on average with two electrons.[4] Despite of the fact that several theoretical works have studied electron-electron interactions in these structures,[4, 5, 6, 7, 8] the role of such interactions is not very clear yet. For example, some authors suggested that the profile of Lorke’s FIR spectroscopy experiment is roughly captured by the non-interacting particles picture.[4, 6] This is surprising because the Coulomb energy inferred from capacitance experiments for a two-electron self-assembled ring was as large as 20 meV,[4] and therefore the so-called “fractional AB effect” should yield major changes in the energy structure.[9, 10] Other authors obtained a similar degree of agreement with the FIR experiment by considering interacting particles.[5] The energy spectrum they predicted for the non-interacting case was indeed different to that they predicted for the interacting case.

The fact that both the non-interacting and the interacting pictures account for most of the experimental data can be explained from two factors. On the one hand, the theoretical models used so far to investigate Lorke’s two-electron experiment were based on the two-dimensional effective mass Hamiltonian with parabolic confinement potential introduced by Chakraborty *et al.*[11] Such models are subject to a fitting procedure[‡] which warrants agreement with a number of experimental resonances. On the other hand, the low-resolution of the FIR absorption experiment allowed only the detection of a small number of resonances. No resonance under 10 meV could be registered. Therefore, a significant part of the experimental data may be reproduced by means of either the non-interacting or the interacting Hamiltonian with an appropriate fitting procedure. A theoretical model free of fitting parameters is of high interest in order to unambiguously determine the role of electron-electron interactions in self-assembled quantum rings.

[‡] At least three parameters need to be fitted: the *characteristic frequency* of the confinement potential, the *effective radius* of the ring and the electron two-dimensional effective mass.[11, 12]

Moreover, there are doubts regarding the validity of the parabolic confinement potential for self-assembled quantum rings. The electronic states of these rings are very sensitive to changes in the inner radius.[13] Thus, unlike in quantum dots, the details of the confinement potential are important. Using a confinement potential of the form introduced in Ref.[11] and assuming that a single ring geometry was present in the sample of Ref.[4], reasonable agreement with the experimental FIR resonances was obtained.[4, 5, 6] Conversely, a later work by Puente and Serra[7] using a different form of parabolic confinement potential (which was modified to account better for the inner radius of the ring) required a bimodal distribution of ring sizes to explain the same experimental data. It follows that a realistic confinement potential is called for a definitive assessment of the role of the electron-electron repulsion on the optoelectronic properties of a self-assembled ring with interacting electrons.

In this paper, we use a truly three-dimensional model, similar to those which successfully described the near-infrared spectrum[14] and single electron energy structure[15, 16] of InGaAs rings, to calculate the electron states and intraband transitions of one and two electrons in a typical InAs/GaAs quantum ring. We use a finite rectangular-well confinement potential defined by the band-offset between the material of the ring and that of the matrix. Without any additional knowledge on the possible interface grading or bandbending, this potential is certainly the most reasonable that one can propose§.

2. Theory

The one-band effective mass Hamiltonian for the electron states, including a magnetic field perpendicular to the ring plane, can be written in cylindrical coordinates and atomic units as

$$\mathcal{H}_e = \left(-\frac{1}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(E_{n,m}; \rho, z)} \nabla \right) + \frac{(B\rho)^2}{8m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{Bm}{2m^*(E_{n,m}; \rho, z)} + \frac{1}{2} \mu_B g(E_{n,m}; \rho, z) B \sigma + V_c(\rho, z) + a_c \varepsilon_{hyd}(\rho, z) \right), \quad (1)$$

where $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ is the quantum number of the projection of the angular momentum onto the magnetic field (B) axis, n is the main quantum number, $V_c(\rho, z)$ is the finite confinement potential corresponding to the geometry shown in Figure 1, and $m^*(E_{n,m}; \rho, z)$ and $g(E_{n,m}; \rho, z)$ stand for the energy- and position-dependent mass and Landé factor, respectively.[16] a_c denotes the hydrostatic deformation potential for the conduction band, and ε_{hyd} is the hydrostatic strain, which we calculate within the

§ It should be noted that the asymmetry of the 2D parabolic-like potential of Ref.[7] accounts for the unequal vertical confinement at the inner and outer edges of the ring cross-section: an abrupt potential for the inner edge, which represents the sheer wall of the ring cavity, and a smoothly increasing potential for the outer edge, which represents the smoothly decreasing height of the ring in the radial direction. Since our confinement potential is 3D, it accounts for this vertical confinement explicitly.

framework of the isotropic elastic theory.[17, 18] It should be noted that this theory allows for good strain estimates while preserving axial symmetry.[19] The strain profile along the radial direction at half ring height, and along the vertical direction at half ring cross-section are displayed in Figure 1. Solid lines are used for lateral strain, $\varepsilon_{\parallel} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$, and dotted lines are used for ε_{zz} . The main effect of hydrostatic strain is to increase the energy gap. This effect, along with the non-parabolicity, leads to increased electron effective masses for InAs. It is then possible to retrieve appropriate values of the mass to reproduce experimental results without having to invoke GaAs diffusion into the ring.[14, 15] Equation (1) is solved numerically using the finite-difference method on a two-dimensional grid (ρ, z) . Ben Daniel-Duke boundary conditions are imposed.[20]

The two-electron Hamiltonian can be written as

$$\mathcal{H}_{2e}(1, 2) = \mathcal{H}_e(1) + \mathcal{H}_e(2) + V_{ee}(1, 2), \quad (2)$$

where H_e is the single-particle Hamiltonian (Eq. (1)) and V_{ee} is the electron-electron Coulomb repulsion term. Eq. (2) is solved by means of the configuration interaction method on the basis of the one-electron wave functions,

$$\psi_{n,m,\sigma} = f_{n,m}(\rho, z) e^{im\phi} |S\sigma\rangle, \quad (3)$$

where $f_{n,m}(\rho, z)$ is the eigenvector of equation (1) and $|S\sigma\rangle = |S\rangle |\sigma\rangle$ is the Bloch function for electrons, with the spin $\sigma = \uparrow$ or \downarrow . The matrix element of the electron-electron interaction can be expressed as a five-dimensional integral,

$$\langle ij | \frac{1}{\epsilon^* r_{12}} | kl \rangle = \frac{1}{2\pi\epsilon^*} \int \int \int \int \int d\rho_1 d\rho_2 dz_1 dz_2 d\Omega \cos(n\Omega) f_i(\rho_1, z_1) f_j(\rho_2, z_2) f_k(\rho_1, z_1) f_l(\rho_2, z_2) \frac{\rho_1 \rho_2}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 + (z_2 - z_1)^2 - 2\rho_1 \rho_2 \cos \Omega}}, \quad (4)$$

where ϵ^* is the effective dielectric constant, $n = (m_k - m_i)$ and $\Omega = \phi_2 - \phi_1$. Eq. (4) is integrated using Monte Carlo routines. The two-electron wave function

$$\Psi_{M,S,N}(1, 2) = \sum_{i,j} c_{i,j}^{M,S,N} \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_i(1)\psi_j(2) - \psi_i(2)\psi_j(1)), \quad (5)$$

is labeled by its total angular momentum z-projection $M = m_1 + m_2$, total spin $S = \sigma_1 + \sigma_2$ and main quantum number N .

The optical absorption intensities for intraband transitions between two-electron states are calculated within the electronic dipole approximation.[21] We assume non-polarized light, although most of the intensity arises from the in-plane light components. We also assume $T = 0$ K so that only transitions from the ground state are calculated. The transition probabilities are represented employing Lorentzian curves of half-width

$\Gamma = 0.5$ meV, in order to obtain smooth spectra^{||}. Hence the absorption coefficient can be written as:

$$\alpha(E) = C \sum_f \frac{E_f - E_0}{1 + 4 \left(\frac{E - (E_f - E_0)}{\Gamma} \right)^2} |\langle \Psi_f | \vec{\mu} | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (6)$$

Here C is a constant factor (which we arbitrarily set to one as we look for relative intensities). Ψ_f and Ψ_0 are the final and ground states, respectively. Their corresponding energies are E_f and E_0 . The x -component of the two-particle dipole matrix element is defined by:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_f | \mu_x | \Psi_0 \rangle &= - \langle \Psi_f | (x_1 + x_2) | \Psi_0 \rangle = \\ &= - \sum_{i,j>i} \sum_{k,l>k} c_{i,j}^f c_{k,l}^0 [\delta_{j,l} x_{ik} + \delta_{i,k} x_{jl} - \delta_{j,k} x_{il} - \delta_{i,l} x_{jk}], \end{aligned} \quad (7)$$

$$(8)$$

where:

$$\begin{aligned} x_{ik} &= \int \int f_{n_i, m_i}(\rho, z) e^{-im_i \phi} \rho \cos \phi f_{n_k, m_k}(\rho, z) e^{im_k \phi} \rho d\rho dz d\phi \\ &= \frac{1}{2} (\delta_{m_i, m_k+1} + \delta_{m_i, m_k-1}) \int \int f_{n_i, m_i}(\rho, z) f_{n_k, m_k}(\rho, z) \rho^2 d\rho dz. \end{aligned} \quad (9)$$

The y - and z - components of the transition moment are analogously defined.

3. Results and discussion

We investigate a self-assembled InAs ring embedded in a GaAs matrix. Lacking precise knowledge on the composition, size and shape of self-assembled structures, our main goal is to qualitatively study the role of electron-electron interactions. Making arbitrary assumptions about the effects of diffusion and segregation would allow for a better fit of the experimental results at the expense of introducing subjectivity. Thus, we simply use the shape and dimensions of a typical InAs ring observed by atomic force microscopy[4, 22] and assume a pure InAs composition.¶ For similar reasons, we neglect the presence of a wetting layer. The shape of our ring is a cut torus (see cross-section in Figure 1). The inner radius is 10 nm and the outer radius 60 nm.[4] Following recent measurements,[22] 4.5 nm height is set at the inner edge of the ring cross-section and then we let it decrease as a spherical caplet. We use an electron band-edge effective mass for InAs (GaAs) $m^* = 0.028$ (0.067), energy gap $E_g = 0.42$ (1.52) eV, split-off $\Delta = 0.38$ (0.34) eV and hydrostatic deformation potential $a_c = -6.66$ (-9.3) eV.[19, 23]

^{||} The value $\Gamma = 0.5$ meV is just an empirical parameter to simulate a smooth spectrum.

¶ Recent evidence about the synthesis of InP/GaAs self-assembled rings indicates that the shape transformation from dots to rings is not accompanied by compositional changes.[2] Besides, an InGaAs alloy would yield similar results to those we predict here because the increased electron effective mass due to the presence of Ga is compensated by the weaker strain effects which, as mentioned in Section 2, also lead to increased effective masses.

The corresponding conduction band-offset is 0.77 eV, and the effective dielectric constant is 12.4. The configuration interaction calculations include all the single-particle states up to 35 meV away from the ground state. We have checked that by enlarging this basis set no significant changes in the low-lying two-electron states are achieved within the range of the magnetic field that is being studied (0-12 T).

Figure 2 illustrates the low-lying single-electron energy levels vs. magnetic field. Solid lines represent $\sigma = \uparrow$ states, and dotted lines $\sigma = \downarrow$ states. Two sets of lines corresponding to the ground $n = 1$ and first excited $n = 2$ states can be seen. The first set ($n = 1, |m| = 0, 1, 2, \dots$) begins at about 617 meV and the second one ($n = 2, |m| = 0, 1, 2, \dots$) at about 641 meV. In the presence of a magnetic field, the energy of the ground state describes aperiodic oscillations as expected from the AB effect in quantum rings with finite width.[16] Figure 2 is similar to the electron energy spectrum in Ref.[15]. The most significant differences shown in Figure 2 are the magnitude of the binding energies (about 600 vs. 200 meV in Ref.[15]) and the energy spacing between levels with $\Delta m = \pm 1$ at zero magnetic field (about twice as much as in Ref.[15]). The first difference comes from the hydrostatic strain. The second is due to the current ring cross-section shape which allows the charge density maximum to be located at values of ρ below those found in Ref.[15], yielding, then, larger contributions of the centrifugal term in the Hamiltonian (1). It should also be noted that the energy spacing between levels with $\Delta n = 1$ in Figure 2 is similar to that found within a similar three-dimensional single-particle model.[16]

Figure 3 shows the two-electron ground state vs. magnetic field without(a) and with(b) Coulomb interaction. The states are labeled according to their total angular momentum z-projection and total spin (M, S). Grey-shaded regions represent magnetic field windows where the ground state has spin one (triplet). At $B = 0$ the ground state is $(0, 0)$ in both cases (with and without Coulomb interaction). As the magnetic field increases, states with lower M become more stabilized, eventually replacing the $(M + 1)$ ones as the ground state. As a result, the ground state shows a succession of decreasing M and spin oscillation (singlet-triplet-singlet-triplet...) that characterizes the interplay between the Zeeman term and the ringlike confinement.[6] When no Coulomb interaction is included, the ground state is predominantly singlet ($S = 0$), although the contribution of the atomic Zeeman term in the single particle Hamiltonian (Eq. (1)) gives rise to windows of the magnetic field where $S = 1$ levels become the ground state (grey-shaded regions). Such windows, which are relatively wide even at moderate magnetic fields, are not found when the atomic Zeeman term is neglected.[6, 9, 10] Therefore, Figure 3(a) shows that the contribution of the atomic Zeeman term, even though small in magnitude, can strongly modify the energy structure of electrons in a self-assembled ring. When the Coulomb interaction is considered (Figure 3(b)), all the states are shifted upwards due to electron-electron repulsion. The lowest-lying levels experience a stronger Coulomb interaction and so at $B = 0$ the ground state $(0, 0)$ is closer to the first excited state $(-1, 1)$ than in the non-interacting case. Moreover, the $S = 1$ triplet states are stabilized by the exchange interaction and they come down in energy with respect

to the singlets. As a result, the values of the magnetic field corresponding to the first crossings of the ground state are approximately halved as compared to those of the non-interacting picture. This is known as the “fractional AB effect”. [9] This effect is strongly dependent on the size of the quantum ring. Figure 3(b) gives an estimation for an InAs self-assembled ring with the dimensions observed in atomic force micrographs. In our calculations, the halving of the spin singlet domains is approximate only at low values of the magnetic field. At high values, the spin singlet domains are almost suppressed and the ground state has predominantly spin one (triplet). This is due to the enhancement of electron-electron interactions and atomic Zeeman splitting with increasing magnetic field. The first crossings in Figs. 3(a) and 3(b) take place at similar magnetic field values to those predicted by Puente and Serra for both interacting and non-interacting electrons,[7] although for the increasing field we find a larger number of crossings.⁺

It is worthwhile pointing out that the net Coulomb interactions we find at $B = 0$ are in the 3-5 meV range. They are smaller than the ones predicted by the two-dimensional models (between 7 and 11 meV)[6, 8] because two-dimensional models overestimate Coulomb interactions due to the infinite confinement in the vertical direction. Our Coulomb interaction energies are also below the 20 meV inferred by Lorke *et al.* using capacitance spectroscopy.[4] We have determined that such a large Coulomb energy cannot be achieved with our model even for narrow-width rings holding a 10 nm inner radius, because the charge density spreads over the inner core of the ring before reaching such a strong interaction. Therefore, our calculations suggest that the missing central part of the ring cannot be responsible for any surprisingly large Coulomb interaction as pointed out in Ref.[4].

In Figure 4 we plot the FIR absorption of the two-electron ring without(a) and with(b) Coulomb interaction for $B = 0, 0.5, 1, 1.5 \dots, 12$ T. The intensities are displayed in arbitrary units and they are offset for the sake of clarity. In the non-interacting picture two sets of resonances can be easily distinguished, a low-lying $\Delta N = 0$ one and a high-lying $\Delta N = 1$ one. At zero magnetic field, the low-lying resonance consists of a single peak at 1.8 meV and the high-lying one is also a single peak at 26.3 meV. When the magnetic field is switched on, both the low-lying and high-lying resonances exhibit Zeeman splitting. The single peaks at $B = 0$ now split into two smaller branches, one at slightly lower energies related to $\Delta M = -1$ transitions and the other at slightly higher energies related to $\Delta M = 1$ transitions. In general the $\Delta M = 1$ branch is more intense than the $\Delta M = -1$ one. As the magnetic field increases, the energy of the low-lying $\Delta M = 1$ resonances progresses in a zig-zag manner, while the high-lying $\Delta M = 1$ branch experiences sudden bumps. This behavior is originated by the AB oscillations of the ground state energy (see Figure 3(a)). The absorption spectrum of interacting particles roughly resembles that without Coulomb interaction. However, some important differences can be underlined. First, the peaks at zero magnetic field get closer. Thus, the low-lying peak is now at 4.1 meV and the high-lying one is at 25.2

⁺ See Ref.[15] for a physical interpretation of the larger number of crossings in our calculations.

meV. In addition, a new smaller peak arises at 28.3 meV. This peak originates from the mixing of different angular momenta and spins induced by the Coulomb interaction. Second, the intensity of the resonances is quite different. This can be seen for example in the relative intensities of the low-lying $\Delta M = 1$ and $\Delta M = -1$ branches, which are now of a similar size for all magnetic fields. Third, the symmetry changes of the ground state occur at different values of the field due to the fractional AB effect (see Fig. 3(b)) and this has a profound impact on the possible transitions at each value of B .

Figure 4 is very different from the absorption spectra of a self-assembled ring which is obtained with the usually employed parabolic confinement potential.[5, 6] Nonetheless, it strongly resembles the calculated magneto-absorption spectrum of the quantum ring V3 in Ref.[7]. Therefore, our model also suggests that a single quantum ring cannot account for all the experimental FIR resonances and at least a second type of ring should be present in the sample measured by Lorke *et al.*[4] This second type of ring should be responsible for the resonances between 10 and 20 meV. The agreement of the two calculated absorption spectra (interacting and non-interacting) with the high-energy experimental resonances (marked with dots in Fig.2(b) of Ref.[4]) is rather similar.* Therefore, our model indicates that Lorke's experiment can be roughly described within the single particle approximation, although higher-resolution experiments should find clear manifestations of electron-electron interaction effects.

4. Conclusion

In conclusion, we have studied the electron energy structure and FIR absorption of one and two electrons in a self-assembled InAs/GaAs quantum ring in a magnetic field. The atomic Zeeman effect and electron-electron interactions have been found to induce significant changes in the energy structure and FIR absorption. The Coulomb exchange interaction yields visibly aperiodic fractional AB oscillations of the ground state energy as well as a rapid narrowing of the magnetic field windows corresponding to spin zero (singlet) ground state. Our 3D model calculations compares well with FIR resonance energies and oscillator strengths obtained in Ref.[7] with a modified form of the parabolic potential for the inner radius of the ring. Here the results are achieved without any parameter fitting, therefore giving strong support to their interpretation of Ref.[4] experiments on self-assembled rings spectroscopy. These results also suggest that the parabolic form of the confinement potential used for mesoscopic rings[11] is unsuitable for self-assembled rings, as it poorly describes the effect of the inner radius.

* This agreement is only moderate. It can be significantly improved by assuming slightly different dimensions to those used in this study.[24] However, as mentioned before, the goal of this work is the qualitative study of electron-electron interactions. Therefore, we only present here the results obtained using the average dimensions of uncapped InAs self-assembled rings.

Acknowledgments

We wish to thank A. Lorke for helpful discussion. Financial support from a MEC-FPU grant, MEC-DGI project CTQ2004-02315/BQU and UJI-Bancaixa project P1-B2002-01 are gratefully acknowledged.

- [1] Garcia JM, Medeiros-Ribeiro G, Schmidt K, Ngo T, Feng JL, Lorke A, Kotthaus J, and Petroff PM, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [2] Raz T, Ritter D, and Bahir G, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003).
- [3] Y. Aharonov, and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [4] Lorke A, Luyken RJ, Govorov AO, Kotthaus JP, Garcia JM, and Petroff PM, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [5] Emperador A, Pi M, Barranco M, and Lorke A, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- [6] Hu H, Zhu JL, Xiong JJ, *Phys. Rev. B* **62**, 16777 (2000).
- [7] Puente A, and Serra LI, *Phys. Rev. B* **63**, 125334 (2001).
- [8] Xia JB, and Li SS, *Phys. Rev. B* **66**, 035311 (2002).
- [9] Niemelä K, Pietiläinen P, Hyvönen P, and Chakraborty T, *Europhys. Lett.* **36**, 533 (1996).
- [10] Emperador A, Pederiva F, and Lipparini E, *Phys. Rev. B* **68**, 115312 (2003).
- [11] Chakraborty T and Pietiläinen P, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994).
- [12] Peeters FM, and Schweigert VA, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [13] Li SS, and Xia JB, *J. Appl. Phys.* **89**, 3434 (2001).
- [14] Climente JI, Planelles J, and Jaskolski W, *Phys. Rev. B* **68**, 075307 (2003).
- [15] Planelles J, Jaskolski W, and Aliaga JI, *Phys. Rev. B* **65**, 033306 (2002).
- [16] Voskoboinikov O, Li Y, Lu HM, Shih CF, and Lee CP, *Phys. Rev. B* **66**, 155306 (2002).
- [17] Downes JR, Faux DA, and O'Reilly EP, *J. Appl. Phys.* **81**, 6700 (1997).
- [18] Davies JH, *J. Appl. Phys.* **84**, 1358 (1998).
- [19] Tadić M, Peeters FM, Janssens KL, Korkusiński M, and Hawrylak P, *J. Appl. Phys.* **92**, 5819 (2002).
- [20] Harrison P, 2000 *Quantum Wells, Wires and Dots*, (John Wiley & Sons Ltd., Guilford).
- [21] Loehr JP, 1998 *Physics of strained quantum well lasers*, (Boston Kluwer Academic cop.).
- [22] Barker JA, Warburton RJ, O'Reilly EP, *Phys. Rev. B* **69**, 035327 (2004). The cross-section of an InAs self-assembled ring, taken with an atomic force microscope, can be seen in Figure 4 of this work.
- [23] Vurgaftman I, Meyer JR, and Ram-Mohan LR, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [24] Planelles J and Climente JI, cond-mat/0412552.

Figure 1. Cross-section of the investigated quantum ring and strain profile of ε_{\parallel} (solid lines) and ε_{zz} (dotted lines). The radial strain profile is taken at half ring height and the vertical one at half section width. The confinement potential is $V_c = 0$ eV inside the ring (grey region) and $V_c = 0.77$ eV outside.

Figure 2. Low-lying energy levels of a single electron in the quantum ring vs. magnetic field. Solid lines are used for the spin $\sigma = \uparrow$ states and dotted lines for the spin $\sigma = \downarrow$ states.

Figure 3. Two-electron energy levels vs. magnetic field in the absence(a) and presence(b) of electron-electron Coulomb interaction. Only levels that become the ground state in a given magnetic field window are shown. Grey-shaded regions indicate windows where the ground state has a total spin of $S = 1$.

Figure 4. Two-electron FIR absorption in the absence(a) and presence(b) of electron-electron Coulomb interaction at $T = 0$ K. The spectra are calculated for magnetic fields $B = 0 - 12$ T in steps of 0.5 T. The intensities are in arbitrary units and the curves have been offset for clarity.

Voltage control of the magnetic properties of charged semiconductor quantum dots containing magnetic ions

J. I. Climente,^{1,2} M. Korkusiński,¹ P. Hawrylak,¹ and J. Planelles²

¹*Institute for Microstructural Sciences,
National Research Council of Canada, Ottawa, Canada K1A 0R6*

²*Departament de Ciències Experimentals,
Universitat Jaume I, Box 224, E-12080 Castelló, Spain*

Abstract

We describe a model device allowing voltage control of the magnetic properties of magnetic ions in III-V self-assembled semiconductor quantum dots. The applied voltage, combined with Coulomb blockade, allows the control of the number of holes in the quantum dot. The spins of the holes interact with the spins of the magnetic ions via *sp-d* exchange interactions. The spectrum of a Mn ion in a *p*-type InAs quantum disk in a magnetic field is calculated as a function of the number of holes described by the Luttinger-Kohn Hamiltonian. For a neutral Mn acceptor, the spin of the hole leads to an effective magnetic field which strongly modifies the magnetization of the ion. The magnetization can be modified further by charging the dot with an additional hole. The interacting holes form a singlet parity ground state, suppress the effective field and modify the magnetic moment of the charged complex.

PACS numbers: 78.67.Hc,75.75.+a

There is currently interest in developing voltage control of magnetic properties¹ of diluted magnetic III-V semiconductors²⁻⁶ (DMS). The interaction of electrons and holes with magnetic impurities in nanocrystals and quantum dots has been investigated by several authors in the last years.⁵⁻¹² Building on this work we describe here a model device allowing voltage control of the magnetic properties of Mn ions in III-V self-assembled semiconductor quantum dots¹³ by controlling the number of holes in the vicinity of the ion. The schematic device structure is shown in Figure 1(a). A layer of quantum dots containing magnetic ions is sandwiched between a metallic gate on the surface and a p-type back contact. The potential applied to the gate, V_g , changes the position of the quantum dot level with respect to the Fermi level of the contact and, combined with Coulomb blockade, allows precise control of the number of holes in each dot.¹⁴ The spin of the holes interacts with the spin of the Mn ion via *sp-d* exchange interaction and modifies the magnetic properties of the complex. The exchange interaction can be modified by changing the dot radius,^{6,7} by the number of additional carriers and by the magnetic field. To understand such interactions we assume a very diluted Mn concentration and study a model of a dot containing one Mn impurity. Figure 1(b) shows the interacting spins in the quantum dot as a function of the voltage. In dots based on III-V semiconductors, Mn ions act as acceptors.¹⁵⁻¹⁸ Therefore, in the absence of external bias our model consists of a negatively charged acceptor and a positively charged hole. By applying positive bias the dot can be emptied and by applying negative bias an additional hole enters the quantum dot. The spin of the second hole almost cancels the spin of the first hole and strongly modifies the magnetic properties of the Mn center.

We start with our device at zero bias. The substitutional Mn^{+2} ion in a III-V semiconductor quantum dot of radius R and thickness W corresponds to an electronic configuration $3d^5$, and with one weakly bound valence hole forms a neutral Mn^0 acceptor.¹⁵⁻¹⁸ The Hamiltonian of the Mn^0 complex in a magnetic field applied along the growth axis is:

$$H_{Mn^0} = g \mu_B B S_z - \mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S} + H_h, \quad (1)$$

where g is the Landé factor of the Mn ion, μ_B is the Bohr magneton, B is the external magnetic field and \vec{S} is the spin of the Mn ion ($S = 5/2$). The first term describes the Hamiltonian of an isolated Mn spin, the second term $H_{ex} = -\mathcal{J}(r) \vec{\sigma} \vec{S}$ corresponds to the *sp-d* exchange interaction between the spin of the hole, $\vec{\sigma}$, and the Mn ion d-shell electrons, and $\mathcal{J}(r)$ is a function rapidly decreasing as the distance from the Mn center increases.⁸

The third term stands for the hole orbital Hamiltonian,

$$H_h = H_{LK} - \frac{e^2}{\epsilon^* \sqrt{\rho^2 + z^2}} + V_c(\rho, z). \quad (2)$$

Due to spin-orbit interaction, hole states are described not by spin but by total angular momentum through the Luttinger-Kohn Hamiltonian H_{LK} .^{9,19-21} The second term in Eq.(2) describes the Coulomb interaction between the positively charged hole and the negatively charged Mn acceptor, for simplicity placed in the center of the disk. $V_c(\rho, z)$ is the confinement potential, e is the hole charge and ϵ^* is the effective dielectric constant of the disk material. No central cell correction for the acceptor potential is considered in this qualitative study.²² The singly and doubly charged acceptor states in SiGe quantum wells and dots have been studied in detail by Rego et al.¹⁹ InAs self-assembled quantum dots with shape resembling quantum disks can be fabricated using In-flush technique.²³ Following Ref. 19, we treat our quantum dot as a flat disk with two lowest subbands $\xi_0(z) = \sqrt{\frac{2}{W}} \cos(\frac{\pi z}{W})$ and $\xi_1(z) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin(\frac{2\pi z}{W})$, with z as the growth direction.

The hole wavefunction corresponding to eigenvalue²⁴ k , “parity up” (*down*), and total angular momentum z -projection F_z can be written as a four-component Luttinger spinor²¹:

$$|F_z, \nu = \uparrow (\downarrow), k \rangle = \sum_n \begin{pmatrix} A_{J_z=+3/2,n}^{F_z, \nu = \uparrow (1), k} f_{F_z-3/2,n}(\rho, \theta) \xi_0(z) (\xi_1(z)) |J_z = \frac{+3}{2} \rangle \\ A_{J_z=-1/2,n}^{F_z, \nu = \uparrow (1), k} f_{F_z+1/2,n}(\rho, \theta) \xi_0(z) (\xi_1(z)) |J_z = \frac{-1}{2} \rangle \\ A_{J_z=+1/2,n}^{F_z, \nu = \uparrow (1), k} f_{F_z-1/2,n}(\rho, \theta) \xi_1(z) (\xi_0(z)) |J_z = \frac{+1}{2} \rangle \\ A_{J_z=-3/2,n}^{F_z, \nu = \uparrow (1), k} f_{F_z+3/2,n}(\rho, \theta) \xi_1(z) (\xi_0(z)) |J_z = \frac{-3}{2} \rangle \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Here $|J_z \rangle$ is the periodic part of the Bloch functions and $f_{F_z-J_z,n}(\rho, \theta)$ is the in-plane envelope part with z -th component of the envelope angular momentum $m_z = F_z - J_z$,

$$f_{F_z-J_z,n}(\rho, \theta) = \frac{e^{im_z\theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2}}{R} \frac{J_{m_z}(k_n^{m_z} \rho)}{|J_{m_z+1}(k_n^{m_z} R)|}. \quad (4)$$

$J_{m_z}(k_n^{m_z} \rho)$ is the Bessel function of order m_z and radial quantum number n . $k_n^{m_z}$ represents the hole wave vector, defined in terms of the Bessel function roots ($\alpha_n^{m_z}$) as $k_n^{m_z} = \alpha_n^{m_z}/R$.

The parity ν quantum number has two possible configurations, $\nu = \uparrow$ and $\nu = \downarrow$. States of opposite parities are orthogonal and the two parity configurations are degenerate in the

absence of magnetic field. Under a suitable definition of parity operators, the parity quantum number is isomorphic to the electronic spin quantum number.^{20,21}

To derive an effective Mn Hamiltonian for small quantum dots, we only retain the two lowest hole states. Moreover, due to short range of the exchange interaction on a quantum dot length scale, we can approximate $\mathcal{J}(r)$ by $\delta(r)$. These two approximations, together with the circular symmetry of the system, lead to matrix elements of the *sp-d* exchange interaction in the hole states $|i\rangle = |F_z, \nu, k\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle j|H_{ex}|i\rangle = & - \sum_{n, J_z} \sum_{n', J'_z} A_{J_z, n}^i A_{J'_z, n'}^j \langle f_{F'_z - J'_z, n'}(\rho, \phi) \xi_{J'_z}^{\nu'}(z) | \langle J'_z | \\ & \delta(r) \sigma_z S_z | J_z \rangle | f_{F_z - J_z, n}(\rho, \phi) \xi_{J_z}^{\nu}(z) \rangle . \end{aligned} \quad (5)$$

These matrix elements are diagonal in the basis of the lowest lying parity up and parity down hole states, and result in an effective Ising Mn^0 Hamiltonian:

$$H_{\text{Mn}^0}^{QM}(i, S_z) = E_i + (g\mu_B B + \beta B_{eff}^0(i)) S_z. \quad (6)$$

Here E_i is the energy of the hole state $|i\rangle$, given by Eq. (2), and the bracketed term is a sum of an external plus an effective internal magnetic field. $\beta = \langle J_z | \delta(r) | J_z \rangle$ is the hole exchange parameter, and $B_{eff}^0(i)$ is the effective magnetic field:

$$B_{eff}^0(i) = -\frac{1}{WR^2} \left(\delta_{\nu, \uparrow} \sum_{J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \mathcal{F}_{i, J_z}(0) + \delta_{\nu, \downarrow} \sum_{J_z = \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \mathcal{F}_{i, J_z}(0) \right), \quad (7)$$

with $\mathcal{F}_{i, J_z}(0)$ being a form factor related to the charge density of the neutral hole state $|i\rangle$ at the center of the disk,

$$\mathcal{F}_{i, J_z}(0) = \delta_{m_z, 0} \frac{J_z}{|J_z|} \left(\sum_n \frac{A_{J_z, n}^i}{|J_1(\alpha_n^0)|} \right)^2. \quad (8)$$

The spectrum of the interacting hole and Mn complex calculated by $H_{\text{Mn}^0}^{QM}$ is limited to $T = 0$ K. At finite temperature one often tries to replace the full quantum mechanical problem by an effective mean field problem of either the Mn ion in the effective field of a hole or a hole in the effective field of the Mn ion. In this mean-field approach, we use the thermodynamical average of the hole spin to derive an effective (mean-field) Mn^0 Hamiltonian which accounts for the influence of finite temperature:

$$H_{Mn^0}^{MF}(S_z) = g\mu_B B S_z + \sum_i \varrho(E_i) (E_i + \beta B_{eff}^0(i) S_z), \quad (9)$$

where $\varrho(E_i) = Z e^{-\frac{(E_i - E_{GS})}{k_B T}}$ is the density matrix, with Z standing for its normalization constant, E_{GS} for the energy of the hole ground state, k_B for the Boltzmann constant and T for the temperature.

It is inferred from $\delta_{mz,0}$ in Eq.(8), that only one J_z component of each hole state $|i\rangle$ may yield a non-zero contribution to the effective field B_{eff}^0 . Moreover, Eq. (7) reveals explicit dependence of the effective magnetic field on the quantum disk size, in agreement with previous work of Efros et al.^{6,7}

To illustrate the effect of the hole on the Mn ion energy levels, we calculate the Zeeman spectrum of a neutral Mn^0 impurity in a model quantum disk of thickness $W=2$ nm and radius $R=5$ nm with an external magnetic field applied along the growth direction. We use both $H_{Mn^0}^{QM}$ and $H_{Mn^0}^{MF}$. A set of parameters close to InAs material is employed: Landé factor of Mn $g = 2.02$,²⁵ Luttinger parameters $\gamma_1 = 19.67$, $\gamma_2 = 8.37$ and $\gamma_3 = 9.29$, and an effective dielectric constant of 12.4. The low-lying states of the hole are expanded in up to $n = 15$ radial wavefunctions and obtained by diagonalization of the matrix representation of the Hamiltonian H_h , Eq.(2). It is found that, in absence of an external magnetic field, $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ and $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ form a two-fold degenerated ground state. When a magnetic field is applied, these two levels split and the ground state is given by $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$. For the magnetic field region we study, the magnitude of this splitting is much smaller than the energy spacing between $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ and the next excited state. Therefore, Equation (5) is a good approximation. The InAs value of β is unknown, however, we have found out that $\beta = -17.1 \text{ eV } \text{\AA}^3$ fits experimental observations for the Mn acceptor ground state in GaAs bulk¹⁶ by employing the model of Ref. 8 with $\mathcal{J}(r)$ replaced by $\delta(r)$. One may expect a similar hole exchange parameter for InAs, therefore we choose $\beta = -17 \text{ eV } \text{\AA}^3$.

Figure 2 illustrates the Zeeman spectrum of the Mn^0 complex. Dashed lines represent the twelve lowest energy levels given by $H_{Mn^0}^{QM}$ and solid lines the mean-field spectrum given by $H_{Mn^0}^{MF}$ at $T = 4$ K. The inset shows the non-interacting spectra of the Mn ion (dotted lines) and the hole levels $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ and $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ (solid lines) for comparison. The energy scale has been offset in all cases by the energy of the hole states at $B = 0$. According to the Ising $H_{Mn^0}^{QM}$, at $B = 0$ there are six two-fold degenerate levels. When an external

magnetic field is applied, the degenerate levels split. The levels arising from the parity up hole state (long period lines) increase in energy without ever crossing. However, the levels arising from the parity down hole state (short period lines) decrease in energy, cross parity up states, become degenerate at a special value of the magnetic field B ($B \approx 16.2$ T in Fig. 2), and finally reverse the order. This degeneracy follows from the cancellation of the atomic Zeeman splitting and the effective internal magnetic field,²⁶ due to the positive Landé factor of Mn and the antiferromagnetic hole exchange parameter of InAs ($\beta < 0$). At low magnetic fields, $|-3/2, \downarrow, 1\rangle |S_z = +5/2\rangle$ is the Mn^0 center ground state due to the $sp-d$ exchange interaction. However, at $B \approx 16.2$ T the atomic Zeeman effect already compensates the effective magnetic field and for larger external magnetic fields $|-3/2, \downarrow, 1\rangle |S_z = -5/2\rangle$ replaces $|-3/2, \downarrow, 1\rangle |S_z = +5/2\rangle$ as the Mn^0 center ground state.

The results of the mean field treatment of the hole are shown as solid lines in Fig. 2. At $B = 0$, there is no net effective magnetic field acting on the Mn ion. This is because the hole levels $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ and $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ are degenerate and cancel each other in Eq.(9). When an external magnetic field is applied, the hole becomes increasingly polarized, $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ starts gaining weight in Eq.(9) and therefore the effective magnetic field increases in strength. As a result, in the region of finite but weak external magnetic field ($0 < B < 2$ T), B_{eff}^0 leads to a large Zeeman splitting. The magnitude of this splitting at $B = 1.8$ T is 8.1 meV, and it is expected to be even larger if the central cell correction is included in the model, as the hole density will be localized closer to the Mn impurity. For larger magnetic fields ($B > 2$ T), the hole is already strongly polarized and thus the Mn^0 levels converge to those predicted with $H_{Mn^0}^{QM}$ for the parity down hole state.

Next we switch our device to negative bias and study the Zeeman spectrum of a Mn ion surrounded by two interacting holes (i.e., the positively charged acceptor) in an InAs quantum disk. The Hamiltonian of the positively charged acceptor is

$$H_{Mn^+} = g \mu_B B S_z + H_{ex}(1, 2) + H_h(1) + H_h(2) + V_{hh}(1, 2), \quad (10)$$

where $H_{ex}(1, 2) = H_{ex}(1) + H_{ex}(2)$ is the $sp-d$ exchange interaction between the spins of the two holes and that of the Mn ion, H_h is the one-body hole Hamiltonian given by Eq.(2) and V_{hh} is the hole-hole Coulomb interaction term. The above equation is solved in the basis of the hole states $|i\rangle = |F_z, \nu, k\rangle$, using the parity properties of the Coulomb interaction.²¹ The wavefunction of a two-hole complex corresponding to the p -th eigenvalue can be written

as a Slater determinant

$$\Phi_p(1, 2) = \sum_{i,j} C_{i,j}^p \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_i(1)\Psi_j(2) - \Psi_i(2)\Psi_j(1)), \quad (11)$$

where $C_{i,j}$ are expansion coefficients which can be classified by its total angular momentum z-projection, $F_{zT} = F_{z1} + F_{z2}$, and total parity, $\nu_T = \nu_1 + \nu_2$.

In our small quantum dot the energy spacing between the two-hole ground state, $|0\rangle$, and the first excited state is over 200 meV. Therefore, at low temperature the *sp-d* exchange interaction for the Mn center is well described by the expectation value in the state $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle 0|H_{ex}(1, 2)|0\rangle = & -\frac{\beta S_z}{WR^2} \left[\sum_{j, F_{z1}} \left(\delta_{\nu_1, \uparrow} \sum_{J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \mathcal{G}_{F_{z1}J_z, j}(0) + \delta_{\nu_1, \downarrow} \sum_{J_z = -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \mathcal{G}_{F_{z1}J_z, j}(0) \right) \right. \\ & \left. + \sum_{i, F_{z2}} \left(\delta_{\nu_2, \uparrow} \sum_{J_z = \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \mathcal{G}_{F_{z2}J_z, i}(0) + \delta_{\nu_2, \downarrow} \sum_{J_z = -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \mathcal{G}_{F_{z2}J_z, i}(0) \right) \right], \quad (12) \end{aligned}$$

where $\mathcal{G}_{F_z J_z, j}(0)$ is the form factor:

$$\mathcal{G}_{F_z J_z, j}(0) = \delta_{m_z, 0} \frac{J_z}{|J_z|} \left(\sum_k C_{F_z \nu k, j}^0 \sum_n \frac{A_{J_z \nu k}^{F_z \nu k}}{|J_1(\alpha_n^0)|} \right)^2. \quad (13)$$

Thus, the effective Hamiltonian of the Mn ion in the field of two holes can be written as:

$$H_{Mn^+} = E_0 + (g\mu_B B + \beta B_{eff}^+) S_z, \quad (14)$$

where E_0 is the energy of the two-hole ground state and the bracketed term is a sum of the external plus the effective internal magnetic fields, with $B_{eff}^+ = \frac{\langle 0|H_{ex}|0\rangle}{\beta S_z}$. As in the single hole case, in Eq.(12) each of the one-body wavefunctions of $|0\rangle$ contributes to the effective field with at most one J_z component, the sign of such a contribution depending on the one-body wavefunction parity and total angular momentum z-projection. Eventually, this may result in one hole contribution cancelling that of the second hole in Eq.(12). From the analogy between hole parity and electronic spin quantum numbers, one expects this cancellation to occur when the two holes form a closed shell configuration (with equal parity up and parity down weight).

Eigenvalues and eigenvectors of the Hamiltonian H_{Mn^+} , Eq.(10), are obtained by means of a configuration interaction method, taking the two lowest single-particle states of parity

up with $F_z = -3/2, \dots, 9/2$ and parity down with $F_z = -9/2, \dots, 3/2$. The $F_{zT} = 0$, singlet parity state is found as the ground state for the entire range of external magnetic fields under study. Figure 3 represents the energy spectrum of the Mn^+ complex in the presence of an external magnetic field using the same parameters as in Figure 2, with and without $sp-d$ exchange interaction (solid and dashed lines, respectively). The results show that the effective magnetic field arising from the $sp-d$ exchange interaction is indeed zero for an external magnetic field $B = 0$. The underlying reason is that, at $B = 0$, parity up terms exactly cancel out parity down terms in Eq.(12). When the external magnetic field is applied, the effective internal magnetic field slightly increases, but it remains negligible even for magnetic fields as high as 15 T, where the two-hole ground state still has singlet parity. This is clearly seen in the inset of Figure 3, where the $sp-d$ exchange energy of the Mn^+ level $|0 \rangle |S_z = -5/2 \rangle$ is depicted vs. the external magnetic field. Although the $sp-d$ exchange energy increases with increasing external magnetic field, at $B = 15$ T the energy splitting due to the effective magnetic field is of the order of tens of μeV . We can compare this splitting range with the few meV splitting of the Mn^0 complex in an external magnetic field (see Fig. 2).

The non-zero contribution of the $sp-d$ exchange energy when $B \neq 0$ can be explained in terms of the single hole picture. The external magnetic field increases the band mixing of hole states with parity down more than that of parity up states, causing their effective masses to increase.²¹ Therefore, in the presence of an external magnetic field the weight of the parity down component of the ground state increases while that of the parity up component decreases. As a result, the magnitude of contribution of the parity down component to the $sp-d$ exchange energy slightly exceeds that of the parity up component and a finite $sp-d$ exchange interaction is obtained despite of the singlet parity. For larger external magnetic fields ($B > 15$ T), the parity of the ground state is expected to change from singlet to triplet. Then, the effective internal magnetic field will abruptly increase and the spectrum will qualitatively resemble that of the Mn^0 complex.

Our calculations have been performed for the particular case of an impurity sitting in the middle of the disk. In a more realistic situation, the disk may be asymmetric and the impurity off-centered. Nonetheless, the formation of a singlet two-hole state within the dot, which strongly suppresses the effective exchange field acting on the Mn ion, results from Pauli exclusion principle and, therefore, is not restricted to any symmetry. If the dot was

asymmetric, the degeneracy of parity up and down states would be removed. Then, the picture would be similar to that we report in the presence of a magnetic field: There would still be a singlet-like state, although its effect on the exchange Hamiltonian would not lead to a perfect cancellation. Therefore, an asymmetric situation would only lead to a small departure from our ideal situation.

In summary, we have presented a model system which suggests electrical control of the magnetization of Mn ions in quantum dots by the control of the number of holes in its vicinity. We have calculated the Zeeman spectrum of a single Mn ion interacting with one and two valence holes in an InAs quantum disk. The single hole in a quantum dot results in an effective Ising like model hamiltonian. The hole introduces an effective magnetic field on the Mn ion levels yielding a large Zeeman splitting. This splitting can be controlled by the size of the quantum dot. When a second hole is added, a singlet-parity two-hole ground state is formed and the effective magnetic field is strongly suppressed. Therefore, the control over the number of confined holes in a single-ion doped III-V DMS QD provides a mechanism to switch on and off the *sp-d* exchange interaction. Spin resonance experiments are suggested to probe the energy levels of Mn spins in this system.

Acknowledgments

We thank A.H.MacDonald(Texas) and B.D.McCombe(Buffalo) for discussions. One of us (JIC) thanks the Institute for Microstructural Sciences for hospitality and financial support during the course of this study. Financial support from MEC-FPU grant and UJI-Bancaixa project P1-B2002-01 are gratefully acknowledged.

¹ M. Ohno, D. Chiba, F. Matsukura, T. Omiya, E. Abe, T. Dietl, Y. Ohno, and T. Ohtani, Nature **408**, 944 (2000).

² J.K. Furdyna, J. Appl. Phys. **64**, R29 (1988) and references therein.

³ P. Kacman, Semicond. Sci. Technol. **16**, R25 (2001) and references therein.

⁴ M. Abolfath, T. Jungwirth, J. Brum, and A.H. MacDonald, Phys. Rev. B **63**, 054418 (2001).

⁵ J. Fernández-Rossier, and L. Brey, Phys. Rev. Lett. **93**, 117201 (2004).

⁶ Al. L. Efros, and M. Rosen, Annual Review of Materials Science **30**, 475 (2000).

- ⁷ D.M. Hoffman, B.K. Meyer, A.I. Ekimov, I.A. Merkulov, Al. L. Efros, M. Rosen, G. Couino, T. Gacoin, and J.P. Boilot, *Solid State Commun.* **114**, 547 (2000).
- ⁸ A.K. Bhattacharjee, and C. Benoit a la Guillaume, *Solid State Commun.* **113**, 17 (2000).
- ⁹ A.K. Bhattacharjee, and C. Benoit a la Guillaume, *Phys. Rev. B* **55**, 10613 (1997).
- ¹⁰ A.O. Govorov, *Phys. Rev. B* **70**, 035321 (2004).
- ¹¹ K. Chang, S.S. Li, J.B. Xia, and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **69**, 235203 (2004).
- ¹² P. Hawrylak, M. Grabowski, and J.J. Quinn, *Phys. Rev. B* **44**, 13082 (1991).
- ¹³ L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum Dots*, (Springer Verlag, Berlin, 1998).
- ¹⁴ H. Drexler, D. Leonard, W. Hansen, J.P. Kotthaus, and P.M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2252 (1994).
- ¹⁵ J. Schneider, U. Kaufmann, W. Wilkening, M. Baeumler, and F. Köhl, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 240 (1987).
- ¹⁶ M. Linnarsson, E. Janzén, B. Monemar, M. Kleverman, and A. Thilderkvist, *Phys. Rev. B* **55**, 6938 (1997).
- ¹⁷ V.F. Sapega, M. Moreno, M. Ramsteiner, L. Däweritz, and K. Ploog, *Phys. Rev. B* **66**, 075217 (2002); V.F. Sapega, T. Ruf, and M. Cardona, *Solid State Commun.* **114**, 573 (2000).
- ¹⁸ A.M. Yakunin, A. Yu. Silov, P.M. Koenraad, W. Van Roy, J. De Boeck, and J.H. Wolter, in *Proceedings of the 11th International Conference on Modulated Semiconductor Structures*, (Nara, 2003), p.357.
- ¹⁹ L.G.C. Rego, J.A. Brum, and P. Hawrylak, *Physica E* **2**, 785 (1998).
- ²⁰ D.A. Broido, and L.J. Sham, *Phys. Rev. B* **31**, 888 (1985).
- ²¹ L.G.C. Rego, P. Hawrylak, J.A. Brum, and A. Wojs, *Phys. Rev. B* **55**, 15694 (1997).
- ²² The central cell correction would affect our results quantitatively. However, its value for Mn in an InAs strained quantum dot is unknown. Even if we assume it to be that of unstrained InAs, it would not qualitatively change the fact that the Mn-doped QD with one or two holes shows a dramatic variation of the magnetization.
- ²³ Z. R. Wasilewski, S. Fafard, and J. P. McCaffrey, *J. Cryst. Growth.* **201**, 1131 (1999).
- ²⁴ It should be noted that Eq.(3) states are not exactly eigenstates of the 4×4 Luttinger-Kohn Hamiltonian and can only be treated as variational functions. However, they capture the important quantum numbers of the system: the parity and the total angular momentum.
- ²⁵ C.A. Stowell, R.J. Wiacek, A.E. Saunders, and B.A. Korgel, *NanoLetters* **3**, 1441 (2003).

²⁶ K. Chang, J.B. Xia, and F.M. Peeters, Appl. Phys. Lett. **82**, 2661 (2003).

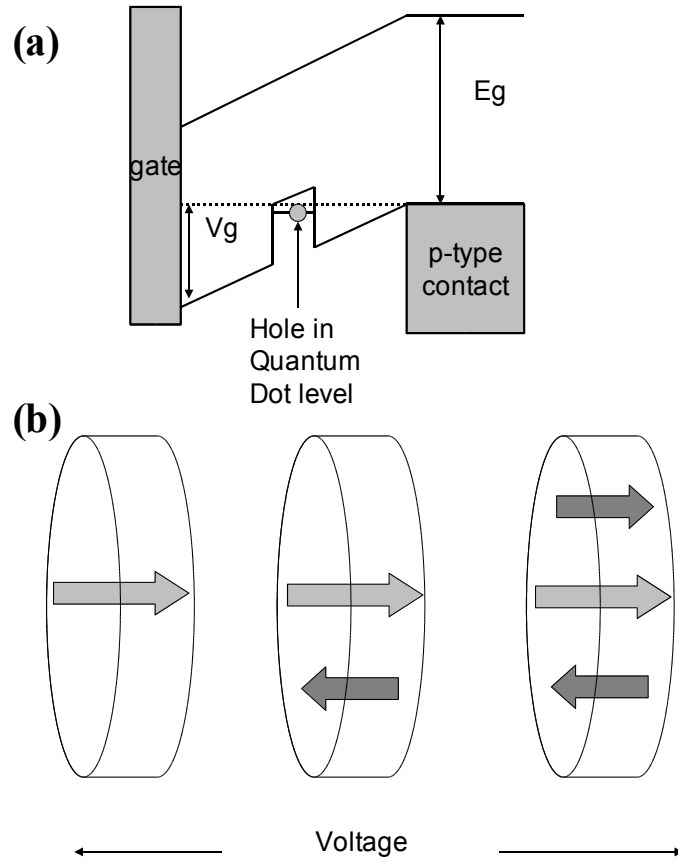


FIG. 1: (a) Schematic illustration of the device structure allowing voltage-control of the number of holes in a quantum dot. (b) Interacting spins in a III-V semiconductor quantum disk with one Mn ion under positive bias (left), zero bias (center) and negative bias (right). Light-shaded arrow corresponds to the Mn ion spin and dark arrows to valence holes spins.

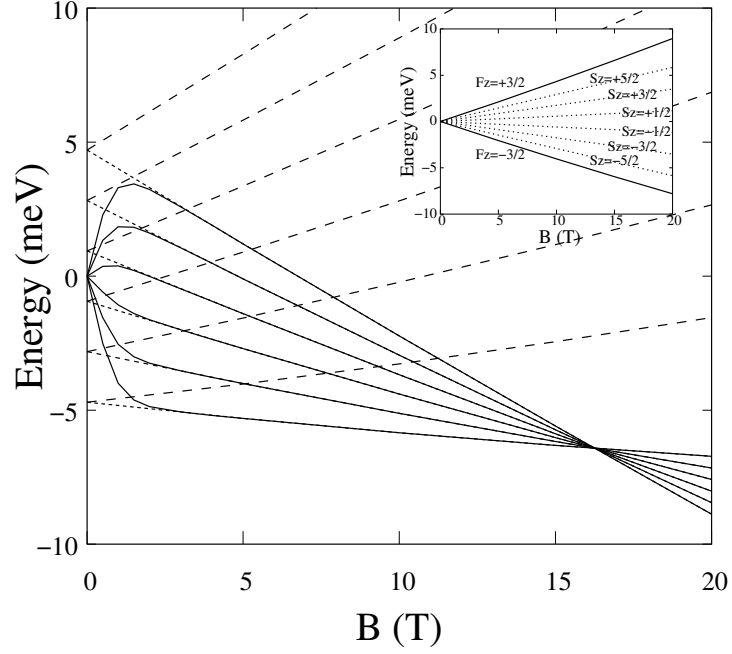


FIG. 2: Energy spectrum vs. magnetic field of a Mn ion bound to one valence hole in an InAs quantum disk, calculated with $H_{Mn^0}^{MF}$ at $T = 4$ K (solid lines) and with $H_{Mn^0}^{QM}$ (dashed lines). For dashed lines, long period lines represent the energy levels arising from the hole state $|3/2, \uparrow, 1\rangle$, whereas short period lines represent those arising from the state $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$. These spectra correspond to the zero bias operation mode of our model device. The inset shows the Zeeman splitting of the free hole states $|3/2, \uparrow, 1\rangle$ and $|-3/2, \downarrow, 1\rangle$ (solid lines) and that of a free Mn ion (dotted lines).

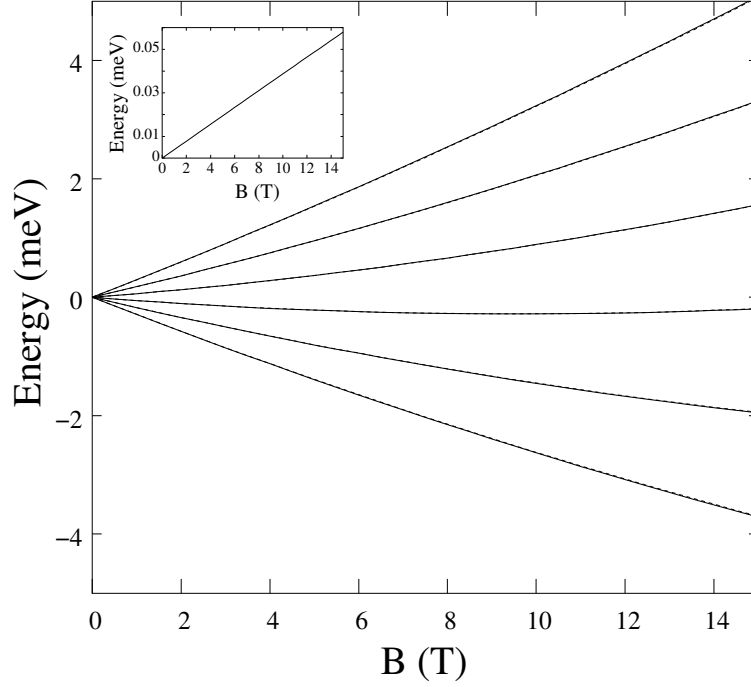


FIG. 3: Energy spectrum vs. magnetic field of a Mn ion bound to two valence holes in an InAs quantum disk, including (solid lines) and excluding (dashed lines) $sp-d$ exchange interaction. The interacting spectrum corresponds to the negative bias operation mode of our model device. The inset shows the $sp-d$ exchange energy corresponding to the Mn^+ level $|0\rangle |S_z = -5/2\rangle$ vs. an external magnetic field.

Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras.

Calculation of strain in quantum dots of arbitrary shape buried in a semiconductor matrix.

Fernando Rajadell, Josep Planelles y Juan Ignacio Climente

Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,
Apartado 224, E-12080 Castelló de la Plana, Spain
email: josep.planelles@exp.uji.es

Abstract

The present paper is an approach to the calculation of strain in quantum dots of arbitrary shape buried in a matrix. We assume the isotropic strain model, which has good performance and is not computationally heavy. We start from the definitions of strain and stress and the fundamental Navier equation. Then, the elasticity formalism is applied to the problem of spherical inclusion. Finally, using the superposition principle, we obtain the strain in an inclusion of arbitrary shape as a sum of effects coming from the inclusion of many small spheres. The resulting strain formula is a surface integral which can be numerically solved and compared to results published in recent scientific literature.

PACS: 73.21.La; 81.40.Jj

Introducción

Desde hace años hay un considerable interés en la síntesis, caracterización y estudio de puntos cuánticos, QDs, autoordenados. Éste viene sin duda estimulado por la posible utilización de estos QDs en nuevos nanodispositivos optoelectrónicos (tales como láseres de puntos cuánticos), fotodetectores, o su uso como puertas cuánticas en el procesado cuántico de la información, entre otras muchas aplicaciones [1,2,3].

Uno de los métodos más empleados para el crecimiento de QDs en matrices semiconductoras es el llamado método de Stranski-Krastanow [4] el cual permite un control de la densidad, tamaño, composición y forma de los puntos cuánticos, consiguiendo un producto con una alta homogeneidad. Las fuerzas de tensión son en parte responsables de ello. Una vez depositada una primera serie de puntos cuánticos sobre la matriz, y después de quedar éstos cubiertos de nuevo por material de la matriz, cada punto cuántico origina un campo de tensiones que promueve el ordenamiento vertical de los nuevos puntos cuánticos que se van depositando y cubriendo sucesivamente. De este modo se consiguen pilas ordenadas de QDs.

Las tensiones que quedan presentes provocan, a su vez, cambios en la estructura de las bandas del material obtenido. Básicamente, el borde de la banda de conducción se estabiliza/desestabiliza proporcionalmente a la deformación hidrostática, mientras que en la banda de valencia los huecos pesados y ligeros (que son degenerados en el punto Γ de la zona de Brillouin) rompen su degeneración proporcionalmente al campo de deformaciones biaxial, a la vez que también son afectados por la presión hidrostática, de manera similar a como lo es la banda de conducción [5]. Adicionalmente, el campo de tensiones genera un potencial piezoeléctrico, aunque éste es generalmente pequeño y, excepto en algunos casos concretos, contribuye poco a la energía electrónica.

Por todos estos motivos, entre otros, se hace necesario calcular el campo de tensiones/deformaciones en un QD. Los métodos que se emplean para su cálculo se pueden clasificar en dos categorías: modelos de elasticidad continua (continuous model CM) y modelos atomísticos (valence force field VFF). En general VFF y CM conducen a resultados que están en razonable acuerdo [6,7]. Dentro del modelo continuo, la descripción más simple se consigue con el modelo continuo isótropo (isotropic elasticity, IE) propuesto por Davies y Downes[8] el cual rinde resultados acordes con aquellos que se obtienen de modelos continuos anisótropos y atomísticos [9,10]. El método IE es conceptualmente simple, computacionalmente asequible y, desde el punto de vista de sus resultados, robusto.

En el presente artículo presentamos el método IE a partir de la ecuación básica de la elasticidad (ecuación de Navier). Los avatares de las reiteradas reformas de planes de estudio han hecho desaparecer el tema de la teoría de los tensores de elasticidad (deformación y tensión), su mutua relación y múltiples aplicaciones de los estudios de Ciencias en España y sólo se le presta atención en las escuelas de Ingeniería, con una obvia orientación hacia sus aplicaciones prácticas. Como complemento al presente resumen divulgativo y con el objeto de proporcionar al no especialista una aproximación didáctica al tema del cálculo del tensor de deformación en QDs de forma arbitraria enterrados en matrices semiconductoras, proporcionamos una versión extensa y completamente autocontenida de este artículo en la dirección electrónica <https://www3.uji.es/~planelle/strain.pdf>. Creemos que la programación de la fórmula de deformaciones y su aplicación a casos concretos donde pueden contrastarse con bibliografía reciente puede constituir una buena propuesta de práctica para estudiantes universitarios.

1. Deformaciones en el entorno de un punto. Tensores de deformación y de tensión.

La teoría de la elasticidad estudia la mecánica de los cuerpos sólidos considerándolos como medios continuos. Bajo la acción de las fuerzas aplicadas, los sólidos se deforman, es decir, cambian de forma y de volumen en mayor o menor grado. El concepto de tensor de deformación está ligado a las deformaciones dentro del sólido, mientras que el concepto de tensor de tensiones está relacionado con los agentes responsables de estas deformaciones, es decir, con las fuerzas.

Presentaremos una breve exposición de aquellos elementos necesarios de la elasticidad lineal que nos permitan abordar el estudio de la inclusión esférica como un paso intermedio al estudio de las deformaciones elásticas en los puntos cuánticos.

En lo que sigue, los medios continuos que consideraremos serán elásticos, isotrópicos y lineales. Así, existirá una relación lineal entre el tensor de deformación y el de tensiones (ley de Hooke), las propiedades mecánicas de los sólidos no tendrán direcciones preferentes y las deformaciones de los puntos materiales del sólido serán infinitesimos de primer orden.

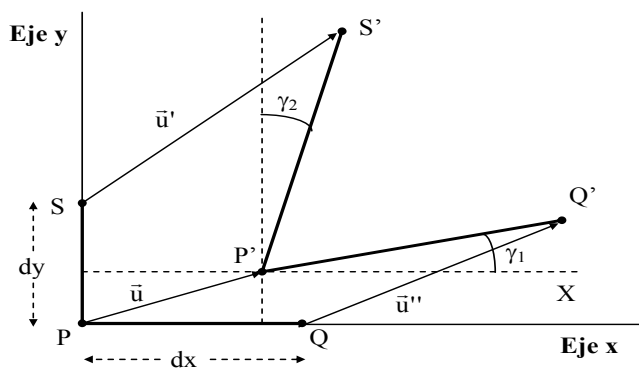
1.1. Tensor de deformación específica

La deformación específica está relacionada con la distorsión del material desde su posición de equilibrio. Cada punto \bar{r} del sólido se desplaza hasta una posición $\bar{r} + \bar{u}$, donde \bar{u} es el desplazamiento.

El tensor de deformación se define como $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial u_i / \partial j + \partial u_j / \partial i)$ donde $i, j = x, y, z$. El significado físico de sus componentes es el siguiente:

– Los términos diagonales ε_{ii} del tensor de deformación específica representan la diferencia de desplazamiento a lo largo del eje i , que experimentan dos puntos P y Q del sólido libre, distanciados la unidad en dicho eje, como consecuencia de la deformación.

– Los términos extradiagonales ε_{ij} ($j \neq i$) del tensor de deformación específica están asociados a un “efecto de cillaza” que la deformación exterior produce en sólido. Este efecto se traduce en la variación experimentada por el ángulo recto, de lados paralelos a los ejes i, j , determinado por tres puntos (S, P y Q) del sólido libre. Gráficamente:



De acuerdo con el significado físico dado, y a partir de la figura anterior, se tiene para ε_{xx} y ε_{xy} :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{u_x'' - u_x}{dx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}$$

Démonos cuenta que el tensor ε de deformación específica es simétrico. Esto se debe a que la parte antisimétrica de las derivadas del desplazamiento representan rotaciones puras sin deformación y deben excluirse.

1.2 Tensor de tensiones

Sobre un sólido pueden actuar dos tipos de fuerzas externas: fuerzas de volumen y fuerzas de superficie. Las fuerzas de volumen actúan sobre cada elemento de volumen del sólido. Un ejemplo de este tipo de fuerzas lo tenemos en el propio peso del cuerpo. Por el contrario, las fuerzas de superficie actúan sobre cada elemento de superficie del sólido.

Además de estas fuerzas externas existen fuerzas internas que provienen de las interacciones mutuas entre partes del sólido. En un cuerpo que no esté deformado, todas las partes del cuerpo se hallan en equilibrio mecánico. Esto significa que si consideramos una porción del sólido, la resultante de las fuerzas que actúan sobre ella, debida a todas las demás, es cero. Cuando ocurre una deformación el cuerpo abandona el estado de equilibrio original. Entonces aparecen fuerzas internas que tienden a llevar el cuerpo al estado de equilibrio. Estas fuerzas internas están relacionadas con las tensiones internas y son el origen del tensor de tensiones. Si no hay deformación no existen tensiones internas.

Las tensiones internas se deben a fuerzas entre las individualidades del material. Un hecho importante para la teoría de la elasticidad es que estas fuerzas tienen un “radio de acción” muy corto. Su efecto se extiende a la vecindad de la individualidad que la ejerce, hasta una distancia del orden de distancias atómicas, mientras que la teoría de la elasticidad, por ser una teoría macroscópica, sólo considera distancias grandes comparadas con las distancias atómicas. Podemos decir que las fuerzas que producen las tensiones internas son “fuerzas de corto alcance”. Por consiguiente, las que ejercen sobre cualquier parte del sólido las partes vecinas, sólo se ejercen sobre la superficie de dicha parte.

Para especificar la tensión σ en un elemento de superficie $d\vec{S}$ alrededor de un punto de la superficie, asumimos que el límite de la relación entre la fuerza $d\vec{f}$ aplicada en el elemento diferencial de superficie $d\vec{S}$ y el módulo de dicha superficie $|d\vec{S}|$, existe. Al

límite $\lim_{dS_j \rightarrow 0} \frac{df_i}{dS_j}$ lo denominamos tensión σ_{ij} . En general, el vector tensión no es normal

al elemento de superficie sobre el que actúa, y por tanto siempre podemos descomponerlo en sus componentes intrínsecas: *tensión normal*, perpendicular el elemento de superficie, y *tensión de cizalla* que actúa en el plano del elemento de superficie. El tensor de tensiones, al igual que sucedía con el tensor de deformación específica, es simétrico.

2. Ley de Hooke generalizada

En lo que sigue consideraremos que el material es elástico, isótropo, homogéneo y lineal. Un material es elástico cuando desaparecido el agente deformador, la forma y el tamaño vuelve a su aspecto original. Un material elástico se dice que es isótropo cuando las propiedades elásticas en un punto son las mismas independientemente de la dirección. Si las propiedades del material son las mismas en cualquier punto dentro del sólido, decimos que es homogéneo. Finalmente, un medio lineal es aquel en el que existe una relación lineal entre los tensores de deformación y de tensiones.

El concepto de elasticidad lineal fue introducido por Hooke en 1678 cuando postuló la ley “*ut tensio sic vis*”, que puede ser traducido como “*la extensión es proporcional a la fuerza*”. Cauchy y Poisson en 1820 desarrollaron, para un sólido elástico e isótropo, la relación lineal entre las componentes de los tensores de tensiones y deformación, que hoy conocemos como ley de Hooke generalizada.

Un sólido elástico isótropo se caracteriza por la coincidencia de los ejes principales de los tensores de deformación y de tensiones; además, poseen únicamente dos constantes elásticas independientes, por ejemplo: el módulo de Young (E) y coeficiente de Poisson (ν). Para cada una de las direcciones principales de los tensores de tensiones y de deformación se cumple pues la proporcionalidad:

$$\sigma_{ii} = E \varepsilon_{ii} \quad (ii = 1,2,3) \quad (1)$$

El coeficiente de Poisson expresa la proporcionalidad entre las deformaciones unitarias. En un cubo de aristas a, b y c, sometido a un estiramiento en la dirección de a, tendremos, de acuerdo con el concepto de coeficiente de Poisson,

$$|db/b|/(da/a) = |dc/c|/(da/a) = \nu \rightarrow |\varepsilon_2|/|\varepsilon_1| = |\varepsilon_3|/|\varepsilon_1| = \nu \quad (2)$$

Como ε_2 y ε_3 serán negativos ($db < 0$ y $dc < 0$), las igualdades anteriores las podemos escribir como $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -\nu \varepsilon_1$.

Puesto que la relación entre la tensión y la deformación es lineal, se cumplirá el principio de la superposición, el cual nos conducirá finalmente a la ley de Hooke generalizada:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \left(\sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr} \sigma \delta_{ij} \right) \quad (3)$$

Despejando σ_{ij} de la ecuación anterior obtenemos las llamadas ecuaciones de Lamé, que expresan las componentes del tensor de tensiones en función de las del tensor de deformación:

$$\sigma_{ij} = 2 \mu \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \lambda \text{tr} \varepsilon \quad (4)$$

donde $\mu = E/(2 + 2\nu)$ y $\lambda = \nu E/((1 + \nu)(1 - 2\nu))$ son los llamados coeficientes de Lamé.

3. Ecuación fundamental de la elasticidad

En un cuerpo elástico en equilibrio, las fuerzas internas se ajustan para hacer mínima la energía. Cuando las fuerzas internas no están en equilibrio es porque existe

deformación. La ecuación fundamental de la elasticidad (Navier) proporciona la relación de la fuerza \vec{f} con las apropiadas derivadas del vector desplazamiento \vec{u} :

$$\vec{f} = (\lambda + 2\mu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \mu\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} \quad (5)$$

4. El problema de la esfera hueca sometida a presiones constantes

En algunos problemas de elasticidad lineal la ecuación diferencial de Navier puede ser integrada analíticamente. Las constantes de integración las podemos obtener a partir de las condiciones de contorno. Este es el caso de la simetría esférica. Para una esfera maciza de radio R sometida a una presión P se obtiene finalmente:

$$u_r = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} r \quad \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} \quad (6)$$

Análogamente, en el caso de un medio elástico grande con una cavidad esférica de radio R, sometido a una presión hidrostática P se obtiene:

$$u_r = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^2}, \quad \varepsilon_{rr} = \frac{-P R^3}{2\mu} \frac{1}{r^3}, \quad \varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^3} \quad (7)$$

5. El problema de la inclusión esférica

En este problema vamos a considerar el caso en el que en una matriz de un cierto material 2, con una cavidad esférica de radio R despreciable frente a las dimensiones de la matriz, “embutimos” una esfera maciza de radio R+dR de un material distinto que llamaremos material 1. El material 1 (interior) ejerce una presión P sobre la superficie de la cavidad esférica de la matriz.

Este problema se resuelve combinando los dos resultados de la esfera maciza y la matriz con una cavidad esférica sometida a una presión desde dentro proveniente del material colocado. Cuando la esfera maciza se introduce en la matriz hueca, se produce un “acoplamiento forzado” entre las constantes de red de ambos materiales. Este hecho impone una condición de contorno para u_r que podemos expresar de la siguiente forma: $u_r^{(2)}(R) - u_r^{(1)}(R) = \varepsilon_0 R$, siendo ε_0 un parámetro que caracteriza lo forzado que resulta la inclusión correspondiente. Éste viene dado en términos de las constantes de red $a_0^{(i)}$ de los materiales en contacto: $\varepsilon_0 = a_0^{(1)} / a_0^{(2)} - 1$.

Sustituyendo las expresiones de u_r , contenidas en (6) y (7), en la condición frontera se obtiene la presión P que, cuando las constantes elásticas de la esfera y la matriz son iguales, resulta:

$$P = (2E \varepsilon_0) / (3(1 - \nu)) \quad (8)$$

Llevando (8) a las expresiones de ε_{rr} , $\varepsilon_{\theta\theta}$ y $\varepsilon_{\phi\phi}$, dentro y fuera de la inclusión, se tiene:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(1)} = -2(1 - 2\nu)\varepsilon_0 / (3(1 - \nu)) \quad (9)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(2)} = \frac{(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (10)$$

6. Deformaciones en inclusiones con forma arbitraria

A partir de la solución para la inclusión esférica, se puede obtener una solución para una inclusión de forma arbitraria. Al igual que hemos considerado en la inclusión esférica, el material incluido y la matriz serán isótropos y tendrán idénticas constantes elásticas (módulo de Young y coeficiente de Poisson).

La estrategia consiste en considerar la inclusión de forma arbitraria y volumen V_0 como superposición de inclusiones esféricas de volumen unidad y evaluar y superponer (sumar) las deformaciones y tensiones que provocan en los puntos interiores y en los exteriores a V_0 . La suma (principio de la superposición) de todas las contribuciones provenientes de las inclusiones esféricas de volumen unidad, interiores a la inclusión arbitraria, nos dará la deformación y la tensión debidas a la totalidad de la inclusión arbitraria. Como en las secciones anteriores, los detalles pormenorizados de las definiciones, demostraciones y ejemplos pueden encontrarse en la versión autocontenida accesible en <https://www3.uji.es/~planelle/strain.pdf>.

La expresión para las componentes del tensor de deformación resulta:

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = -\varepsilon_0 \delta_{ij} q + \frac{1+\nu}{E} \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) \quad (11)$$

donde $q = 0,1$ para puntos exteriores/interiores a la inclusión arbitraria y donde la integral doble se realiza sobre la superficie que delimita la inclusión de forma arbitraria.

En la ecuación anterior el vector \bar{A}_{ij} está definido según:

$$\bar{A}_{ij} = -\frac{E \varepsilon_0}{8\pi(1-\nu)} \frac{x_i \bar{e}_j + x_j \bar{e}_i}{|\vec{r}|^3}. \quad (12)$$

La ecuación (11) puede usarse tanto para el caso en que el punto cuántico tenga menor constante de red que la matriz (ε_0 será positivo), como en el caso contrario (lo cual implica un valor negativo de ε_0), de acuerdo con el criterio asumido en la definición del parámetro ε_0 .

La ecuación (11), excepto para geometrías muy simples, no tiene integración analítica. Por ello, en la práctica, debemos recurrir a la integración numérica. La discretización implícita en la integración numérica reemplaza la superficie continua por una superficie formada por cuadrados muy pequeños, cuyo vector superficie es paralelo a alguno de los ejes coordenados.

Hay que tener presente que la ecuación (11) la hemos obtenido para puntos \vec{r} dentro o fuera del punto cuántico, pero no para puntos exactamente en la superficie matemática que separa la inclusión de la matriz. Podemos hacer el cálculo en puntos separados una distancia muy pequeña de la superficie, pero nunca en la superficie. Esto, desde el punto de vista práctico, no supone ningún problema.

Un ejercicio interesante que proponemos es la integración numérica de la ecuación (11) para un punto cuántico esférico de radio R . El resultado que se obtiene coincidirá con los resultados que se derivan de las ecuaciones analíticas. Esta comparación puede

servir además para determinar la precisión del cálculo numérico al variar el grado de discretización. Finalmente, es recomendable reproducir algunos cálculos de la bibliografía reciente como, por ejemplo, los que podemos encontrar en las referencias [8,10]. Así, a título de ejemplo, en la figura 2a, representamos un punto cuántico cuya forma coincide con una sección de un toroide según un plano perpendicular al eje z. En la figura 2b hemos plasmado el cálculo de la componente ε_{zz} del tensor de deformación, en unidades ε_0 , frente a la distancia x (u.a.) medida desde el centro del toroide.

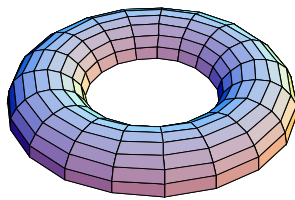


Figura 2a

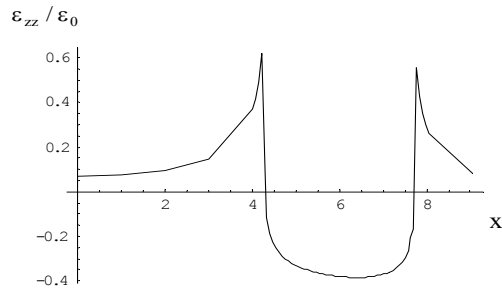


Figura 2b

Agradecimientos

Agradecemos el soporte financiero del proyecto UJI-Bancaixa P1-B2002-01 y de una beca MEC-FPU.

Bibliografía

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (Wiley, Chichester, 1998).
- [2] L. Jacak, P. Hawrylak and A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998)
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier, Amsterdam, 1999)
- [4] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3203.
- [5] John P. Loehr, *Physics of Strained Quantum Well Lasers*, (Kluwer, Boston 1998).
- [6] C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, and A. Zunger, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 2548.
- [7] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 5688.
- [8] J.H. Davies, *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 1358; J.R. Downes, D.A. Faux, and E.P. O'Reilly, *J. Appl. Phys.*, 81 (1997) 6700.

[9] M. Tadic, F.M. Peeters, K.L. Janssens, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 5819.

[10] M. Tadic, F.M. Peeters and K.L. Janssens *Phys. Rev. B* 65 (2002) 165333

Textos generales sobre teoría de la elasticidad

L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995)

Ortiz Berrocal Luis, *Elasticidad*, (Mc CrawHill, Buenos Aires, 1998)

Ajit K. Mal and Sarva Jit Singh, *Deformation of Elastic Solids* (Prentice Hall, New Jersey, 1991)

Feynman Richard y Leighton Robert B., *Física* (volumen II) (Addison-Wesley Iberoamericana, Mexico, 1987)

Cálculo del tensor de deformaciones en puntos cuánticos enterrados en matrices semiconductoras.

Fernando Rajadell, Josep Planelles y Juan Ignacio Climente

Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,
Apartado 224, E-12080 Castelló de la Plana, Spain
email: josep.planelles@exp.uji.es

Abstract

The present paper is a pedagogical approach to the calculation of strain in quantum dots of arbitrary shape buried in a matrix. We assume the isotropic strain model, which has good performance and is not computationally heavy. The paper is self-contained: we start from the definitions of strain and stress and obtain the Navier equation. Then, the elasticity formalism is applied to the problem of spherical inclusion. Finally, using the superposition principle, we obtain the strain in an inclusion of arbitrary shape as a sum of effects coming from the inclusion of many small spheres. The resulting strain formula is a surface integral which can be numerically solved and compared to results published in recent scientific literature.

PACS: 73.21.La; 81.40.Jj

Introducción

Desde hace años hay un considerable interés en la síntesis, caracterización y estudio de puntos cuánticos, QDs, autoordenados. Éste viene sin duda estimulado por la posible utilización de estos QDs en nuevos nanodispositivos optoelectrónicos (tales como láseres de puntos cuánticos), fotodetectores, o su uso como puertas cuánticas en el procesado cuántico de la información, entre otras muchas aplicaciones [1,2,3].

Uno de los métodos más empleados para el crecimiento de QDs en matrices semiconductoras es el llamado método de Stranski-Krastanow [4] el cual permite un control de la densidad, tamaño, composición y forma de los puntos cuánticos, consiguiendo un producto con una alta homogeneidad. Las fuerzas de tensión son en parte responsables de ello. Una vez depositada una primera serie de puntos cuánticos sobre la matriz, y después de quedar éstos cubiertos de nuevo por material de la matriz, cada punto cuántico origina un campo de tensiones que promueve el ordenamiento vertical de los nuevos puntos cuánticos que se van depositando y cubriendo sucesivamente. De este modo se consiguen pilas ordenadas de QDs.

Las tensiones que quedan presentes provocan, a su vez, cambios en la estructura de las bandas del material obtenido. Básicamente, el borde de la banda de conducción se estabiliza/desestabiliza proporcionalmente a la deformación hidrostática, mientras que en la banda de valencia los huecos pesados y ligeros (que son degenerados en el punto Γ de la zona de Brillouin) rompen su degeneración proporcionalmente al campo de deformaciones biaxial, a la vez que también son afectados por la presión hidrostática, de manera similar a como lo es la banda de conducción [5]. Adicionalmente, el campo de tensiones genera un potencial piezoeléctrico, aunque éste es generalmente pequeño y, excepto en algunos casos concretos, contribuye poco a la energía electrónica.

Por todos estos motivos, entre otros, se hace necesario calcular el campo de tensiones/deformaciones en un QD. Los métodos que se emplean para su cálculo se pueden clasificar en dos categorías: modelos de elasticidad continua (continuous model CM) y modelos atomísticos (valence force field VFF). En general VFF y CM conducen a resultados que están en razonable acuerdo [6,7]. Dentro del modelo continuo, la descripción más simple se consigue con el modelo continuo isótropo (isotropic elasticity, IE) propuesto por Davies y Downes[8] el cual rinde resultados acordes con aquellos que se obtienen de modelos continuos anisótropos y atomísticos [9,10]. El método IE es conceptualmente simple, computacionalmente asequible y, desde el punto de vista de sus resultados, robusto.

En el presente artículo derivaremos el método IE a partir de la ecuación básica de la elasticidad (ecuación de Navier) con el objeto de proporcionar al no especialista una aproximación didáctica al tema. Creemos que la programación de la fórmula de deformaciones y su aplicación a casos concretos donde pueden contrastarse con la bibliografía puede constituir una buena propuesta de práctica para estudiantes universitarios.

1. Deformaciones en el entorno de un punto. Tensores de deformación y de tensión.

La teoría de la elasticidad estudia la mecánica de los cuerpos sólidos considerándolos como medios continuos. Bajo la acción de las fuerzas aplicadas, los sólidos se deforman, es decir, cambian de forma y de volumen en mayor o menor grado. Como veremos, el concepto de tensor de deformación está ligado a las deformaciones dentro del sólido, mientras que el concepto de tensor de tensiones está relacionado con los agentes responsables de estas deformaciones, es decir, con las fuerzas.

En este apartado presentaremos una breve exposición de aquellos elementos necesarios de la elasticidad lineal que nos permitan abordar el estudio de la inclusión esférica como un paso intermedio al estudio de las deformaciones elásticas en los puntos cuánticos.

En lo que sigue, los medios continuos que consideraremos serán elásticos, isótropos y lineales. Así, existirá una relación lineal entre el tensor de deformación y el de tensiones (ley de Hooke), las propiedades mecánicas de los sólidos no tendrán direcciones preferentes y las deformaciones de los puntos materiales del sólido serán infinitésimos de primer orden.

1.1 Tensor de deformación específica

Consideremos un sólido elástico inicialmente no deformado y sean P y Q dos puntos del mismo infinitamente próximos.

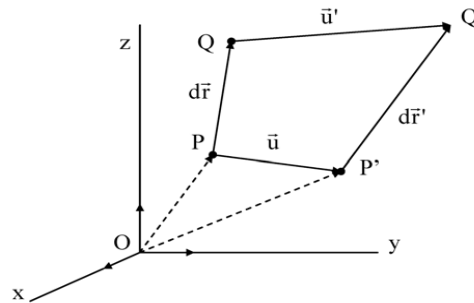


Figura 1

Producida una pequeña deformación, el punto P pasa al P' y el punto Q al Q'. Representaremos por \vec{u} el desplazamiento de P' respecto de P y por \vec{u}' el de Q' respecto de Q. En coordenadas cartesianas:

$$\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j} + u_z \vec{k} \quad \vec{u}' = u'_x \vec{i} + u'_y \vec{j} + u'_z \vec{k} \quad (1)$$

Teniendo en cuenta que los desplazamientos \vec{u} y \vec{u}' son infinitesimales, podemos expresar las componentes de \vec{u}' en función de las de \vec{u} y de sus derivadas mediante un desarrollo de Taylor hasta primer orden:

$$u'_i = u_i + \frac{\partial u_i}{\partial x} dx + \frac{\partial u_i}{\partial y} dy + \frac{\partial u_i}{\partial z} dz \quad (i = x, y, z) \quad (2)$$

Las ecuaciones (2) pueden representarse como $[\bar{u}'] = [\bar{u}] + [M][d\bar{r}]$ (3)

donde $[\bar{u}']$, $[\bar{u}]$ y $[d\bar{r}]$ son matrices 3x1 y $[M]$ es una matriz 3x3 cuyos elementos son $m_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$.

La matriz $[M]$ podemos descomponerla como suma de una matriz simétrica y otra antisimétrica según

$$[M] = \frac{[M] + [M]^T}{2} + \frac{[M] - [M]^T}{2} = [D] + [H] \quad (4)$$

donde $[M]^T$ es la matriz transpuesta de $[M]$.

De la figura 1 se desprende $\bar{u} + d\bar{r}' = d\bar{r} + \bar{u}' \rightarrow d\bar{r}' = d\bar{r} + (\bar{u}' - \bar{u})$, que expresada en forma matricial y teniendo en cuenta las ecuaciones (3) y (4), así como el concepto de matriz identidad, conduce a

$$[d\bar{r}'] = [I][d\bar{r}] + ([D] + [H])[d\bar{r}] = [D][d\bar{r}] + [I + H][d\bar{r}] \quad (5)$$

La matriz simétrica $[D]$ es lo que denominamos tensor de deformación específica. Sus elementos son del tipo

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

$[I+H]$ es una matriz infinitesimal y, por ser $[H]$ antisimétrica, ortogonal; cuyos elementos son del tipo $\delta_{ij} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, donde δ_{ij} es el delta de Kronecker.

La matriz $[I+H]$, al aplicarla al vector $d\bar{r}$, le produce un giro pero le conserva el módulo. En cambio el tensor de deformación específica $[D]$ cuando aplica a $d\bar{r}$ le produce, en general, un cambio de módulo y de dirección.

Al ser $[D]$ un tensor simétrico, existirán, en un punto P del sólido, tres direcciones perpendiculares entre sí tales que el vector dado por la transformación $[D][d\bar{r}]$ no cambia de dirección, sino únicamente de módulo. Estas tres direcciones son las llamadas direcciones principales del tensor de deformación. Para cualquier vector $d\bar{r}$, cuya dirección coincida con alguna de las tres direcciones principales del tensor de deformación, se verificará

$$[D][d\bar{r}] = \varepsilon [d\bar{r}] \rightarrow [D - \varepsilon I][d\bar{r}] = [\vec{0}] \quad (7)$$

La ecuación matricial (7) constituye un sistema de ecuaciones homogéneo cuya condición de compatibilidad proporciona la ecuación característica

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{xx} - \varepsilon & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} - \varepsilon & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

La ecuación (8) constituye una ecuación cúbica en ε cuyas raíces ε_1 , ε_2 y ε_3 se denominan deformaciones principales.

La traza del tensor de deformación específica es un invariante respecto de cualquier rotación, suele denominarse invariante lineal (o dilatación cúbica unitaria). Si lo representamos por e , tendremos

$$e = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \text{div } \vec{u} \quad (9)$$

Los términos del tensor de deformación específica tienen la siguiente interpretación:

a) Los términos ε_{ii} ($i = x, y, z$) de la diagonal representan la diferencia de desplazamientos a lo largo del eje i que experimentan dos puntos P y Q, distanciados la unidad a lo largo del mencionado eje en el sólido libre, como consecuencia de la deformación. Veamos como ejemplo el caso de ε_{xx} :

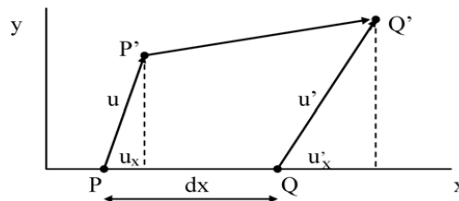


Figura 2

La deformación del sólido afecta desigualmente a los puntos P y Q. P pasa a P' (se deforma u_x en la dirección x) y Q pasa a Q' (se deforma u'_x en la dirección x).

De acuerdo con lo anterior,
$$\varepsilon_{xx} = \frac{u'_x - u_x}{dx} = \frac{u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx - u_x}{dx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$$

(Idéntica interpretación para los restantes términos de la diagonal, ε_{yy} y ε_{zz}).

b) Los elementos extradiagonales del tensor de deformación están asociados a un “efecto de cizalla” que se traduce en la variación experimentada por el ángulo, inicialmente recto, de lados paralelos a los ejes etiquetados en la correspondiente componente extradiagonal del tensor de deformación. Consideremos, por ejemplo, el

término
$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right);$$

En la figura siguiente, figura 3, la deformación implica que P pasa a P', S pasa a S' y Q pasa a Q'. Además, en el estado inicial no deformado, los segmentos PQ y PS forman un ángulo recto.

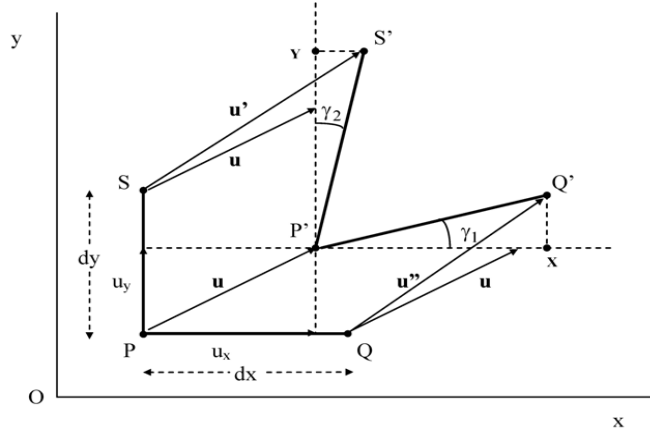


Figura 3

En la figura anterior se tienen las siguientes distancias:

$$\overline{P'Y} = \overline{PS} + u'_y - u_y = dy + \frac{\partial u_y}{\partial y} dy = \left(1 + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right) dy \quad (10.1)$$

$$\overline{YS'} = u'_x - u_x = \frac{\partial u_x}{\partial y} dy \quad (10.2)$$

$$\overline{XQ'} = u''_y - u_y = \frac{\partial u_y}{\partial x} dx \quad (10.3)$$

$$\overline{P'X} = \overline{PQ} + u''_x - u_x = dx + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx = \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right) dx, \quad (10.4)$$

De la figura 3 y de las ecuaciones (10), aceptando que $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ y $\frac{\partial u_y}{\partial y}$ son despreciables

$$\text{como sumandos frente a 1, se tiene } \text{tg}\gamma_1 \cong \gamma_1 = \frac{\partial u_y}{\partial x} \text{ y } \text{tg}\gamma_2 \cong \gamma_2 = \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (11)$$

$$\text{con lo cual } \epsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \quad (12)$$

Obsérvese que si ϵ_{ij} ($i \neq j$) es positivo, el ángulo inicialmente recto disminuye. En cambio, si es negativo, dicho ángulo aumenta.

1.2 Tensor de tensiones

Sobre un sólido pueden actuar dos tipos de fuerzas externas: fuerzas de volumen y fuerzas de superficie. Las fuerzas de volumen actúan sobre cada elemento de volumen del sólido. Un ejemplo de este tipo de fuerzas lo tenemos en el propio peso del cuerpo.

Por el contrario, las fuerzas de superficie actúan sobre cada elemento de superficie del sólido.

Además de estas fuerzas externas existen fuerzas internas que provienen de las interacciones mutuas entre partes del sólido. En un cuerpo que no esté deformado, todas las partes del cuerpo se hallan en equilibrio mecánico. Esto significa que si consideramos una porción del sólido, la resultante de las fuerzas que actúan sobre ella, debida a todas las demás, es cero. Cuando ocurre una deformación el cuerpo abandona el estado de equilibrio original. Entonces aparecen fuerzas internas que tienden a llevar el cuerpo al estado de equilibrio. Estas fuerzas internas están relacionadas con las tensiones internas y son el origen del tensor de tensiones. Si no hay deformación no existen tensiones internas.

Las tensiones internas se deben a fuerzas entre las individualidades del material. Un hecho importante para la teoría de la elasticidad es que estas fuerzas tienen un “radio de acción” muy corto. Su efecto se extiende a la vecindad de la individualidad que le ejerce, hasta una distancia del orden de distancias atómicas, mientras que la teoría de la elasticidad, por ser una teoría macroscópica, sólo considera distancias grandes comparadas con las distancias atómicas. Podemos decir que las fuerzas que producen las tensiones internas son “fuerzas de corto alcance”. Por consiguiente, las que ejercen sobre cualquier parte del sólido las partes vecinas, sólo se ejercen sobre la superficie de dicha parte.

Consideremos una parte del sólido elástico ocupando una región V encerrada por la superficie S en el estado deformado. De acuerdo con lo anterior, la acción del material exterior ($R-V$) ejercerá sobre V unas fuerzas externas localizadas en la frontera S . Se admite que tales fuerzas están distribuidas de forma continua sobre S . Los elementos de volumen dV interiores a V , por el principio de acción y reacción, ejercerán fuerzas que se cancelarán mutuamente.

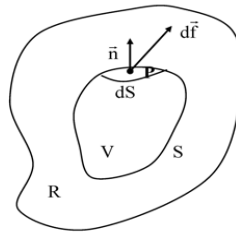


Figura 4

Para especificar la tensión en un elemento de superficie dS alrededor del punto P de S , asumimos que $d\vec{f}$ compensa la resultante de las fuerzas internas, debidas a las interacciones entre individualidades, sobre el elemento de superficie dS , y que el límite

$\lim_{dS \rightarrow 0} \frac{d\vec{f}}{dS}$ existe. Así, este límite es lo que denominamos vector tensión en el punto P :

$$\vec{\sigma} = \lim_{dS \rightarrow 0} \frac{d\vec{f}}{dS} \quad (13)$$

En general, el vector tensión no es normal al elemento de superficie dS sobre el que actúa, y por tanto siempre podemos descomponerlo en sus componentes intrínsecas:

tensión normal, perpendicular el elemento de superficie dS , y *tensión de cizalla* que actúa en el plano del elemento de superficie dS . Alternativamente, podemos resolver la tensión en sus componentes cartesianas. Para ello consideremos un pequeño elemento cúbico cuyos lados son paralelos a los ejes de coordenadas x, y, z .

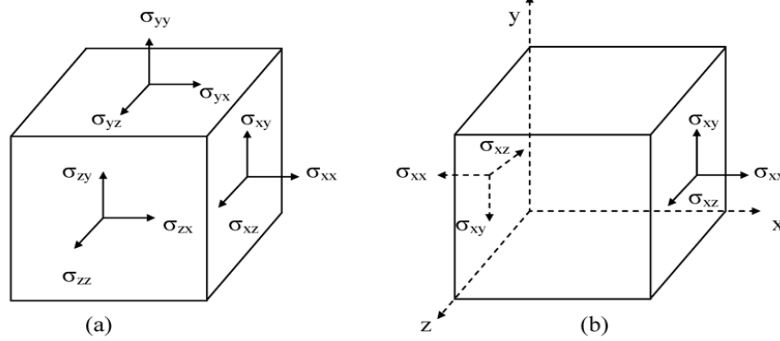


Figura 5

En la figura 5 vemos que las componentes de la tensión actuando en la cara del cubo normal al eje x y en el sentido positiva son $(\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz})$. Análogamente, para las caras perpendiculares a los ejes y, z , tenemos, respectivamente, $(\sigma_{yx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz})$ y $(\sigma_{zx}, \sigma_{zy}, \sigma_{zz})$. Estas componentes, dispuestas matricialmente, nos dan el tensor de tensiones

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Las componentes $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ representan las *tensiones normales* y las restantes componentes $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yx}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}, \sigma_{zy}$ representan las *tensiones de cizalla*. Por convenio, la *tensión normal* en una superficie será positiva cuando produzca tensión y negativa si produce compresión del material dentro del elemento. El sentido positivo de cualquier componente de las *tensiones de cizalla*, en cualquier cara del elemento cúbico, se hace coincidir con el sentido positivo (negativo) del eje coordenado si la *tensión normal*, en la misma cara, coincide con el sentido positivo (negativo) del correspondiente eje. Esta regla está ilustrada en la figura 5(b), indicando los sentidos positivos de $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}$ correspondientes a dos caras, del elemento cúbico, normales a la dirección del eje x .

A continuación vamos a demostrar que el tensor de tensiones, al igual que sucedía con el tensor de deformación específica, es simétrico. Para ello consideremos el equilibrio de un pequeño paralelepípedo rectangular con centro en el punto $P(x, y, z)$ y longitudes de lados iguales a dx, dy, dz . Con estas condiciones, los centros de las seis caras serán

$$\left(x \pm \frac{1}{2}dx, y, z\right), \quad \left(x, y \pm \frac{1}{2}dy, z\right) \quad \left(x, y, z \pm \frac{1}{2}dz\right)$$

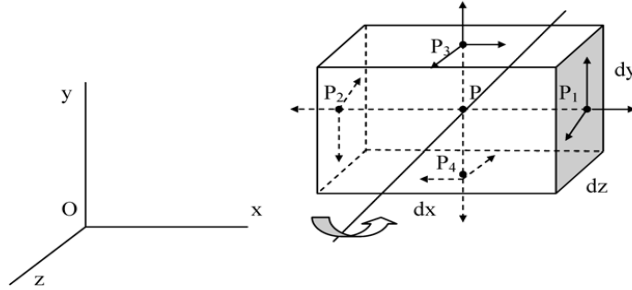


Figura 6

Si las componentes del tensor de tensiones en el punto P son σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yx} , σ_{yy} , ..., σ_{zz} , entonces dichas componentes en las caras de centros P₁, P₂, P₃ y P₄ serán

$$\text{En } P_1(x+dx/2, y, z): \quad \sigma_{xx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xz} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} dx$$

$$\text{En } P_2(x-dx/2, y, z): \quad \sigma_{xx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx, \quad \sigma_{xz} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} dx$$

$$\text{En } P_3(x, y+dy/2, z): \quad \sigma_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yz} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} dy$$

$$\text{En } P_4(x, y-dy/2, z): \quad \sigma_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} dy, \quad \sigma_{yz} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} dy$$

El equilibrio para el pequeño elemento de volumen paralelepípedo implica que no exista rotación alrededor de ningún eje, por ejemplo del eje dibujado en la figura 6 que pasa por P y es paralelo al eje z. Por ello, el momento resultante de todas las fuerzas, respecto de ejes que pasen por P y sean paralelos a los ejes coordenados, deben ser separadamente cero.

El equilibrio respecto de la rotación alrededor del eje dibujado en la figura 6, teniendo en cuenta que la tensión es fuerza/superficie, da lugar a la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} dx \left(\sigma_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx \right) dz dy + \frac{1}{2} dx \left(\sigma_{xy} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx \right) dz dy = \\ = \frac{1}{2} dy \left(\sigma_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy \right) dx dz + \frac{1}{2} dy \left(\sigma_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy \right) dx dz \end{aligned}$$

Dividiendo la anterior igualdad por dx dy dz y simplificando obtenemos $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$.

De forma análoga podemos demostrar $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$ y $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$.

Vemos, por tanto, que el tensor de tensiones es simétrico, por lo que sólo es necesario conocer seis de las nueve componentes.

Si representamos por $[T]$ el tensor de tensiones, el vector tensión $[\bar{\sigma}]$ en un plano π del sólido, cuyo vector director sea $[\bar{n}_\pi]$, vendrá dado por

$$[\bar{\sigma}] = [T] [\bar{n}_\pi] \quad (14)$$

(en la ecuación (14), los vectores $[\bar{\sigma}]$ y $[\bar{n}_\pi]$ están escritos como matrices columna)

Al ser $[T]$ un tensor simétrico, siempre podemos encontrar tres direcciones, mutuamente perpendiculares, para las que el vector tensión de la ecuación (14) sea paralelo al vector $[\bar{n}_\pi]$. En estas condiciones la ecuación (14) se escribirá como $[\bar{\sigma}] = [T] [\bar{n}_\pi] = \sigma [\bar{n}_\pi]$ (donde σ es un escalar). Introduciendo la matriz identidad $[I]$, la anterior ecuación puede escribirse como

$$[T] [\bar{n}_\pi] = \sigma [I] [\bar{n}_\pi]$$

o equivalentemente

$$[T - \sigma I] [\bar{n}_\pi] = [\bar{0}] \quad (15)$$

La ecuación matricial (15) constituye un sistema de ecuaciones homogéneo cuya condición de compatibilidad proporciona la ecuación característica

$$\begin{vmatrix} \sigma_{xx} - \sigma & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} - \sigma & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} - \sigma \end{vmatrix} = 0 \quad (16)$$

La ecuación (16) constituye una ecuación cúbica en σ , cuyas raíces σ_1 , σ_2 y σ_3 se denominan tensiones principales.

2. Ley de Hooke generalizada

Hasta este punto, hemos considerado la descripción matemática de los tensores de deformación y de tensiones sin entrar en consideraciones acerca de la naturaleza específica del material. Para continuar en la formulación matemática, necesitamos introducir ecuaciones adicionales que relacionen las componentes de ambos tensores en un sólido determinado. En lo que sigue consideraremos que el material es elástico, isótropo, homogéneo y lineal. Un material es elástico cuando desaparecido el agente deformador, la forma y el tamaño vuelve a su aspecto original. Un material elástico se dice que es isótropo cuando las propiedades elásticas en un punto son las mismas independientemente de la dirección. Si las propiedades del material son las mismas en cualquier punto dentro del sólido, decimos que es homogéneo. Finalmente, un medio lineal es aquel en el que existe una relación lineal entre los tensores de deformación y de tensiones.

El concepto de elasticidad lineal fue introducido por Hooke en 1678 cuando postuló la ley “*ut tensio sic vis*”, que puede ser traducido como “*la extensión es proporcional a la fuerza*”.

En sólidos tridimensionales necesitamos seis componentes del tensor de deformación para describir la deformación en un punto. Similarmente, la especificación completa de las fuerzas internas actuando en un punto requiere el uso de las seis componentes del tensor de tensiones. Cauchy y Poisson en 1820 desarrollaron, para un sólido elástico,

isótropo, la relación lineal entre las componentes de los tensores de tensiones y deformación, que hoy conocemos como ley de Hooke generalizada.

Un sólido elástico isótropo se caracteriza por la coincidencia de los ejes principales de los tensores de deformación y de tensiones; además, poseen únicamente dos constantes elásticas independientes, por ejemplo: el módulo de Young (E) y coeficiente de Poisson (ν).

Para cada una de las direcciones principales de los tensores de tensiones y de deformación se cumple la proporcionalidad:

$$\sigma_i = E \varepsilon_i \quad (i = 1,2,3) \quad (17)$$

La extensión del material en una dirección, por ejemplo la dirección principal 1, lleva asociada la contracción del material en las dos restantes direcciones principales perpendiculares

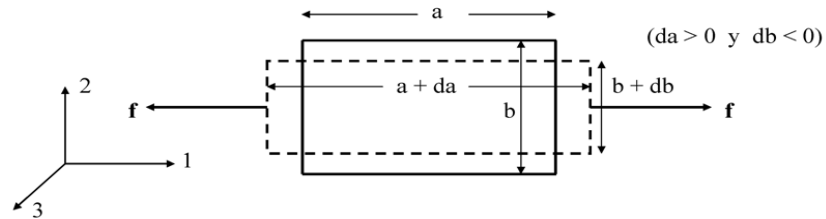


Figura 7

El coeficiente de Poisson expresa la proporcionalidad entre las deformaciones unitarias. Extendiendo mentalmente la figura 7 a la tercera dimensión de la barra estirada únicamente en la dirección 1, tendremos, de acuerdo con el concepto de coeficiente de Poisson,

$$\frac{|db/b|}{da/a} = \frac{|dc/c|}{da/a} = \nu \rightarrow \frac{|\varepsilon_2|}{\varepsilon_1} = \frac{|\varepsilon_3|}{\varepsilon_1} = \nu \quad (18)$$

Como ε_2 y ε_3 serán negativos ($db < 0$ y $dc < 0$), las igualdades (18) podemos escribirlas como $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -\nu \varepsilon_1$

En la figura 7 vemos que la deformación se realiza en la dirección principal 1, por tanto, de acuerdo con la ecuación (17), $\varepsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E}$; con lo cual la expresión (19) podemos

escribirla en la forma $\varepsilon_i = -\nu \frac{\sigma_1}{E}$ (donde la dirección principal $i \neq 1$)

Puesto que la relación entre la tensión y la deformación es lineal, se cumplirá el principio de la superposición. Por tanto, estamos en condiciones de poder obtener la deformación unitaria, en un elemento de volumen y en una dirección principal, cuando sobre el elemento de volumen actúan simultáneamente tensiones en las tres direcciones principales. Consideremos, para ello, un elemento de volumen de forma cúbica, cuyas aristas tengan longitud unidad y direcciones coincidentes con las direcciones principales del tensor de tensiones:

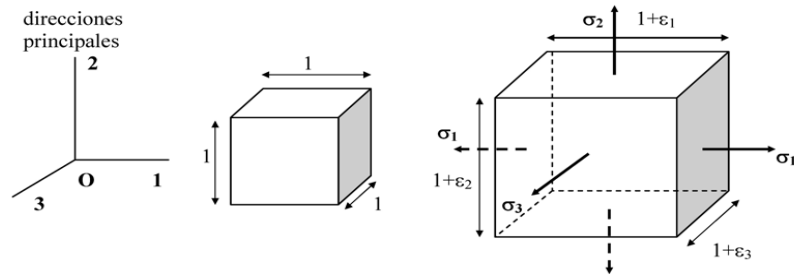


Figura 8

En las deformaciones que hemos considerado, las direcciones principales de los tensores de deformación y de tensiones coinciden en todo momento.

De acuerdo con el principio de superposición, la deformación unitaria en una dirección principal será la suma del efecto, sobre ella, de las tres tensiones principales. Así, de acuerdo con las ecuaciones (17) y (19), tendremos:

$$\varepsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E} - \nu \frac{\sigma_2}{E} - \nu \frac{\sigma_3}{E} \rightarrow \varepsilon_1 = \frac{1}{E} (\sigma_1 - \nu (\sigma_2 + \sigma_3))$$

ecuación, ésta última, que genéricamente podemos escribir en la forma

$$\varepsilon_i = \frac{1}{E} (\sigma_i - \nu (\text{tr}\sigma - \sigma_i)) \text{ o equivalentemente, } \varepsilon_i = \frac{1+\nu}{E} \left(\sigma_i - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma \right) \quad (20)$$

(donde $i = 1, 2, 3$ y $\text{tr}\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$)

La ecuación (20) constituye la ley de Hooke generalizada para las direcciones principales de los tensores de deformación y de tensiones.

En un sistema de referencia Oxyz, resultado de una rotación [R] arbitraria del sistema de ejes principales Ox* y z* (O123 en la figura 8), las expresiones matriciales de los tensores de tensiones σ y σ^* vienen relacionados por esta misma matriz de rotación según:

$$[\sigma] = [R]^+ [\sigma^*] [R] \quad (21)$$

donde, recordemos, el tensor $[\sigma^*]$ es diagonal.

En estos nuevos ejes, el tensor de deformación $[\varepsilon]$ puede escribirse, teniendo en cuenta las ecuaciones (20) y (21), como

$$[\varepsilon] = [R]^+ [\varepsilon^*] [R] = \frac{1+\nu}{E} [R]^+ \left([\sigma^*] - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma [I] \right) [R]$$

$$[\varepsilon] = \frac{1+\nu}{E} \left([\sigma] - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma [I] \right) \quad (22)$$

donde su elemento ε_{ij} se particulariza como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \left(\sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \text{tr}\sigma \delta_{ij} \right) \quad (23)$$

De la ecuación (23) podemos obtener la relación entre las trazas de los tensores de deformación y de tensiones:

$$\text{tr}\varepsilon = \frac{1-2\nu}{E} \text{tr}\sigma \quad (24)$$

Despejando σ_{ij} de la ecuación (23) y teniendo en cuenta (24), obtenemos las ecuaciones de Lamé, que expresan las componentes del tensor de tensiones en función de las del tensor de deformación

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \lambda \text{tr}\varepsilon \quad (25)$$

donde los coeficientes $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ son los coeficientes de Lamé. (26)

3. Ecuación fundamental de la elasticidad

En un cuerpo elástico en equilibrio, las fuerzas internas se ajustan para hacer mínima la energía. Veamos qué sucede cuando las fuerzas internas no están en equilibrio. Para ello consideremos un trozo pequeño de material, de volumen V , encerrado en una superficie S .

Si el trozo está en equilibrio, $\vec{F} = 0$.

Podemos considerar \vec{F} como suma de dos contribuciones: $\vec{F} = \vec{F}_{\text{ext}} + \vec{F}_{\text{int}}$.

La contribución exterior puede ser debida a fuerzas tales como la gravedad que actúan a distancia produciendo una fuerza por unidad de volumen \vec{f}_{ext} . Así, $\vec{F}_{\text{ext}} = \int_V \vec{f}_{\text{ext}} dV$.

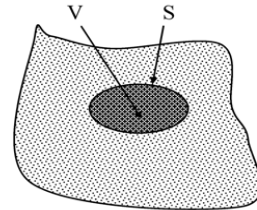


Figura 9

En el equilibrio esta fuerza exterior estaría equilibrada por la fuerza total interior, \vec{F}_{int} , proveniente del material cercano que actúa a través de la superficie S . Si el trozo de material no está en equilibrio,

$$\vec{F}_{\text{int}} + \int_V \vec{f}_{\text{ext}} dV = \int_V \rho \vec{f} dV \rightarrow \vec{F}_{\text{int}} = \int_V (-\vec{f}_{\text{ext}} + \rho \vec{f}) dV \rightarrow \vec{F}_{\text{int}} = \int_V \vec{f} dV \quad (27)$$

donde ρ es la densidad del material y \vec{f} el vector aceleración.

Lo que hemos llamado \vec{F}_{int} está relacionado con las tensiones o esfuerzos en el material. El vector tensión, $\vec{\sigma}$, en cualquier punto de la superficie S caracterizado por el vector unitario normal \vec{n} , viene dado por $[\vec{\sigma}] = [T] [\vec{n}]$. Si denominamos dS a un elemento de superficie de S y tenemos en cuenta que $\vec{\sigma} = \frac{d\vec{F}_{int}}{dS}$, las componentes de la ecuación

matricial anterior serán

$$\frac{dF_{int,i}}{dS} = \sigma_{ix} n_x + \sigma_{iy} n_y + \sigma_{iz} n_z \rightarrow dF_{int,i} = \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS \quad (i,k = x,y,z) \quad (28)$$

Integrando (28) a toda la superficie S y teniendo en cuenta (27) obtenemos

$$\int_V \vec{f}_i dV = \int_S \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS \quad (29)$$

Desde un punto de vista matemático, $\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k$ representa el producto escalar del vector $\vec{\sigma}_i$ por \vec{n} . La integral de superficie que aparece en la ecuación (29) representa, por tanto, el flujo de $\vec{\sigma}_i$ que sale del volumen V a través de la superficie S. Lo cual, de acuerdo con el teorema de la divergencia, se puede escribir como la integral de volumen de la divergencia de $\vec{\sigma}_i$ extendida a todo el volumen V:

$$\int_S \left(\sum_{k=1}^3 \sigma_{ik} n_k \right) dS = \int_S \vec{\sigma}_i \cdot \vec{n} dS = \int_V (\nabla \cdot \vec{\sigma}_i) dV = \int_V \left(\frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} \right) dV \quad (30)$$

$$\text{De (29) y (30) se tiene: } f_i = \frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} \quad (i = x,y,z). \quad (31)$$

Para obtener la ecuación fundamental de la elasticidad, es decir la relación de la fuerza \vec{f} con las apropiadas derivadas del vector desplazamiento \vec{u} , combinamos las ecuaciones (31) y (25). Obtenemos:

$$f_i = 2\mu \left(\frac{\partial \varepsilon_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{iz}}{\partial z} \right) + \lambda \frac{\partial \text{tr} \varepsilon}{\partial x_i} \quad (x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z) \quad (32)$$

Las derivadas de las componentes del tensor de deformación, así como la derivada de su traza, podemos obtenerlas de la expresión (6). Haciendo esto para cada una de las expresiones implícitas en la ecuación (32), obtenemos:

$$f_x = (\lambda + \mu) \frac{\partial (\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial x} + \mu \nabla^2 u_x, \quad f_y = (\lambda + \mu) \frac{\partial (\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial y} + \mu \nabla^2 u_y, \\ f_z = (\lambda + \mu) \frac{\partial (\vec{\nabla} \cdot \vec{u})}{\partial z} + \mu \nabla^2 u_z$$

Las anteriores ecuaciones constituyen las componentes x,y,z de la ecuación vectorial

$$\boxed{\vec{f} = (\lambda + \mu) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) + \mu \nabla^2 \vec{u}} \quad (33)$$

La ecuación (33) se conoce con el nombre de ecuación de Navier.

Haciendo uso de la identidad vectorial $\nabla^2 \vec{u} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u}$, la ecuación de Navier puede expresarse también como

$$\vec{f} = (\lambda + 2\mu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \mu\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} \quad (34)$$

4. El problema de la esfera hueca sometida a presiones constantes

En algunos problemas de elasticidad lineal la ecuación diferencial de Navier puede ser integrada analíticamente. Las constantes de integración las podemos obtener a partir de las condiciones de contorno. La simetría esférica del problema que abordamos a continuación hace que sea didácticamente adecuado. Además, tiene un interés adicional porque podemos considerarlo como un problema previo al de la inclusión esférica.

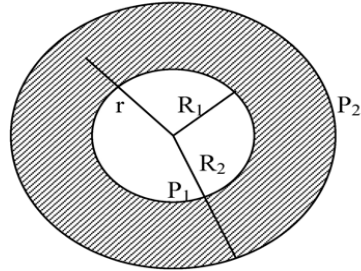


Figura 10

Condiciones de contorno:

$$\sigma_{rr}(R_1) = -P_1$$

$$\sigma_{rr}(R_2) = -P_2$$

La simetría esférica implica:

$$u_r = u_r(r); \quad u_\theta = u_\phi = 0 \quad (35)$$

y por consiguiente $\vec{u} = u_r \vec{e}_r$, donde \vec{e}_r es un vector unitario radial

Como suponemos que no hay fuerzas de volumen ni aceleraciones dentro del material, la ecuación de Navier, ecuación (34), queda $(\lambda + 2\mu)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \mu\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{u} = 0$. Además, la simetría radial implica $\vec{\nabla} \times (u_r \vec{e}_r) = 0$. En estas condiciones la ecuación de Navier queda reducida a

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot (u_r \vec{e}_r)) = 0 \rightarrow \vec{\nabla}(u_r \vec{e}_r) = \text{cte} \quad (36)$$

Utilizando el operador divergencia en coordenadas esféricas,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 A_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(A_\theta \sin \theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_\phi}{\partial \phi}$$

y teniendo en cuenta (35), obtenemos

$$\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 u_r)}{dr} = \text{cte} \rightarrow u_r = a r + \frac{b}{r^2} \quad (37)$$

En coordenadas esféricas los elementos diagonales del tensor de deformación son

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}; \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right); \quad \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \sin \theta u_r + \cos \theta u_\theta \right) \quad (38)$$

En este caso los elementos extradiagonales, debido a la simetría esférica, son nulos.

De las ecuaciones (35) y (38) tenemos

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{u_r}{r} \quad (39)$$

$$\text{De (37) y (39):} \quad \varepsilon_{rr} = a - \frac{2b}{r^3}; \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = a + \frac{b}{r^3} \quad (40)$$

A partir de (40), utilizando la ecuación de Lamé, ecuación (25), podemos obtener

$$\sigma_{rr} = (2\mu + 3\lambda)a - \frac{4\mu b}{r^3} \quad \sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = (2\mu + 3\lambda)a + \frac{2\mu b}{r^3} \quad (41)$$

Es inmediato comprobar que, en este caso, también los elementos extradiagonales del tensor de tensiones son nulos.

De las ecuaciones (41), teniendo en cuenta las condiciones de contorno del problema ($\sigma_{rr}(R_1) = -P_1$, $\sigma_{rr}(R_2) = -P_2$), obtenemos las constantes a y b

$$a = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} \quad b = \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \quad (42)$$

Finalmente, llevando estos valores de a y b a las ecuaciones (37), (40) y (41) obtenemos

$$u_r = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} r + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^2} \quad (43.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} - \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.2)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(2\mu + 3\lambda)(R_2^3 - R_1^3)} + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{4\mu(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.3)$$

$$\sigma_{rr} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(R_2^3 - R_1^3)} - \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.4)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = \frac{P_1 R_1^3 - P_2 R_2^3}{(R_2^3 - R_1^3)} + \frac{R_1^3 R_2^3 (P_1 - P_2)}{2(R_2^3 - R_1^2)} \frac{1}{r^3} \quad (43.5)$$

Como caso particular del problema que estamos tratando, podemos considerar el caso de una esfera maciza de radio R sometida a una presión P. Las fórmulas anteriores son aplicables haciendo $R_1 = 0$, $R_2 = R$ y $P_2 = P$. Se obtiene:

$$u_r = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} r \quad (44.1) \quad \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\phi\phi} = \frac{-P}{2\mu + 3\lambda} \quad (44.2)$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\phi\phi} = -P \quad (44.3)$$

Todavía podemos contemplar un segundo caso particular del problema que estamos considerando. Se trataría de obtener el desplazamiento u_r y las componentes diagonales de los tensores de deformación y de tensiones para el caso de un medio elástico grande con una cavidad esférica de radio R , sometido a una compresión hidrostática. Para ello hacemos, en las ecuaciones (43), $R_2 \gg R_1 = R$. Se obtiene:

$$u_r = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} r + \frac{(P_1 - P_2) R^3}{4\mu} \frac{1}{r^2} \quad (45.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} - \frac{(P_1 - P_2) R^3}{2\mu} \frac{1}{r^3} \quad (45.2)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{-P_2}{2\mu + 3\lambda} + \frac{(P_1 - P_2) R^3}{4\mu} \frac{1}{r^3} \quad (45.3)$$

$$\sigma_{rr} = -P_2 - (P_1 - P_2) \frac{R^3}{r^3} \quad (45.4)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = -P_2 + \frac{1}{2}(P_1 - P_2) \frac{R^3}{r^3} \quad (45.5)$$

Si suponemos que P_2 es cero y $P_1 = P$, las ecuaciones anteriores quedarán

$$u_r = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^2} \quad (46.1)$$

$$\varepsilon_{rr} = \frac{-P R^3}{2\mu} \frac{1}{r^3} \quad (46.2)$$

$$\sigma_{rr} = -P R^3 \frac{1}{r^3} \quad (46.4)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{P R^3}{4\mu} \frac{1}{r^3} \quad (46.3)$$

$$\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{\theta\theta} = \frac{P R^3}{2} \frac{1}{r^3} \quad (46.5)$$

5. El problema de la inclusión esférica

En este problema vamos a considerar el caso en el que en una matriz de un cierto material 2, con una cavidad esférica de radio R despreciable frente a las dimensiones de la matriz, “embutimos” una esfera maciza de radio $R+\delta R$ de un material distinto que llamaremos material 1. El material 1 (interior) ejerce una presión P sobre la superficie de la cavidad esférica de la matriz.

Este problema lo resolveremos combinando los dos resultados que hemos obtenido, como casos particulares, en el problema anterior de la esfera hueca: la esfera maciza y la matriz con una cavidad esférica sometida a una presión desde dentro proveniente del material colocado.

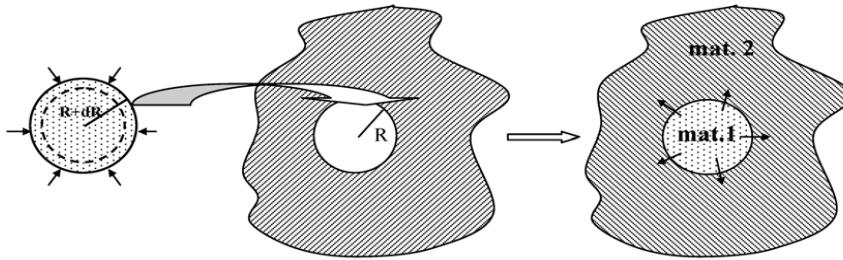


Figura 11

Supondremos que a una distancia r muy grande, contada desde el centro de la inclusión esférica, la presión es nula. Así, para la matriz podemos utilizar las ecuaciones (46).

Cuando la esfera maciza se introduce en la matriz hueca, se produce un “acoplamiento forzado” entre las constantes de red de ambos materiales. Este hecho impone una condición de contorno para u_r que podemos derivar de la siguiente forma:

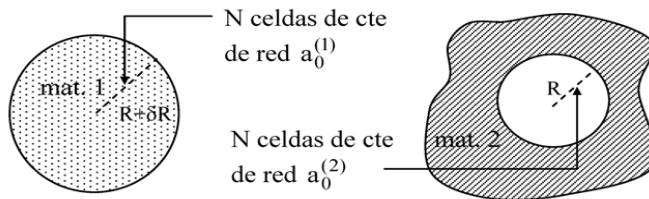


Figura 12

$$\left. \begin{array}{l} N a_0^{(1)} = R + \delta R \\ N a_0^{(2)} = R \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{a_0^{(1)}}{a_0^{(2)}} = 1 + \frac{\delta R}{R} \Rightarrow \delta R = R \left(\frac{a_0^{(1)}}{a_0^{(2)}} - 1 \right) \Rightarrow \delta R = R \varepsilon_0$$

siendo $\varepsilon_0 = a_0^{(1)} / a_0^{(2)} - 1$ un parámetro que caracteriza lo forzado que resulta la inclusión correspondiente.

Asimilando este δR a la diferencia del desplazamiento u_r en la superficie de contacto entre los materiales 1 y 2, tendremos $u_r^{(2)}(R) - u_r^{(1)}(R) = \varepsilon_0 R$ (47)

Particularizando la solución de la esfera maciza, ecuación (44.1), para $r = R$, tendremos

$$u_r^{(1)}(R) = \frac{-P}{2\mu_1 + 3\lambda_1} R \quad (48.1)$$

Asimismo, de las soluciones para un medio con una cavidad esférica, ecuación (46.1), para $r = R$, se tiene

$$u_r^{(2)} = \frac{P R}{4\mu_2} \quad (48.2)$$

Llevando (48.1) y (48.2) a la ec. (47) se tiene $P = \frac{\varepsilon_0}{1/(2\mu_1 + 3\lambda_1) + 1/(4\mu_2)}$. Ecuación

en la que al sustituir las expresiones de las constantes de Lamé, ecs (26), conduce a

$$P = \frac{\varepsilon_0}{(1 - 2\nu_1)/E_1 + (1 + \nu_2)/(2E_2)} \quad (49)$$

Si las constantes elásticas de la esfera (material 1) y de la matriz (material 2) se suponen iguales, la ecuación (49) queda

$$P = \frac{2E \varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (50)$$

Para este último caso, donde tiene validez la ecuación (50), podemos obtener las expresiones de u_r , ε_{rr} , $\varepsilon_{\theta\theta}$, $\varepsilon_{\phi\phi}$, σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$ y $\sigma_{\phi\phi}$ dentro y fuera de la inclusión. En efecto,

a) *Dentro de la inclusión:* sustituimos la ecuación (50) en las ecuaciones (44) y tenemos en cuenta las ecuaciones (26) para las constantes de Lamé. De esta forma obtenemos

$$u_r^{(1)} = -\frac{2(1 - 2\nu) \varepsilon_0}{3(1 - \nu)} r \quad (51.1)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(1)} = -\frac{2(1 - 2\nu)\varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (51.2) \quad \sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = \sigma_{\phi\phi}^{(1)} = -\frac{2E\varepsilon_0}{3(1 - \nu)} \quad (51.3)$$

b) *Fuera de la inclusión:* sustituimos la ecuación (50) en las ecuaciones (46) y tenemos en cuenta las ecuaciones (26) para las constantes de Lamé. Se obtiene

$$u_r^{(2)} = \frac{(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^2} \quad (52.1)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.2) \quad \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = \varepsilon_{\phi\phi}^{(2)} = \frac{(1 + \nu)\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.3)$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{2E\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.4) \quad \sigma_{\theta\theta}^{(2)} = \sigma_{\phi\phi}^{(2)} = \frac{E\varepsilon_0 R^3}{3(1 - \nu)} \frac{1}{r^3} \quad (52.5)$$

Un ejemplo de inclusión esférica lo podemos encontrar en un punto cuántico esférico de InAs de radio R incluido en una matriz muy grande del material GaAs. Se supone que

ambos medios son isotrópicos y que las constantes elásticas son las mismas para los dos tipos de material. Un punto cuántico de esta naturaleza puede ser generado mediante la siguiente secuencia estándar de procesos:

- Se comienza con una muestra de GaAs (matriz) a la que se le extrae una esfera de radio R que constituirá el punto.
- Se transmuta este material extraído a InAs en un ambiente relajado. De esta forma, debido a que la constante de red del InAs es mayor que la del GaAs, se expande una fracción ϵ_0 de su tamaño original: $\epsilon_0 = a_0^{InAs} / a_0^{GaAs} - 1 \cong 0,072$.
- Se aplica una presión hidrostática para reducir el volumen del punto hasta su valor original.
- Finalmente, se introduce el punto en la cavidad original y se permite su relajación. Esto provoca un desplazamiento radial u_r y, por consiguiente, una presión en el propio punto y en material más próximo de la matriz.

6. Deformaciones en inclusiones con forma arbitraria

En este apartado veremos cómo, a partir de la solución para la inclusión esférica, podemos obtener una solución para una inclusión de forma arbitraria. Al igual que hemos considerado en la inclusión esférica, el material incluido y la matriz serán isotrópicos y tendrán idénticas constantes elásticas (módulo de Young y coeficiente de Poisson).

El procedimiento, y la forma en que hacemos uso del resultado de la inclusión esférica, se vislumbra en el siguiente esquema:

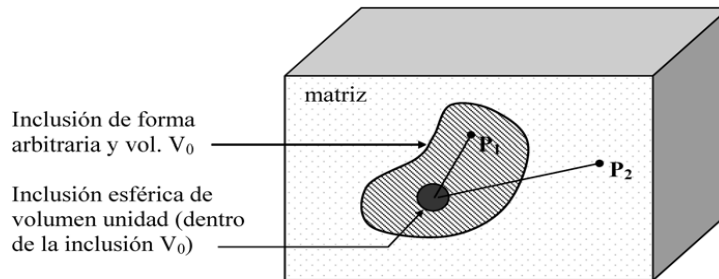


Figura 13

La estrategia consiste en considerar la inclusión de forma arbitraria y volumen V_0 como superposición de inclusiones esféricas de volumen unidad y evaluar y superponer (sumar) las deformaciones y tensiones que provocan en los puntos interiores a V_0 , como el punto P_1 , y en los exteriores a V_0 como el P_2 . La suma (principio de la superposición) de todas las contribuciones provenientes de las inclusiones esféricas de volumen unidad, interiores a la inclusión arbitraria, nos dará la deformación y la tensión debidas a la totalidad de la inclusión arbitraria.

De acuerdo con lo anterior, el desplazamiento, por unidad de volumen de inclusión arbitraria, en puntos tales como P_1 y P_2 , se obtendrá a partir de la ecuación (52.1) dividiendo por el volumen $(4/3)\pi R^3$ de la inclusión (téngase en cuenta que la mencionada ecuación es únicamente válida para inclusiones esféricas y en puntos exteriores a la inclusión). Si denominamos \tilde{u}_r a este desplazamiento por unidad de volumen, se tiene

$$\tilde{u}_r = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{1}{r^2} \quad (53)$$

Debido a la simetría radial de la *subinclusión* esférica de volumen unidad podemos escribir

$$\tilde{\mathbf{u}}_r = \tilde{u}_r \frac{\vec{r}}{r} \xrightarrow{\text{ec. (53)}} \tilde{\mathbf{u}}_r = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k}}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \quad (54)$$

De la ecuación (54) se desprende que

$$\tilde{u}_{x_i} = \frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{x_i}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(3/2)}} \quad (\text{donde } x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z) \quad (55)$$

De la ecuación (55) podemos obtener las componentes del tensor de deformación específica (que serán también por unidad de volumen de inclusión). Teniendo en cuenta

que $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{x_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{x_j}}{\partial x_i} \right)$, obtenemos las siguientes expresiones:

$$\tilde{\varepsilon}_{xx} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{2x^2 - y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \quad \tilde{\varepsilon}_{yy} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{-x^2 + 2y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}}$$

$$\tilde{\varepsilon}_{zz} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{-x^2 - y^2 + 2z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}}$$

$$\tilde{\varepsilon}_{xy} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3xy}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \quad \tilde{\varepsilon}_{xz} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3xz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}}$$

$$\tilde{\varepsilon}_{yz} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3yz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}}$$

Estas componentes del tensor de deformación por unidad de volumen de inclusión pueden escribirse, de acuerdo con la simbología utilizada en la ec. (55), como:

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = -\frac{\varepsilon_0 (1 + \nu)}{4\pi (1 - \nu)} \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(5/2)}} \quad (\text{siendo } x_1=x, x_2=y, x_3=z) \quad (56)$$

Ahora ya estamos en condiciones de evaluar las componentes del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión. Para ello utilizaremos la ecuación de Lamé,

ecuación (25), en la que previamente habremos sustituido los coeficientes μ y λ según las ecuaciones (26). La ecuación de Lamé queda en la forma

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left\{ (1-2\nu) \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \nu tr \varepsilon \right\} \quad (57)$$

Llevando las ecuaciones (56) a la ecuación (57) obtenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{xx} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{2x^2 - y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{yy} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{-x^2 + 2y^2 - z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\sigma}_{zz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{-x^2 - y^2 + 2z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{xy} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3xy}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \\ \tilde{\sigma}_{yz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3yz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} & \tilde{\sigma}_{xz} &= -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3xz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{(5/2)}} \end{aligned}$$

Al igual que hemos hecho con las componentes del tensor de deformación, las anteriores expresiones del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión, podemos escribirlas conjuntamente como

$$\tilde{\sigma}_{ij}(x_1, x_2, x_3) = -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{3x_i x_j - \delta_{ij}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{(5/2)}} \quad (58)$$

donde hemos explicitado el punto arbitrario (x_1, x_2, x_3) en el que se define $\tilde{\sigma}_{ij}$.

La ecuación (58) permite calcular las componentes del tensor de tensiones por unidad de volumen de inclusión. Si aplicamos el principio de la superposición podemos hallar las componentes del tensor de tensiones, en un punto P cualquiera, como la integral de las componentes elementales anteriores extendida a todo el volumen de la inclusión arbitraria. No debemos olvidar que las coordenadas que aparecen en las ecuaciones (58) están referidas a la inclusión esférica elemental.

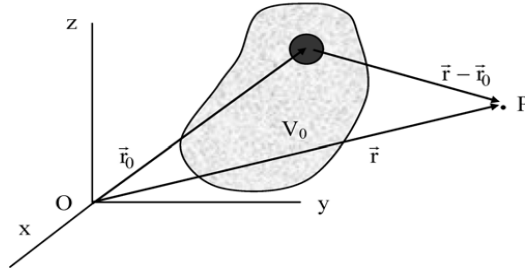


Figura 14

De acuerdo con la figura anterior, las componentes del tensor de tensiones en un punto P se obtendrán como

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 \quad (59)$$

donde \vec{r} es el vector posición del punto P.

Teniendo en cuenta el teorema de la divergencia, podemos transformar la integral de volumen de (59) en una integral de superficie extendida a toda la superficie de la frontera de la inclusión arbitraria. Para ello cualquier $\tilde{\sigma}_{ij}$ debe poder expresarse como la divergencia de cierto vector \vec{A}_{ij} . La elección de estos vectores no es única; nosotros vamos a considerar la que propone Bimberg:

$$\vec{A}_{ij} = -\frac{E \varepsilon_0}{8\pi(1-\nu)} \frac{x_i \vec{e}_j + x_j \vec{e}_i}{|\vec{r}|^3} \quad (60)$$

donde $\vec{e}_1 = \vec{i}$, $\vec{e}_2 = \vec{j}$, $\vec{e}_3 = \vec{k}$ y $|\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

(Nótese que si $i = j$ la ecuación (60) conduce a $\vec{A}_{ii} = -\frac{E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \frac{x_i \vec{e}_i}{|\vec{r}|^3}$)

El lector puede comprobar que los vectores dados por la ecuación (60) cumplen la igualdad

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) = \vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (61)$$

Importante: Debe tenerse presente que las derivadas implícitas en el operador divergencia afectan a las coordenadas de \vec{r}_0 .

De acuerdo con la expresión (61), podemos escribir la ecuación (59) como

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 = \iiint_{V_0} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 \quad (62)$$

A la hora de aplicar el teorema de la divergencia, hemos de contemplar separadamente los casos en los que el punto P, donde se quieren calcular las componentes del tensor de tensiones, esté dentro o fuera de la inclusión arbitraria de volumen V_0 .

Caso 1. El punto P está fuera de la inclusión arbitraria

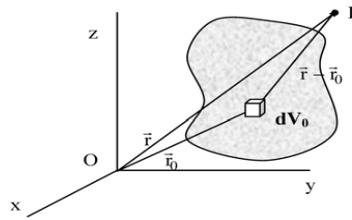


Figura 15

En este caso no existe ningún punto singular en la integral $\iiint_{V_0} \vec{\nabla} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0$. Por tanto, la aplicación directa del teorema de la divergencia conduce a

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0} \vec{\nabla} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_0 = \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) \quad (63)$$

donde S_0 es la superficie que delimita la inclusión arbitraria.

Así, por ejemplo, la componente σ_{xx} del tensor de tensiones sería, teniendo en cuenta la ecuación (60),

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(x, y, z) &= \iint_{S_0} \bar{A}_{xx}(x - x_0, y - y_0, z - z_0) d\bar{S}_0(x_0, y_0, z_0) = \\ &= \frac{-E \varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{(x - x_0) \bar{i} d\bar{S}_0}{((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)^{3/2}} \end{aligned}$$

Caso 2. El punto P está dentro de la inclusión arbitraria

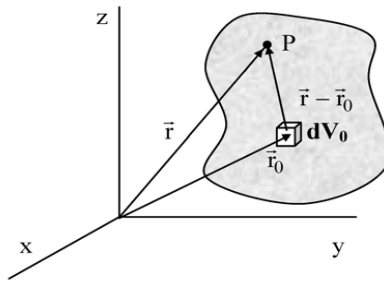


Figura 16

Cuando elemento de volumen dV_0 , que recorre todo el volumen V_0 , contenga al punto P, éste último constituirá un punto singular al hacer indeterminado el vector \bar{A}_{ij} . La singularidad se evita descomponiendo la integral de la expresión (59) en suma de dos integrales de volumen, de acuerdo con el siguiente esquema:

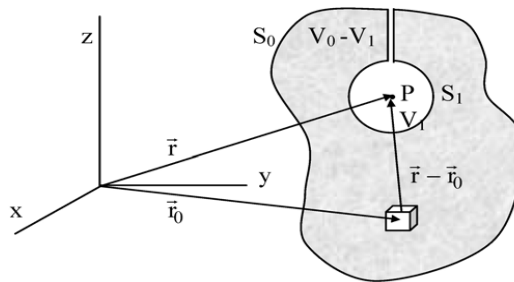


Figura 17

De acuerdo con la anterior figura, la inclusión arbitraria la suponemos como “suma” de una inclusión esférica centrada en P, de volumen V_1 y superficie S_1 más una segunda inclusión de volumen V_0-V_1 y de superficies S_0 (exterior) y S_1 (interior). Así, tendremos

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iiint_{V_0-V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} + \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 \quad (64)$$

Como el punto P es exterior al volumen V_0-V_1 , la primera integral de la ecuación (64) puede evaluarse igual que en el caso 1; es decir

$$\begin{aligned} \iiint_{V_0-V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} &= \iiint_{V_0-V_1} \vec{\nabla} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_{01} = \\ &= \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) + \iint_{S_1} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1) d\bar{S}_1(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (65)$$

En la expresión (65) \vec{r}_0 y \vec{r}_1 son vectores que caracterizan la posición de un elemento de superficie de S_0 y S_1 , respectivamente.

Llevando (65) a (64) tenemos

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) + \iint_{S_1} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1) d\bar{S}_1(\vec{r}_1) + \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 \quad (66)$$

La segunda y tercera integrales de la ecuación (66) pueden obtenerse analíticamente. Comencemos evaluando la segunda integral; es decir la integral de $\bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_1)$ sobre la superficie esférica S_1 . Para ello, en aras de una mayor simplicidad, hacemos coincidir el origen de coordenadas O con el punto P (centro de la superficie esférica S_1). De esta forma, $\vec{r} = (0,0,0)$.

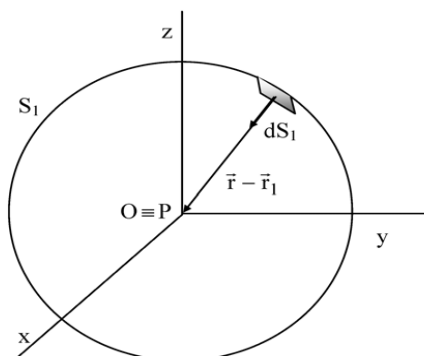


Figura 18

El vector $\vec{r} - \vec{r}_1$ tendrá módulo constante. Hacemos $|\vec{r} - \vec{r}_1| = a$ (radio de la esfera S_1). La simetría hace que sea idónea la utilización de coordenadas esféricas. Así, teniendo en cuenta que

$$x = a \sin \theta \cos \phi, \quad y = a \sin \theta \sin \phi, \quad z = a \cos \theta$$

$$d\bar{S}_1 = -a^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, \bar{e}_r$$

$$\bar{e}_r = \sin\theta \cos\phi \, \bar{i} + \sin\theta \sin\phi \, \bar{j} + \cos\theta \, \bar{k}$$

podemos obtener

$$\iint_{S_1} \bar{A}_{ij} (\bar{r} - \bar{r}_1) \, d\bar{S}_1(\bar{r}_1) = -\frac{E \varepsilon_0}{3(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (67)$$

La evaluación de la tercera integral de (66), $\iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij} (\bar{r} - \bar{r}_0) \, dV_1$, requiere la obtención previa de las componentes del tensor de tensiones, por unidad de volumen, para puntos interiores de la propia inclusión.

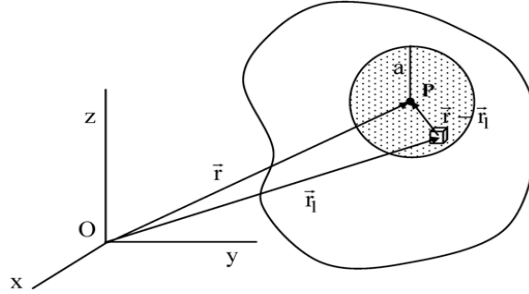


Figura 19

A partir de la ecuación (51.1), dividiendo por $(4/3) \pi a^3$, tenemos

$$\tilde{u}_r = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \bar{r}$$

cuyas componentes cartesianas serán $\tilde{u}_{x_i} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} x_i$ (68)

A partir de (68), las componentes del tensor de deformación, $\tilde{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{x_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_{x_j}}{\partial x_i} \right)$,

serán

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{(1-2\nu) \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (69)$$

Llevando (69) a la ecuación de Lamé (ecuación (25)) particularizada para deformaciones y tensiones por unidad de volumen,

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left\{ (1-2\nu) \tilde{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij} \nu \, tr \tilde{\varepsilon} \right\},$$

obtenemos

$$\tilde{\sigma}_{ij} = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \quad (70)$$

Podemos observar cómo $\tilde{\sigma}_{ij}$ es constante dentro de la inclusión. Por tanto, la integral buscada quedará

$$\begin{aligned} \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 &= -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \iiint_{V_1} dV_1 = -\frac{1}{\pi a^3} \frac{E \varepsilon_0}{2(1-\nu)} \delta_{ij} \frac{4}{3} \pi a^3 \Rightarrow \\ \iiint_{V_1} \tilde{\sigma}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) dV_1 &= -\frac{2E \varepsilon_0}{3(1-\nu)} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (71)$$

Llevando los resultados (67) y (71) a la expresión (66) obtenemos, para un punto interior a la inclusión arbitraria, la expresión

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) - \frac{E \varepsilon_0}{1-\nu} \delta_{ij} \quad (72)$$

La ecuación (63) (válida para P fuera de la inclusión arbitraria) y la (72) (válida cuando P está dentro de la inclusión arbitraria) podemos escribirlas conjuntamente en la forma

$$\boxed{\sigma_{ij}(\vec{r}) = \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\vec{r} - \vec{r}_0) d\bar{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{E \varepsilon_0}{1-\nu} \delta_{ij}} \quad (73)$$

donde $q = 0,1$ (fuera/dentro de la inclusión arbitraria) y \bar{A}_{ij} está definido en la ecuación (60).

A partir de (73), teniendo en cuenta las expresiones de \bar{A}_{ij} podemos obtener la $\text{tr}\sigma$. En efecto,

$$\begin{aligned} \text{tr}\sigma(\vec{r}) &= -\frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{(x-x_0)\vec{i} + (y-y_0)\vec{j} + (z-z_0)\vec{k}}{\left((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2\right)^{(3/2)}} d\bar{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{3E\varepsilon_0}{1-\nu} = \\ &= -\frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\bar{S}_0(\vec{r}_0) - q \frac{3E\varepsilon_0}{1-\nu} \end{aligned} \quad (74)$$

La integral que aparece en (74) es el ángulo sólido cambiado de signo, y vale 4π dentro de la inclusión y cero fuera de ella. Es decir,

$$\iint_{S_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\bar{S}_0(\vec{r}_0) = -4\pi q \quad (q = 0,1 \text{ fuera/dentro de la inclusión arbitraria}) \quad (75)$$

De acuerdo con esto último, la ecuación (74) para la traza de σ queda finalmente

$$\boxed{\text{tr}\sigma(\vec{r}) = -\frac{2E\varepsilon_0}{1-\nu} q} \quad (76)$$

Llegado a este punto ya estamos en disposición de obtener una expresión para las componentes del tensor de deformación. En efecto, si en la ecuación (23) sustituimos las ecuaciones (73) y (76) obtendremos:

$$\boxed{\varepsilon_{ij}(\bar{r}) = -\varepsilon_0 \delta_{ij} q + \frac{1+\nu}{E} \iint_{S_0} \bar{A}_{ij}(\bar{r} - \bar{r}_0) d\bar{S}_0(\bar{r}_0)} \quad (77)$$

(Téngase presente que $q = 0,1$ para puntos exteriores/interiores a la inclusión arbitraria y la integral doble se realiza sobre la superficie que delimita dicha inclusión arbitraria). El vector \bar{A}_{ij} está definido en la ecuación (60).

A partir de la ecuación (77) podemos calcular la traza del tensor de deformación. Así, teniendo en cuenta la identidad (75), se tiene

$$\text{tr}\varepsilon(\bar{r}) = \varepsilon_{xx}(\bar{r}) + \varepsilon_{yy}(\bar{r}) + \varepsilon_{zz}(\bar{r}) = -3\varepsilon_0 q - \frac{\varepsilon_0(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \iint_{S_0} \frac{\bar{r} - \bar{r}_0}{|\bar{r} - \bar{r}_0|^3} d\bar{S}_0(\bar{r}_0) \Rightarrow$$

$$\boxed{\text{tr}\varepsilon(\bar{r}) = -\frac{2\varepsilon_0(1-2\nu)}{1-\nu} q} \quad (78)$$

donde puede observarse que la traza del tensor deformación, al igual que la del tensor de tensiones, se anula fuera de la inclusión.

Puede comprobarse que las ecuaciones (78) y (76), para las trazas de los tensores de deformación y de tensiones, respectivamente, cumplen la ecuación (24).

La ecuación (77) puede usarse tanto para el caso en que el punto cuántico tenga menor constante de red que la matriz (ε_0 será positivo), como en el caso contrario (lo cual implica un valor negativo de ε_0), de acuerdo con el criterio asumido para la definición del parámetro ε_0 en la sección 5.

La ecuación (77), excepto para geometrías muy simples, no tiene integración analítica. (un ejercicio simple e ilustrativo es la obtención de las ecuaciones (51.2), (52.2) y (52.3), válidas para un nanocrystal esférico, a partir de (77)). Por ello, en la práctica, debemos recurrir a la integración numérica. La discretización implícita en la integración numérica reemplaza la superficie continua por una superficie formada por cuadrados muy pequeños, cuyo vector superficie es paralelo a alguno de los ejes coordenados.

Hay que tener presente que la ecuación (77) la hemos obtenido para puntos \bar{r} dentro o fuera del punto cuántico, pero no para puntos exactamente en la superficie matemática que separa la inclusión de la matriz. Podemos hacer el cálculo en puntos separados una distancia muy pequeña de la superficie, pero nunca en la superficie. Esto, desde el punto de vista práctico, no supone ningún problema.

Un ejercicio interesante que proponemos es la integración numérica de la ecuación (77) para un punto cuántico esférico de radio R. El resultado que se obtiene coincidirá con los resultados que se derivan de las ecuaciones (51.2), (52.2) y (52.3). Esta comparación puede servir además para determinar la precisión del cálculo numérico al variar el grado de discretización, es decir, el lado de los pequeños cuadrados en que consideramos

descompuesta la superficie de integración. Finalmente, es recomendable reproducir algunos cálculos de la bibliografía reciente como, por ejemplo, los que podemos encontrar en las referencias [8,10].

Agradecimientos

Agradecemos el soporte financiero del proyecto UJI-Bancaixa P1-B2002-01 y de una beca MEC-FPU.

Bibliografía

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (Wiley, Chichester, 1998).
- [2] L. Jacak, P. Hawrylak and A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998)
- [3] T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier, Amsterdam, 1999)
- [4] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3203.
- [5] John P. Loehr, *Physics of Strained Quantum Well Lasers*, (Kluwer, Boston 1998).
- [6] C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, and A. Zunger, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 2548.
- [7] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 5688.
- [8] J.H. Davies, *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 1358; J.R. Downes, D.A. Faux, and E.P. O'Reilly, *J. Appl. Phys.*, 81 (1997) 6700.
- [9] M. Tadic, F.M. Peeters, K.L. Janssens, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 5819.
- [10] M. Tadic, F.M. Peeters and K.L. Janssens *Phys. Rev. B* 65 (2002) 165333

Textos generales sobre teoría de la elasticidad

L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995)

Ortiz Berrocal Luis, *Elasticidad*, (Mc CrawHill, Buenos Aires, 1998)

Ajit K. Mal and Sarva Jit Singh, *Deformation of Elastic Solids* (Prentice Hall, New Jersey, 1991)

Feynman Richard y Leighton Robert B., *Física* (volumen II) (Addison-Wesley Iberoamericana, Mexico, 1987)

