

UNIVERSIDAD DE SONORA

DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES DEPARTAMENTO DE INVESTIGACIÓN EN FÍSICA

"DISPERSIÓN RAMAN EN ALAMBRES CUÁNTICOS EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO **EXTERNO**" DOCTORADO EN CIENCIAS FÍSICA **TESIS PRESENTADA POR** MARICELA FERNÁNDEZ LOZADA DIRECTOR DE TESIS RICARDO BETANCOURT RIERA

Hermosillo, Sonora, 2021

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON





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

Productos obtenidos

Publicaciones:

- Fernández-Lozada M., Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re. and Nieto Jalil J. M. "Electron states in a semiconductor quantum well wire in presence of an external transversal electric field". Physica Scripta **93** (2018) 095804. <u>https://doi.org/10.1088/1402-4896/aad4d8</u>
- Fernández-Lozada M., Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Ferrer-Moreno L. A. and Riera R. "Electric field to Control Ligth Scattering on Semiconductor QWW". Enviado.
- Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Fernández-Lozada M. and Ferrer-Moreno L. A. "One-phonon resonant Raman scattering in a nanowire in presence of an external homogeneous electric field". Enviado.

Congresos:

- "Efecto del campo eléctrico en los estados electrónicos de un alambre cuántico semiconductor". XII Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. Cuernavaca. Morelos. México. 2018.
- "Electron Raman scattering in a semiconductor quantum well wire in presence of an external transversal electric field". XXVIII International Materials Research Congress. Cancun. Mexico. 2019.
- "One-phonon resonant Raman scattering in a nanowire in presence of electric field".
 March Meeting. Denver. Colorado. Estados Unidos. 2020.

Dedicatoria

A mi familia

A todo aquel que ame y desarrolle la ciencia en beneficio de la humanidad

Agradecimientos

A la vida por darme la oportunidad de seguir creciendo como ser humano.

A México por darme la oportunidad que creí perdida.

Al CONACYT por su apoyo financiero.

Al DIFUS por su acogida y apoyo.

A mi director de tesis Dr. Ricardo Betancourt Riera por sus orientaciones, esfuerzo y dedicación en la realización de este trabajo.

Al Dr. Raúl Riera Aroche por sus asesorías, motivación y apoyo.

A mi tribunal de seguimiento por su contribución en cada período.

A mis amigos por estar siempre ahí...

Resumen

El objetivo de esta tesis es presentar una investigación teórica de la dispersión Raman en un alambre cuántico semiconductor polar, con simetría cilíndrica bajo la acción de un campo eléctrico externo homogéneo y transversal al eje del cilindro. Se consideró que el campo eléctrico puede producir cambios significativos en los espectros Raman; de manera que pueda ser utilizado como mecanismo de control de los estados electrónicos. En el estado del arte se exponen los aspectos de la teoría cuántica del sólido utilizados en el estudio de la dispersión Raman. Se presenta, además, una fundamentación con algunos aspectos de carácter experimental que se relacionan con el contenido de la tesis. Los estados electrónicos fueron obtenidos considerando alambres cuánticos con barreras de potencial tanto finita como infinita. El estudio de la dispersión Raman se realizó considerando dos modelos físicos: uno extrínseco, donde un electrón se encuentra en la banda de conducción realizando solamente transiciones intra-banda sin la participación de fonones; y otro intrínseco, donde el electrón realiza transiciones inter-bandas con la participación de un fonón. Los resultados obtenidos mostraron que la presencia del campo eléctrico modifica los estados electrónicos, rompe la degeneración existente en ausencia de campo eléctrico y elimina las reglas de selección para las transiciones cuánticas. Los espectros obtenidos para la dispersión Raman electrónica mostraron cambios en la intensidad y pequeños desplazamientos al variar la intensidad del campo eléctrico. La dispersión Raman resonante unifonónica mostró que el campo eléctrico provoca la aparición de singularidades en los espectros asociadas a modos de oscilación con $m \neq 0$, un incremento en la eficiencia Raman y un desplazamiento en las resonancias de entrada y salida. Los resultados fueron obtenidos realizando la evaluación numérica en alambres cuánticos de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ para la dispersión Raman electrónica y de GaAs para la dispersión Raman resonante unifonónica. Estos resultados permitieron corroborar la hipótesis planteada al inicio de la investigación.

Palabras clave: alambre cuántico, semiconductores polares, dispersión Raman, campo eléctrico.

Abstract

The objective of this thesis is to present a theoretical research of Raman scattering in a polar semiconductor quantum wire with cylindrical symmetry under the action of a homogeneous external electric field transverse to the axis of the cylinder. It was considered that the electric field can produce significant changes in the Raman spectra; so that it can be used as a control mechanism for electron states. In the state of the art, the aspects of the quantum solid theory used in the study of Raman scattering are exposed. In addition, a foundation is presented with some aspects of an experimental nature that are related to the content of the thesis. The electron states were obtained considering quantum wires with both finite and infinite potential barriers. The study of Raman scattering was carried out considering two physical models: one extrinsic, where one electron is found in the conduction band performing only intra-band transitions without the participation of phonons; and another intrinsic one, where the electron performs inter-band transitions with the participation of one phonon. The results obtained showed that the presence of the electric field modifies the electron states, breaks the existing degeneration in the absence of the electric field and eliminates the selection rules for quantum transitions. The spectra obtained for the electron Raman scattering showed changes in intensity and small displacements when varying the electric field intensity. The one-phonon resonant Raman scattering showed that the electric field causes the appearance of singularities in the spectra associated with modes of oscillation with an increase in Raman efficiency and a shift in the input and output resonances. The results were obtained by performing the numerical evaluation in quantum wires of GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As for electron Raman scattering and GaAs for one-phonon resonant Raman scattering. These results allowed corroborating the hypothesis raised at the beginning of the research.

Keywords: quantum wire, polar semiconductors, Raman scattering, electric field.

Índice

Capítul	o 1: Introducción	1	
Capítul	Capítulo 2: Estado del arte		
2.1. Fundamentos teóricos			
2	2.1.1. Problema cuántico del sólido	10	
2	2.1.2. Modelo fenomenológico para la interacción electrón-fonón en nanoestructuras semiconductoras	17	
2	2.1.3. Hamiltoniano de interacción electrón-fotón	24	
2	2.1.4. Sección eficaz de dispersión para un proceso de dispersión Raman	27	
2.2.	Fundamentos experimentales	31	
Capítul en prese	Capítulo 3: Estados electrónicos y reglas de selección en alambres cuánticos en presencia de un campo eléctrico homogéneo		
3.1	Estados electrónicos de alambres cuánticos en presencia de un campo eléctrico homogéneo	37	
3.2	Reglas de selección	41	
3.3	Discusión de resultados	46	
3.4	Conclusiones del capítulo	55	
Capítul	o 4: Dispersión Raman electrónica en un QWW en presencia de un		
campo e	eléctrico homogéneo	56	
4.1	Sección eficaz de dispersión	56	
4.2	Discusión de resultados	59	
4.3	Conclusiones del capítulo	64	

Capítu	lo 5: Dispersión Raman resonante unifonónica en un FSW en presencia	
de un campo eléctrico homogéneo		
5.1	Sección eficaz de dispersión	66
5.2	Discusión de resultados	72
5.3	Conclusiones del capítulo	78
Conclu	siones	82
Perspectivas futuras		84
Bibliografía		

Lista de figuras

Figura 1.1: Estructura cristalina del GaAs. Es del tipo zinc blenda donde	
los átomos de color rosa (internos del cubo) son del grupo V como el As , y	
los de color verde (caras y extremos del cubo) del grupo III como el Ga o	
<i>Al</i> [40].	5
Figura 1.2: Estructura de bandas del GaAs [41].	6
Figura 2.1: Diagrama energético en el que las líneas horizontales	
representan distintos estados [84]	28
Figura 2.2: Interpretación espectral de los procesos de dispersión [85].	29
Figura 2.3: Espectro de fotovoltaje para un alambre cuántico de	
InGaAs/GaAs (curva 1) y GaAs de referencia p-i-n (curva 2) medido a	
T = 290 K y excitación estacionaria.	32
Figura 2.4: Espectros de fotovoltaje para las heteroestructuras de	
InGaAs/GaAs medidas con una iluminación continua (curva 1) y	
modulada a 80Hz (curva 2).	32
Figura 2.5: Dependencia del espectro Raman de un alambre de GaAs con	
la presión externa [30]	33
Figura 2.6: Reglas de selección de polarización [32].	34
Figura 2.7: Comparación de los espectros Raman del nanoalambre y el	
bulk de GaAs para la luz incidente y dispersada polarizadas en el eje del	
alambre [33]	35

Figura 2.8: Espectros Raman obtenidos utilizando luz polarizada paralela y perpendicular al eje del alambre de *GaAs* [33].

Figura 3.1: Transiciones ópticas.

Figura 3.2: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos para un nanoalambre $(V_0 = \infty)$ donde F = 40.0 kV/cm. Entonces: (*a*) valores de λ_r para n=1, (*b*) valores de \mathcal{E}_r para n=1, (*c*) valores de λ_r para n=2, y (*d*) valores de \mathcal{E}_r para n=2. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0.

Figura 3.3: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos donde F = 40.0 kV/cm y $\langle r \rangle = r_0$, siendo: (*a*)-(*c*) nanoalambre, (*d*)-(*f*) QWW. Las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0. Además, las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, en la figura (*d*) si las líneas azules o negras son continuas (discontinuas) corresponden a la región dentro (fuera) del QWW.

Figura 3.4: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos para un nanoalambre $(V_0 = \infty)$ donde $r_0 = 40$ Å. Entonces: (a) valores de λ_r para n = 1 (b) valores de \mathcal{E}_r para n = 1 (c) valores de λ_r para n = 2 y (d) valores de \mathcal{E}_r para n = 2. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0. 48

35

42

50

Figura 3.5: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos para un QWW donde n=1 y $\langle r \rangle = r_0 = 40$ Å, siendo: (*a*) valores de λ_r , y (*b*) valores de \mathcal{E}_r . Las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares; si las líneas azules o negras son continuas (discontinuas) corresponden a la región dentro (fuera) del QWW.

Figura 3.6: Energía de la parte confinada de los estados electrónicos para el QWW: (*a*) $r_0 = 55$ Å y (*b*) $r_0 = 75$ Å. Las líneas continuas negras representan la energía de los estados pares ($m \ge 0$) y las líneas azules los estados impares (m < 0), mientras que las líneas discontinuas rojas corresponden al sistema en ausencia de campo eléctrico.

Figura 3.7: Parte radial de la función de onda de los estados electrónicos para un QWW de radio $r_0 = 75$ Å : (*a*) estado electrónico (1,0), (*b*) estado electrónico (2,0), (*c*) estado electrónico (1,+1), (*d*) estado electrónico (1,+2), (*e*) estado electrónico (1,-1), y (*f*) estado electrónico (1,-2). Las líneas negras corresponden a una intensidad de campo eléctrico F = 0.0 kV/cm, las líneas rojas a F = 1.0 kV/cm, las líneas verdes a F = 40.0 kV/cm y las líneas azules a F = 100.0 kV/cm.

Figura 4.1: Diagrama del mecanismo de dispersión: (*a*) primer caso, y (*b*) segundo caso

Figura 4.2: Espectro de emisión para un alambre cuántico de radio $r_0 = 55 \text{ Å}$ considerando la presencia de un campo eléctrico de intensidad F = 40.0 kV/cm. Las líneas rojas corresponden a una energía de la

53

52

61

54

radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.25 \,\text{eV}$ y las líneas negras a una energía de la radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.28 \,\text{eV}$. En diferentes condiciones de polarización: (a) (σ_s^+, σ_l^+) , (b) (σ_s^+, σ_l^-) , (c) (σ_s^-, σ_l^+) , (d) (σ_s^-, σ_l^-) .

Figura 4.3: Espectro de emisión para la polarización (σ_s^-, σ_l^+) y posición de los picos resonantes para un QWW de radio $r_0 = 65$ Å y radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.28$ eV. Entonces, los espectros de emisión para: (a) F = 1.0 kV/cm, (b) F = 10.0 kV/cm, (c) F = 20.0 kV/cm, (d) F = 30.0 kV/cm, (e) F = 40.0 kV/cm, (f) posición de los picos resonantes con respecto a la intensidad del campo eléctrico.

Figura 5.1: Diagrama del mecanismo de dispersión.67

Figura 5.2: Eficiencia Raman para un FSW de radio $r_0 = 15$ Å. Las líneas rojas son secciones multiplicadas por el factor indicado en la figura. 73

Figura 5.3: Eficiencia Raman para un FSW de radio $r_0 = 20 \text{ Å}$. 76

Figura 5.4: Sección eficaz diferencial de dispersión para la resonancia de entrada de un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica. Se considera un FSW de radio $r_0 = 15$ Å en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo. La energía de la radiación incidente es: (*a*) $\hbar \omega_l = 3.12024$ eV, (*b*) $\hbar \omega_l = 3.12028$ eV, (*c*) $\hbar \omega_l = 3.12035$ eV, (*d*) $\hbar \omega_l = 3.12024$ eV, (*e*) $\hbar \omega_l = 3.12028$ eV, (*f*) $\hbar \omega_l = 3.12035$ eV. 78

Figura 5.4: Sección eficaz diferencial de dispersión para la resonancia de entrada para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica. Se considera un FSW de radio $r_0 = 15$ Å en presencia de un campo eléctrico

80

63

externo homogéneo. La energía del fotón de radiación incidente es $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,-1}$ para la línea roja y de $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,+1}$ para la línea negra.

Capítulo 1: Introducción

Actualmente, la ciencia e ingeniería de nanomateriales forman un campo complejo y muy demandante para científicos de diversas disciplinas. Debido al avance de las ciencias experimentales, es posible hacer crecer de manera controlada y caracterizar nuevos materiales de dimensiones nanométricas como: cuasicristales, películas ultradelgadas, nanopartículas metálicas y semiconductoras, fullerenos, nanotubos de carbono, nanocompuestos de polímeros y otros como los denominados sistemas confinados: pozos cuánticos (QW), pozos cuánticos múltiples (MQW), superredes (SL), alambres cuánticos (QWW) y puntos cuánticos (QD), etcétera [1].

Los nanomateriales presentan cambios en las propiedades físicas: ópticas, mecánicas y de transporte, comparados con los materiales de dimensiones volumétricas (bulk), o incluso pueden presentar propiedades completamente nuevas e inesperadas debido a diferentes factores como: (1) la cantidad de átomos localizados en la superficie del cristal en comparación con el número de átomos localizados en el interior de éste. Estos sistemas presentan una mayor proporción de átomos superficiales, lo que favorece la modificación de las propiedades fisicoquímicas de los materiales como es el caso del punto de fusión [1]; (2) el confinamiento cuántico, en este caso, tanto los portadores de carga como los fonones se encuentran confinados en una o más direcciones en un rango de 1 a 100nm, lo que da lugar a la cuantización de la energía en la dirección de confinamiento, siendo esta sensible al tamaño del sistema. De esta manera, los nanocristales del mismo material semiconductor; pero con diferente tamaño, son capaces de emitir luz en una longitud de onda diferente cuando se investigan las propiedades ópticas. Por esta razón, resulta indispensable realizar

una investigación adecuada de estos sistemas, lo que nos permitirá una mejor comprensión de estos, y con ello, generar nuevas aplicaciones tecnológicas que contribuyan al avance y bienestar de la humanidad [1-6].

En este trabajo nos ocuparemos de las nanoestructuras semiconductoras. Estas estructuras se pueden clasificar, según el número de direcciones en la que los portadores pueden moverse libremente, en: cuasi-bidimensional (pozo cuántico), cuasi-unidimensional (hilo o alambre cuántico) o cuasi-cerodimensional (punto cuántico), los cuales pueden tener distintas geometrías mostrando propiedades diferentes; siendo los alambres cuánticos uno de los que presentan mayores ventajas tecnológicas.

La ventaja más elemental de los alambres cuánticos es la gran relación superficievolumen [7]. Estos sistemas pueden tener 100 veces más superficie que una película delgada de las mismas dimensiones (aporte adicional de la superficie lateral). Además, poseen dos direcciones cuánticamente delimitadas donde la energía está cuantizada y una dirección disponible para la conducción de electrones, exhibiendo una relación entre la longitud y el ancho de 1000 o más. Esto permite a los alambres cuánticos no sólo realizar funciones como dispositivos, sino también como interconexiones, lo que ha dado lugar a que en las últimas décadas hayan sido estudiados intensamente tanto desde el punto de vista teórico como experimental [7-37].

Las técnicas de síntesis de nanomateriales son muy diversas en función del tipo de nanomaterial a producir, y del control necesario de los parámetros que definen las propiedades de estos (tamaño, barrera de potencial, forma y composición). Una clasificación ampliamente considerada para delimitar las técnicas de producción de nanomateriales, se basa en la escala del material o precursor de origen y suelen agruparse en dos categorías: las «de arriba hacia abajo» y las «de abajo hacia arriba» [2].

Las técnicas denominadas «de arriba hacia abajo» consisten en la miniaturización o reducción de tamaño de estructuras de partida con una dimensión superior a la escala nanométrica como son, por ejemplo: la litografía y la molienda. La molienda es un proceso simple en el que los nanomateriales se forman por la atrición mecánica del mismo material;

mientras las técnicas de litografía permiten esculpir un material en escala macroscópica hasta la nanoescala utilizando técnicas de ataque químico (disolución con ácidos o disolventes) o físico (bombardeo de iones, electrones, fotones).

Por otro lado, las técnicas «de abajo hacia arriba» se basan en el crecimiento o ensamblado de estructuras nanométricas a partir de precursores moleculares con una escala inferior a estas. Estas técnicas son más versátiles en cuanto a la modificación de los parámetros que definen las propiedades de dichos sistemas; pero la producción de los mismos, a gran escala, es compleja debido a la dificultad de controlar los fenómenos de transporte de materia y energía involucrados en los procesos de nanocristalización. Una de estas técnicas es el autoensamblaje, en el cual se produce una organización espontánea de los componentes requiriendo poca intervención humana. Otro ejemplo es el crecimiento epitaxial por haces moleculares. En esta técnica, los haces moleculares inciden sobre un sustrato y diversas reacciones químicas ocasionan la deposición de monocapas sucesivas, pudiéndose variar la composición de las capas epitaxiales mediante el adecuado control de las especies químicas de los haces, manteniendo el control de la temperatura y del vacío en la cámara de crecimiento.

En el caso de los alambres cuánticos o nanoalambres las técnicas más utilizadas son: deposición electroquímica, deposición de vapor y crecimiento de VLS (vapor-líquidosólido). Este último puede producir alambres cuánticos de alta calidad de muchos materiales y utiliza un material fuente de partículas en forma de vapor que se van depositando sobre un metal líquido (como el oro) utilizado como catalizador. La fuente deposita estas nanopartículas y comienza a saturar el líquido. Al alcanzar la sobresaturación, la fuente se solidifica y crece hacia fuera desde la nanopartícula, pudiéndose ajustar la longitud final del nanohilo con el simple apagado de la fuente [38].

Las estructuras de baja dimensionalidad pueden ser elaboradas con diferentes materiales, y dentro de ellos se encuentran los semiconductores polares formados por elementos de los grupos **II-VI** y **III-V**. Estos materiales pueden cristalizar tanto en una estructura cúbica tipo zinc blenda, como en una hexagonal de tipo wurtzita; aunque a

temperatura ambiente, en general, una de las dos estructuras es termodinámicamente más estable. Además, el tipo de estructura que adoptará el material depende del grado de ionicidad del enlace, ya que al aumentar la ionicidad del mismo se pasa de la estructura cúbica a la hexagonal.

Los semiconductores de la familia **III-V** son combinaciones de los elementos de los grupos **IIIA** (*Al*, *Ga* o *In*) y **VA** (*P*, *As* o *Sb*) como, por ejemplo: el Arseniuro de Galio (*GaAs*). Los sistemas basados en semiconductores como el *GaAs* son muy útiles para desarrollar dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, siendo posible construirlos cada vez más pequeños y eficientes. Los alambres cuánticos de *GaAs* pueden tener múltiples aplicaciones en la optoelectrónica, tales como: láseres, dispositivos de almacenamiento de memoria, creación de imágenes, sensores, celdas fotovoltaicas, en la computación cuántica, etc. [3,11, 29].

Estos alambres están formados por un núcleo cilíndrico de *GaAs* rodeado de una capa de $Al_xGa_{1-x}As$ para valores de *x* que se encuentran en el intervalo $0 < x \le 1$. En la interfaz entre los dos materiales se presenta un cambio en las propiedades electrónicas debido a la presencia de materiales distintos, lo que desempeña un papel importante en el comportamiento de estos sistemas. La sustitución del *Ga* por el *Al* produce un nuevo material con un ancho de banda prohibida mayor que en el *GaAs*, de esta forma, tenemos que en la región central de la estructura existen estados posibles para el electrón; mientras que las regiones vecinas son prohibidas para éste [39].

Tanto el *GaAs* como el $Al_xGa_{1-x}As$ tienen una estructura cristalina tipo zinc blenda consistente en dos redes cúbicas centradas en las caras (FCC) entrelazadas, donde se halla un elemento del grupo **III** como el *Ga* o el *Al* en los extremos y centro de las caras, y un átomo del grupo **V** como el *As* en las posiciones internas del cubo. Este tipo de estructura se muestra en la Figura 1.1.



Figura 1.1: Estructura cristalina del *GaAs*. Es del tipo zinc blenda donde los átomos de color rosa (internos del cubo) son del grupo **V** como el *As*, y los de color verde (caras y extremos del cubo) del grupo **III** como el *Ga* o *Al* [40].

El *GaAs* es uno de los semiconductores más importantes desde el punto de vista tecnológico siendo ampliamente estudiado, lo que ha dado lugar a que muchos parámetros de su estructura sean conocidos, razón fundamental para ser elegido como material de estudio en nuestro trabajo. El gap se encuentra en el punto Γ (Figura 1.2) y su constante de red es aproximadamente de 5.65Å [41].

Por otro lado, el $Al_xGa_{1-x}As$ corresponde a la aleación **III-V** más estudiada, la cual presenta gap directo para concentraciones de 0 < x < 0.4, por lo que en nuestro trabajo se utilizará una concentración menor a 0.4. Cuando la concentración de Al es 1 la constante de red del AlAs es 5.65Å siendo prácticamente igual al GaAs [41].

La aplicación de campos externos puede modificar las propiedades de los sistemas nanoestructurados. Teóricamente se ha obtenido, por ejemplo, que la aplicación de un campo eléctrico puede provocar cambios en la ganancia Raman en un pozo cuántico con perfil de potencial en forma de escalón [42] e influir en los procesos de pérdida de energía de los electrones calientes en los alambres cuánticos [12]. Otros autores han obtenido que el efecto combinado de los campos eléctrico y magnético sobre el polarón presenta una mayor influencia en el caso de que el potencial de confinamiento sea finito [13], y esta combinación puede también producir variaciones en la energía de enlace del excitón [14]. Es decir, al igual que el confinamiento, los campos externos dan lugar a nuevas propiedades ópticas,

electrónicas y de transporte, y modifican las propiedades ya existentes en estos sistemas [12-19, 22, 23, 37, 42-46].



Figura 1.2: Estructura de bandas del GaAs [41].

Una de las técnicas más utilizadas para caracterizar los sistemas de baja dimensionalidad es la dispersión inelástica de la luz conocida como dispersión Raman, esto es, un cambio en la frecuencia de la luz dispersada con respecto a la luz incidente al interactuar con un sistema físico.

La dispersión Raman en estructuras de baja dimensionalidad ha sido abordada por diferentes autores, tanto desde el punto de vista experimental como teórico [20, 28-36, 45-54]. Un estudio experimental realizado en alambres cuánticos de CdZnSe/ZnSe con diferentes longitudes y radios mostró grandes resonancias de la radiación secundaria para los fonones LO y una dependencia con el tamaño de los alambres cuánticos del parámetro de acoplamiento electrón-fonón [34]. Desde el punto de vista teórico, el estudio de la dispersión Raman electrónica en alambres cuánticos del GaAs/AlAs ha mostrado que la sección eficaz

diferencial de dispersión depende del radio del sistema; obteniéndose, además, que el aumento del radio del alambre incrementa la intensidad de los picos; sin embargo, para un valor del radio fijo la intensidad de los picos disminuye cuando aumenta la energía del fotón incidente [35].

En nuestro grupo de investigación se han realizado varios estudios en esta temática [8, 15, 16, 21-26, 42, 55-71], dentro de ellos se encuentra la dispersión Raman en un alambre cuántico semiconductor de GaAs, en presencia de un campo magnético externo paralelo al eje del alambre, con y sin tener en cuenta la interacción electrón-fonón. Estos estudios mostraron que el efecto del campo magnético es particularmente notable en los electrones, al romper la degeneración existente en los estados electrónicos. Los espectros de dispersión Raman mostraron muchas frecuencias debido a la presencia (ausencia) de reglas de selección para el número cuántico m(n). Por otro lado, se pudo apreciar que el efecto del confinamiento predomina sobre el efecto del campo magnético para valores del campo inferiores a los 100T y radios menores que 100Å. El gap entre los estados que se desdoblan se incrementa con el aumento del campo magnético, y esto puede provocar que el campo "saque" o "introduzca" algunos estados en el alambre [16]. Al considerar la interacción electrón-fonón se observó una disminución de la intensidad del espectro del sistema. La emisión del fonón está regida por una regla de selección para el número cuántico m y es diferente para cada modo de oscilación [15]; sin embargo, aún no se conocen ciertos aspectos de estos sistemas que pudieran ser utilizados para generar nuevas aplicaciones o mejorar las ya existentes, lo que da lugar a nuestro problema de investigación.

Problema

Necesidad de controlar la dispersión Raman en un alambre cuántico semiconductor, a través de un campo eléctrico externo, para mejorar el diseño de fuentes de radiación.

Para resolver este problema nos trazamos el siguiente objetivo:

Objetivo general

Investigar teóricamente la dispersión Raman, a través de los estados electrónicos, en un alambre cuántico semiconductor de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con simetría cilíndrica, bajo la acción de un campo eléctrico externo homogéneo y transversal al eje del alambre.

Objetivos particulares

- Calcular los estados electrónicos y las reglas de selección para un alambre cuántico semiconductor de simetría cilíndrica, con barrera de potencial tanto finita como infinita, en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo aplicado en dirección transversal al eje del alambre.
- 2) Analizar los efectos del campo eléctrico sobre los estados electrónicos en un alambre cuántico de GaAs y $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$.
- 3) Obtener la sección eficaz diferencial de dispersión para un proceso de dispersión Raman electrónica en un alambre cuántico de simetría cilíndrica, considerando barrera de potencial finita y solamente transiciones ópticas intra-banda.
- 4) Analizar los efectos del campo eléctrico sobre los espectros para un proceso de dispersión Raman electrónica en un alambre cuántico de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$.
- Obtener la sección eficaz diferencial de dispersión para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica en un alambre cuántico que no presenta cobertura lateral.
- 6) Analizar los efectos del campo eléctrico sobre la eficiencia cuántica y los espectros, para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica en un alambre cuántico sin cobertura lateral de *GaAs*.

Para darle cumplimiento al objetivo general propuesto se ha considerado la siguiente hipótesis:

Hipótesis

La aplicación de un campo eléctrico externo homogéneo y transversal puede producir cambios significativos en los estados electrónicos en un alambre cuántico semiconductor de simetría cilíndrica, de manera que el campo eléctrico pueda ser utilizado como mecanismo de control de los estados electrónicos y las reglas de selección para el diseño de fuentes de radiación.

Para lograr una adecuada comprensión de nuestro trabajo, esta tesis se ha dividido en un primer capítulo, que es este apartado, y cuatro capítulos más. El capítulo 2 contiene los fundamentos teóricos y experimentales que han servido de base para el desarrollo de esta investigación. En el capítulo 3 se presenta el estudio de los estados electrónicos y las reglas de selección para un alambre cuántico con simetría circular en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo, aplicado transversalmente al eje del alambre, considerando barreras de potencial tanto finita como infinita. En el capítulo 4 se presenta el cálculo de la sección eficaz de dispersión en un alambre cuántico con barrera de potencial finita, con un análisis y discusión de los espectros de emisión considerando diferentes valores del radio, campo eléctrico y radiación incidente. En el capítulo 5 se muestra el estudio de la dispersión Raman resonante unifonónica para un alambre que no presenta cobertura lateral, con un análisis y discusión de los espectros de emisión y la eficiencia Raman. Finalmente, se presentan las conclusiones generales y algunas recomendaciones para la continuación de este trabajo.

Capítulo 2: Estado del arte

Para estudiar la dispersión Raman en estructuras de baja dimensionalidad, desde el punto de vista teórico, se requiere el empleo de la teoría cuántica del sólido, la cual nos permite conocer las excitaciones elementales, cuasi-partículas, interacciones y campos en los sólidos, y en particular, los estados estacionarios y dinámicos de electrones, fonones, la interacción electrón-fonón y la respuesta de estos a campos o excitaciones externas. En este capítulo se describen los modelos más importantes que se tendrán en cuenta en nuestro trabajo, y algunas evidencias experimentales obtenidas a través de diferentes investigaciones que se han realizado en los alambres cuánticos.

2.1 Fundamentos teóricos

2.1.1. Problema cuántico del sólido

El estudio teórico de las propiedades de las nanoestructuras se realiza a través de la teoría cuántica del sólido. Para conocer los estados electrónicos del sólido hay que resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{2.1}$$

Esta ecuación contiene un elevado número de variables debido a la gran cantidad de partículas involucradas (electrones y núcleos atómicos) por lo que se hace imposible obtener directamente su solución, requiriéndose la aplicación de un conjunto de aproximaciones. A continuación, se presentan las aproximaciones más importantes a tener en cuenta en nuestro trabajo:

Aproximación de valencia

Las propiedades físicas y químicas de los átomos están determinadas por los electrones más externos llamados electrones de valencia. En el sólido, estos electrones intervienen, por ejemplo: en la cohesión del material, en su respuesta ante intercambios de calor, en la capacidad para conducir la electricidad o emitir luz. Este hecho permite agrupar las partículas del sistema en dos grupos. El primero está formado por los electrones de valencia, siendo la densidad de carga dependiente del estado y del entorno en el que se encuentre el átomo. El segundo grupo está formado por el resto de las partículas, es decir, el núcleo y los electrones internos correspondientes a las capas completamente llenas, lo que se conoce como "core", cuya densidad de carga radial no varía, o sea, es independiente tanto del entorno en el que se encuentra el átomo como del estado en que se encuentra el mismo (fundamental o excitado) [72].

En el sólido, estos "cores" forman los iones de la red, de manera que el hamiltoniano del sistema puede expresarse como:

$$\hat{H} = \hat{H}_{e} + \hat{H}_{I} + \hat{H}_{ee} + \hat{H}_{II} + \hat{H}_{eI}$$
(2.2)

donde \hat{H}_{e} corresponde a la energía cinética de los electrones (de valencia), \hat{H}_{I} a la energía cinética de los iones, \hat{H}_{ee} a la interacción entre electrones, \hat{H}_{II} a la interacción entre iones y \hat{H}_{eI} corresponde a la interacción entre iones y electrones.

Aproximación de Born-Oppenheimer

Para obtener los estados electrónicos del sólido es necesario realizar una segunda aproximación conocida como aproximación de Born-Oppenheimer que consiste en considerar el movimiento de los electrones separado del movimiento de los iones, es decir, desacoplar los grados de libertad electrónicos de los vibracionales [72-75].

Considerando que el sistema se encuentra en equilibrio térmico, todas las partículas tendrán la misma energía cinética promedio; pero la masa de los iones es, cuando menos, 1.840 veces más grande que la masa de los electrones, y por tanto la velocidad de estos últimos será mayor. Esto significa que los electrones "ven" al ion en una posición casi fija por lo que consideraremos que estos se encuentran en las posiciones fijas \mathbf{R}_{j} . Entonces, para resolver la ecuación del sólido se propone la función de onda como el producto de dos funciones, una que represente la solución para los electrones $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, y otra que represente la solución para los iones $\chi(\mathbf{R})$, es decir

$$\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R},\mathbf{r})\chi(\mathbf{R})$$
(2.3)

donde **R** es el vector de posición de los iones y **r** es el vector de posición de los electrones.

Sustituyendo (2.2) y (2.3) en (2.1), y considerando que el término

$$-\sum_{j} \frac{\hbar^{2}}{2M} \left(2 \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{R}_{j}} \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{R}_{j}} + \chi \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial \mathbf{R}_{j}^{2}} \right)$$
(2.4)

es despreciable (varía poco al variar la configuración electrónica), se consigue convertir el problema inicial (2.1) en dos problemas: uno iónico y uno electrónico.

El problema electrónico está dado por la expresión:

$$\left[-\sum_{i}\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}}{\partial\mathbf{r}_{i}^{2}}+\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j\neq i}\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}\left|\mathbf{r}_{i}-\mathbf{r}_{j}\right|^{2}}+\sum_{ij}V_{eI}\left(\mathbf{r}_{i}-\mathbf{R}_{j}\right)\right]\Phi\left(\mathbf{R},\mathbf{r}\right)=E_{e}\left(\mathbf{R}\right)\Phi\left(\mathbf{R},\mathbf{r}\right)$$
(2.5)

de manera que los electrones se mueven en una red estática que tiene al ion *j*-ésimo en la posición fija \mathbf{R}_{j} .

Mientras que el problema iónico consiste en resolver:

$$\left[-\sum_{i}\frac{\hbar^{2}}{2M}\frac{\partial^{2}}{\partial\mathbf{R}_{i}^{2}}+E_{e}\left(\mathbf{R}\right)+\sum_{i\neq j}V_{II}\left(\mathbf{R}_{i}-\mathbf{R}_{j}\right)\right]\chi\left(\mathbf{R}\right)=E\chi\left(\mathbf{R}\right)$$
(2.6)

donde $E_e(\mathbf{R})$ es la energía total de los electrones como función de las posiciones de los iones.

Aún, la ecuación correspondiente a los electrones sigue siendo difícil de resolver por ser un problema multielectrónico, lo que hace necesario aplicar una nueva aproximación.

Aproximación monoelectrónica

Para simplificar el problema electrónico dado por la ecuación (2.5), se considera que cada electrón se mueve de manera independiente en un campo efectivo debido al resto de las partículas, lo que permite representar la función de onda multielectrónica a través de funciones de onda monoelectrónicas, la que recibe el nombre de determinante de Slater [72-75]

$$\Phi(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2},...,\mathbf{r}_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{1}(\mathbf{r}_{1}) & \phi_{1}(\mathbf{r}_{2}) & ... & \phi_{1}(\mathbf{r}_{N}) \\ \phi_{2}(\mathbf{r}_{1}) & \phi_{2}(\mathbf{r}_{2}) & ... & \phi_{2}(\mathbf{r}_{N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \ddots & \ddots & \ddots \\ \phi_{N}(\mathbf{r}_{1}) & \phi_{N}(\mathbf{r}_{2}) & ... & \phi_{N}(\mathbf{r}_{N}) \end{vmatrix}$$
(2.7)

siendo *N* el número total de electrones y \mathbf{r}_i el conjunto de las tres coordenadas espaciales y la coordenada de spin correspondientes al electrón *i*-ésimo.

Utilizando el método de Hartree-Fock [72-75], se produce el paso del problema multielectrónico a N problemas monoelectrónicos del mismo tipo donde la ecuación a resolver es de la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\phi(\mathbf{r})$$
(2.8)

siendo $U(\mathbf{r})$ el potencial efectivo, el cual es la suma del potencial de Hartree-Fock y el potencial de interacción electrón-ion, que es periódico, y se conoce con el nombre de potencial cristalino. Este potencial es desconocido, lo que conlleva a calcular los estados

estacionarios electrónicos considerando las propiedades específicas de los tres tipos de sólidos: metales, semiconductores y aislantes; dando lugar al método cuasilibre en metales, ondas planas ortonormalizadas o pseudopotencial en semiconductores y electrón fuertemente ligado en aislantes. Para el caso no estacionario, donde el sólido es sometido a un potencial externo que puede depender del tiempo, la ecuación (2.8) se puede resolver utilizando la aproximación de la masa efectiva.

Aproximación de la masa efectiva

Esta aproximación parte de considerar que el potencial cristalino $U(\mathbf{r})$ es periódico; luego, el teorema de Bloch permite escribir la función de onda electrónica de un cristal infinito, denominada función de Bloch, como el producto de una función $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ definida en la celda unitaria del cristal por una función envolvente $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ que cambia lentamente en la estructura [72-76],

$$\phi_{n\mathbf{k}}\left(\mathbf{r}\right) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}\left(\mathbf{r}\right) \tag{2.9}$$

siendo \mathbf{k} un vector de la red recíproca y n un índice que corresponde a la banda. Como esta función es periódica puede ser desarrollada en serie de Fourier

$$\phi_{n\mathbf{k}}\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{\mathbf{l}} a_{n}\left(\mathbf{r},\mathbf{l}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}}$$
(2.10)

donde **l** es un vector de la red directa y los coeficientes $a_n(\mathbf{r}, \mathbf{l})$, conocidos como funciones de Wannier, están definidas de la forma [77]

$$a_{n}(\mathbf{r},\mathbf{l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{l})}$$
(2.11)

las cuales forman un conjunto ortonormal y pueden ser utilizadas para transformar la ecuación (2.8), siendo N el número de valores posibles de **k** para la *n*-ésima banda en la primera zona de Brillouin.

Para realizar esta transformación consideremos que el electrón en el cristal se encuentra bajo la acción de un potencial externo $V(\mathbf{r},t)$, entonces la ecuación de Schrödinger a resolver tiene la forma

$$\left[\hat{H} + V(\mathbf{r}, t)\right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$
(2.12)

donde \hat{H} es el hamiltoniano del electrón en el campo periódico del cristal. Para resolver esta ecuación se propone la solución de la forma

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n} \sum_{\mathbf{l}} \varphi_n(\mathbf{l},t) a_n(\mathbf{r},\mathbf{l})$$
(2.13)

donde $\varphi_n(\mathbf{l},t)$ es denominada función envolvente de la *n*-ésima banda. Sustituyendo (2.13) en (2.12) y realizando varias operaciones se obtiene la ecuación para la función envolvente [77]

$$\left[\mathcal{E}_{n}\left(-i\nabla\right)\varphi_{n}\left(\mathbf{r},t\right)-i\hbar\frac{\partial\varphi_{n}\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t}\right]_{\mathbf{r}=\mathbf{l}}+\sum_{n'}\sum_{\mathbf{l}'}V_{nn'}\left(\mathbf{l},\mathbf{l}'\right)\varphi_{n}\left(\mathbf{l},t\right)=0$$
(2.14)

conocida como ecuación de Schrödinger en la representación de Wannier, donde \mathcal{E}_n es la energía del electrón en la *n*-ésima banda.

Suponiendo que el potencial externo es lo suficientemente débil como para no provocar transiciones entre las bandas, esto es

$$V_{nn}\left(\mathbf{l},\mathbf{l}'\right) = \delta_{nn'}V_{nn'}\left(\mathbf{l},\mathbf{l}'\right)$$
(2.15)

y considerando que el potencial varía lentamente con la posición, es decir

$$a_L \frac{\Delta V}{V} \ll 1 \tag{2.16}$$

siendo a_L la constante de la red, entonces

$$V_{nn}(\mathbf{l},\mathbf{l}') = \delta_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}V_{nn}(\mathbf{l},\mathbf{l}') = \delta_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}V(\mathbf{r},t)\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{l}}$$
(2.17)

lo que significa que el potencial no debe provocar transiciones entre los distintos nodos **l**, la ecuación (2.14) queda de la forma

$$\left[\mathcal{E}_{n}\left(-i\nabla\right)+V\left(\mathbf{r},t\right)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\varphi_{n}\left(\mathbf{r},t\right)=0$$
(2.18)

donde $\mathbf{r} = \mathbf{l}$. La función $\varphi_n(\mathbf{r}, t)$ es tratada formalmente como una función continua que varía lentamente con la posición alrededor de l, además, la solución será diferente para cada banda *n*.

De esta manera, la ecuación de Schrödinger original (2.12), se ha transformado en una ecuación para la función envolvente (2.18), en la cual el hamiltoniano ha sido sustituido por un hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}_{ef} = \mathcal{E}_n \left(-i\nabla \right) + V \left(\mathbf{r}, t \right)$$
(2.19)

que depende de la relación de dispersión $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$, y la función envolvente puede ser interpretada como la función de onda efectiva del electrón en el cristal.

Teniendo en cuenta que en casi todos los fenómenos físicos que ocurren en los semiconductores, los electrones que participan están situados cerca de los extremos de las bandas, se puede sustituir la ley de dispersión real por una ley parabólica

$$\mathcal{E}_{n}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{nx}}k_{x}^{2} + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{ny}}k_{y}^{2} + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{nz}}k_{z}^{2}$$
(2.20)

donde μ_n es el tensor de masa efectiva del electrón en la banda *n*. Entonces, el hamiltoniano efectivo se puede escribir de la forma

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2}{\mu_{nx}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{\mu_{ny}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{\mu_{nz}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(\mathbf{r}, t)$$
(2.21)

Si el potencial externo $V(\mathbf{r},t) = V(\mathbf{r})$ y el material es isótropo (la misma masa efectiva en todas las direcciones) entonces la ecuación a resolver será

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi_n(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_n\varphi_n(\mathbf{r})$$
(2.22)

y la función de onda se puede escribir de la forma [77]

$$\Psi_{n}(\mathbf{r}) = \varphi_{n}^{A,B}(\mathbf{r})u_{n\mathbf{k}_{0}}(\mathbf{r})$$
(2.23)

donde el supraíndice *A*, *B* se refiere a los materiales *A* y *B* que forman la nanoestructura. De esta manera, nuestro objetivo es determinar $\varphi_n^{A,B}(\mathbf{r})$ cuya forma depende del tipo de nanoestructura a considerar.

Este método, conocido como aproximación de la masa efectiva, es válido en la vecindad de los puntos de alta simetría (Γ , *X*, *L*) de la zona de Brillouin de los materiales volumétricos. Es adecuado para estudiar las propiedades de las cuasipartículas en las estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad y constituye un método dinámico para la determinación de las bandas de energía de las partículas en el sólido ya que puede ser utilizado cuando el sistema se somete a potenciales externos, como es en el caso de las nanoestructuras debido al potencial de confinamiento.

2.1.2. Modelo fenomenológico para la interacción electrón-fonón en nanoestructuras semiconductoras

El movimiento de los átomos en los materiales pone de manifiesto una serie de fenómenos físicos. En el sólido, la dinámica de los iones que forman la red se describe en términos de modos de oscilación, de manera que cada modo de vibración es equivalente al movimiento de un oscilador cuántico, cuyo cuanto de energía recibe el nombre de fonón. Los fonones en semiconductores polares se clasifican en ópticos y acústicos según la manera en que oscile la red, produciéndose una interacción entre el fonón y el electrón. Esta interacción

electrón-fonón puede ser tratada de diferentes formas según el tipo de material como es el caso de los acoplamientos: potencial de deformación y piezoeléctrico [78].

Al tener en cuenta que los iones se desplazan de la posición de equilibrio unas pocas fracciones de angstrom, es suficiente conocer la energía potencial en la vecindad del punto de equilibrio, lo que permite desarrollarla en serie de Taylor respecto a los desplazamientos hasta un segundo orden en la aproximación armónica, esto es

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R},\alpha} \sum_{\mathbf{R}',\alpha'} u_{\alpha} \left(\mathbf{R} \right) \cdot \ddot{\Phi}_{\alpha,\alpha'} \left(\mathbf{R}, \mathbf{R}' \right) \cdot u_{\alpha'} \left(\mathbf{R} \right)$$
(2.24)

donde $u_{\alpha}(\mathbf{R})$ es el desplazamiento del ion α que se encuentra en el sitio \mathbf{R} de la red cristalina, pero $\tilde{\Phi}_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{R},\mathbf{R}')$ es desconocido. Este problema puede ser resuelto por métodos semiempíricos, ab initio o asociando un campo vectorial a los desplazamientos iónicos de manera que satisfaga cierta ecuación diferencial, método que sólo es aplicable para longitudes de onda largas, al no contemplar el carácter discreto del material [79, 80].

En aquellos semiconductores que son débilmente iónicos, como es el caso que nos ocupa, las oscilaciones ópticas juegan un papel importante fundamentalmente en el límite de onda larga. Para estudiar estas oscilaciones se considera: (1) un vector de desplazamiento **u**, que describe el movimiento relativo entre dos iones de cada celda elemental, y un potencial ϕ relacionado con el campo eléctrico que se encuentra acoplado a las oscilaciones mecánicas, (2) el sólido como una distribución continua con densidad de masa $\rho = M^*/v_c$, siendo M^* la masa reducida del ion y v_c el volumen de la celda elemental, (3) las frecuencias transversal (ω_{TO}) y longitudinal (ω_{LO}) del material volumétrico en el punto de simetría Γ , las cuales están relacionadas a través de la expresión $\omega_{LO}^2 = (\varepsilon_0/\varepsilon_{\infty})\omega_{TO}^2$, donde ε_0 y ε_{∞} son las constantes dieléctricas estática y de alta frecuencia respectivamente. Entonces, se puede definir una densidad de Lagrange de la forma

$$L = \frac{1}{2} \rho \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 - \frac{1}{2} \rho \omega_{TO}^2 \mathbf{u}^2 - \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \phi + \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{\infty} \left| \nabla \phi \right|^2 + \frac{1}{2} \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl}$$
(2.25)

donde el primer término corresponde a la densidad de energía cinética, el segundo describe la densidad de interacción elástica entre los iones, el tercero representa el acoplamiento de las oscilaciones mecánicas con el campo eléctrico siendo

$$\alpha^{2} = \frac{1}{4\pi} \left(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{\infty} \right) \rho \omega_{TO}^{2}$$
(2.26)

la polarizabilidad cuando el medio es homogéneo e isótropo. El cuarto término corresponde a la densidad de energía del campo eléctrico en el medio, y el quinto corresponde a los esfuerzos internos del medio siendo el responsable de la dispersión donde

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\nabla_j u_i + \nabla_i u_j \right) \tag{2.27}$$

es el tensor de deformación, el cual está relacionado con el tensor de esfuerzos a través de la expresión

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \lambda_{ijkl} u_{kl} \tag{2.28}$$

y λ_{ijkl} se relaciona con el módulo del tensor de elasticidad cumpliendo las mismas propiedades de simetría que el tensor de los módulos elásticos. Si el medio es isótropo, sus componentes distintas de cero están dadas a través de dos parámetros independientes β_{TO} y β_{LO} , que describen la dispersión de las oscilaciones y pueden ser obtenidos ajustando las relaciones de dispersión para el caso volumétrico [80].

Si se toman a (\mathbf{u}, ϕ) como variables generalizadas y aplicamos las ecuaciones del movimiento a (2.25), se obtiene que

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -\rho \omega_{TO}^2 \mathbf{u} - \alpha \nabla \phi - \nabla \cdot \ddot{\sigma} \quad \mathbf{y} \quad \nabla \cdot \left(\varepsilon_{\infty} \nabla \phi - 4\pi \alpha \mathbf{u} \right) = 0$$
(2.29)

ecuaciones que son válidas para las nanoestructuras semiconductoras independientemente de su geometría.

Asumiendo que

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \mathbf{u}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad \phi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$$
(2.30)

y que, dentro de los límites de una parte homogénea dada de la estructura, los parámetros del medio son constantes, escribiendo el desplazamiento como $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{TO} + \mathbf{u}_{LO}$ de manera que $\nabla \cdot \mathbf{u}_{TO} = 0$ y $\nabla \times \mathbf{u}_{LO} = 0$, se obtiene

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_{TO}^2 - \omega^2}{\beta_{TO}^2}\right) \mathbf{u}_{TO} = 0$$
(2.31)

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\beta_{LO}^2}\right) \mathbf{u}_{LO} = 0$$
(2.32)

$$\nabla \phi = \frac{4\pi\alpha}{\varepsilon_{\infty}} \mathbf{u}_{LO} \tag{2.33}$$

La ecuación (2.33) muestra que el campo eléctrico originado por la polarización del medio se encuentra acoplado solamente con las oscilaciones longitudinales por lo que se puede decir que el campo eléctrico también es longitudinal y tiene sentido opuesto al desplazamiento.

Si las soluciones de estas ecuaciones (2.31) y (2.32) se expresan como ondas planas con vector de onda \mathbf{k}

$$\mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{0\nu} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \nu = LO, TO \tag{2.34}$$

entonces, se pueden obtener las relaciones de dispersión para un modo longitudinal

$$\omega^{2}(k) = \omega_{LO}^{2} - \beta_{LO}^{2}k^{2}$$
(2.35)

y dos modos transversales

$$\omega^{2}(k) = \omega_{TO}^{2} - \beta_{TO}^{2}k^{2}$$
(2.36)

que permiten ajustar los valores de β_{TO} y β_{LO} a partir de la ley de dispersión experimental.

Para resolver las ecuaciones (2.31)-(2.33) hay que tener en cuenta que en las interfaces de las nanoestructuras las propiedades del material cambian abruptamente, por lo que se hace necesario imponer condiciones de empalme en las interfaces según las características del sistema [27,79].

Hamiltoniano de interacción electrón-fonón

Al producirse la interacción entre electrones e iones se produce un intercambio de energía creándose o destruyéndose fonones. Esto significa que mientras la red pasa de un estado vibracional a otro, un electrón pasa de un estado a otro, de manera tal que la energía total del sistema siempre permanece constante.

Muchas propiedades de los semiconductores polares están determinadas por la interacción que se produce entre los electrones y los fonones ópticos, debido a la carga local que da lugar a una interacción coulombiana con la red. Para estudiar la interacción electrón-fonón existen diferentes modelos microscópicos, pero debido a la complejidad de estos [72] se suele pasar a un tratamiento continuo de la vibración de la red como son: el llamado potencial de deformación, que considera la variación de la energía de las bandas electrónicas debido al desplazamiento de los iones, y la llamada interacción de Frölich.

Esta interacción se caracteriza por la presencia de campos eléctricos de largo alcance. En el caso de los cristales que presentan cierto carácter polar, como sucede en el *GaAs*, los fonones ópticos longitudinales llevan asociada una onda de polarización eléctrica originando un campo eléctrico que actúa sobre los electrones, los que a su vez polarizan el medio a su paso pudiendo generar fonones ópticos [72].

Para determinar el hamiltoniano de interacción electrón-fonón vía Frölich, se parte del hecho de que las funciones $\{\mathbf{u}_{\nu}, \phi_{\nu}\}$ forman un conjunto ortogonal y completo; luego, pueden ser tomadas como base para realizar un desarrollo en serie de la forma

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \sum_{\nu} \left[\tilde{C}_{\nu} \mathbf{u}_{\nu} \left(\mathbf{r} \right) e^{-i\omega_{\nu}t} + \tilde{C}_{\nu}^{*} \mathbf{u}_{\nu}^{*} \left(\mathbf{r} \right) e^{i\omega_{\nu}t} \right]$$
(2.37)

$$\phi(\mathbf{r},t) = \sum_{\nu} \left[\tilde{C}_{\nu} \phi_{\nu} \left(\mathbf{r} \right) e^{-i\omega_{\nu}t} + \tilde{C}_{\nu}^{*} \phi_{\nu}^{*} \left(\mathbf{r} \right) e^{i\omega_{\nu}t} \right]$$
(2.38)

siendo los coeficientes \tilde{C}_{ν} iguales ya que \mathbf{u}_{ν} y ϕ_{ν} son soluciones de un único problema de autovalores.

Calculando la densidad de momento canónica de **u** y realizando la cuantificación del campo fonónico se obtiene el hamiltoniano de interacción electrón-fonón [72]

$$\hat{H}_{ph}(\mathbf{r},t) = -\sum_{\nu} \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{2\omega_{\nu} \Pi}} \left[\phi_{\nu}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\nu}t} \hat{\mathbf{b}}_{\nu} + \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_{\nu}t} \hat{\mathbf{b}}_{\nu}^{\dagger} \right]$$
(2.39)

donde \hat{b}_{ν} y \hat{b}_{ν}^{\dagger} son los operadores de Bose de segunda cuantización de aniquilación y creación de fonones respectivamente, Π es una constante que está relacionada con la constante de normalización de los vectores \mathbf{u}_{ν} [79, 81].

Para el caso de un alambre cuántico sin cobertura lateral (FSW) las oscilaciones de la superficie son libres. Entonces, $\mathbf{u} = 0$ para $r > r_0$; pero $\phi \neq 0$ en todo el espacio y la solución en coordenadas cilíndricas, está dada por [81]

_

$$u_{r} = \frac{B}{r_{0}} \left[-\frac{n}{y^{2}} \frac{g_{m}(x)}{f_{m+2}(y)} \frac{r_{0}}{r} f_{m} \left(y \frac{r}{r_{0}} \right) + x f_{m}' \left(x \frac{r}{r_{0}} \right) + m \left(\frac{\beta_{LO}^{2}}{\beta_{TO}^{2}} x^{2} - y^{2} \right) t_{m}(x, y) \left(\frac{r}{r_{0}} \right)^{m-1} \right] e^{im\theta}$$
(2.40)

$$u_{\theta} = \frac{B}{r_0} \left[-\frac{1}{y} \frac{g_m(x)}{f_{m+2}(y)} f'_m \left(y \frac{r}{r_0} \right) + m \left(\frac{r_0}{r} \right) f_m \left(x \frac{r}{r_0} \right) + m \left(\frac{\beta_{LO}^2}{\beta_{TO}^2} x^2 - y^2 \right) t_m(x, y) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{m-1} \right] e^{i \left(m\theta + \frac{\pi}{2} \right)}$$
(2.41)
$$\phi = B \frac{4\pi\alpha}{\varepsilon_{\infty}} \begin{cases} \left[f_m \left(x \frac{r}{r_0} \right) - t_m \left(x, y \right) \left(\frac{r}{r_0} \right)^m \right] e^{im\theta}, & r \le r_0 \\ \left[f_m \left(x \right) - t_m \left(x, y \right) \right] \left(\frac{r_0}{r} \right)^m e^{im\theta}, & r > r \end{cases}$$
(2.42)

donde B es una constante de normalización,

$$x = \sqrt{\frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{n,m}^2}{\beta_{LO}^2}} r_0, \quad y = \sqrt{\frac{\omega_{TO}^2 - \omega_{n,m}^2}{\beta_{TO}^2}} r_0$$
(2.43)

$$t_{m}(x, y) = \frac{y^{2} f_{m}(x) f_{m+2}(y) + \varepsilon_{\infty} g_{m}(x) f_{m}(y)}{\left(\varepsilon_{\infty} \frac{\beta_{LO}^{2}}{\beta_{TO}^{2}} x^{2} + y^{2}\right) f_{m+2}(y)}$$
(2.44)

y
$$g_m(x) = \frac{\beta_{LO}^2}{\beta_{TO}^2} x^2 f_m(x) - 2(m+1) x f_{m+1}(x)$$
 (2.45)

Las autofrecuencias de las oscilaciones se obtienen al resolver la ecuación [81]

$$2m(m-1)\left[\frac{\beta_{LO}^{2}}{\beta_{TO}^{2}}x^{2}-y^{2}\right]t_{m}(x,y)f_{m+2}(y)+2my^{2}f_{m+2}(y)\left[xf_{m}'(x)-f_{m}(x)\right]+g_{m}(x)\left[2yf_{m}'(y)+\left(y^{2}-2m^{2}\right)f_{m}(y)\right]=0$$
(2.46)

siendo

$$R = x^2 - \left(\frac{\beta_{TO}}{\beta_{LO}}\right)^2 y^2 \tag{2.47}$$

Obteniéndose el hamiltoniano de interacción electrón-fonón [81]

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{nm} \tilde{C}_{n,m} \left[F_{n,m} \left(r \right) e^{im\theta} \hat{\mathbf{b}}_{n,m} + CH \right]$$
(2.48)

donde CH representa el conjugado hermítico,

$$\tilde{C}_{n,m} = \left(\frac{\pi\omega_{LO}\rho}{\omega_{n,m}}\right)^{1/2} r_0^2 C_F, \quad C_F = -\sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}}{V} \left(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1}\right)}$$
(2.49)

y
$$F_{n,m}(r) = B_{n,m} \left[f_m(xr/r_0) - t_m(x, y)(r/r_0)^m \right]$$
 para $0 \le r \le r_0$ (2.50)

donde

$$B_{n,m}^{2} = \frac{\Pi}{\rho} \left(2\pi L_{z} \int_{0}^{r_{0}} \left(\left| u_{r} \right|^{2} + \left| u_{\theta} \right|^{2} \right) r dr \right)^{-1}$$
(2.51)

 $V = \pi r^2 L_z$ es el volumen, L_z es la longitud del alambre, $f_m(z)$ es la función de Bessel de primer tipo si $z^2 > 0$ y la función de Bessel modificada de primer tipo, si $z^2 < 0$ [81].

2.1.3. Hamiltoniano de interacción electrón-fotón

Para estudiar los procesos de dispersión Raman se hace imprescindible conocer el hamiltoniano de interacción electrón-fotón. Para ello, consideremos el electrón en el sólido en presencia de un campo electromagnético externo, entonces

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu_0} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + \hat{\mathbf{U}} \left(\mathbf{r} \right) + e \hat{\phi} + \frac{e\hbar}{2\mu_0 c} \left(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right)$$
(2.52)

donde μ_0 es la masa del electrón libre, Â es el potencial vectorial del campo electromagnético, $\hat{\phi}$ el potencial campo eléctrico estático, *c* es la velocidad de la luz en el vacío y $\hat{\sigma}$ corresponde a la matriz de Pauli.

De la teoría del campo electromagnético se sabe que

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$
(2.53)

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{2.54}$$

Si tomamos como calibración de los potenciales

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \tag{2.55}$$

entonces, el potencial escalar correspondiente a la onda electromagnética es independiente del tiempo y responde solamente al campo eléctrico estático, en unión al campo cristalino.

Por otro lado, la probabilidad de que el spin cambie su orientación cuando se absorbe un fotón es pequeña, ya que es directamente proporcional al factor $e\hbar/c$, por lo que el último término en el hamiltoniano (2.52) se puede despreciar. De esta manera, se tiene que

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + \hat{\mathbf{U}} \left(\mathbf{r} \right) + e \hat{\phi}$$
(2.56)

Si se tiene en cuenta que

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right) = \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}} + \frac{e^2}{c^2}\hat{\mathbf{A}}^2$$
(2.57)

y para cualquier estado Ψ

$$\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}\right)\Psi = -i\hbar\nabla\cdot\mathbf{A}\Psi = -i\hbar\left[\left(\nabla\cdot\mathbf{A}\right)\Psi + \hat{\mathbf{A}}\nabla\Psi\right]$$
(2.58)

al tener en cuenta la calibración mencionada anteriormente, se tiene que

$$(\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{A}})\Psi = (\hat{\mathbf{A}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\Psi$$
 (2.59)

es decir, los operadores \hat{A} y \hat{p} conmutan; luego, el hamiltoniano puede ser escrito de la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}) - \frac{e}{\mu c} \left(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) + \frac{e^2}{2\mu c^2} \hat{\mathbf{A}}^2 + e\hat{\phi}$$
(2.60)

donde el primer término corresponde a la energía cinética del electrón, el segundo al potencial cristalino y el último término corresponde a la energía de interacción con el campo eléctrico estático. Entonces, el hamiltoniano de interacción electrón-fotón está dado por los términos tercero y cuarto

$$\hat{H}_{r} = -\frac{e}{\mu c} \left(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) + \frac{e^{2}}{2\mu c^{2}} \hat{\mathbf{A}}^{2}$$
(2.61)

El segundo término es importante en los procesos donde se produce la interacción del electrón con dos fotones simultáneamente, cuando la longitud de onda del fotón es menor o igual a la longitud característica del sistema; pero esto no suele ocurrir en semiconductores, de manera que el término con \hat{A}^2 se puede despreciar [82]. Entonces, el hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H}_r = -\frac{e}{\mu c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$
(2.62)

Si el potencial vectorial se expresa como una onda plana con vector de onda ${\bf k}$ y frecuencia ω

$$\mathbf{A} = A_0 \cos\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t\right) \mathbf{e}_r = \frac{1}{2} A_0 \left[e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \mathbf{e}_r$$
(2.63)

donde \mathbf{e}_r es el vector de polarización de la radiación, el campo eléctrico está dado por

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = A_0 \frac{\omega}{c} \operatorname{sen}\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t\right) \mathbf{e}_r$$
(2.64)

y la densidad de energía correspondiente a N fotones en un volumen V, es igual a

$$\frac{1}{V}N\hbar\omega = \frac{\overline{E^2}}{4\pi} = \frac{A_0^2\omega^2}{4\pi c^2}\overline{\operatorname{sen}\left[\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) - \omega t\right]} = \frac{A_0^2\omega^2}{8\pi c^2}$$
(2.65)

Como $\overline{\operatorname{sen}^2 x} = 1/2$, entonces

$$A_0 = 2c \sqrt{\frac{2\pi N\hbar}{V\omega}}$$
(2.66)

Sustituyendo las ecuaciones (2.63) y (2.66) en (2.62) se tiene que

$$\hat{H}_{r} = -\frac{e}{\mu} \sqrt{\frac{2\pi N\hbar}{V\omega}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\mathbf{e}_{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right)$$
(2.67)

Teniendo en cuenta el desarrollo en serie de la exponencial

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + \left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right) + \frac{\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)^2}{2!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)^n}{n!}$$
(2.68)

y considerando N=1 se obtiene finalmente

$$\hat{H}_{r} = -\frac{e}{\mu} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \left[1 - i\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) - \frac{\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right)^{2}}{2} - \dots \right] \left(\mathbf{e}_{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right)$$
(2.69)

en donde el primer término corresponde a la aproximación dipolar y el segundo a la cuadripolar [82]. Si se tiene en cuenta sólo la aproximación dipolar, entonces

$$\hat{H}_{r} = -\frac{e}{\mu} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \left(\mathbf{e}_{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right)$$
(2.70)

2.1.4. Sección eficaz de dispersión para un proceso de dispersión Raman

Al hacer incidir radiación electromagnética sobre la materia esta puede, entre otros fenómenos, ser dispersada elástica o inelásticamente. La luz dispersada elásticamente se llama dispersión de Rayleigh, en este caso, la energía de la luz dispersada es igual a la energía de la luz incidente. Por otro lado, en la dispersión inelástica, la energía de la luz dispersada es diferente a la energía de la luz incidente.

La dispersión Raman es una dispersión inelástica de la luz (aproximadamente una millonésima parte más pequeña que la dispersión elástica) comprendida usualmente como la dispersión de la luz debido a los fonones; pero también puede ser producida por excitaciones electrónicas o excitaciones magnéticas sin la participación de fonones [83]. Esta dispersión puede ser modelada como el proceso siguiente: el fotón incidente lleva al sistema transitoriamente a un nivel de energía superior, el cual abandona rápidamente para pasar a

un nuevo estado emitiendo un fotón de radiación secundaria, cuya frecuencia dependerá de la distancia energética entre los estados del sistema.

Si el fotón dispersado tiene una frecuencia menor a la del incidente, se produce una transferencia de energía del fotón al electrón que, después de saltar al estado virtual, vuelve a uno permitido con energía mayor al que tenía inicialmente lo que se conoce como dispersión Raman Stokes.

Si el fotón dispersado tiene una frecuencia mayor a la del incidente, se produce una transferencia de energía de la red al fotón. Esto significa que el sistema antes de la interacción no se encontraba en su estado base o fundamental sino en uno de mayor energía, y después de la interacción pasa, en general, al estado base produciéndose así la dispersión Raman anti-Stokes (Figura 2.1).



Figura 2.1: Diagrama energético en el que las líneas horizontales representan distintos estados [84].

Así, si se toma como origen para medir las frecuencias la correspondiente a la onda incidente v, las líneas Stokes se encuentran para valores de frecuencia menores que v; mientras que las líneas anti-Stokes se encuentran para valores de frecuencia mayores que v. Sin embargo, a temperatura ambiente existen más electrones con niveles energéticos bajos que con niveles altos; de manera que ocurrirán más transiciones tipo Stokes que anti-Stokes, y la línea Stokes en consecuencia, tendrá una intensidad mayor, siendo la distancia entre la línea Stokes y anti-Stokes con respecto a la línea de Rayleigh o incidente iguales, tal como se ilustra en la Figura 2.2.

La dispersión Raman resonante (DRR) es un proceso que se produce debido a transiciones entre la banda de valencia y la banda de conducción, el primer paso consiste en la creación de un par electrón-hueco debido a la absorción de un fotón de radiación incidente, cuya energía tiene que ser mayor a la energía del gap; luego, se producen procesos de relajación que conducen al cambio del estado vibracional del sistema, es decir, se produce una transición intermedia intra-banda con la emisión de un fonón óptico longitudinal, y el paso final es una recombinación radiativa. En la DRR que tiene lugar en cristales aislantes o semiconductores las transiciones electrónicas intermedias, en general, son virtuales (aparecen en la teoría de perturbaciones y no conservan la energía, cuando esta se conserva la transición se convierte en real), pero pueden hacerse reales, por lo que la eficiencia de la dispersión Raman presenta un incremento limitado únicamente por la vida media finita de los estados intermedios [15].



Figura 2.2: Interpretación espectral de los procesos de dispersión [85].

Para describir la dispersión Raman se utiliza la sección eficaz diferencial de dispersión que macroscópicamente, determina el número de fotones dispersados en el intervalo de frecuencia ω_s y $\omega_s + d\omega_s$, en un ángulo sólido $d\Omega$ por unidad de área. Si se define $W_{fi}(\omega_s, \mathbf{e}_s)$ como la probabilidad de transición del estado inicial $|i\rangle$ al estado final $|f\rangle$ por unidad de tiempo, entonces el número de fotones dispersados por unidad de tiempo con vector de onda entre \mathbf{k}_s y $\mathbf{k}_s + d\mathbf{k}_s$ se puede escribir como [86]

$$dN_{s} = \sum_{f} W_{fi} \left(\omega_{s}, \mathbf{e}_{s} \right) \frac{V}{\left(2\pi\right)^{3}} d^{3} \mathbf{k}_{s}$$
(2.71)

donde V es el volumen del sistema. El cambio a unidades de frecuencia permite escribir la ecuación (2.71) de la siguiente forma

$$dN_{s} = \sum_{f} W_{fi} \left(\omega_{s}, \mathbf{e}_{s} \right) \frac{V}{\left(2\pi c\right)^{3}} \omega_{s}^{2} d\omega_{s} d\Omega$$
(2.72)

siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

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

$$d\sigma = \frac{\eta(\omega_s)V}{\eta(\omega_l)c} dN_s \tag{2.73}$$

donde $\eta(\omega)$ es el índice de refracción del medio a la frecuencia ω , siendo ω_s (ω_l) la frecuencia del fotón dispersado (incidente).

Sustituyendo la ecuación (2.72) en (2.73) y realizando algunas operaciones se obtiene la expresión para la sección eficaz diferencial de dispersión por unidad de frecuencia ω_s y ángulo sólido Ω .

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \frac{V^2 \omega_s^2 \eta(\omega_s)}{8\pi^3 c^4 \eta(\omega_l)} \sum_f W_{fi}(\omega_s, \mathbf{e}_s)$$
(2.74)

donde $W_{fi}(\omega_s, \mathbf{e}_s)$ se calcula mediante la Regla de Oro de Fermi

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i} \left| M_{fi} \right|^2 \delta \left(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i \right)$$
(2.75)

siendo M_{fi} la amplitud de probabilidad de transición desde el estado inicial del sistema con energía \mathcal{E}_i al estado final del sistema con energía \mathcal{E}_f , que se calcula de diferentes maneras según el tipo de proceso que se considere [82]. De esta manera, se obtienen las reglas de selección correspondientes al proceso de dispersión, así como los espectros de emisión y excitación.

3.2 Fundamentos experimentales

A través de la espectroscopía Raman se han realizado diferentes estudios sobre los alambres cuánticos como es el caso del InAs/InP [28]. Este estudio mostró la existencia de modos vibracionales cuyas energías evidencian las propiedades de confinamiento de los alambres, observándose la presencia de picos correspondientes a fonones ópticos tanto transversales como longitudinales, donde cierto modo LO es casi coincidente con el del bulk. Además, se encontró que los modos vibracionales que surgen en los alambres cuánticos violan las reglas de selección presentes en semiconductores volumétricos con estructura tipo zinc blenda, donde sólo los fonones LO están permitidos en la polarización paralela.

La posibilidad de utilizar los alambres cuánticos como celdas solares condujo al estudio del fotovoltaje en el sistema *InGaAs/GaAs* [29]; observándose, un fotovoltaje significativamente más alto en el rango espectral de 1.25-1.37eV en comparación con una juntura *p-i-n* de *GaAs* tomada como referencia (Figura 2.3), debido a las transiciones interbandas que se producen en los alambres cuánticos. De esta manera, los estados cuánticos en el alambre de *InGaAs* resultaron ser una extensión del espectro de fotovoltaje en el rango infrarrojo de 1.25-1.37eV, donde la muestra de referencia de *GaAs* es transparente, siendo este efecto independiente de la frecuencia de excitación (Figura 2.4).



Figura 2.3: Espectro de fotovoltaje para un alambre cuántico de *InGaAs/GaAs* (curva 1) y *GaAs* de referencia *p-i-n* (curva 2) medido a T = 290 K y excitación estacionaria.



Figura 2.4: Espectros de fotovoltaje para las heteroestructuras de *InGaAs/GaAs* medidas con una iluminación continua (curva 1) y modulada a 80Hz (curva 2).

Por otro lado, se ha podido observar que las propiedades ópticas de los alambres de *GaAs* pueden ser modificadas al aplicar una presión externa [30]. En la Figura 2.5 se puede apreciar que la intensidad del modo *LO* gana aproximadamente 2 órdenes de magnitud, mientras que el modo *TO* sólo alrededor de 1 orden de magnitud al aumentar la presión externa, donde las resonancias de los modos *LO* y 2*LO* indican la presencia de la interacción electrón-fonón vía Frölich. La relación de intensidad (2*LO*)/(*LO*) se reporta igual a 4.4, lo que confirma que el acoplamiento vía Frölich es más fuerte en los nanoalambres de *GaAs* que en el bulk [30].



Figura 2.5: Dependencia del espectro Raman de un alambre de GaAs con la presión externa [30]

También, se ha realizado el estudio de plasmones confinados en alambres cuánticos de GaAs/GaAlAs con dopaje modulado [32]. Estos modos muestran reglas de selección únicas que se explican teniendo en cuenta, tanto la polarización como la paridad de la distribución del campo eléctrico local en los alambres. La Figura 2.6 muestra los espectros de alambres de 180nm (Figura 2.6(*a*)) y 430nm (Figura. 2.6(*b*)) con magnitud fija del vector de onda de dispersión q en cuatro configuraciones experimentales diferentes: q orientado paralelo y perpendicular al eje del alambre y, para cada caso, los espectros en la configuración de polarización sp y pp ("polarizada" y "despolarizada", respectivamente). Cuando q es paralelo, la simetría de la muestra es preservada por el campo óptico y se verifica la conservación de la paridad.



Figura 2.6: Reglas de selección de polarización [32].

Al estudiar la influencia de la polarización de la luz sobre la dispersión Raman en nanoalambres de *GaAs* [33], se observó que el modo *TO* en 267cm⁻¹ presenta la mayor intensidad cuando la polarización de la luz incidente y dispersada son paralelas al eje del nanoalambre mostrando una intensidad menor con respecto al bulk (Figura 2.7), mientras que la luz dispersada con polarización perpendicular al eje del alambre tiene una caída en la intensidad (Figura 2.8), lo que no se observa en el material volumétrico, evidenciando la modificación de las reglas de selección debido al confinamiento.



Figura 2.7: Comparación de los espectros Raman del nanoalambre y el bulk de *GaAs* para la luz incidente y dispersada polarizadas en el eje del alambre [33].



Figura 2.8: Espectros Raman obtenidos utilizando luz polarizada paralela y perpendicular al eje del alambre de *GaAs* [33].

También, se ha investigado el efecto que produce la aplicación de campos externos sobre las propiedades de estos sistemas. Un estudio realizado en alambres cuánticos semiconductores de *n-GaAs*, por ejemplo, mostró que al aplicar un campo eléctrico sobre el alambre se producen cambios en la conductividad, ya que aparece una nueva longitud de corte cuando la intensidad del campo eléctrico supera cierto valor crítico, hecho que condujo a la modificación de la teoría de Mott-Kaveh para la conductividad en alambres cuánticos [43].

Capítulo 3: Estados electrónicos y reglas de selección en alambres cuánticos en presencia de un campo eléctrico homogéneo

En este capítulo se estudian los estados electrónicos para un alambre cuántico semiconductor de simetría cilíndrica en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo, aplicado transversalmente al eje del alambre. Primeramente, se considera barrera de potencial finita o confinamiento parcial de los portadores de carga; en este caso, haremos referencia al sistema como QWW (del inglés quantum well wire). Como segundo caso, se considera barrera de potencial infinita o confinamiento total de los portadores y haremos referencia a este sistema como nanoalambre. Se obtienen; además, las reglas de selección para las transiciones ópticas inter-bandas e intra-banda correspondientes a la solución obtenida.

3.1 Estados electrónicos para un alambre cuántico de simetría cilíndrica en presencia de un campo eléctrico externo.

Consideremos un alambre cuántico con simetría cilíndrica de radio r_0 y longitud *L*, en la dirección del eje *z*, en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo, aplicado en la dirección del eje *x*. Para obtener los estados estacionarios monoelectrónicos resolvemos la ecuación estacionaria de Schrödinger:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]-eFr\cos\theta+V(r)-\mathcal{E}\right\}\varphi(r,\theta,z)=0$$
(3.1)

donde *e* y μ son la carga y la masa efectiva del electrón respectivamente, *F* es la intensidad del campo eléctrico y V(r) es el potencial de confinamiento. Sea

$$V(r), \mu = \begin{cases} 0, & \mu_1, & 0 \le r < r_0 \\ V_0, & \mu_2, & r_0 \le r < \infty \end{cases}$$
(3.2)

Para resolver la ecuación (3.1) se propone la solución

$$\varphi(r,\theta,z) = f(r,\theta) \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}} \quad y \quad \mathcal{E} = \mathcal{E}_r + \frac{\hbar^2}{2\mu}k_z^2$$
(3.3)

siendo \mathcal{E}_r la parte de la energía de los estados electrónicos debido al confinamiento, mientras que $\hbar^2 k_z^2/2\mu$ es la energía correspondiente a la dirección libre (\mathbf{k}_z es el vector de onda del electrón en la dirección z). Sustituyendo (3.3) en (3.1) se obtiene

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial}{\partial r}f\left(r,\theta\right)\right] + \frac{1}{r^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial \theta^{2}}f\left(r,\theta\right) + \frac{2\mu}{\hbar^{2}}\left[eFr\cos\theta - V\left(r\right) + \mathcal{E}_{r}\right]f\left(r,\theta\right) = 0 \quad (3.4)$$

Proponiendo $f(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta)$, tenemos que

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial}{\partial r}R\right] + \frac{2\mu\left[\mathcal{E}_{r}-V(r)\right]}{\hbar^{2}}r^{2} = -\left[\frac{1}{\Theta}\frac{\partial^{2}\Theta}{\partial\theta^{2}} + 2\frac{\mu eF}{\hbar^{2}}r^{3}\cos\theta\right]$$
(3.5)

La parte derecha de la ecuación (3.5) tiene un aspecto similar a la ecuación de Mathieu, pero en el segundo término aparece la variable radial lo que impide aplicar el método de separación de variables. Esta dificultad se resuelve utilizando la aproximación realizada por Harutyunyan [19], donde se sustituye *r* por su valor medio $\langle r \rangle$ con lo que se logra separar variables

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial}{\partial r}R\right] + \frac{2\mu\left[\mathcal{E}_{r}-V(r)\right]}{\hbar^{2}}r^{2} = -\left[\frac{1}{\Theta}\frac{\partial^{2}\Theta}{\partial\theta^{2}} + 2\frac{\mu eF}{\hbar^{2}}\langle r\rangle^{3}\cos\theta\right] = \lambda_{r} \qquad (3.6)$$

De esta manera, se obtiene para la parte angular la ecuación de Mathieu [87,88]

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \phi^2} + \left[c_r - 2q \cos 2\phi\right] \Theta = 0 \tag{3.7}$$

donde $\theta = 2\phi$, $c_r = 4\lambda_r$ y $q = -4\mu eF \langle r \rangle^3 /\hbar^2$. Como la solución de la ecuación (3.7) debe ser periódica [87],

$$\Theta(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \begin{cases} ce_{2m}(q,\theta/2), & c_r = a_{2m}, & m = 0,1,2,\dots \\ se_{2|m|}(q,\theta/2), & c_r = b_{2|m|}, & m = -1,-2,-3,\dots \end{cases}$$
(3.8)

siendo $\operatorname{ce}_{2m}(q,\phi)$ y $\operatorname{se}_{2|m|}(q,\phi)$ las funciones periódicas de Mathieu, mientras que a_{2m} y $b_{2|m|}$ son sus respectivos autovalores. Dichas funciones tienen período π , paridad definida y reproducen la solución correspondiente al caso donde F = 0.

Por otro lado, la parte radial toma la forma de la ecuación de Bessel

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \left[k_r^2 - \frac{\lambda_r}{r^2} \right] R = 0$$
(3.9)

donde $k_r^2 = 2\mu \left[\mathcal{E}_r - V(r) \right] / \hbar^2$. La solución de la ecuación (3.9) depende del signo de los autovalores de la función de Mathieu; si c_r es positivo el orden de la ecuación de Bessel es real y la solución está dada por las funciones de Bessel; mientras que, si c_r es negativo el orden de la ecuación de Bessel es imaginario y la solución está dada por las funciones de Bessel de orden imaginario, las cuales están relacionadas con la descripción de fenómenos

anisótropos [89]; luego, siguiendo las indicaciones dadas en la referencia [88], la solución toma la forma

$$R_{n,m}(r) = \begin{cases} A \mathcal{R} e \left[J_{\sqrt{\lambda_r}}(k_a r) \right], & 0 \le r < r_0 \\ B K_{\sqrt{\lambda_r}}(k_b r), & r_0 \le r < \infty \end{cases}$$
(3.10)

donde J_{ν} es la función de Bessel de primer tipo y K_{ν} la función de Bessel modificada de segundo tipo, ambas de orden ν [87,88], siendo

$$k_a = \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2}\mathcal{E}_r} \quad \text{y} \quad k_b = \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} \left[V_0 - \mathcal{E}_r\right]} \tag{3.11}$$

Aplicando las condiciones de frontera de Ben Daniel-Duke, esto es, la continuidad de la función de onda, $\varphi(r)$, y del flujo de probabilidad, $(1/\mu)(\partial \varphi/\partial r)$, en la interfaz; así como la condición de normalización, se obtienen las constantes de normalización

$$A = [I_1 + I_2]^{-\frac{1}{2}}, \quad B = A \frac{\Re e[J_{\sqrt{\lambda_r}}(k_a r_0)]}{K_{\sqrt{\lambda_r}}(k_b r_0)}$$
(3.12)

$$I_{1} = \int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}\boldsymbol{e}[J_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r)]^{2} r dr \quad y \quad I_{2} = \frac{\mathcal{R}\boldsymbol{e}[J_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r_{0})]}{K_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{b}r_{0})} \int_{r_{0}}^{\infty} [K_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{b}r)]^{2} r dr \quad (3.13)$$

mientras que \mathcal{E}_r puede determinarse a partir de la ecuación trascendente

$$\mu_{2}k_{a}\mathcal{R}e[J'_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r_{0})]K_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r_{0}) = \mu_{1}k_{b}\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r_{0})]K'_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{b}r_{0})$$
(3.14)

Finalmente, la solución de la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\varphi_{n,m,k_z}(r,\theta,z) = \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{\pi L}} R_{n,m}(r) \times \begin{cases} \operatorname{ce}_{2m}(q,\theta/2), & c_r = a_{2m}, & m = 0,1,2,\dots \\ \operatorname{se}_{2|m|}(q,\theta/2), & c_r = b_{2|m|}, & m = -1,-2,-3,\dots \end{cases}$$
(3.15)

En consecuencia, para cada *m* se obtiene n = 1, 2, ..., siendo *n* el número cuántico principal y está asociado a los ceros de la ecuación trascendente (3.14). Los estados electrónicos se agrupan en sub-bandas denotadas por el número cuántico *n*, las cuales contienen un conjunto de estados denotados por el número cuántico *m* [24]. Al igual que en un pozo cuántico [90], si las barreras de potencial son finitas, la presencia de un campo eléctrico externo aplicado en la dirección de confinamiento provoca que no existan verdaderos estados estacionarios, pues el electrón siempre puede "salir" del sistema por efecto túnel sin poder regresar debido, precisamente, a la presencia del campo eléctrico.

Si existe confinamiento total, esto es $V_0 \rightarrow \infty$, la solución toma la forma

$$\varphi_{n,m,k_{z}}(r,\theta,z) = \frac{A}{\sqrt{\pi L}} e^{ik_{z}z} \Re e[J_{\sqrt{\lambda_{r}}}(k_{a}r)] \times \begin{cases} ce_{2m}(q,\theta/2), & c_{r} = a_{2m}, & m = 0,1,2,... \\ se_{2|m|}(q,\theta/2), & c_{r} = b_{2|m|}, & m = -1,-2,-3,... \end{cases}$$
(3.16)

donde $A = \int_0^{r_0} \Re e[J_{\sqrt{\lambda_r}}(k_a r)]^2 r dr$ y la energía, \mathcal{E}_r , se obtiene de la ecuación

$$\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{\tau}}}(k_{a}r_{0})] = 0$$
(3.17)

3.2 Reglas de selección

Las reglas de selección para las transiciones ópticas dependen del hecho de que estas sean inter-bandas o intra-banda (Figura 3.1). Utilizando el hamiltoniano de interacción electrón-fotón en aproximación dipolar (2.70), las funciones de onda (3.15) y teniendo en cuenta que las funciones de Mathieu son ortogonales sólo si q es el mismo [87,88], se obtiene para el QWW lo siguiente:

> Transiciones ópticas inter-bandas (creación de un par electrón-hueco)

$$\left\langle n_{e}, m_{e}, k_{ze} \left| \hat{H}_{r} \right| n_{h}, m_{h}, k_{zh} \right\rangle = -\frac{e}{\mu_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{p}_{vc} \left(0 \right) \right] T_{n_{e}, m_{e}; n_{h}, m_{h}} \delta_{k_{ze}, k_{zh}}$$
(3.18)

donde $\mathbf{p}_{vc}(0)$ se obtiene del elemento de transición que conecta la banda de valencia (v) y la banda de conducción (c). Además,

$$T_{n_e,m_e;n_h,m_h} = A_{n_e,m_e} A_{n_h,m_h} \Lambda_{1,m_e,m_h} \int_{0}^{r_0} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_e}}(k_{ae}r)] \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_h}}(k_{ah}r)] r dr$$

$$+ B_{n_e,m_e} B_{n_h,m_h} \Lambda_{2,m_e,m_h} \int_{r_0}^{\infty} K_{\sqrt{\lambda_e}}(k_{be}r) K_{\sqrt{\lambda_h}}(k_{bh}r) r dr$$
(3.19)

siendo

$$\Lambda_{j,m_{e},m_{h}} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{2\pi} fe_{2m_{e}} \left(q_{ej}, \theta/2 \right) fe_{2m_{h}} \left(q_{hj}, \theta/2 \right) d\theta$$
(3.20)

y
$$fe_{2m}(q,\phi) = \begin{cases} ce_{2m}(q,\phi), & \lambda_r = a_{2m}/4, & m = 0, +1, +2...\\ se_{2|m|}(q,\phi), & \lambda_r = b_{2m}/4, & m = -1, -2, -3... \end{cases}$$
 (3.21)

donde e(h) describe al electrón (hueco) y, j = 1(2) indica el interior (exterior) del alambre.



Figura 3.1: Transiciones ópticas.

Como se puede observar, para las transiciones ópticas inter-bandas no hay reglas de selección para los números cuánticos n y m. Este resultado no coincide con el obtenido en ausencia del campo eléctrico ni en presencia de un campo magnético donde se cumple que $m_e = m_h$ [16,35].

Transiciones ópticas intra-banda

En este caso, en el hamiltoniano de interacción electrón- fotón [26]

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left(\nabla_{+} \mathbf{e}_{-} + \nabla_{-} \mathbf{e}_{+} + \nabla_{z} \mathbf{e}_{z} \right), \quad \nabla_{\mp} = \frac{\exp(\pm i\theta)}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$
(3.22)

$$\mathbf{y} \quad \mathbf{e}_{\pm} = \frac{\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y}{\sqrt{2}} \tag{3.23}$$

En la dirección \mathbf{e}_{z} :

$$\left\langle n_{1}, m_{1}, k_{z1} \left| \hat{H}_{r} \right| n_{2}, m_{2}, k_{z2} \right\rangle_{z} = -ik_{z2}r_{0} \frac{i\hbar|e|}{\mu_{0}r_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{r}}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{e}_{z} \right] T_{n_{1}, m_{1}; n_{2}, m_{2}}^{z} \delta_{k_{z1}, k_{z2}}$$
(3.24)

siendo

$$T_{n_{1},m_{1};n_{2},m_{2}}^{z} = \beta_{1}A_{1}^{*}A_{2}\Lambda_{1,m_{1},m_{2}}^{z} \int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)]\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a2}}}(k_{a2}r)]rdr + \beta_{2}B_{1}^{*}B_{2}\Lambda_{2,m_{1},m_{2}}^{z} \int_{r_{0}}^{\infty} K_{\sqrt{\lambda_{b1}}}(k_{b1}r)K_{\sqrt{\lambda_{b2}}}(k_{b2}r)rdr$$
(3.25)

donde

$$\beta_{j} = \frac{\mu_{0}}{\mu_{j}} \quad \text{y} \quad \Lambda_{j,m_{1},m_{2}}^{z} = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\pi} \text{fe}_{2m_{1}}(q_{j},\phi) \text{fe}_{2m_{2}}(q_{j},\phi) d\phi$$
(3.26)

expresión que fue obtenida realizando el cambio de variable $\phi=\theta/2$.

En la dirección \mathbf{e}_{\pm} :

$$\left\langle n_{1}, m_{1}, k_{z1} \middle| \hat{H}_{r} \middle| n_{2}, m_{2}, k_{z2} \right\rangle_{\pm} = -\frac{i\hbar |e|}{\mu_{0}r_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{r}}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{e}_{\pm} \right] T_{n_{1}, m_{1}; n_{2}, m_{2}}^{\pm} \delta_{k_{z1}, k_{z2}}$$
(3.27)

donde

$$T_{n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} = \frac{\sqrt{2}}{2} \Big[T_{1,n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} \mp i T_{2,n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} \Big]$$
(3.28)

siendo

$$T_{1,n_{1},m_{1};n_{2},m_{2}}^{\pm} = k_{a2}r_{0}\frac{\mu_{0}}{\mu_{1}}A_{1}^{*}A_{2}\Lambda_{1,1,m_{1},m_{2}}^{\pm}\int_{0}^{r_{0}}\boldsymbol{\mathcal{R}}\boldsymbol{e}[\boldsymbol{J}_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)]\boldsymbol{\mathcal{R}}\boldsymbol{e}[\boldsymbol{J}_{\sqrt{\lambda_{a2}}}'(k_{a2}r)]rdr + k_{b2}r_{0}\frac{\mu_{0}}{\mu_{2}}B_{1}^{*}B_{2}\Lambda_{1,2,m_{1},m_{2}}^{\pm}\int_{r_{0}}^{\infty}K_{\sqrt{\lambda_{b1}}}(k_{b1}r)K_{\sqrt{\lambda_{b2}}}'(k_{b2}r)rdr$$
(3.29)

$$T_{2,n_{1},m_{1};n_{2},m_{2}}^{\pm} = r_{0} \frac{\mu_{0}}{\mu_{1}} A_{1}^{*} A_{2} \Lambda_{2,1,m_{1},m_{2}}^{\pm} \int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)] \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a2}}}(k_{a2}r)] dr$$

$$+ r_{0} \frac{\mu_{0}}{\mu_{2}} B_{1}^{*} B_{2} \Lambda_{2,2,m_{1},m_{2}}^{\pm} \int_{r_{0}}^{\infty} K_{\sqrt{\lambda_{b1}}}(k_{b1}r) K_{\sqrt{\lambda_{b2}}}(k_{b2}r) dr$$
(3.30)

$$\Lambda_{\alpha,j,m_{1},m_{2}}^{\pm} = \frac{3-\alpha}{\pi} \int_{0}^{\pi} e^{\pm 2i\phi} \operatorname{fe}_{m_{1}}(q_{j},\phi) \operatorname{fe}_{m_{2}}(q_{j},\phi) d\phi \qquad (3.31)$$

donde $\alpha = 1(2)$. Tampoco para las transiciones ópticas intra-banda aparecen reglas de selección para los números cuánticos *n* y *m*. Este resultado es diferente al obtenido en ausencia de campo eléctrico, donde las transiciones ópticas intra-banda se realizan entre estados consecutivos para el número cuántico *m* ($m_a = m_b \pm 1$).

Para el caso del nanoalambre $(V_0 \rightarrow \infty)$, utilizando las funciones de onda (3.16) se obtiene:

Transiciones ópticas inter-bandas

$$\left\langle n_{e}, m_{e}, k_{ze} \left| \hat{H}_{r} \right| n_{h}, m_{h}, k_{zh} \right\rangle = -\frac{e}{\mu_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{r}}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{p}_{vc} \left(0 \right) \right] T_{n_{e}, m_{e}; n_{h}, m_{h}} \delta_{k_{ze}, k_{zh}}$$
(3.32)

donde

$$T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} = A_{n_{e},m_{e}}A_{n_{h},m_{h}}\Lambda_{1,m_{e},m_{h}}\int_{0}^{r_{0}} \Re[J_{\sqrt{\lambda_{e}}}(k_{ae}r)]\Re[J_{\sqrt{\lambda_{h}}}(k_{ah}r)]rdr$$
(3.33)

donde tampoco se obtienen reglas de selección. Este resultado también es diferente al obtenido en ausencia de campo eléctrico, donde se cumplen las reglas de selección $m_e = m_h$ y $n_e = n_h$. Debemos señalar que en el caso particular en que las masas efectivas del electrón y el hueco sean iguales entonces se cumple que $m_e = m_h$ cuando existe el campo eléctrico homogéneo.

Transiciones ópticas intra-banda

En la dirección \mathbf{e}_{z} :

$$\left\langle n_{1}, m_{1}, k_{z1} \middle| \hat{H}_{r} \middle| n_{2}, m_{2}, k_{z2} \right\rangle_{z} = -ik_{z2}r_{0}\frac{i\hbar|e|}{\mu_{0}r_{0}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{r}}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{e}_{z} \right] T_{n_{1}, n_{2}}^{z} \Lambda_{m_{1}, m_{2}}^{z} \delta_{k_{z1}, k_{z2}}$$
(3.34)

donde

$$T_{n_{1},n_{2}}^{z} = \beta_{1}A_{1}^{*}A_{2}\int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)]\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a2}}}(k_{a2}r)]rdr$$
(3.35)

En la dirección \mathbf{e}_{\pm} :

$$\left\langle n_{1}, m_{1}, k_{z1} \middle| \hat{H}_{r} \middle| n_{2}, m_{2}, k_{z2} \right\rangle_{\pm} = -\frac{i\hbar |e|}{\mu_{0}r_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{r}}} \left[\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{e}_{\pm} \right] T_{n_{1}, m_{1}; n_{2}, m_{2}}^{\pm} \delta_{k_{z1}, k_{z2}}$$
(3.36)

donde

$$T_{n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} = \frac{\sqrt{2}}{2} \Big[T_{1,n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} \mp i T_{2,n_1,m_1;n_2,m_2}^{\pm} \Big]$$
(3.37)

siendo

$$T_{1,n_{1},m_{1};n_{2},m_{2}}^{\pm} = k_{a2}r_{0}\beta_{1}A_{1}^{*}A_{2}\Lambda_{1,1,m_{1},m_{2}}^{\pm} \int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)]\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a2}}}'(k_{a2}r)]rdr$$
(3.38)

$$T_{2,n_{1},m_{1};n_{2},m_{2}}^{\pm} = r_{0}\beta_{1}A_{1}^{*}A_{2}\Lambda_{2,1,m_{1},m_{2}}^{\pm} \int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a1}}}(k_{a1}r)]\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{a2}}}(k_{a2}r)]dr$$
(3.39)

por lo que tampoco se obtienen reglas de selección.

Entonces, se puede concluir que la presencia de un campo eléctrico aplicado en dirección transversal al eje del alambre rompe las reglas de selección correspondientes al sistema, tanto para transiciones ópticas inter-bandas como intra-banda.

3.3 Discusión de resultados

Los alambres cuánticos construidos con simetría cilíndrica tienen estados electrónicos degenerados [8]. Las soluciones que se han obtenido son evidentemente aproximadas; sin embargo, contienen características propias del sistema como es la aparición de estados pares e impares, excepto para m=0 donde sólo existen estados pares, lo que refleja la ruptura de la simetría del sistema debido a la presencia del campo eléctrico. Es decir, el campo eléctrico rompe la simetría circular del sistema responsable de esta degeneración.

Por otro lado, las funciones de Bessel pueden tener orden imaginario a partir de cierto valor que denominamos punto crítico, el cual depende de la magnitud del campo eléctrico y del radio del sistema. Con relación a esto, llamamos región o régimen subcrítico a la región donde la función de Bessel es de orden real, y como región o régimen supercrítico a la región donde el orden de la función de Bessel es imaginario. Este cambio de comportamiento puede explicarse de la siguiente manera: la fuerza que el campo eléctrico ejerce sobre el electrón provoca un flujo de probabilidad en dirección transversal, lo que obliga al electrón a atravesar la barrera manteniendo el sentido de dicho flujo. En la medida que se incrementa la intensidad del campo eléctrico, el flujo de probabilidad aumenta, produciéndose un flujo "contracorriente", debido a la forma de la frontera, pasando así el sistema a un régimen supercrítico identificado con la función de Bessel de orden imaginario.

Para obtener los estados electrónicos del QWW se ha considerado una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ utilizando los siguientes parámetros físicos: $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$ y $V_0 = 0.30$ eV. En las Figuras 3.2-3.6, las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden al sistema en ausencia de campo eléctrico.

La Figura 3.2 muestra los valores de λ_r , cuya raíz define el orden de la función de Bessel, y las energías correspondientes a un nanoalambre en función del radio, para una intensidad de campo eléctrico F = 40.0 kV/cm. El valor medio de r se obtuvo utilizando la función de onda correspondiente al sistema en ausencia de campo eléctrico, por lo cual $\langle r \rangle$ es distinto para cada estado electrónico con números cuánticos (n,m), lo que puede considerarse como una aproximación de primer orden. Los valores de m mostrados en la figura hacen referencia al sistema en ausencia de campo eléctrico.

En las Figuras 3.2(*a*) y 3.2(*c*) se muestra cómo cambia λ_r respecto al radio, para n=1 y n=2 respectivamente. Para m=0 el valor de λ_r siempre es negativo, por lo que la solución se encontrará siempre en el régimen supercrítico. También se puede observar que los valores de λ_r para $m \neq 0$ comienzan a diferenciarse cuando $r_0 > 50$ Å. Este punto aumenta ligeramente con el incremento de m y n. En las Figuras 3.2(*b*) y 3.2(*d*) se muestran las energías de los estados electrónicos (\mathcal{E}_r) para n=1 y n=2 respectivamente. Las energías de los estados electrónicos pares e impares, al igual que los valores de λ_r , comienzan a diferenciarse de la energía de los estados electrónicos sin campo eléctrico cuando $r_0 > 50$ Å, aumentando ligeramente esta diferencia con el incremento de m y de n. El régimen subcrítico puede ocurrir en estados con $m \neq 0$, pasando al régimen supercrítico cuando el estado en cuestión, (n,m), alcanza la energía del estado base de la sub-banda, es decir, (n,0) correspondiente a un sistema donde F = 0.



Figura 3.2: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos como funciones del radio para un nanoalambre $(V_0 = \infty)$ donde F = 40.0 kV/cm. Entonces: (*a*) valores de λ_r para n = 1, (*b*) valores de \mathcal{E}_r para n = 1, (*c*) valores de λ_r para n = 2, y (*d*) valores de \mathcal{E}_r para n = 2. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0.

Los resultados mostrados en la Figura 3.3 fueron obtenidos utilizando el radio del nanoalambre y del QWW como valor medio de $r (\langle r \rangle = r_0)$ y un campo eléctrico de magnitud F = 40.0 kV/cm. Esta elección para el valor medio de r permite que el cálculo se simplifique enormemente al tener sólo un valor medio para todos los estados, además, de esta forma los valores propios de la función de Mathieu no dependerán de n. En las Figuras 3.3(d), 3.3(e) y 3.3(f) si las líneas azules o negras son continuas (discontinuas) corresponden a la región dentro (fuera) del QWW.

El efecto de cambiar el valor medio, $\langle r \rangle = r_0$, se observa si comparamos la Figura 3.2 con las Figuras 3.3(*a*), 3.3(*b*) y 3.3(*c*), esto muestra que en el caso del nanoalambre, dicho cambio provoca que los valores de λ_r y las energías de la parte confinada de los estados electrónicos pares e impares, comiencen a diferenciarse de forma notable de los estados sin campo eléctrico cuando $r_0 > 30$ Å, es decir, se refuerza el efecto del campo eléctrico debido a que en un nanoalambre, generalmente, $\langle r \rangle < r_0$; además, este cambio disminuye el radio para el cual se alcanza el punto crítico.

Es notable que, tanto en la Figura 3.2 como en la Figura 3.3, antes de que el sistema alcance el régimen supercrítico, se produce una mezcla de estados electrónicos que provoca que el estado (n,0) no sea el estado base de cada sub-banda. Esto es muy raro que se produzca, aunque en el caso de átomos y moléculas confinados ocurre [91-93], de cualquier manera, no hemos encontrado evidencia experimental que justifique o niegue este hecho; por lo cual podemos considerar que lo más probable es que esto se deba a una limitación del modelo propuesto.

Si comparamos los resultados del nanoalambre (Figuras 3.3(a), 3.3(b) y 3.3(c)) con los del QWW (Figuras 3.3(d), 3.3(e) y 3.3(f)), se observa que el QWW alcanza el régimen supercrítico para valores de radio mayores que los del nanoalambre, esto se debe a la posibilidad de que el electrón en un QWW puede salir del sistema por efecto túnel, mientras que en el nanoalambre esto no es posible.

En la Figura 3.4, se muestra el comportamiento de λ_r y la energía de la parte confinada para un nanoalambre en función del campo eléctrico, para un radio del alambre $r_0 = 40$ Å. Se puede observar que la energía de los estados pares siempre es mayor que la energía de los estados impares; además, la influencia del campo eléctrico sobre los estados electrónicos es menor que el efecto producido por el confinamiento.



Figura 3.3: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos donde F = 40.0kV/ cm y $\langle r \rangle = r_0$, siendo: (a)-(c) nanoalambre, (d)-(f) QWW. Las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0. Además, las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, en la figura (d) si las líneas azules o negras son continuas (discontinuas) corresponden a la región dentro (fuera) del QWW.



Figura 3.4: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos como funciones del campo eléctrico para un nanoalambre $(V_0 = \infty)$ donde $r_0 = 40$ Å. Entonces: (*a*) valores de λ_r para n = 1, (*b*) valores de \mathcal{E}_r para n = 1, (*c*) valores de λ_r para n = 2, y (*d*) valores de \mathcal{E}_r para n = 2. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0.

Al comparar la Figura 3.5 con la Figura 3.4 se puede determinar que el efecto del campo eléctrico sobre el parámetro λ_r y los niveles de energía es mayor en el QWW que en el nanoalambre, debido a que en el primero el confinamiento es menor por ser la barrera de potencial finita. Por otro lado, tanto en la Figura 3.4 (nanoalambre) como en la Figura 3.5 (QWW) se observa que el efecto Stark no es lineal.



Figura 3.5: Parámetro λ_r y energía de la parte confinada de los estados electrónicos como funciones del campo eléctrico para un QWW donde n = 1 y $\langle r \rangle = r_0 = 40$ Å, siendo: (*a*) valores de λ_r , y (*b*) valores de \mathcal{E}_r . Las líneas rojas discontinuas corresponden a un sistema donde F = 0. Las líneas azules corresponden a los estados impares y las líneas negras a los estados pares; si las líneas azules o negras son continuas (discontinuas) corresponden a la región dentro (fuera) del QWW.

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, donde el efecto del campo eléctrico es fuerte para radios $r_0 > 50$ Å, se procedió al estudio de los estados electrónicos para dos QWW: uno de radio $r_0 = 55$ Å (Figura 3.6(*a*)) y otro de radio $r_0 = 75$ Å (Figura 3.6(*b*)). Como se puede ver, en ausencia de campo eléctrico todos los estados electrónicos, excepto el estado fundamental, se encuentran degenerados. La energía de los estados electrónicos disminuye con el incremento del radio, entonces el número de estados "dentro" del sistema incrementa. En la Figura 3.6(*a*) se puede observar una diferencia, aproximadamente, de 80meV entre los estados (1,+1) y (1,-1) cuando F = 100.0kV/cm, mientras que entre los estados (1,+2) y (1,-2) la diferencia es de 10meV aproximadamente. Esta diferencia está dada en el hecho de que para los estados (1,+1) y (1,-1) la degeneración se rompe, aproximadamente, para F = 10.0kV/cm mientras que para la ruptura de la degeneración de los estados (1,+2) y (1,-2) se necesita, más o menos, un campo eléctrico de intensidad F = 60.0kV/cm. En la Figura 3.6(*b*) se puede apreciar un comportamiento inusual del estado (1,-1) debido a que para F = 50.0kV/cm aproximadamente, el sistema se encuentra en régimen supercrítico. Los estados (1,+3) y (1,-3) son ligeramente afectados por el campo eléctrico porque en la medida que incrementa el valor absoluto del número cuántico *m*, para que se puede apreciar dicho efecto, se requiere una intensidad del campo eléctrico mayor.



Figura 3.6: Energía de la parte confinada de los estados electrónicos como función del campo eléctrico para el QWW: (*a*) $r_0 = 55$ Å y (*b*) $r_0 = 75$ Å. Las líneas continuas negras representan la energía de los estados pares ($m \ge 0$) y las líneas azules los estados impares (m < 0), mientras que las líneas discontinuas rojas corresponden al sistema en ausencia de campo eléctrico.

En la Figura 3.7 se puede observar el comportamiento de la densidad de probabilidad en la dirección radial para los estados electrónicos: (a) (1,0), (b) (2,0), (c) (1,+1), (d) (1,+2), (e) (1,-1), y (f) (1,-2), para un QWW de radio $r_0 = 75$ Å. Las líneas rojas corresponden al sistema en ausencia de campo eléctrico. Las líneas verdes cuando F = 40.0 kV/cm, y las líneas azules cuando F = 100.0 kV/cm. En las Figuras 3.7(a) y 3.7(b) se puede notar un comportamiento oscilatorio con el incremento del campo eléctrico debido a que estos estados se encuentran en el régimen supercrítico, observándose; además, un incremento de la densidad de probabilidad hacia la frontera al aumentar la intensidad del campo eléctrico. El paso al régimen supercrítico también se puede apreciar en la Figura 3.7(e) para F = 100.0 kV/cm (línea azul). Por otro lado, se pueden observar pocos cambios en la densidad de probabilidad para los estados (1,+1) y (1,+2) (Figuras 3.7(c) y 3.7(d)) cuando incrementa la intensidad del campo eléctrico, debido a que estos estados se encuentran en el



Figura 3.7: Parte radial de la función de onda de los estados electrónicos para un QWW de radio $r_0 = 75$ Å: (a) estado electrónico (1,0), (b) estado electrónico (2,0), (c) estado electrónico (1, +1), (d) estado electrónico (1, +2), (e) estado electrónico (1, -1), y (f) estado electrónico (1, -2). Las líneas negras corresponden a una intensidad de campo eléctrico $F = 0.0 \text{kV}^{\prime}$ cm, las líneas rojas a $F = 10.0 \text{kV}^{\prime}$ cm, las líneas verdes a $F = 40.0 \text{kV}^{\prime}$ cm y las líneas azules a F = 100.0kV[/] cm.

régimen subcrítico. Algo similar ocurre para el estado (1,-2) (Figura 3.7(*f*)) donde la densidad de probabilidad en la dirección radial permanece prácticamente invariable.

La influencia del campo eléctrico sobre los estados electrónicos en un QWW ha sido reportada por Stepanyan y sus colaboradores utilizando el método variacional [12], pero sólo son calculados el estado base o fundamental y el primer estado excitado del sistema sin obtener; además, el desdoblamiento de los niveles de energía debido a la presencia del campo eléctrico.

3.4 Conclusiones del capítulo

Al estudiar los estados electrónicos y las reglas de selección para un QWW crecido en una matriz de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ y un nanoalambre de GaAs, ambos con simetría cilíndrica, en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo aplicado transversalmente al eje de alambre, se puede concluir lo siguiente:

- > Se ha obtenido una solución aproximada, la cual se ajusta presumiblemente bien cuando el campo eléctrico es muy débil o el sistema está fuertemente confinado, es decir cuando r_0 es pequeño.
- Al incrementar la intensidad del campo eléctrico, la densidad de probabilidad en dirección radial incrementa hacia la frontera y muestra un comportamiento oscilatorio para el estado base y los estados en la región supercrítica.
- La existencia de un régimen supercrítico "pudiera" estar relacionada a la modificación de la teoría de Mott-Kaveh para la conductividad en alambres cuánticos, cuando la intensidad del campo eléctrico supera cierto valor crítico [43].
- Esta solución permite determinar que el campo eléctrico rompe la degeneración de los estados electrónicos, los cuales se dividen en estados pares e impares.
- La presencia del campo eléctrico en alambres cuánticos semiconductores elimina las reglas de selección de las transiciones ópticas inter-bandas e intra-banda.

Capítulo 4: Dispersión Raman electrónica en un QWW en presencia de un campo eléctrico homogéneo

En este capítulo se presenta el cálculo de la sección eficaz diferencial de dispersión para un proceso de dispersión Raman electrónica en un QWW de simetría cilíndrica sometido a un campo eléctrico externo homogéneo, aplicado transversalmente al eje del alambre. En el modelo utilizado se asumen bandas parabólicas que se desdoblan en un sistema de subbandas debido al confinamiento y al campo eléctrico. La banda de valencia se encuentra totalmente llena y un electrón ocupa la banda de conducción, el cual realiza transiciones intersubbandas e intra-subbanda en la banda de conducción, considerándose que el proceso ocurre a T = 0K.

4.1 Sección eficaz de dispersión

Para calcular la sección eficaz diferencial de dispersión se utiliza la ecuación (2.74)y se considera un mecanismo de dispersión que tiene lugar de dos formas distintas: la primera, es que el electrón en la banda de conducción absorbe un fotón de radiación incidente produciéndose una transición, para luego emitir un fotón de radiación secundaria (Figura 4.1(a)); en la segunda, el electrón en la banda de conducción primero emite un fotón de radiación secundaria, y luego absorbe un fotón de radiación incidente (Figura 4.1(b)).



Figura 4.1: Diagrama del mecanismo de dispersión: (*a*) primer caso, y (*b*) segundo caso.

En este caso, la amplitud de probabilidad M_{fi} se calcula de la siguiente forma [71]:

$$M_{fi} = \sum_{a} \frac{\langle f | \hat{H}_{s} | a \rangle \langle a | \hat{H}_{i} | i \rangle}{\left(\mathcal{E}_{i} - \mathcal{E}_{a} + i\Gamma_{a} \right)} + \sum_{b} \frac{\langle f | \hat{H}_{i} | b \rangle \langle b | \hat{H}_{s} | i \rangle}{\left(\mathcal{E}_{i} - \mathcal{E}_{b} + i\Gamma_{b} \right)}$$
(4.1)

donde $\hat{H}_{s(l)}$ es el hamiltoniano de interacción electrón-fotón en la aproximación dipolar (2.70), el subíndice *s* (*l*) indica la radiación secundaria (incidente), $|i\rangle \neq |f\rangle$ son los estados inicial y final. Además, $|a\rangle \neq |b\rangle$ son los estados intermedios con energías $\mathcal{E}_{a} \neq \mathcal{E}_{b}$ respectivamente, y $\Gamma_{a(b)}$ es el tiempo de vida del estado intermedio *a* (*b*).

Los elementos matriciales de la ecuación (4.1) están dados por la expresión (3.27), ya que la dispersión Raman no puede ocurrir en la dirección z [16]. Entonces, teniendo en cuenta que las energías de los estados inicial y final del sistema respectivamente, son:

$$\mathcal{E}_{i} = \hbar \omega_{l} + \mathcal{E}_{n^{*},m^{*}}(k_{z}) \quad \mathbf{y} \quad \mathcal{E}_{f} = \hbar \omega_{s} + \mathcal{E}_{n,m}(k_{z})$$
(4.2)

mientras que las energías de los estados intermedios tienen la forma

$$\mathcal{E}_{a} = \mathcal{E}_{n',m'}(k_{z}) \quad \mathbf{y} \quad \mathcal{E}_{b} = \hbar \omega_{l} + \hbar \omega_{s} + \mathcal{E}_{n',m'}(k_{z})$$
(4.3)

Sustituyendo la ecuación (3.27) en (4.1) se obtiene

$$M_{fi} = \left(\mathbf{e}_{s} \cdot \mathbf{e}_{\pm}\right) \left(\mathbf{e}_{l} \cdot \mathbf{e}_{\pm}\right) \frac{2\mu_{0}r_{0}}{\hbar^{2}} A_{0}M_{\pm\pm}$$
(4.4)

donde

$$A_{0} = -\left(\frac{e}{\mu_{0}r_{0}}\right)^{2} \frac{2\pi\hbar^{3}}{V} \left(\omega_{s}\omega_{l}\right)^{-1/2}, \quad y$$
(4.5)

$$M_{\pm\pm} = \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{0}r_{0}^{2}} \sum_{m',n'} T_{n,m;n',m'}^{\pm} T_{n',m';n'',m''}^{\pm} \times \left[\frac{1}{\hbar\omega_{s} + \mathcal{E}_{r}(n,m) - \mathcal{E}_{r}(n',m') + i\Gamma_{a}} - \frac{1}{\hbar\omega_{l} - \mathcal{E}_{r}(n,m) + \mathcal{E}_{r}(n',m') - i\Gamma_{b}} \right]$$
(4.6)

Sustituyendo la ecuación (4.4) en (2.75) para posteriormente, sustituir en la ecuación (2.74), y teniendo en cuenta que la función delta de Dirac puede ser sustituida por la Lorentziana

$$\delta\left(\mathcal{E}_{f}-\mathcal{E}_{i}\right) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{f}}{\left(\mathcal{E}_{f}-\mathcal{E}_{i}\right)^{2}+\Gamma_{f}^{2}}$$
(4.7)

se obtiene para la sección eficaz diferencial de dispersión la expresión

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right) = \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right)_{++} + \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right)_{+-} + \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right)_{-+} + \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right)_{--} + \left(\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega}\right)_{--}$$
(4.8)

donde

$$\left(\frac{d^{2}\sigma}{d\omega_{s}d\Omega}\right)_{\pm\pm} = \sigma_{0}\Gamma_{f}^{2} \frac{\omega_{s}}{\omega_{l}} \left(\sigma_{s}^{\pm} \cdot \sigma_{l}^{\pm}\right) \times \sum_{n,m,n'',m''} \frac{\left|M_{\pm\pm}\right|^{2}}{\left[\hbar\omega_{l} - \hbar\omega_{s} + \mathcal{E}_{r}\left(n'',m''\right) - \mathcal{E}_{r}\left(n,m\right)\right]^{2} + \Gamma_{f}^{2}},$$
(4.9)

es el aporte de cada polarización de los fotones incidente y dispersado a la sección eficaz diferencial de dispersión, siendo

$$\boldsymbol{\sigma}_{0} = \frac{\eta(\boldsymbol{\omega}_{s})}{\eta(\boldsymbol{\omega}_{l})} \left(\frac{e}{c}\right)^{4} \frac{4\hbar}{\pi \mu_{0}^{2} \Gamma_{f}}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{r}^{\pm} = \left|\left(\mathbf{e}_{r} \cdot \mathbf{e}_{\pm}\right)\right|^{2}$$
(4.10)

y $\Gamma_{\scriptscriptstyle f}\,$ el tiempo de vida del estado final.
4.2 Discusión de resultados

Teóricamente, los espectros de emisión Raman se obtienen a partir de la sección eficaz diferencial de dispersión, dada por la ecuación (4.9), fijando el valor de la energía de la radiación incidente ($\hbar \omega_l$) [21,58]. Para obtener estos espectros se utilizó un alambre cuántico de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ con los siguientes parámetros físicos: $\mu_1 = 0.0665\mu_0$, $\mu_2 = 0.096\mu_0$, $V_0 = 0.30$ eV y $\Gamma_a = \Gamma_b = 1$ meV y $\Gamma_f = 3$ meV [83]. Las figuras se han obtenido considerando solamente estados que se encuentran en la región subcrítica, descritos por funciones de Bessel de orden real con la excepción de los estados electrónicos que tienen m = 0, los que están dados por funciones de Bessel de orden imaginario. Estas últimas, tienen un comportamiento "oscilatorio" cuando $r \rightarrow 0$ (ver Figura 3.7) lo que complica la solución de las integrales en esa región, de cualquier forma, la función converge pues sólo tiene una indeterminación evitable en el origen.

En la Figura 4.2 se pueden observar los espectros de emisión considerando diferentes polarizaciones tanto de la radiación incidente como secundaria. La configuración elegida corresponde a un QWW de radio $r_0 = 55$ Å en presencia de un campo eléctrico de intensidad F = 40.0 kV/cm. El fotón incidente tiene energía $\hbar \omega_l = 0.25$ eV para la línea roja y $\hbar \omega_l = 0.28$ eV para la línea negra, entonces: (a) (σ_s^+, σ_l^+) , (b) (σ_s^+, σ_l^-) , (c) (σ_s^-, σ_l^+) , (d) (σ_s^-, σ_l^-) .

En estas figuras se puede observar que en el espectro de emisión para un proceso de dispersión Raman electrónica existen dos tipos de singularidades. En primer lugar, se tienen los picos no resonantes que están relacionados con la ley de conservación de la energía (ver ecuación (2.75)). Entonces, los picos no resonantes dependen de la radiación incidente y su "posición" puede determinarse directamente de la ecuación (4.9), de manera que se observarán cuando:

$$\hbar\omega(n_a, m_a, n_b, m_b) = \hbar\omega_l + \mathcal{E}_r(n_a, m_a) - \mathcal{E}_r(n_b, m_b)$$
(4.11)

En segundo lugar, tenemos los picos resonantes cuya "posición" no depende de la radiación incidente. Estos ocurren cuando la energía de la radiación secundaria coincide exactamente con el gap entre los estados electrónicos involucrados en la transición, y su "posición" puede determinarse directamente de la ecuación (4.6), de manera que se observarán cuando:

$$\hbar\omega_s(n_a, m_a, n_b, m_b) = \mathcal{E}_r(n_a, m_a) - \mathcal{E}_r(n_b, m_b)$$
(4.12)

Si comparamos la Figura 4.2 con las Figuras 2 y 3 de la referencia [16], se observa que el campo eléctrico rompe las reglas de selección, a diferencia del campo magnético donde algunas singularidades no se observan para todas las polarizaciones; por ejemplo, en nuestro caso los picos correspondientes a $\hbar \omega_s (1,\pm 2,1,+1)$ y $\hbar \omega_s (1,\pm 2,1,-1)$ (picos resonantes) se observan para todas las polarizaciones debido a que no existen reglas de selección. Además, las posiciones de las singularidades son independientes de la polarización de la radiación incidente o secundaria.

Si se comparan los cuatro espectros que conforman la Figura 4.2, se puede notar que el cambio en la polarización modifica la intensidad de los picos resonantes y no resonantes. Por otro lado, cuando se comparan los resultados obtenidos para $\hbar \omega_l = 0.25 \text{ eV}$ y $\hbar \omega_l = 0.28 \text{ eV}$, se puede apreciar que la posición de los picos resonantes no cambia (ver ecuación (4.12)) mientras que la posición de los picos no resonantes es afectada (ver ecuación (4.11)). También se puede observar que el incremento de la energía de la radiación incidente disminuye la intensidad de los picos debido a que aumenta la diferencia entre la frecuencia de la radiación incidente y la frecuencia de resonancia (detuning). Además, podemos observar que las posiciones de los picos se mantienen fijas a diferencia de lo que ocurre en presencia del campo magnético [16], ya que en nuestro caso no existen reglas de selección. Por otro lado, se puede observar la presencia del pico representado por la notación $\hbar \omega_s (1,+1,1,-1)$, pico que no existiría en ausencia de campo eléctrico.



Figura 4.2: Espectro de emisión para un alambre cuántico de radio $r_0 = 55$ Å considerando la presencia de un campo eléctrico de intensidad F = 40.0 kV/cm. Las líneas rojas corresponden a una energía de la radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.25$ eV y las líneas negras a una energía de la radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.28$ eV. En diferentes condiciones de polarización: (a) (σ_s^+, σ_l^+) , (b) (σ_s^+, σ_l^-) , (c) (σ_s^-, σ_l^+) , (d) (σ_s^-, σ_l^-) .

La Figura 4.3 corresponde a un QWW de radio $r_0 = 65$ Å. Las Figuras 4.3(*a*)-4.3(*e*) corresponden a la polarización (σ_s^-, σ_l^+) donde se ha tomado la energía de la radiación incidente $\hbar \omega_l = 0.28$ eV. Entonces, tenemos los espectros de emisión para diferentes intensidades del campo eléctrico: (*a*) F = 1.0 kV/cm, (*b*) F = 10.0 kV/cm,

(c) F = 20.0 kV/cm, (d) F = 30.0 kV/cm, (e) F = 40.0 kV/cm, y (f) energía de algunos picos resonantes en función del campo eléctrico. En la Figura 4.2(c) se ha utilizado un alambre de radio menor ($r_0 = 55 \text{ Å}$) que en la Figura 4.3(e) ($r_0 = 65 \text{ Å}$), el cual tiene la misma polarización (σ_s^-, σ_l^+) y la misma intensidad del campo eléctrico F = 40.0 kV/cm. Cuando comparamos estas figuras se observa que el número de singularidades en el espectro de emisión incrementa con el incremento del radio del sistema debido a que el número de estados dentro del QWW también aumenta.

En la Figura 4.3 se pueden apreciar dos tipos de picos resonantes. Primero, los picos resonantes relacionados a transiciones intra-subbandas, donde $n_a = n_b$, por ejemplo: $\hbar \omega_s (1,\pm 1,1,0)$, $\hbar \omega_s (1,\pm 2,1,\pm 1)$ y $\hbar \omega_s (1,\pm 2,1,0)$. Segundo, picos resonantes relacionados a transiciones inter-subbandas, donde $n_a \neq n_b$, por ejemplo: $\hbar \omega_s (2,0,1,\pm 2)$, $\hbar \omega_s (2,0,1,\pm 1)$, y $\hbar \omega_s (2,0,1,0)$. Se debe notar que el incremento del campo eléctrico a 10.0kV/cm causa un incremento de un orden en la intensidad de los picos resonantes relacionados a transiciones inter-subbandas; mientras este incremento es mucho menor para los picos resonantes relacionados a transiciones intra-subbandas.

Las Figuras 4.3(*a*)-4.3(*e*) fueron obtenidas para diferentes valores de la intensidad del campo eléctrico. En estas figuras la posición del pico resonante o no resonante depende de dos estados electrónicos, y se pueden observar dos tipos de singularidades: una del tipo $\hbar\omega_s(2,0,1,\pm1)$ que se desdobla en $\hbar\omega_s(2,0,1,-1)$ y $\hbar\omega_s(2,0,1,\pm1)$, y otras como $\hbar\omega_s(1,\pm2,1,0)$ y $\hbar\omega_s(2,0,1,\pm2)$ que se mantienen juntas. En la Figura 4.3(*f*), se muestra el comportamiento de la posición de los picos respecto a la intensidad del campo eléctrico. Las líneas azules se utilizan para distinguir las singularidades donde uno de los estados involucrados en la transición es impar. En esta figura se puede notar que todos los picos se desdoblan; pero en diferente magnitud, mostrando que el efecto Stark no es igual para todos los estados. Entonces, se verifica la ruptura de la degeneración de los estados electrónicos.



Figura 4.3: Espectros de emisión para la polarización (σ_s^-, σ_l^+) y posición de los picos resonantes para diferentes intensidades del campo eléctrico en un QWW de radio $r_0 = 65$ Å y radiación incidente $\hbar\omega_l = 0.28$ eV. Entonces: (a) F = 1.0 kV/cm, (b) F = 10.0 kV/cm, (c) F = 20.0 kV/cm, (d) F = 30.0 kV/cm, (e) F = 40.0 kV/cm, (f) posición de los picos resonantes con respecto a la intensidad del campo eléctrico donde las líneas azules corresponden a transiciones que involucran un estado impar.

Este resultado muestra que la división de los estados electrónicos y la eliminación de las reglas de selección debido a la presencia del campo eléctrico se reflejan en los espectros de emisión. También, se obtienen las posiciones de las singularidades resonantes y no resonantes para diferentes polarizaciones tanto de la radiación incidente como secundaria. Se muestran cambios en las posiciones de todas las singularidades resonantes debido al aumento en la intensidad del campo eléctrico, aunque el desplazamiento inducido por el campo es pequeño. Además, el cambio en la intensidad del campo también afecta la intensidad de los picos. Estos efectos descritos se deben al hecho de que el campo eléctrico es transversal al eje del QWW. En el caso de que el campo eléctrico tenga simetría cilíndrica (similar al de una línea cargada), las reglas de selección de las transiciones ópticas no cambian con respecto a un sistema en ausencia de campo eléctrico [94]. Al comparar con los resultados de la referencia [16], se observan cambios en el número de singularidades en los espectros de emisión. En presencia de un campo eléctrico externo, el número de singularidades observadas en el espectro de emisión es mayor que el número de singularidades observadas tanto en presencia de un campo magnético como en ausencia de campos externos, debido a las reglas de selección.

Para el diseño de algunas aplicaciones, por ejemplo, el láser Raman inter-subbanda sintonizable [95], el sistema objeto de estudio permitiría modular la eficiencia y la posición de los picos con el campo eléctrico. Sin embargo, para un mejor rendimiento se requiere una estructura en la que se pueda controlar la energía de los estados electrónicos, como en el alambre cuántico núcleo/cascarón y el alambre cuántico escalonado [96]. Al observar los resultados descritos en las referencias [42], [59] y [96], podemos concluir que en el diseño de fuentes de luz, los sistemas cilíndricos son más eficientes que los sistemas basados en pozos cuánticos. Los sistemas cilíndricos son más difíciles de optimizar debido a las reglas de selección, pero la presencia del campo eléctrico provoca la eliminación de estas lo que podría simplificar el proceso.

4.3 Conclusiones del capítulo

El estudio de la dispersión Raman electrónica en un alambre cuántico semiconductor de $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo aplicado transversalmente al eje de alambre, permite concluir lo siguiente:

- El campo eléctrico, si es homogéneo y transversal al eje del alambre, es un buen parámetro externo para controlar el proceso de dispersión de la luz y los efectos resonantes.
- Se demuestra que el campo eléctrico provoca cambios en las posiciones de todas las singularidades resonantes, aunque el desplazamiento es pequeño. Además, afecta la intensidad de los picos.
- Se verifica que el campo eléctrico, al romper las reglas de selección, cambia drásticamente el número de singularidades en el espectro de emisión.
- Al romperse las reglas de selección, los espectros de las distintas polarizaciones muestran pequeñas diferencias en cuanto a la intensidad de los picos.

Capítulo 5: Dispersión Raman resonante unifonónica en un FSW en presencia de un campo eléctrico homogéneo

En este capítulo se presenta el cálculo de la sección eficaz diferencial de dispersión para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica en un alambre cuántico que no presenta cobertura lateral, esto es, un FSW (del inglés free-standing wire), el cual presenta simetría cilíndrica y está sometido a un campo eléctrico externo homogéneo aplicado transversalmente al eje del alambre. Se utiliza un modelo de bandas parabólicas, las cuales se desdoblan en un sistema de sub-bandas debido al confinamiento y al campo eléctrico. La banda de valencia está completamente llena y la banda de conducción totalmente vacía, considerándose solamente procesos de tipo Stokes (T = 0 K).

5.1 Sección eficaz de dispersión

Para calcular la sección eficaz de dispersión Raman correspondiente a un proceso resonante unifonónico consideramos un mecanismo de dispersión que presenta tres etapas (Figura 5.1): en la primera, un electrón en la banda de valencia absorbe un fotón de radiación incidente pasando a la banda de conducción, creándose un par electrón-hueco; luego, se produce un proceso de relajación que conduce al cambio del estado vibracional del sistema, es decir, se produce una transición intermedia intra-banda con la emisión de energía equivalente a la energía de un fonón, siendo el paso final una recombinación radiativa.



Figura 5.1: Diagrama del mecanismo de dispersión.

En este caso, la amplitud de probabilidad M_{fi} se calcula de la siguiente forma [8]:

$$M_{fi} = \sum_{a,b} \frac{\langle f | \hat{H}_s | b \rangle \langle b | \hat{H}_{ph} | a \rangle \langle \hat{a} | \hat{H}_l | i \rangle}{(\hbar \omega_l - \mathcal{E}_a + i\Gamma_a) (\hbar \omega_s - \mathcal{E}_b + i\Gamma_b)}$$
(5.1)

donde \hat{H}_{ph} es el hamiltoniano de interacción electrón-fonón (2.48). Los elementos matriciales debido a la interacción electrón-fotón de la ecuación (5.1) están dados por la expresión (3.32):

$$\left\langle a \left| \hat{H}_{l} \right| i \right\rangle = \frac{e}{\mu_{0}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{l}}} \left[\mathbf{e}_{l} \cdot \mathbf{p}_{cv} \left(0 \right) \right] T_{n_{e}, m_{e}; n_{h}, m_{h}} \delta_{k_{ze}, k_{zh}}, \qquad (5.2)$$

para la creación del par electrón-hueco, mientras que para la recombinación del par se tiene

$$\left\langle f \left| \hat{H}_{s} \right| b \right\rangle = \frac{e}{\mu_{j}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{s}}} \left[\mathbf{e}_{s} \cdot \mathbf{p}_{vc} \left(0 \right) \right] T_{n'_{e}, m'_{e}; n'_{h}, m'_{h}} \delta_{k'_{ze}, k'_{zh}}$$
(5.3)

donde $\mu_j = \mu_{e(h)}$ es la masa efectiva del electrón (hueco) y $T_{n_e,m_e;n_h,m_h}$ está dado por la ecuación (3.33). El elemento matricial correspondiente a la interacción electrón-fonón está dado por

$$\left\langle b\left|\hat{H}_{ph}\right|a\right\rangle = C_{n,m}\left[\delta_{a_{h}b_{h}}\left\langle c;n'_{e},m'_{e},k'_{e}\right|F_{n,m}\left(r\right)e^{-im\theta}\left|n_{e},m_{e},k_{e};c\right\rangle\right.\left.-\delta_{a_{e}b_{e}}\left\langle v;n'_{h},m'_{h},k'_{h}\right|F_{n,m}\left(r\right)e^{-im\theta}\left|n_{h},m_{h},k_{h};v\right\rangle\right]$$
(5.4)

donde $F_{n,m}(r)$ está dado por la expresión (2.50),

$$C_{n,m} = r_o C_F \sqrt{\frac{\pi \omega_{LO} \rho}{\omega_{n,m}}}, \quad C_F = -er_0 \sqrt{\frac{2\pi \hbar \omega_{LO}}{V} \left(\varepsilon_{a\infty}^{-1} - \varepsilon_{b\infty}^{-1}\right)}$$
(5.5)

c y v representan las bandas de conducción y valencia respectivamente.

Como se está considerando T = 0 K, se obtiene que el elemento matricial tiene la forma

$$\left\langle b \left| \hat{H}_{ph} \right| a \right\rangle = c_F \sqrt{\pi \frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}}} \left[\delta_{a_h b_h} I^{(nm)}_{n'_e, m'_e; n_e, m_e} \Lambda^{(m)}_{m'_e, m_e} \delta_{k'_e k_e} - \delta_{a_e b_e} I^{(nm)}_{n'_h, m'_h; n_h, m_h} \Lambda^{(m)}_{m'_h, m_h} \delta_{k'_h k_h} \right]$$
(5.6)

donde

$$I_{n'_{j},m'_{j};n_{j},m_{j}}^{(n,m)} = r_{0}\sqrt{\rho}A_{n'_{j}}^{*}A_{n_{j}}\int_{0}^{r_{0}} \mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda'_{j}}}(k'_{j}r)]F_{n,m}(r)\mathcal{R}e[J_{\sqrt{\lambda_{j}}}(k_{j}r)]rdr$$
(5.7)

$$\mathbf{y} \quad \Lambda_{m'_j,m_j}^{(m)} = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{2\pi} \mathbf{f} \mathbf{e}_{m'_j} \left(q_j, \theta/2 \right) \mathbf{f} \mathbf{e}_{m_j} \left(q_j, \theta/2 \right) e^{-im\theta} d\theta$$
(5.8)

Sustituyendo (5.2), (5.3) y (5.6) en (5.1) se obtiene

$$M_{fi} = M_1 - M_2 \tag{5.9}$$

donde

$$M_{1} = \sum_{\substack{n_{e},m_{e},k_{ze} \ n_{e},m_{e}',k_{ze} \ n_{e}',m_{e}',k_{ze}'}} \sum_{n_{e},m_{e}',k_{ze}'} \frac{\Theta}{\mu_{e}\sqrt{\omega_{l}\omega_{s}}} \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}}\right)^{1/2} T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} I_{n_{e}',m_{e}';n_{e},m_{e}}^{(n,m)} \Lambda_{m_{e}',m_{e}'}^{(m)} T_{n_{e}',m_{e}';n_{h},m_{h}} \left(\frac{1}{\left(\hbar\omega_{l} - \mathcal{E}_{a} + i\Gamma_{a}\right)\left(\hbar\omega_{s} - \mathcal{E}_{b} + i\Gamma_{b}\right)}\right]} \delta_{k_{ze},-k_{zh}} \delta_{k_{ze}',k_{ze}} \delta_{k_{ze}',k_{zh}}$$
(5.10)

siendo

$$\Theta = \frac{2e^2 \pi^{3/2} \hbar C_F}{\mu_0 V} \Big[\hat{\mathbf{e}}_l \cdot \hat{\mathbf{p}}_{cv} \left(0 \right) \Big] \Big[\hat{\mathbf{e}}_s \cdot \hat{\mathbf{p}}_{vc} \left(0 \right) \Big]$$
(5.11)

Teniendo en cuenta el mecanismo de dispersión propuesto, las energías de los estados inicial y final están dadas por

$$\mathcal{E}_i = \hbar \omega_l \quad \text{y} \quad \mathcal{E}_f = \hbar \omega_s + \hbar \omega_{n,m}$$
 (5.12)

mientras que las energías de los estados intermedios están dadas por

$$\mathcal{E}_{a} = \underbrace{\mathcal{E}_{r}\left(n_{e}, m_{e}\right) + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{e}}k_{ez}^{2}}_{\text{Energía del electrón}} + \underbrace{\mathcal{E}_{r}\left(n_{h}, m_{h}\right) + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{h}}k_{hz}^{2}}_{\text{Energía del hueco}} + \mathcal{E}_{g}$$
(5.13)

$$\mathcal{E}_{b} = \underbrace{\mathcal{E}_{r}\left(n_{e}^{\prime}, m_{e}^{\prime}\right) + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{e}}k_{ez}^{\prime 2}}_{\text{Energía del electrón}} + \underbrace{\mathcal{E}_{r}\left(n_{h}, m_{h}\right) + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{h}}k_{hz}^{2}}_{\text{Energía del hueco}} + \mathcal{E}_{g}$$
(5.14)

donde \mathcal{E}_r es la energía de la parte confinada de los estados electrónicos dados por la ecuación (3.17), y \mathcal{E}_g es la energía del gap entre la banda de valencia y de conducción. Haciendo

$$\mathcal{E}_{n_e,m_e,n_h,m_h} = \mathcal{E}_r\left(n_e,m_e\right) + \mathcal{E}_r\left(n_h,m_h\right) + \mathcal{E}_g \tag{5.15}$$

tenemos

$$\mathcal{E}_{a} = \mathcal{E}_{n_{e}, m_{e}, n_{h}, m_{h}} + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{r}} k_{ez}^{2} \quad y \quad \mathcal{E}_{b} = \mathcal{E}_{n_{e}', m_{e}', n_{h}, m_{h}} + \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{r}} k_{ez}^{2}$$
(5.16)

siendo $\mu_r = \mu_e \mu_h / (\mu_e + \mu_h)$ la masa reducida. Teniendo en cuenta las expresiones (5.2) y (5.3), se puede ver que $k_{ez} = k_{hz}$. Sustituyendo la ecuación (5.16) en (5.10), y transformando

$$\sum_{k_z} \dots \implies \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty \dots dk_z$$
 (5.17)

se obtiene, aplicando teoría de residuos, que

$$M_{1} = \frac{iL\Theta}{\left(8\mu_{r}\hbar^{2}\right)^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{\omega_{l}\omega_{s}}} \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}}\right)^{1/2} \frac{\mu_{r}}{\mu_{e}} \sum_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} - \sum_{n_{e},m_{e};n_{e},m_{e},m_{e},m_{e},m_{h},m_{h}} \sum_{n_{e},m_{e};n_{e},m_{e},m_{e},m_{e},m_{h},m_{h}} \frac{Z_{1}(n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}) - Z_{2}(n_{e}',m_{e}',n_{h},m_{h})}{\hbar\omega_{n,m} - \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}} + \mathcal{E}_{n_{e}',m_{e}',n_{h},m_{h}} + i(\Gamma_{a} - \Gamma_{b})}$$

$$(5.18)$$

donde

$$Z_{1}(n_{e}, m_{e}, n_{h}, m_{h}) = \frac{1}{\left[\hbar\omega_{l} - \mathcal{E}_{n_{e}, m_{e}, n_{h}, m_{h}} + i\Gamma_{a}\right]^{1/2}}$$
(5.19)

y
$$Z_{2}(n'_{e}, m'_{e}, n_{h}, m_{h}) = \frac{1}{\left[\hbar\omega_{s} - \mathcal{E}_{n'_{e}, m'_{h}, m_{h}} + i\Gamma_{b}\right]^{1/2}}$$
 (5.20)

De manera análoga, se obtiene

$$M_{2} = \frac{iL\Theta}{\left(8\mu_{r}\hbar^{2}\right)^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{\omega_{l}\omega_{s}}} \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}}\right)^{1/2} \frac{\mu_{r}}{\mu_{h}} \sum_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} X_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} X_{n_{h}',m_{h}'}^{(n,m)} T_{n_{e},m_{e};n_{h}',m_{h}'} \frac{Z_{1}(n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}) - Z_{2}(n_{e},m_{e},n_{h}',m_{h}')}{\hbar\omega_{n,m} - \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}} + \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h}',m_{h}'} + i(\Gamma_{a} - \Gamma_{b})}$$
(5.21)

multiplicando y dividiendo por $\hbar \omega_{LO} \left(\hbar^2 / 2 \mu_r r_0^2 \right)^{1/2}$ tenemos:

$$\Phi_{1}(\omega_{l},\omega_{s}) = \beta_{1}\Upsilon \sum_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} \sum_{n'_{e},m'_{e}} \frac{T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}}I_{n'_{e},m'_{e};n_{e},m_{e}}^{(n,m)}T_{n'_{e},m'_{e};n_{h},m_{h}}}{\hbar\omega_{n,m} - \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}} + \mathcal{E}_{n'_{e},m'_{e},n_{h},m_{h}} + i(\Gamma_{a} - \Gamma_{b})}\Lambda_{m'_{e},m_{e}}^{(m)}} \times \left[Z_{1}(n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}) - Z_{2}(n'_{e},m'_{e},n_{h},m_{h})\right]$$
(5.22)

$$\Phi_{2}(\omega_{l},\omega_{s}) = \beta_{2}\Upsilon \sum_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} \sum_{n_{h}',m_{h}'} \frac{T_{n_{e},m_{e};n_{h},m_{h}} I_{n_{h}',m_{h}';n_{h},m_{h}}^{(n,m)} T_{n_{e},m_{e};n_{h}',m_{h}'}}{\hbar\omega_{n,m} - \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}} + \mathcal{E}_{n_{e},m_{e},n_{h}',m_{h}'} + i(\Gamma_{a} - \Gamma_{b})} \Lambda_{m_{h}',m_{h}}^{(m)}} \times \left[Z_{1}(n_{e},m_{e},n_{h},m_{h}) - Z_{2}(n_{e},m_{e},n_{h}',m_{h}'}) \right]$$
(5.23)

donde

$$\beta_1 = \frac{\mu_r}{\mu_e}, \quad \beta_2 = \frac{\mu_r}{\mu_h} \quad \text{y} \quad \Upsilon = \hbar \omega_{LO} \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_r r_0^2}\right)^{1/2} \tag{5.24}$$

Entonces

$$M_{j} = \frac{iL\Theta r_{0}}{2\hbar^{3}\sqrt{\omega_{l}\omega_{s}\omega_{LO}\omega_{n,m}}} \Phi_{j}(\omega_{l},\omega_{s}) \quad \text{para} \quad j = 1,2$$
(5.25)

Sustituyendo M_{j} en la ecuación (5.9) se obtiene M_{ji} la que se sustituye en la expresión (2.75), entonces

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\frac{L\Theta r_0}{2\hbar^3 \sqrt{\omega_l \omega_s \omega_{LO}}} \right]^2 \sum_i \frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}} \left| \Phi_1(\omega_l, \omega_s) - \Phi_2(\omega_l, \omega_s) \right|^2 \delta\left(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i\right)$$
(5.26)

Por otro lado, la función delta puede ser sustituida por la Lorentziana y teniendo en cuenta que los estados inicial y final del sistema están dados por la ecuación (5.12)

$$\delta\left(\mathcal{E}_{f}-\mathcal{E}_{i}\right) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{f}^{2}}{\left[\hbar\omega_{l}-\hbar\omega_{s}-\hbar\omega_{n,m}\right]^{2}+\Gamma_{f}^{2}}$$
(5.27)

Sustituyendo en la ecuación (2.74), las expresiones (5.26) y (5.27), se obtiene finalmente

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega_s d\Omega} = \sigma_0 \frac{\omega_s}{\omega_l} \sum_{n,m} \frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}} \left| \Phi_1(\omega_l, \omega_s) - \Phi_2(\omega_l, \omega_s) \right|^2 \frac{\Gamma_f^2}{\left[\hbar \omega_l - \hbar \omega_s - \hbar \omega_{n,m} \right]^2 + \Gamma_f^2} \quad (5.28)$$

siendo

$$\sigma_{0} = \frac{Ve^{6}\eta(\omega_{s})}{2\pi c^{4}\mu_{0}^{2}\hbar^{4}\eta(\omega_{l})\omega_{LO}\Gamma_{f}} \left(\varepsilon_{a\infty}^{-1} - \varepsilon_{b\infty}^{-1}\right) \left[\left[\mathbf{e}_{l}\cdot\mathbf{p}_{cv}\left(0\right)\right]\left[\mathbf{e}_{s}\cdot\mathbf{p}_{vc}\left(0\right)\right]\right]^{2}$$
(5.29)

Dividiendo por el volumen e integrando sobre todos los valores posibles de la frecuencia ω_s , se obtiene la expresión para la eficiencia cuántica Raman

$$\frac{1}{V}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_0 \frac{\pi\Gamma_f}{2\hbar\omega_l V} \sum_{nm} \frac{\omega_{LO}}{\omega_{n,m}} (\omega_l - \omega_{n,m}) \left| \Phi_1(\omega_l, \omega_s) - \Phi_2(\omega_l, \omega_s) \right|^2$$
(5.30)

5.2 Discusión de resultados

Para estudiar el comportamiento de la eficiencia Raman se empleó un FSW de *GaAs*. Los parámetros utilizados para calcular los estados del par electrón-hueco son: $E_g = 1.43 \text{ eV}$, $\mu_e = 0.0665 \mu_0$ y $\mu_h = 0.45 \mu_0$; mientras que, para determinar los modos de oscilación de los fonones se utilizó: $\hbar \omega_{LO} = 36.25 \text{ meV}$, $\hbar \omega_{TO} = 33.29 \text{ meV}$, $\beta_{LO} = 3.2 \times 10^5 \text{ m/s}$, $\beta_{TO} = 3.3 \times 10^5 \text{ m/s}$, $\varepsilon_0 = 13.18 \text{ y} \varepsilon_{\infty} = 10.89$. Para facilitar los cálculos hemos considerado que $\Gamma_a = \Gamma_b = \Gamma_f = 1 \text{ meV}$. Los resultados que se muestran se han obtenido considerando que los estados electrónicos se encuentran en la región subcrítica, de manera que nos ajustamos a las condiciones de aplicabilidad del modelo. Además, para simplificar los cálculos se consideran solamente las contribuciones de los modos de oscilación n=1, n=2y n=3.

En la Figura 5.2 se muestra el comportamiento de la eficiencia Raman para un FSW de radio $r_0 = 15$ Å teniendo en cuenta diferentes intensidades del campo eléctrico. La doble resonancia que se observa corresponde a la parte de la energía de los estados intermedios debido al confinamiento (ver las ecuaciones (5.22), (5.23) y (5.30)), de manera que el primer pico (el cual llamamos resonancia de entrada) se relaciona con el estado intermedio $|a\rangle$, y el segundo (el cual llamamos resonancia de salida) con el estado intermedio $|b\rangle$. La doble

resonancia se representa por $\mathcal{E}_{n_e,m_e,n_h,m_h}$, y la separación entre estos dos picos corresponde a la energía de un fonón.



Figura 5.2: Eficiencia Raman para un FSW de radio $r_0 = 15$ Å. Las líneas rojas son secciones multiplicadas por el factor indicado en la figura.

En las Figuras 5.2(*a*), 5.2(*b*) y 5.2(*c*) la existencia de picos correspondientes a las transiciones $\mathcal{E}_{1,0,1,-2}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+2}$ muestran que la presencia del campo eléctrico rompe las reglas de selección del sistema, ya que en ausencia de campo eléctrico y en presencia de campo magnético se exige que $m_e = m_h$ como se puede observar en las referencias [8] y [15]. Si se comparan las Figuras 5.2(*a*), 5.2(*b*) y 5.2(*c*), donde se ha considerado sólo la emisión de un fonón con m = 0 (longitudinal puro, ver las referencias [27] y [81]) se puede ver que tanto la intensidad como la posición de los picos no cambian significativamente con el incremento de la intensidad del campo eléctrico. Esto se debe a que el efecto del campo eléctrico es menor que el efecto del confinamiento.

En las Figuras 5.2(*d*), 5.2(*e*) y 5.2(*f*), se ha considerado sólo la emisión de un fonón con m=1 (el cual es una mezcla de longitudinal y transversal, ver las referencias [27] y [81]). La emisión de un fonón con m=1 es posible en un sistema cilíndrico como el que estamos estudiando; sin embargo, en las referencias [8] y [15] se demuestra que, si se considera la aproximación dipolar en la interacción electrón-fotón la emisión de fonones m=1 no está permitida en un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica. Es la presencia de un campo eléctrico externo homogéneo lo que provoca, al romper la simetría del sistema, la aparición de la contribución $m \neq 0$. Por otro lado, se debe señalar que, en el caso de un punto cuántico esférico, es posible obtener contribuciones para $m \neq 0$ si se consideran aproximaciones distintas a la aproximación dipolar [97].

Si se comparan las Figuras 5.2(*d*)-5.2(*f*), correspondientes a m=1, con las Figuras 5.2(*a*)-5.2(*c*), para m=0, se puede apreciar una menor eficiencia Raman, en 9 órdenes para F = 1kV/cm, 6 órdenes para F = 40kV/cm y 4 órdenes para F = 240kV/cm. De manera que, si bien es cierto que la presencia del campo eléctrico permite la emisión de fonones con modos de oscilación m=1, o mayor, su contribución al proceso es menor con respecto a la emisión de un fonón con m=0. Cuando m=1, el incremento de la intensidad del campo eléctrico favorece la emisión de este fonón en las transiciones vinculadas a los pares electrónhueco $\mathcal{E}_{1,0,1,0}$, $\mathcal{E}_{1,0,1,-2}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+2}$ pero de diferentes maneras, ya que el efecto del campo eléctrico es diferente para cada estado. Para F = 1kV/cm y F = 240kV/cm el sistema es más

eficiente cuando se producen las transiciones vinculadas a los pares electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,-2}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+2}$; mientras que, para F = 40 kV/cm la mayor eficiencia se obtiene para las transiciones vinculadas al par electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,0}$, no siendo así para transiciones vinculadas a los pares electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,-1}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1}$ cuyo pico aumenta muy poco respecto a la intensidad del campo eléctrico.

La Figura 5.3 muestra el comportamiento de la eficiencia Raman para un FSW de radio mayor, $r_0 = 20$ Å, en función de la energía del fotón incidente, considerando los mismos parámetros que en la Figura 5.2. Si se compara con esta figura se puede apreciar un corrimiento de los picos, como se observa en las transiciones vinculadas a los pares electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,0}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,\pm 2}$, hacia las regiones de menor energía; también, se observa la aparición de picos relacionados con los pares electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,\pm 3}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,\pm 4}$. Lo anterior se debe a la disminución de la distancia entre niveles de energía al incrementar el radio del FSW (ver Figura 3.2). Además, se puede apreciar que existe un ligero aumento de la eficiencia Raman con el aumento del radio del sistema. Esto es predecible y se debe, otra vez, a la disminución de la distancia entre niveles de energía al incrementar el radio del sistema, lo que afecta el término $1/[\hbar \omega_{n,m} - \varepsilon_{n_e,m_e,n_h,m_h} + \varepsilon_{n'_e,m'_e,n_h,m_h} + i(\Gamma_a - \Gamma_b)]$ en la ecuación (5.22) y la expresión equivalente en la ecuación (5.23).

Se puede apreciar que la posición de los picos en la Figura 5.3, al igual que en la Figura 5.2, permanece casi invariante al incrementar la intensidad del campo eléctrico, observándose en el caso de m=0 una ligera variación en cuanto a la intensidad, cuando la intensidad del campo eléctrico aumenta a F = 240 kV/cm, en especial para picos relacionados con los pares electrón-hueco $\mathcal{E}_{1,0,1,\pm3}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,\pm4}$. Este efecto se observa en la Figura 5.3 y no en la Figura 5.2 debido a que, al aumentar el radio del sistema, el efecto del confinamiento disminuye con respecto al efecto del campo eléctrico.



Por otro lado, para m=1 se observa que, al combinar el aumento de la intensidad del campo eléctrico con el aumento del radio del sistema, se incrementa la intensidad de los picos. Esto se puede comprobar si se compara la Figura 5.2(*d*) con la Figura 5.3(*d*) donde se aprecia una diferencia de 3 órdenes de magnitud, la Figura 5.2(*e*) con la Figura 5.3(*e*) donde

se observa una diferencia de 1 orden de magnitud, y finalmente la Figura 5.2(*f*) con la Figura 5.3(*f*) donde se observa una diferencia de 2 órdenes de magnitud. Sin embargo, el incremento en la intensidad de los picos es menor, ya que cuando la intensidad del campo eléctrico pasa de F = 1kV/cm a F = 240kV/cm la variación es de aproximadamente 3-4 órdenes en las Figuras 5.3(*d*)-5.3(*f*); mientras que, en el caso de las Figuras 5.2(*d*)-5.2(*f*) el cambio es de 4-5 órdenes de magnitud, cambios que se deben al incremento del radio del sistema.

En la Figura 5.4 se puede ver el comportamiento de la sección eficaz de dispersión con respecto a la diferencia de energía entre la radiación incidente y secundaria, para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica en un FSW de radio $r_0 = 15$ Å considerando diferentes intensidades del campo eléctrico. Estos gráficos se han obtenido para la resonancia de entrada, es decir, la energía del fotón incidente es igual a la diferencia de energía entre electrón y el hueco. En este caso, se ha escogido el par $\mathcal{E}_{1,0,1,0}$, entonces: (*a*) $\hbar \omega_l = 3.12024 \text{ eV}$, (*b*) $\hbar \omega_l = 3.12028 \text{ eV}$, (*c*) $\hbar \omega_l = 3.12035 \text{ eV}$, (*d*) $\hbar \omega_l = 3.12024 \text{ eV}$, (*e*) $\hbar \omega_l = 3.12028 \text{ eV}$, (*f*) $\hbar \omega_l = 3.12035 \text{ eV}$. Las Figuras 5.4(*a*)-5.4(*c*) corresponden a la emisión de un fonón con m = 0, mientras que las Figuras 5.4(*d*)-5.4(*f*) corresponden a la emisión de un fonón con m = 1.

Al igual que en las Figuras 5.2 y 5.3, se puede apreciar que para m = 0 la intensidad de los picos es prácticamente independiente de la intensidad del campo eléctrico debido al fuerte efecto del confinamiento. Además, para m = 0 el modo de oscilación del fonón más intenso es el n = 1, mientras que para m = 1 el modo de oscilación del fonón más intenso es el n = 2, más alejado de $\hbar \omega_{LO}$. Para analizar esto, debemos conocer la energía de los modos de oscilación de los fonones: $\hbar \omega_{1,0} = 33.27 \text{ meV}$, $\hbar \omega_{2,0} = 27.46 \text{ meV}$, $\hbar \omega_{3,0} = 15.67 \text{ meV}$, $\hbar \omega_{1,1} = 32.38 \text{ meV}$, $\hbar \omega_{2,1} = 30.76 \text{ meV}$ y $\hbar \omega_{3,1} = 27.03 \text{ meV}$.

Como los modos con m=0 son puramente longitudinales es lógico que mientras estén más cerca de la energía del fonón óptico longitudinal $\hbar \omega_{LO}$ (es decir, el modo $\hbar \omega_{1,0}$)



Figura 5.4: Sección eficaz diferencial de dispersión para la resonancia de entrada de un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica. Se considera un FSW de radio $r_0 = 15$ Å en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo. En este caso, se ha escogido el par $\mathcal{E}_{1,0,1,0}$, y la energía de la radiación incidente es: (*a*) $\hbar \omega_l = 3.12024 \text{ eV}$, (*b*) $\hbar \omega_l = 3.12028 \text{ eV}$, (*c*) $\hbar \omega_l = 3.12035 \text{ eV}$, (*d*) $\hbar \omega_l = 3.12024 \text{ eV}$, (*e*) $\hbar \omega_l = 3.12028 \text{ eV}$, (*f*) $\hbar \omega_l = 3.12035 \text{ eV}$.

su contribución a la sección eficaz es más intensa; sin embargo, cuando m=1 el modo $\hbar\omega_{2,1}$ es el que hace la mayor contribución a la sección eficaz de dispersión. Esto se debe a que los modos de oscilación en un FSW son modos mixtos siempre que sea $m \neq 0$, esto es, tienen una parte longitudinal y una parte transversal, pero solo la parte longitudinal se puede acoplar al electrón. Por lo tanto, podemos concluir que los fonones cuya parte longitudinal es mayor contribuirán más a la sección transversal de dispersión. Si se comparan las Figuras 5.4(*d*)-5.4(*f*) se observa un incremento de la sección eficaz de dispersión, lo que también se puede apreciar en las Figuras 5.2(*d*)-5.2(*f*) y 5.3(*d*)-5.3(*f*); sin embargo, el aumento de la intensidad del campo eléctrico provoca un incremento, en especial, de la intensidad de la contribución del modo $\hbar\omega_{11}$, en comparación con los otros modos.

La Figura 5.5 también muestra el comportamiento de la sección eficaz de dispersión con respecto a la diferencia de energía entre la radiación incidente y secundaria para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica en un FSW de radio $r_0 = 15$ Å, considerando diferentes intensidades del campo eléctrico; pero en este caso, se ha escogido como resonancia de entrada: $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,-1}$ para la línea roja y $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,+1}$ para la línea negra, cuando $m_e \neq m_h$, entonces: (a) $\mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 3.4551054 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.4551055 \text{ eV}$, (b) $\mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 3.45508 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.4551054 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.4551055 \text{ eV}$, (e) $\mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 3.45508 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.4551054 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.4551055 \text{ eV}$, (e) $\mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 3.45508 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.45524 \text{ eV}$, (f) $\mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 3.45432 \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} = 3.45973 \text{ eV}$. En resumen, las Figuras 5.5(a), 5.5(b) y 5.5(c) corresponden a la emisión de un fonón con m = 0, mientras que las Figuras 5.5(d), 5.5(e) y 5.5(f) corresponden a la emisión de un fonón con m = 1.

En este caso, se destaca que la contribución de los estados pares es mayor que la contribución de los estados impares y ambos permanecen casi constantes para el caso donde m=0. Cuando m=1 a medida que aumenta la intensidad del campo eléctrico aumenta el aporte relativo de los estados pares respecto a los estados impares. Se debe señalar que la



Figura 5.5: Sección eficaz diferencial de dispersión para la resonancia de entrada para un proceso de dispersión Raman resonante unifonónica. Se considera un FSW de radio $r_0 = 15$ Å en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo. La energía del fotón de radiación incidente es $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,-1}$ para la línea roja y de $\hbar \omega_l = \mathcal{E}_{1,0,1,+1}$ para la línea negra.

Figura 5.5(*f*) está en una escala de 10⁻³, mientras que las Figuras 5.5(*d*) y 5.5(*e*) están en una escala de 10⁻⁵. Este comportamiento se puede observar a pesar de que la diferencia de energía de la radiación secundaria es muy pequeña: $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} - \mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 1.00 \times 10^{-7} \text{ eV}$ para un campo eléctrico de intensidad F = 1 kV/cm, $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} - \mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 1.60 \times 10^{-4} \text{ eV}$ para un campo eléctrico de intensidad F = 40 kV/cm y $\mathcal{E}_{1,0,1,+1} - \mathcal{E}_{1,0,1,-1} = 5.41 \times 10^{-3} \text{ eV}$ para un campo eléctrico de intensidad F = 240 kV/cm.

5.3 Conclusiones del capítulo

La investigación realizada sobre la dispersión Raman resonante unifonónica en un FSW con simetría cilíndrica crecido en una matriz de *GaAs*, en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo aplicado transversalmente al eje de alambre, permite concluir lo siguiente:

- La presencia del campo eléctrico provoca la aparición de picos en los espectros donde m_e ≠ m_h, a diferencia de un sistema en ausencia de campos externos o en presencia de un campo magnético
- El campo eléctrico provoca la aparición de picos en los espectros asociadas a modos de oscilación donde m≠0, a diferencia de un sistema en ausencia de campos externos o en presencia de un campo magnético (esto si sólo se considera la interacción electrón-fotón en aproximación dipolar).
- El campo eléctrico produce un incremento en la eficiencia Raman, desplazando las resonancias de entrada y salida; pero en una menor medida en comparación con el efecto producido por un campo magnético.
- Se confirma que la contribución del modo de oscilación $\hbar \omega_{1,0}$ es el más importante para la resonancia de entrada, con pequeñas contribuciones del resto de los modos de oscilación ($\hbar \omega_{2,0} y \ \hbar \omega_{3,0}$).

Conclusiones

En este trabajo se estudiaron dos procesos de dispersión Raman en un alambre cuántico de $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$, con simetría cilíndrica en presencia de un campo eléctrico externo homogéneo, aplicado transversalmente al eje del alambre. Primero se obtuvieron los estados electrónicos del sistema, y luego, la expresión matemática para la sección eficaz diferencial de dispersión correspondiente a un proceso de dispersión Raman electrónica. Finalmente, se calcularon la sección eficaz diferencial de dispersión Raman resonante unifonónica, considerando el modelo del FSW. De nuestro trabajo se puede concluir que la presencia del campo eléctrico provoca:

- El rompimiento de la degeneración de los estados electrónicos y la eliminación de las reglas de selección en las transiciones ópticas intra-banda e inter-bandas.
- Que el número de picos observados en los espectros Raman sea mayor que en los espectros obtenidos en presencia de un campo magnético o en ausencia de campos externos, debido a las reglas de selección.
- Un incremento en la eficiencia Raman; pero en una menor medida en comparación con el efecto producido por un campo magnético [15].

También,

- El campo eléctrico es adecuado para controlar la dispersión de la luz en alambres cuánticos ya que influye sobre los estados electrónicos y las reglas de selección.
- En comparación con el campo magnético los efectos del campo eléctrico sobre este sistema lo hacen más adecuado como mecanismo de control de los procesos de dispersión, además de ser fácil de generar y manipular.
- El QWW y el FSW son buenos candidatos para ser utilizados como dispositivos nanooptoelectrónicos, ya que su comportamiento óptico puede ser manipulado a través del control de sus parámetros, y además mediante un campo eléctrico externo.
- Para el diseño de algunas aplicaciones, por ejemplo, el láser Raman inter-subbanda sintonizable, nuestro sistema permitiría modular la eficiencia y la posición de los picos con el campo eléctrico de una manera más simple.
- Al observar los resultados reportados en la literatura podemos concluir que en el diseño de fuentes de luz, los sistemas cilíndricos son más eficientes que los sistemas basados en pozos cuánticos [26,71,96]; sin embargo, los sistemas cilíndricos son más difíciles de optimizar debido a las reglas de selección, pero la presencia del campo eléctrico al eliminarlas simplifica el proceso.

Perspectivas futuras

Para continuar nuestro trabajo en el futuro, hacemos las siguientes recomendaciones:

- Realizar un análisis que permita determinar la influencia del conjunto de aproximaciones utilizadas en los resultados obtenidos.
- Continuar en la búsqueda de resultados experimentales que permitan corroborar o no la existencia del régimen supercrítico, así como la calidad de nuestros resultados.
- Añadir al sistema estudiado un campo magnético en la dirección del eje del alambre para analizar el efecto de los campos cruzados.
- Investigar alambres cuánticos con otras simetrías con el fin de encontrar la simetría más favorable para los procesos de dispersión y eficiencia cuántica.
- Comparar los resultados obtenidos con otros que se puedan obtener en puntos cuánticos del mismo material.
- Estudiar la dispersión Raman electrónica para un alambre cuántico, vista en el capítulo 4, considerando la interacción electrón-fonón para acercar la investigación teórica a la realidad experimental.

Bibliografía

- [1] Morán J. L. y Rodríguez J. L. "Los materiales nanoestructurados. Sus propiedades y aplicaciones en la revolución científica y tecnológica del siglo XXI". Primera Edición. Sociedad Mexicana de Física, A. C y Fondo de Cultura Económica. ISBN 978-607-16-1371-4 (2012).
- [2] Sebastian V. "Nanocristales, nuevos materiales con propiedades y aplicaciones únicas". Enseñanza de las ciencias de la Tierra. ISSN 1132-9157 (2018) 306-314.
- [3] Wallentin J., Persson J. M., Wagner J. B., Samuelson L., Deppert K., Borgstrom M. T. "High- performance single nanowire tunnel diodes". Nano Letters 10 3 (2010) 974-979.
- [4] Li Q., Gao J. S., Li Z. Z., Yang H. G., Liu H. Wang X. Y., Li Y. D. "Absorption enhancement in nanostructured silicon fabricated by self-assembled nanosphere lithography". Optical Materials **70** (2017) 165-170.
- [5] Lin C., Povinelli M. L. "Optical absorption enhancement in silicon nanowire arrays with a large lattice constant for photovoltaic applications". Optics Express 17 22 (2009) 19371-19381.
- [6] Cheon S. E., Lee H. S. Choi J., Jeong A. R., Lee T. S., Jeong D. S., Lee K. S., Lee W. S., Kim W. M., Lee H., Kim, I. "Fabrication of parabolic Si

nanostructures by nanosphere lithography and its application for solar cells". Scientific Reports **7** (2017) 7336.

- Soci C., Zhang A., Xiang B., Dayeh S. A., Aplin D. P. R., Park J., Bao X. Y., Lo
 Y. H. y Wang D. "ZnO Nanowire UV Photodetectors with High Internal Gain".
 Nano Letters 7 4 (2007) 1003-1009.
- [8] Betancourt Riera R., Betancourt R., Rosas R., Riera R., Marin J. L. "One phonon resonant Raman scattering in quantum wires and free-standing wires". Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 24 3-4 (2004) 257-267.
- [9] Winkler G. W., Varjas D., Skolasinski R., Soluyanov A. A., Troyer M., Wimmer M. "Orbital Contributions to the Electron g Factor in Semiconductor Nanowires".
 Physical Review Letters 119 3 (2017) 037701.
- [10] Santhibhushan B., Soni M., Srivastava A. "Optical properties of boron-group (V) hexagonal nanowires: DFT investigation". Pramana-Journal of Physics 89 14 (2017).
- [11] Yuan X., Saxena D., Caroff P., Wang F., Lockrey M., Mokkapati S., Tan H., Jagadish C. "Strong Amplified Spontaneous Emission from High Quality *GaAsSb* Single Quantum Well Nanowires". Journal of Physical Chemistry C 121 15 (2017) 8636-8644.
- [12] Stepanyan A., Yeranosyan M., Vardanyan L., Asatryan A., Kirakosyan A., Vartanian A. "Energy-loss rate of hot electrons due to confined acoustic phonon modes in a semiconductor quantum wire under transverse electric field". Physica B: Condensed Matter 519 15 (2017) 102-107.
- [13] Vartanian A. L., Asatryan A. L., Vardanyan L. A. "Influence of both electric and magnetic field on the polaron properties in a finite-potential quantum well wire".
 Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 47 (2013) 134-140.

- [14] Saravanan S., Peter A. J., Lee C. W. "Combined effects of magnetic and electric fields on the interband optical transitions in *InAs/InP* quantum wire". Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 67 (2015) 99-104.
- [15] Betancourt-Riera Re., Betancourt-Riera Ri., Nieto Jalil J. M., Riera R., "One phonon resonant Raman scattering in semiconductor quantum wires: Magnetic field effect". Physica B: Condensed Matter **410** 1 (2013) 126-130.
- Betancourt Riera Ri., Nieto Jalil J. M., Riera R., Betancourt Riera Re., Rosas R.
 "Electron Raman scattering in semiconductor quantum wire in external magnetic field". Journal of Physics: Condensed Matter 20 4 (2008) 45203-45210.
- [17] Sinyavskii E. P., Karapetyan S. A. "Specific features of the charge carrier mobility in nanowires in transverse electric and magnetic fiels". Semiconductors 48 2 (2014) 216-218.
- [18] Sakr M. R. "Electric modulation of optical absorption in nanowires". Optics Communications 378 1 (2016) 16-21.
- [19] Harutyunyan V. A. "Cylindrical nanolayer in the strong uniform electric field: The field localization of carriers and electro-optical transitions". Physica E: Lowdimensional Systems and Nanostructures 41 (2009) 695-700.
- [20] Howlader A. H., Islam M. S., Tanaka S., Makino T., Hashimoto A. "Vacancy and curvature effects on the phonon properties of single wall carbon nanotube".
 Japanese Journal of Applied Physics 57 252 (2018) 02CB08.
- [21] Bergues J. M., Betancourt-Riera R., Riera R., Marín J. L. "One phonon-assisted electron Raman scattering in quantum well wires and free-standing wires". Journal of Physics: Condensed Matter 12 36 (2000) 7983-7998.
- [22] Betancourt-Riera Ri., Nieto Jalil J. M., Betancourt-Riera Re., Riera R., Rosas R."One phonon assisted intersubband electron Raman scattering in a

semiconductor quantum wire in a magnetic field". Revista Mexicana de Física **53** 7 (2007) 116–118.

- [23] Betancourt-Riera Ri., Nieto Jalil J. M., Betancourt-Riera Re., Riera R. "Electron Raman scattering in semiconductor quantum wire in external magnetic field: Fröhlich interaction". Physica B: Condensed Matter 404 16 (2009) 2468–2473.
- [24] Betancourt-Riera Re., Betancourt-Riera Ri., Nieto Jalil J. M., Riera R. "Electron Raman scattering in semiconductor quantum well wire of cylindrical ring geometry". Chinese.Physics B 24 11 (2015) 117302.
- [25] Munguia-Rodriguez M., Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re. et al. "Electron states and Electron Raman scattering in semiconductor double cylindrical quantum well wire". Chinese Physics B 25 11 (2016) 117302.
- [26] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Munguía-Rodríguez M. "Electron states and electron Raman scattering in a semiconductor step-quantum well wire". Physica B: Condensed Matter 515 15 (2017) 34-42.
- [27] Comas F., Trallero-Giner C., Cantarero A. "Optical phonon and electron-phonon interaction in quantum wires". Physical Review B, Condensed Matter 47 12 (1993) 50-56.
- [28] Angelova T., Cros A., Cantarero A., Fuster D., González Y., y González L.
 "Raman study of *InAs/InP* quantum wires". AIP Conference Proceedings 893 865 (2007).
- [29] Kovalova M., Kondratenko S., Furrow C., Kunets V., Ware M., Salamo G. "Photo-voltage in *InGaAs/GaAs* heterostructures with one-dimensional nanostructures". Conference Proceedings of SPIE 9126 (2014).
- [30] Zardo I., Yazji S., Marini C., Uccelli E., Fontcuberta i Morral A., Abstreiter G.,
 Postorino P. "Presure Tuning of the Optical Properties of *GaAs* Nanowires".
 ACS Nano 6 4 (2012) 3284-3291.

- [31] Adu K. W., Gutierrez H. R., Eklund P. C. "Raman-active phonon line profiles in semiconducting nanowires". Vibrational Spectroscopy 42 (2006) 165-175.
- [32] Dahl C., Jusserand B., Etienne B. "Raman scattering by plasmons in deep etched quantum wires". Solid-State Electronics 40 1-8 (1996) 261-264.
- [33] Zardo I., Conesa-Boj S., Peiro F., Morante J. R., Arbiol J., Uccelli E., Abstreiter G., Fontcuberta i Morral A. "Raman spectroscopy of wurtzite and zinc-blende *GaAs* nanowires: Polarization dependence, selection rules, and strain effects". Physical Review B 80 (2009) 245324.
- [34] Schreder B., Kümmell T., Bacher G., Forchel A., Landwehr G., Materny A., y Kiefer W. "Resonance Raman spectroscopy and excitation profile of Cd_xZn_{1-x}Se/ZnSe quantum wires". Journal of Crystal Growth 214/215 (2000) 792-796.
- [35] Xiang-Fu Zhao, Cui-Hong Liu. "Electron Raman Scattering in quantum well wires". Physica B: Condensed Matter **392** 1 (2007) 11-15.
- [36] Mariani E., Sassetti M., Kramer B. "New selection rules for resonant Raman scattering on quantum wires". Europhysics Letters 49 2 (2000) 224-230.
- [37] Kumar S., Thomas K. J., Smith L. W., Pepper M., Farrer I., Ritchie D. A., Jones G. A. C., y Griffiths J. "Effect of low transverse magnetic field on the confinement strength in a quasi-1D wire". AIP Conference Proceedings 1566 245 (2013).
- [38] Royo M., De Luca M., Rurali R., Zardo I. "A review on III-V core-multishell nanowires: growth, properties, and applications". J. Phys. D: Appl. Phys. 50 (2017) 143001 (34pp).
- [39] López M., Meléndez M. "Pozos, hilos y puntos cuánticos: estructuras semiconductoras de baja dimensión". Avance y Perspectiva 16 (1997) 243-254.

- [40] Yaojun A. Du, Sung Sakong, Kratzer P. "As vacancies, Ga antisites and Au impurities in Zincblende and Wurtzite GaAs nanowire segments from first principles". Physical Review B, Condensed Matter 87 7 (2013) 075308
- [41] Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram Mohan. "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys". Journal of Applied Physics 89 11 (2001) 5815-5875.
- [42] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Ferrer-Moreno L. A., Nieto Jalil J.
 M. "Electron states and electron Raman scattering in semiconductor stepquantum well; Electric field effect". Superlattices and Microstructures 104 (2017) 428-437.
- [43] Hu G. Y., O'Connell R. F. "Electric field effect on weak localization in a semiconductor quantum wire". Solid-State Electronics 32 12 (1989) 1253-1257.
- [44] Montaño-Friede L., Peña-Rodriguez O., Rivera A., Guerrero-Martínez A. and Pal U. "Optimizing the electric field around solid and core-shell alloy nanostructures for near-field applications". Nanoscale 8 (2016) 14836-14845.
- [45] Faugeras C., Orlita M., Potemski M. "Raman scattering of graphene-based systems in high magnetic fields". Journal of Raman Spectroscopy 49 1 (2018) 146-156.
- [46] Tiutiunnyk A., Mora-Ramos M. E., Morales A. L., Duque C. M., Restrepo R. L., Ungan F., Martínez-Orozco J. C., Kasapoglu E., Duque C. A. "Electron Raman scattering in a double quantum well tunned by an external nonresonant intense laser field". Optical Materials 64 (2017) 496-501.
- [47] Takeuchi H., Sumioka T., Nakayama M. "Longitudinal optical phonon-plasmon coupled mode in undoped *GaAs/n*-type *GaAs* epitaxial structures observed by Raman Scattering and terahertz time-domain spectroscopic measurement". IEEE Transaction on terahertz science and technology **7** 2 (2017) 124-130.

- [48] Gustin C., Hughes S. "Influence of electron-phonon scattering for an on-demand quantum dot single-photon source using cavity-assisted adiabatic passage".
 Physical Review B 96 8 (2017) 085305.
- [49] Monsalve-Calderon K., Gil-Corrales A., Morales A. L. "Electron Raman scattering and Raman Gain in Pyramidal semiconductor quantum dots". Journal of Nanosciences and Nanotechnology 17 (2017) 1140-1148.
- [50] Taghavi S., Abdolvahab R., Rezaei G., Karimi M. J. "One-phonon Raman scattering in a two-dimensional quantum pseudo-dot system". Superlattices and Microstructures 110 (2017) 19-25.
- [51] Liu Y., Zhuang J., Hao W., Du Y. "Raman studies on silicene and germanene". Surface Innovations 6 1-2 (2018) 4-12.
- [52] Kolesov E. A., Tivanov M. S., Korolik O., Kapitanova O., Fu X., Cho H., Kang T., Panin G. "The effect of atmospheric doping on pressure-dependent Raman scattering in supported grapheme". Journal of Nanotechnology 9 (2018) 704-710.
- [53] Munkhbaatar P., Myung-Whun K. "Orbital wave in Raman scattering cross section of *LaMn O₃*". Physical Review B 97 8 (2018) 085101.
- [54] Gillet Y., Kontur S., Giantomassi M. "Ab initio approach to second-order Resonant Raman Scattering including exciton-phonon interaction". Scientifics Reports 7 (2017) 7344.
- [55] Riera R., Marín J. L., Rosas R. A. "Optical properties and impurity states in nanostructured materials". [Ed.] H. S. Nalwa. S.L Academic Press 6 (2001) 173-291.
- [56] Betancourt-Riera R., Nieto Jalil J. M., Riera R., Rosas R."Electron Raman Scattering in Nanostructures". [Ed.] H. S. Nalwa. American Scientific Publishers 13 (2011) 427-480.

- [57] Bergues J. M., Betancourt-Riera R., Marín J. L., Riera R. "Electron Raman Scattering in Semiconductor Quantum Dots". Physics Low-Dimensional Structure 7/8 (1996) 81-94.
- [58] Riera R., Marín J. L., Bergues J. M., Betancourt-Riera R., Fernández M.
 "Electron Raman scattering in a spherical quantum dots". Revista Mexicana de Física 44 2 (1998) 167-172.
- [59] Ferrer-Galindo L., Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Riera R. "Electron states and electron Raman scattering in an asymmetrical double quantum well: External electric field". Physica B: Condensed Matter 545 (2018) 215-221.
- [60] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Ferrer-Moreno L. A., Sanu-Ginarte A. D. "Theory of electron Raman scattering in a semiconductor core/shell quantum wire". Physica B-Condensed Matter 563 (2019) 93-100.
- [61] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Ferrer-Moreno L. A., Sanu-Ginarte A. D. "Electron states and electron Raman scattering in a semiconductor quantum well with step-barriers: Electric field effect". Physica B: Condensed Matter 575 (2019) 411700.
- [62] Betancourt-Riera R., Bergues J. M., Riera R., Marín J. L. "One phonon assisted electron Raman scattering in spherical semiconductor quantum dots". Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 5 (2000) 204-214.
- [63] Riera R., Marín J. L., Rosas R. A. "Optical properties and impurity states in nanostructured materials". H. S. Nalwa. Academic Press 6 (2001) 173-291.
- [64] Betancourt-Riera R., Riera R., Rosas R., Marín J. L. "Electron Raman scattering in semiconductor quantum well". Physics Low-Dimensional Structure 1/2 (2003) 125-142.

- [65] Betancourt-Riera R., Rosas R., Marín-Enriquez I., Riera R., Marín J. L. "Electron Raman scattering in asymmetrical multiple quantum wells". Journal of Physics: Condensed Matter 17 (2005) 4451-4461.
- [66] Nieto Jalil J. M., Betancourt-Riera Ri., Riera R., Comas F. "Long-wavelength polar optical modes in semiconductor heterostructures". Revista Mexicana de Física 53 7 (2007) 119–122.
- [67] Betancourt-Riera R., Riera R., Rosas R., Nieto J. M. "Electron Raman scattering in asymmetrical multiple quantum wells system: Fröhlich interaction". Physica E 40 (2008) 785–794.
- [68] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Jordán Hernández R., Riera R.
 "Estados electrónicos para un cascarón cuántico semiconductor de geometría cilíndrica". Revista Electrónica Nova Scientia 5 9 (2012) 89 97.
- [69] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Riera R., Rosas R. "Electron Raman scattering in asymmetrical multiple quantum wells system with an external electric field". Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 44 (2012) 1152–1157.
- [70] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Rosas R., Riera R. "Electron Raman Scattering in Asymmetrical Multiple Quantum Wells System with an External Electric Field: Fröhlich Interaction". Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 9 (2012) 1–8.
- [71] Ferrer-Moreno L. A., Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Riera R.
 "Electron Raman scattering in semiconductor step-quantum well". Physica B: Condensed Matter 477 (2015) 87-93.
- [72] Peter Y., Cardona M. "Fundamentals of Semiconductor: Physics and Materials Properties". Springer (2005).
- [73] Pavplov P. V., "Física del Estado Sólido". Ed. Mir (1987).

- [74] Davidov A. S., "Teoría del Sólido". Ed. Mir (1981).
- [75] Kittel Ch. "Quantum Theory of Solids". John Wiley & Sons, Inc (1987)
- [76] Kittel Ch. "Introduction to Solid State Physics".8th Ed. John Wiley & Sons, Inc (2005).
- [77] Rosas R. A., Riera R., Marin J. L., Campoy G. "Handbook of Thin Film Materials". [Ed.] H. S. Nalwa 5 (2002) 208-335.
- [78] León H., Tutor J., Comas F., Trallero C. "Movilidades electrónicas limitadas por mecanismos de dispersión fonónica en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad". Revista Cubana de Física 12 1 (1992).
- [79] Trallero-Giner C., Comas F. "Phenomenological treatment of long-wavelength polar optical oscillations in semiconductor nanostructures". Philosophical Magazine B 70 3 (1994) 583-599.
- [80] Trallero-Giner C., Pérez-Álvarez R., García-Moliner F. "Long wave polar modes in semiconductor heterostructure". Pergamon (1998).
- [81] Comas F., Cantarero A., Trallero-Giner C., Moshisky M. "Polar optical oscillations in quantum wires and free-standing wires: the electron-phonon interaction Hamiltonian". Journal of Physics: Condensed Matter 7 9 (1995) 1789-1805.
- [82] Davydov A. S. "Quantum Mechanics". [Ed.] Revolucionaria. Instituto del Libro. La Habana (1969).
- [83] Cantarero A. "Review on Raman scattering in semiconductor nanowires: I. theory". Journal of Nanophotonics. SPIEDigitalLibrary.org/jnp (2013)
- [84] Pérez J. L., Murillo R., Gómez R. "Espectroscopías Infrarroja y Raman". www.tdx.cat/bitstream/handle.
- [85] Andrews D. "Molecular photophysics and spectroscopy Raman scattering and spectral interpretation". Morgan & Claypool (2014).
- [86] Betancourt Riera Ricardo. "Estudio de la Dispersión Raman en Sistemas Nanoestructurados". Tesis en Opción al Título de Doctor en Ciencias (Física). Universidad de Sonora (2004).
- [87] Abramowitz M. and Stegun I. A. "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables" (New York: Dover Publications) (1972).
- [88] Olver F. W. J., Lozier D. M., Schneider B. I., Boisvert R. F., Clark C. W., Miller
 B. R., Saunders B. V. "NIST Handbook of Mathematical Functions" (Cambridge University Press) (2017), <u>http://dlmf.nist.gov/</u>.
- [89] Pratap D., Ramakrishna S. A., Pollock J. G., Iyer A. K. "Anisotropic metamaterial optical fibers". Optics Express 23 7 (2015) 9075.
- [90] Ahn D., Chuang S. L. "Exact calculations of quasi-bound states of an isolated quantum-well with uniform electric-field-quantum-well Stark resonance".
 Physical Review B 34 12 (1986) 9034-9037.
- [91] Rodriguez-Bautista M., Díaz-García C., Navarrete-López M. A., Vargas R., Garza J. "Roothaan's approach to solve the Hartee-Fock equations for atoms confined by soft walls: Basis set with correct asymptotic behavior". Journal of. Chemical Physics 143 (2015) 034103.
- [92] Garza J., Vargas R., Aquino N., Sen K. D. "DFT reactivity indices in confined many-electron atoms". Journal of Chemical Science **117** 5 (2005) 379–386.
- [93] Montgomery H. E. Jr., Sen K. D. "Dipole polarizabilities for a hydrogen atom confined in a penetrable sphere". Physiscs Letters A 376 (2012) 1992–1996.

- [94] Masale M., Tshipa, Nijegorodov N. y Rowlands G. "Oscillator strengths of optical transitions of a cylinfrical shell: Crossed static electric and magnetic fields". Superlattice and Microstructure 51 (2012) 265-273.
- [95] Sun G., Khurgin J. B., Friedman L. y Soref R. A. "Tunable intersubband Raman laser in *GaAs/AlGaAs* multiple quantum wells". Journal of the Optical Society of America B 15 2 (1998) 648-51.
- [96] Betancourt-Riera Ri., Betancourt-Riera Re., Ferrer-Moreno L. A. y Sañu-Ginarte
 A. D. "Theory of electron Raman scattering in a semiconductor core/shell
 quantum well wire". Physica B: Condensed Matter 563 (2019) 93-100.
- [97] Chamberlain M. P., Trallero-Giner C. and Cardona M. "Theory of one-phonon Raman scattering in semiconductor microcrystallites". Physical Review B 51 3 (1995) 1680-1693.