



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS



Control Escolar de Licenciatura

VOTOS DE APROBATORIOS

Secretaría Ejecutiva del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas Aplicadas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
P r e s e n t e.

Por medio de la presente le informamos que después de revisar la versión escrita de la tesis que realizó el C. **BARRETO BASAVE FRANCISCO** con número de matrícula **10003138** cuyo título es:

“Problemas unidimensionales en mecánica cuántica y sus posibles aplicaciones como modelos de pozos cuánticos”

Consideramos que **SI** reúne los méritos que son necesarios para continuar los trámites para obtener el título de **Licenciado Ciencias Área Terminal en Física**.

Cuernavaca, Mor a 09 de mayo de 2022

Atentamente
Por una universidad culta

Se adiciona página con la e-firma UAEM de los siguientes:

Dr. Rolando Pérez Álvarez	(Presidente).
Dr. Luis Manuel Gaggero Sager	(Secretario).
Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos	(Vocal).
Dr. Juan Carlos Martínez Orozco	(Suplente).
Dr. Federico Vázquez Hurtado	(Suplente).



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

MIGUEL EDUARDO MORA RAMOS | Fecha:2022-05-09 11:51:17 | Firmante

A2KfHkZZAbUZIqY+6FaawxSF/CwWzYIDlqdtB1qDC+pawrbX3R/TOUOBUtYseQ7HlcmPVZfAUju0/oUTuOyKTLy6Fr/6Q0nkLLQztCGqDtvGCx9NfWLz4d7JPdSapHG8JvKEfL PDkcXdVWVmBJYval8hEUahqCTkdwakSADsw5F1Uj8oLj1gGqWSXsa/gOhiQGGuDpw7BP/lwWL3uVvQSRhSG45PIWPFn4XuhPltX6QBN/e+8BTkKAMbmdpKurxccGuq0tj/SltiV JHZsVtwX/oklulRupcXjPOad6g0kEyBDMfMhkykSpiMr6SGkVmAKLzFIP0jyrenhwSix9XCFIQ==

FEDERICO VAZQUEZ HURTADO | Fecha:2022-05-09 13:28:23 | Firmante

K3ywLslU8BrGW6jO3wDQCbvF6P6mKjZFZJqW01rrbqxws3o29HPgPNdjhiZMy0hE5njweuHwHQchnWz6WE5C7/NY4wT68u6aembUwmcvFTac0SmXchP2lFeBnK8/Gdn3L8vJ k5TG2jMR3E0haotrth6RUjKdosnVgTmJ0Ti7Y0XVFodu3MGPFiwyDRj9mBcZeuY4oiuj/RK+Nb2UNzjFRsGx1EC2qAx+Rg+/H1ZAXzxcPOWOU30DYbucDetErVlSr1faC8Xs6iS ZE90igCJJrc86H97mCohMj1JLuPCXp/6r/Dvl2AQafE5pm8DsOWTq9UyoJ2sC1BodTdOBytQ==

ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2022-05-09 16:08:56 | Firmante

mM+5/1Se6KS4rxmLCzXFNduHMLulpfHt8bErbxiG2bKhTh3Xtd2egqkJ//b+luVrDZQ+yqhL5gvCkIDKgWm/bnc5ptVll/xImp/tUSJZif6xkvnSylL6DB77na4mRn485QKwY7vtNvcxIM JN/S2nwgzbZTUcPd+1Rgle3k6dQfv3lLUwXZ4uEejNGWocinz2pnFKIEU68YK2U/lw0vFd2KTugeYSY8NHbYwsPT3jld5oH1vRRyC4mYklNxdJEmU13qppw+pBtGhF4XNt/pvkSzhp GVrP9Wcu1qjBP7zFS9LftyvxhDFRZSkLuqojr+ewS0+4Pc5E6+3R1n2qSsq1nw==

JUAN CARLOS MARTÍNEZ OROZCO | Fecha:2022-05-10 11:54:05 | Firmante

PEtdqNewziTBYyqTwi6+yi0ovvXkZtgVrnrkzMEOdCMzxEayrl5TN5t30ejhxDTqB2P82dSlk2IkTYBXDJ+tNW+DNWxmJDuhzLSG9lp+4ptgeRt3Rg5rstSalUBKlJhGkBFd6jyA2 pTL2tIN6LZY50N0CBcfzLbznw/X4hoj4o/9opmnwizmJUOsTndTuHwufJppQ1/fYGPwyP5XyumXoNpaenaNdimJsUng/wingZPc8+5wngVSSTh7aquREFpeQc+gcpWB8utgl2TLc Wz91F44yYtriDGoGEKKMZV+Tfybj0XPNF/Fo4OcluFkd6NW57RneNXznYux8aklYw==

LUIS MANUEL GAGGERO SAGER | Fecha:2022-05-12 09:45:28 | Firmante

I2kV26VXR3POq5HjllCSEilYyh1a+QoN5qnljllGt7zVahBWWv9hMlcfDOKclmUdKhgIODIZUFURrPiDd8GIYEhAYwbKuyGQWYr4ALNAKymUsfqPeRSqGK/zfymiaos8ocSIWCTnfj evyl5kA6lqcvrAvfpU5ycheMUMUbcUOVrh4bePYH7HcMzSDKyUcOnzM+e9flCQEzwqnsfMQv32lebn0bRodfoK6s/i5cj7qd2GHtD0Sge093oio3WYwie8YL0vP3UXR10Pid8bzWEO q657QxV5jh6AXtKBAIxsuNx079sRHtDmLzNkCnwjRkAlK8qUnQmpidWBoGTcuo6Gw==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



Pq4OK0vSW

https://efirma.uaem.mx/noRepudio/WpllCfHc4kiOsDd3St2aDQPTM2JanyIH





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y
APLICADAS
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS

PROBLEMAS UNIDIMENSIONALES EN MECÁNICA CUÁNTICA Y SUS POSIBLES APLICACIONES COMO MODELOS DE POZOS CUÁNTICOS

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE

LICENCIADO EN CIENCIAS CON ÁREA TERMINAL EN FÍSICA

PRESENTA

Francisco Barreto Basave

DIRECTOR DEL TRABAJO:

DOCTOR MIGUEL EDUARDO MORA RAMOS

Cuernavaca, Morelos 2022



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

Dedicatoria

*Con especial cariño a mi mamá Nerey Basave Ocampo
y a mi papá Francisco Barreto Cazalez.*

A mis hermanas Ariana y Lizbeth.

Sin ustedes nada de esto sería posible.

¡Gracias!

Agradecimientos

*Especial agradecimiento al Doctor Miguel Eduardo Mora Ramos por haberme permitido colaborar con el y dirigir mi tesis con paciencia durante todo este tiempo de trabajo.
¡Gracias!*

Índice general

1. Resumen	1
2. Introducción	3
2.1. Planteamiento general del problema	3
3. Marco teórico	5
3.1. La aproximación adiabática	5
3.2. El método de Hartree-Fock	6
4. Aproximación de masa efectiva	9
4.1. Masa efectiva: Planteamiento de un paquete de ondas	10
4.2. Generalización al tensor de masa efectiva	11
4.3. Acoplamiento espín órbita	15
4.4. Modelo de Kane	16
5. Heteroestructuras semiconductoras	19
5.1. Pozo de potencial de barrera finita	19
5.2. Método de la función envolvente	21
5.3. Masa efectiva en materiales con estructuras tipo zinc-blenda	22
5.4. Función masa efectiva dependiente de la posición	23
5.5. Soluciones del Hamiltoniano de BenDaniel-Duke	25
6. Potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci	29
6.1. Definición de los pozos de potencial de Fibonacci y k-Fibonacci	29

7. Respuesta óptica en sistemas de baja dimensión	31
7.1. Óptica no lineal	31
7.2. Modelo de Paspalakis Boviatsis y Baskoutas	32
8. Resultados	35
8.1. Potencial de Fibonacci	35
8.1.1. Potencial Fibonacci con $\alpha = 1$	36
8.1.2. Potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$	38
8.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$	41
8.2.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 3$	42
8.2.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 4$	43
8.2.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 5$	44
8.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$	47
8.3.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 2$	47
8.3.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$	48
8.4. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$	51
8.4.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3/2$	52
8.4.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$	53
8.4.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3$	54
8.5. Respuesta óptica para los potenciales de Fibonacci	55
8.5.1. Coeficiente de absorción óptica para potenciales de Fibonacci	55
8.5.2. Coeficiente de absorción óptica para potenciales de k-Fibonacci	57
9. Conclusiones	59
Apéndices	63
A. Aproximación adiabática	63
B. Funciones de Bloch	67
B.1. Factor de normalización	67

B.2. Funciones de Bloch en la ecuación de Schrödinger	68
C. Teorema de Wannier	71
D. Unidades Atómicas efectivas	75
D.1. Unidades atómicas efectivas de la barrera	76
D.2. Altura de la barrera	78
D.3. Ecuación de BenDaniel-Duke en unidades atómicas efectivas	79
D.4. Base completa en el espacio de Hilbert en unidades atómicas efectivas	80
E. Respuesta óptica. Modelo de Paspalakis, Baviatsis y Baskoutas	83
F. Funciones hiperbólicas de tipo Fibonacci y k Fibonacci	103
Bibliografía	105

Capítulo 1

Resumen

En el presente trabajo se desarrolla un método para obtener los estados electrónicos de conducción en los llamados *pozos de potencial de tipo Fibonacci y k -Fibonacci* los cuales están basados en aleaciones semiconductoras compuestas por arseniuro de galio (GaAs) y aluminio galio arsénico ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$). Los pozos cuánticos analizados se definen a partir de las *funciones hiperbólicas de tipo Fibonacci y las funciones hiperbólicas generalizadas de tipo Fibonacci* [9]. Estas funciones se ajustan de manera que describan un perfil de barrera finita.

En cada situación se deriva teóricamente una *función de masa efectiva dependiente de la posición* este modelo de masa dependiente de la posición está directamente conectado con la aproximación de *función de onda envolvente* empleada en el estudio de la dinámica de electrones en heteroestructuras semiconductoras [12, 21]. De modo que se buscan soluciones al problema de Schrödinger con masa dependiente de la posición utilizando el Hamiltoniano de BenDaniel-Duke [3].

Finalmente, se calcula el coeficiente de absorción óptica no lineal asociado a transiciones inter-subbanda. Para esta sección de óptica no-lineal se emplea el modelo presentado por Paspalakis, Boviatsis y Baskoutas [16].

Capítulo 2

Introducción

Cualquier sólido de dimensiones macroscópicas es una colección de un enorme número de núcleos atómicos y electrones. Normalmente el núcleo atómico de un elemento es una mezcla de sus isótopos, sin embargo, este detalle es de poca importancia para la mayoría de las propiedades del mismo. Una peculiaridad de los sólidos establecida empíricamente es el hecho de que sus núcleos atómicos ocupan más o menos posiciones fijas en el espacio. En un cristal ideal, estas posiciones forman una red periódica tridimensional. En un sólido neutro (como es el caso de los materiales estudiados en el presente trabajo) la carga total positiva debida a los núcleos es igual a la carga de todos sus electrones.

2.1. Planteamiento general del problema

En un cristal ideal en el que los efectos relativistas y la interacción del espín se vuelven importantes, los estados estacionarios del sistema son descritos por la ecuación de Schödinger,

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \mathcal{E}\Psi, \quad (2.1.1)$$

donde Ψ es la función de onda del cristal, \mathcal{E} la energía y $\hat{\mathcal{H}}$ es el operador Hamiltoniano el cual está dado por,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2 + V(\vec{r}, \vec{R}), \quad (2.1.2)$$

donde $V(\vec{r}, \vec{R})$ es la energía de Coulomb de la interacción entre electrones y núcleos; la cual es de la forma

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K e^2}{R_{JK}} + \sum_{i < k} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i < J} \frac{Z_J e^2}{r_{iJ}}, \quad (2.1.3)$$

en donde m es la masa del electrón, M_J es la masa del J -ésimo núcleo, \vec{r}_i y \vec{R}_J son los vectores de posición del i -ésimo electrón y el J -ésimo núcleo respectivamente, R_{JK} , r_{ij} y r_{iJ} son las distancias

entre los correspondientes núcleos y electrones y finalmente Z_J es el número atómico del J -ésimo núcleo.

El espectro de energías de este Hamiltoniano es en general complicado. Sin embargo, debido a que la dinámica del sistema esta completamente determinada por la función de onda del cristal, Ψ , la solución de la ecuación (2.1.1) en principio contestaría todas las preguntas acerca del sólido en cuestión, por ejemplo, ¿por qué la colección de cierto tipo de átomos y electrones constituyen una red cristalina de algún tipo u otro?, además nos permitiría determinar propiedades térmicas, magnéticas y ópticas del sólido en particular, entre otras.

Debido a que una muestra macroscópica de un sólido contiene cerca de 10^{23} partículas (proporcional al número de avogadro), la función de onda del sólido, Ψ , depende del mismo número de variables. Por este motivo resulta prácticamente imposible obtener (o incluso escribir) la solución exacta a la ecuación (2.1.1). A decir verdad, incluso si encontramos un método para obtener (especificar) una función de onda de tal número de variables, no sería de ninguna utilidad, ya que su aplicación para el cálculo de cantidades observadas experimentalmente se encontraría con dificultades que tendrían que ser reconocidas como fundamentales.

Por lo tanto, el trabajo de las teorías físicas se encuentra en el establecimiento de aproximaciones razonables que nos permitan interpretar y calcular propiedades observadas y medidas experimentalmente.

Capítulo 3

Marco teórico

Debido a que la descripción de la dinámica de un cristal macroscópico como un conjunto de todos sus núcleos atómicos y electrones resulta complicado y de poca utilidad es que se recurre a distintas aproximaciones respaldadas por los resultados experimentales. A continuación presentamos dos aproximaciones fundamentales en la física del estado sólido.

3.1. La aproximación adiabática

La llamada *aproximación adiabática* busca simplificar la ecuación (2.1.1) utilizando el hecho de que la masa de los electrones m es mucho más pequeña que las masas de los núcleos atómicos M_J ; de modo que, al momento de considerar el movimiento de los electrones, el término asociado al movimiento de los núcleos es despreciable.

Bajo esta hipótesis, pretendemos representar la función de onda del sistema completo (electrones y núcleos) en la forma

$$\Psi(\vec{r}, R) = \Phi(R)\psi(\vec{r}, R), \quad (3.1.1)$$

donde $\Phi(R)$ es la función de onda de los núcleos y $\psi(\vec{r}, R)$ es la función de onda de los electrones.

De modo que la función de onda de los electrones $\psi(\vec{r}, R)$, que se mueven en el campo estático de núcleos, satisface la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 + V(\vec{r}, R) \right] \psi = \varepsilon \psi(\vec{r}, R), \quad (3.1.2)$$

ahora las posiciones de los núcleos atómicos \vec{R}_J dejan de ser variables de una ecuación diferencial y se convierten en parámetros constantes del potencial producido por los núcleos atómicos $V(\vec{r}, R)$.

Análogamente, podemos llegar a la ecuación para la ecuación de onda de los núcleos atómicos en la

forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2 + \varepsilon(R) \right] \Phi = \mathcal{E} \Phi(R), \quad (3.1.3)$$

de la ecuación (3.1.3), concluimos que $\Phi(R)$, describe a los núcleos moviéndose en un campo con energía potencial $\varepsilon(R)$ debido a los electrones. Los detalles matemáticos de la aproximación se encuentran en el apéndice A.

Por lo tanto, la aproximación adiabática nos permite estudiar el comportamiento de un sistema compuesto de núcleos atómicos y electrones en dos problemas más sencillos: El primero de ellos es estudiar el movimiento de electrones en una red cristalina de núcleos y posteriormente, analizar el problema del movimiento de los núcleos en un campo promedio $\varepsilon(R)$ debido a los electrones.

3.2. El método de Hartree-Fock

En la sección 3.1, justificamos porque el problema mecánico cuántico general de estudiar el movimiento de electrones y núcleos atómicos (como un conjunto completo) puede ser simplificado al problema del movimiento de electrones en una red periódica de núcleos atómicos estáticos. Sin embargo, describir el comportamiento de la colección de electrones de un cristal macroscópico sigue siendo extremadamente complicado de modo que resolver este problema requiere nuevamente de obtener solución por métodos aproximados. Un método de alta efectividad que ganó prominencia en la teoría de electrones de un cristal; es el llamado *método de Hartree-Fock*. Este método consiste en reducir el problema de multielectrones al problema de un solo electrón.

Consideremos un sistema de N electrones interactuando en un potencial periódico $V(\vec{r}_i)$. En esta situación, la ecuación de Schrödinger del sistema es de la forma

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_i) = \varepsilon\psi(\vec{r}_i); \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad (3.2.1)$$

con el Hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j \text{ y } i \neq j} \frac{e^2}{r_i r_j}, \quad (3.2.2)$$

donde $V(\vec{r}_i)$ es la energía potencial del i -ésimo electrón debido a la red cristalina.

El método de Hartree-Fock se basa en la idea de reemplazar la interacción entre electrones por la acción de algún campo efectivo externo denotado por $u_{\text{eff}}(\vec{r}_i)$. Este campo deberá proveer la mejor descripción del promedio de la interacción de todos los electrones del cristal actuando sobre un solo electrón en específico y será el mismo para cualquier electrón.

Bajo esta suposición, el Hamiltoniano del sistema ahora será igual a la suma de Hamiltonianos de

cada electrón; es decir,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \hat{\mathcal{H}}_i, \quad (3.2.3)$$

donde cada uno de estos hamiltonianos es de la forma:

$$\hat{\mathcal{H}}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_i) + u_{\text{eff}}(\vec{r}_i), \quad (3.2.4)$$

Esta aproximación nos permite sustituir el problema multielectrónico en una red cristalina fija por la descripción del movimiento de un solo electrón bajo la acción de un campo promedio $u_{\text{eff}}(\vec{r}_i)$. Esto se debe a que suponemos que la distribución electrónica tendrá como promedio una periodicidad similar a la de los corazones iónicos. Por lo tanto, la energía potencial de cada electrón no depende de su posición relativa al resto de electrones, sino solo de sus coordenadas en la red.

Por lo tanto, en la aproximación de Hartree-Fock, podemos escribir el Hamiltoniano como el de un solo electrón en un potencial periódico debido a la presencia de una red cristalina.

Capítulo 4

Aproximación de masa efectiva

De la teoría de Sommerfeld para electrones libres obtenemos la siguiente relación de dispersión de la energía en términos del vector de onda k ,

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.0.1)$$

de esta, detectamos que el coeficiente k^2 determina la curvatura de $\varepsilon(\vec{k})$ contra k .

Sin embargo, sabemos que la teoría de bandas extiende la teoría de Sommerfeld al caso en que los electrones del sólido están sometidos a un potencial periódico [1, 11, 14]. La existencia de este potencial modifica los niveles de energía de los electrones libres, que pasan a ser *bandas* de energía permitidas denotadas por el subíndice n , es decir, tenemos un conjunto de niveles energéticos de la forma $\{\varepsilon_n(\vec{k})\}$. De modo que, el estado fundamental de los metales consiste en una serie de bandas completamente llenas y una banda (o varias en caso de solapamientos) ocupadas parcialmente.

En el caso de los semiconductores, en el cero absoluto ($T = 0$ K), la banda más alta ocupada está completamente llena y se conoce como *banda de valencia* (B.V.) dado que contiene los electrones responsables del enlace covalente. Mientras que la banda desocupada más baja se conoce como *banda de conducción* (B.C.). El ancho de la banda es del orden de 20 eV y el gap energético que separa la banda de conducción de la banda de valencia es típicamente del orden de $E_g = 0.2$ a 2 eV.

El comportamiento de un semiconductor está determinado por electrones en estados próximos al borde de la banda de valencia y al fondo de la banda de conducción. Para tratar con electrones en estados próximos a un máximo (o a un mínimo) de energía podemos tomar la curva de dispersión $\varepsilon(\vec{k})$ de modo que - en buena aproximación - sea descrita por una ley parabólica (como electrones libres),

$$\text{B.C.} \quad \varepsilon(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (4.0.2)$$

donde E_g es la energía del gap, k es el vector de onda medido desde el borde de la zona de Brillouin y m_e denota la masa del electrón cerca del borde de la B.C.. Además, hemos tomado el borde superior de la B.V. como el cero para la energía potencial.

Mientras que para un electrón cerca del borde superior de la banda de valencia tiene energía

$$\text{B.V. } \varepsilon(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (4.0.3)$$

ahora, m_h es la masa de los huecos en la banda de valencia. De modo que los electrones cerca del fondo de la B.C. se comportan como partículas libres con una masa aparente positiva m_e y aquellos que ocupan estados cerca del tope de la B.V. parecen tener una masa negativa $-m_h$.

Aclaremos que el cristal como un conjunto completo no pesa menos (o más) si la *masa aparente* de los portadores de carga es menor (o mayor) que la masa de los electrones libres. Por otro lado, tampoco se contradice la segunda ley de Newton para el cristal como un todo, iones más portadores de carga. El punto importante es que un electrón en presencia de un potencial periódico es acelerado relativo a la red (en presencia de un campo eléctrico ó magnético) como si tuviera una cierta *masa efectiva*, en general distinta a la masa del electrón libre. Ahora, justifiquemos a detalle a que se debe este aparente comportamiento con masas efectivas negativas.

Una de las aproximaciones más empleada en la física de semiconductores es la llamada *aproximación de masa efectiva*. Dicha aproximación nos introduce el concepto de *masa efectiva dependiente de la posición* el cual ha mejorado de manera excepcional nuestro entendimiento de distintas propiedades físicas, tales como propiedades electrónicas de semiconductores [2], propiedades electrónicas de pozos, hilos y puntos cuánticos [10], entre otras.

4.1. Masa efectiva: Planteamiento de un paquete de ondas

Consideremos el movimiento de un electrón en una banda de energía; suponemos que el electrón se comporta como un paquete de ondas formado por funciones de onda fijadas alrededor de un valor particular k . Por definición, la velocidad de grupo es

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (4.1.1)$$

Sabemos que la frecuencia asociada a una onda con energía ε , esta dada por $\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$ de modo que la velocidad de grupo se escribe como,

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}, \quad (4.1.2)$$

o, generalizando nos queda que,

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}), \quad (4.1.3)$$

donde los efectos del cristal sobre el movimiento del electrón están contenidos en la relación de dispersión $\varepsilon(k)$.

Por otro lado, el trabajo $\delta\varepsilon$ hecho por un campo eléctrico externo sobre el electrón en un intervalo de tiempo δt es: $\delta\varepsilon = -eEv_g\delta t$ y alternativamente $\delta\varepsilon = (d\varepsilon/dk)\delta k = \hbar v_g\delta k$. Comparando ambas relaciones, obtenemos que

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE = F, \quad (4.1.4)$$

donde F es la fuerza externa. Esta es una relación muy importante, nos dice que en un cristal $\hbar(d\vec{k}/dt)$ es igual a la fuerza externa actuando sobre el electrón.

En el espacio libre, $d(mv)/dt$ es igual a la fuerza. De modo que no hemos abandonado la segunda ley de Newton, el electrón en el cristal está sujeto a fuerzas de la red cristalina así como a fuerzas externas.

Diferenciando la ecuación (4.1.2) con respecto al tiempo y recordando que $dk/dt = F/\hbar$, llegamos a la expresión siguiente,

$$\left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)^{-1} \frac{dv_g}{dt} = F, \quad (4.1.5)$$

si identificamos $\hbar^2(d^2\varepsilon/dk^2)^{-1}$ como una masa, entonces la ecuación (4.1.6) asume la forma de la segunda ley de Newton. Es por esto que definimos nuestra *masa efectiva* m^* como

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2}. \quad (4.1.6)$$

para obtener un valor numérico, es necesario conocer la relación de dispersión $\varepsilon(k)$ en cada situación.

4.2. Generalización al tensor de masa efectiva

Como ha sido demostrado teorica y experimentalmente un problema de multielectrones en un cristal puede, con adecuada exactitud, resolverse como el problema de un solo electrón. Esto es equivalente a decir que los electrones en un cristal pueden ser descritos por medio de las ecuaciones de Hartree-Fock en buena aproximación.

Ha sido demostrado que la función de onda de un electrón en un potencial periódico es de la forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (4.2.1)$$

donde \vec{k} es el vector de onda del electrón, y la amplitud de la función de onda $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ debe cumplir con

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_n) = u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (4.2.2)$$

en otras palabras, los electrones en un cristal pueden ser descritos por funciones de Bloch. Estas funciones mantienen la periodicidad del cristal.

Sabemos que la dinámica de un electrón en presencia de un potencial (periódico) esta descrita por la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (4.2.3)$$

donde $V(\vec{r})$ es el potencial periódico debido a la red cristalina.

Sustituyendo las funciones de onda de Bloch en la forma (4.2.1), nos queda (para detalles matemáticos nos referimos al apéndice B.2),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u_{\vec{k}} + V(\vec{r})u_{\vec{k}} - \frac{i\hbar^2}{m}(\vec{k} \cdot \nabla)u_{\vec{k}} = \left(\varepsilon_{\vec{k}} - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)u_{\vec{k}}. \quad (4.2.4)$$

Para el caso en que $\vec{k} = 0$, esta ecuación se reduce simplemente a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u_{\vec{0}} + V(\vec{r})u_{\vec{0}} = \varepsilon_0u_{\vec{0}}, \quad (4.2.5)$$

que es la misma ecuación de Schrödinger(4.2.12) para la función de onda $\psi_{\vec{k}}$.

El estudio de distintos tipos de potenciales periódicos (en modelos unidimensionales) ha llevado a la conclusión de que no todos los valores de la energía $\varepsilon_{\vec{k}}$ son permitidos. Generalmente, el espectro de energías de electrones en presencia de potenciales periódicos se divide en bandas de energía permitidas y prohibidas (otra forma de referirse a las bandas de energías prohibidas es llamarlos gaps energéticos).

En otras palabras, la dependencia de la energía de un electrón en presencia de un campo periódico con el vector de onda \vec{k} (dentro de las fronteras de la primera zona de Brillouin) no es una función única, por el contrario consiste de un conjunto de la forma $\{\varepsilon_n(\vec{k})\}$, donde n es el número de la banda de energía permitida tal y como anticipamos antes. Entonces, la función de onda del electrón también depende del número de banda n en la que se encuentre.

Con estas consideraciones, las funciones de onda de Bloch se deben escribir como:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (4.2.6)$$

Ahora, si suponemos que en adición al potencial periódico $V(\vec{r})$, tenemos un campo $u(\vec{r})$ actuando sobre el electrón de conducción del cristal (por ejemplo, un campo eléctrico externo). Entonces la ecuación de Schrödinger a resolver será de la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(\vec{r}) + u(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}). \quad (4.2.7)$$

Proponemos soluciones dadas por un desarrollo en un sistema de funciones de Bloch como:

$$\psi(z) = \sum_n \sum_{\vec{k}} c_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (4.2.8)$$

donde $c_{n\vec{k}}$ son los coeficientes del desarrollo por determinarse. Si uno aproxima el desarrollo como solo las funciones de Bloch de la n -ésima banda puede llegar a la siguiente ecuación (consultar apéndice C),

$$[\varepsilon_n(-i\nabla) + u(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}), \quad (4.2.9)$$

en esta aproximación, la ecuación de Schrödinger (4.2.7) es reemplazada por (4.2.9), la cual no contiene el potencial periódico $V(\vec{r})$. A primera vista, esto es de poca utilidad porque en esta última ecuación debemos conocer $\varepsilon_n(-i\nabla)\psi(\vec{r}) = \varepsilon_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ dentro de la primera zona de Brillouin y para conocer esta relación debemos encontrar la solución de la ecuación (4.2.7).

No obstante, podemos aproximar expresiones para $\varepsilon_n(\vec{k})$. Si tenemos un mínimo o un máximo de la energía $\varepsilon_n(\vec{k})$ en el punto $\vec{k} = \vec{k}_0$, entonces podemos desarrollar en una serie de potencias alrededor de este punto como

$$\varepsilon_n(\vec{k}) \approx \varepsilon_n(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} (k_\alpha - k_{\alpha 0})(k_\beta - k_{\beta 0}), \quad (4.2.10)$$

donde k_α y k_β son las componentes ortogonales del vector \vec{k} . En el desarrollo anterior, nos hemos quedado el término de segundo orden y empleado la condición de máximo (ó mínimo) en $\vec{k} = \vec{k}_0$.

Como la energía $\varepsilon_n(\vec{k})$ es un escalar y \vec{k} es un vector, las cantidades $(\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k}) / \partial k_\alpha \partial k_\beta) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0}$ son componentes de un tensor de rango 2. Reduciendo el tensor a sus ejes principales y colocando el origen de la energía y del vector de onda en el punto extremo (es decir, $\varepsilon_n(\vec{k}_0) = 0$ y $\vec{k}_0 = 0$), obtenemos

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_\alpha^2} \right) \Big|_{\vec{k}=0} k_\alpha^2. \quad (4.2.11)$$

Para aproximar la descripción del movimiento de un electrón en presencia de un potencial periódico lo más posible al movimiento de un electrón libre, introducimos el *tensor de masa efectiva inversa* como

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right) \Big|_{\vec{k}=\vec{0}}, \quad (4.2.12)$$

cuyas componentes de sus ejes principales son

$$\frac{1}{m_\alpha} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_\alpha^2} \right) \Big|_{\vec{k}=\vec{0}}, \quad (4.2.13)$$

las cantidades m_α con unidades de masa no son componentes de un tensor (debido a que las cantidades inversas a las componentes de un tensor generalmente no constituyen un tensor); sin embargo, por simplicidad se les conoce como el tensor de masa efectiva.

Con la definición de este tensor de masa efectiva inversa, encontramos que la ecuación (4.2.11) toma

la forma siguiente

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} = \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}}, \quad (4.2.14)$$

esta expresión es como la energía cinética de un electrón con distintas masas en los ejes x , y y z . Para llegar a esta, introducimos el operador de *cuasi-momento* como

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (4.2.15)$$

su única diferencia del vector de onda \vec{k} es la presencia del factor constante \hbar .

Debemos mantener presente que la ecuación (4.2.11) es válida solo para energías cerca del mínimo (o máximo) de energía. Equivalentemente, es cierta para valores del momento p_{α} pequeños, es decir, en los casos en que se cumple $p_{\alpha} \ll \hbar/a$ (donde a es el parámetro de red). Esta condición es usualmente verificada en materiales semiconductores debido a la baja concentración de electrones de conducción.

Finalmente, en el caso en el que todas las componentes del tensor $1/m_{\alpha}$ sean iguales, una masa efectiva escalar m^* puede ser introducida como sigue,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_{\alpha}} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_x^2} \right) \Big|_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_y^2} \right) \Big|_{\vec{k}_0} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_z^2} \right) \Big|_{\vec{k}_0}, \quad (4.2.16)$$

en este caso, la energía del electrón es igual a

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{p^2}{2m^*}, \quad (4.2.17)$$

es decir, es igual que la energía cinética de un electrón libre con masa m^* tal y como se deduce en el enfoque de un paquete ondas.

Ahora justifiquemos el origen de estas masas efectivas negativas que mencionamos antes,

- Cerca del extremo inferior de una banda, donde $\varepsilon_n(\vec{k})$ alcanza un mínimo, las segundas derivadas cumplen la condición $m_{\alpha}^{-1} = \hbar^{-2}(\partial^2 \varepsilon_n)(\partial k_{\alpha}^2)|_{k_0} > 0$. Es por esto que la masa efectiva en estos puntos es positiva, tal y como sucede en los electrones de conducción.
- Por el contrario, cerca de un máximo, se cumple la condición siguiente: $(\partial^2 \varepsilon_n)(\partial k_{\alpha}^2)|_{k_0} < 0$, por este motivo, cerca de máximos de energía las masas efectivas resultan ser negativas como sucede con los portadores de carga de la B.V., es decir, para los huecos.

Observemos que las masas efectivas determinan la proporción entre la fuerza y la aceleración. Para masas efectivas negativas, la aceleración del electrón será en dirección opuesta a la fuerza. Esto no deberá sorprendernos puesto que el método de masa efectiva es la forma más sencilla de considerar el efecto sobre el electrón de un potencial periódico (debido a la red cristalina). La combinación de la acción del potencial periódico y la fuerza externa en el electrón, que poseen propiedades ondulatorias, dan lugar al suceso antes descrito.

4.3. Acoplamiento espín órbita

Hasta el momento, hemos estudiado el comportamiento de un electrón en un cristal sin tener en cuenta el efecto del espín.

Es sabido que en átomos la interacción del momento magnético del electrón (su espín) con su movimiento orbital resulta en la separación y reubicación de sus niveles energéticos atómicos. Por ejemplo, la interacción del momento magnético intrínseco del electrón de valencia con su movimiento orbital en un átomo de sodio, resulta en el separamiento de la línea D en 0.002 eV (lo cual se conoce como el doblete del sodio). En general, la energía de separamiento entre niveles resulta mayor en átomos pesados. Es conocido que en átomos de rubidio esta energía es del orden de 0.03 eV y para átomos de mercurio es de 0.23 eV.

El desplazamiento del espectro del electrón de conducción en un semiconductor por acoplamiento espín-órbita es mayor para átomos con número atómico Z grande. Por lo tanto, en el antimonio de indio (InSb, $Z_{\text{In}} = 49$ y $Z_{\text{Sb}} = 51$) es mayor que en el germanio (Ge, $Z_{\text{Ge}} = 32$) y mucho mayor si lo comparamos con silicio (Si, $Z_{\text{Si}} = 14$).

De la teoría de Pauli para el espín del electrón, el operador de vector de espín es

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}, \quad (4.3.1)$$

donde el vector renglón $\hat{\sigma}$ esta compuesto de las matrices de espín, es decir, $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$. En la representación en la que el espín apunta el eje preferencial z (en este caso, $\sigma_3 = \sigma_z$) estas matrices son iguales a:

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{y} \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.3.2)$$

más comúnmente llamadas matrices de Pauli.

De estas, observamos que el valor de la proyección de espín en el eje z es igual a $\pm\hbar/2 = s\hbar$, donde las coordenadas de espín son $s = \pm 1/2$ como es bien conocido teorica y experimentalmente.

Sigue de resultados experimentales, así como de la rigurosa teoría relativista de Dirac, que el electrón posee un momento magnético dado por

$$\hat{\mu} = -\mu_B \hat{\sigma}, \quad (4.3.3)$$

donde,

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad (4.3.4)$$

esta cantidad se conoce como *magnetón de Bohr* y además de otras constantes aparece c que representa la velocidad de la luz en el vacío.

Esudiamos la interacción del momento magnético del electrón $\hat{\mu}$ con su movimiento orbital. En primer lugar, cuando un electrón se mueve en un campo eléctrico de intensidad E_0 , en una aproximación no relativista, se genera un campo magnético de la forma

$$\vec{H} = \vec{E} \times \frac{\vec{v}}{c}, \quad (4.3.5)$$

aquí \vec{v} es la velocidad del electrón. Si el electrón se está moviendo en un potencial periódico (debido a la presencia de la red cristalina) $V(\vec{r})$, entonces

$$\vec{E} = \frac{1}{e} \nabla V(\vec{r}), \quad (4.3.6)$$

donde e es la carga del electrón.

La energía dipolar de un momento $\hat{\mu}$ en un campo magnético \vec{H} es igual a $-\hat{\mu} \cdot \vec{H}$, por lo tanto, el operador del acoplamiento espín-órbita de acuerdo con (4.3.3)-(4.3.6) es igual a

$$\hat{\mu} \cdot \vec{H} = \mu_B \hat{\sigma} \cdot \left[\frac{1}{e} \nabla V(\vec{r}) \times \frac{\hat{p}}{mc} \right] = -\frac{i\hbar^2}{2m^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot [\nabla V(\vec{r}) \times \nabla], \quad (4.3.7)$$

donde hemos tomado en cuenta que el operador velocidad \vec{v} puede escribirse como

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla. \quad (4.3.8)$$

Una deducción relativista consistente a partir de la ecuación de Dirac, nos lleva a una ecuación doblemente menor para la interacción espín-órbita, por lo tanto, el Hamiltoniano correcto para el acoplamiento de espín-órbita es

$$\hat{\mathcal{H}}_{so} = -\frac{i\hbar}{4m^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot [\nabla V(\vec{r}) \times \nabla] \quad (4.3.9)$$

4.4. Modelo de Kane

Por lo tanto, la descripción completa de un electrón en presencia de una red periódica, teniendo en cuenta la interacción espín-órbita, esta descrita por la ecuación de Schrödinger siguiente,

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{4m^2 c^2} [\nabla V(\vec{r}) \times \vec{p}] \cdot \hat{\sigma} \psi(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi(\vec{r}), \quad (4.4.1)$$

para la parte periódica de las funciones de Bloch, $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ nos queda,

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\nabla V \times \vec{p}] \cdot \hat{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [\nabla V \times \vec{k}] \cdot \hat{\sigma} \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E'_k u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (4.4.2)$$

donde m se supone la masa del electrón libre y E'_k es la energía del estado con vector de onda \vec{k} y está dada por

$$E'_k = \varepsilon_{\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.4.3)$$

El modelo presentado por Evan Kane [13], permite encontrar soluciones a la ecuación (4.4.2). En este modelo, la interacción espín-órbita se trata como independiente de \vec{k} ; para esto se desprecia el quinto término que aparece. Mientras que el cuarto término se conoce como interacción espín órbita independiente de \vec{k} y de tipo atómico.

Para dar soluciones, vamos a suponer que conocemos la solución de la ecuación

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right] U_i = E_i U_i, \quad (4.4.4)$$

y usaremos el conjunto completo de las U_i como una base para una representación. Las propiedades de simetría de las funciones U_i están dadas por la teoría de grupos.

Consideremos las funciones que corresponden a las bandas de conducción son no degeneradas (o doblemente degeneradas si se tiene en cuenta el espín) y se denotan por $S \uparrow$ y $S \downarrow$, donde \uparrow significa espín hacia arriba (up) y \downarrow significa espín hacia abajo (down). La notación S significa que las funciones tienen las mismas propiedades de simetría de los orbitales tipo s . Las funciones de la banda de valencia son triplemente degeneradas (sextuplemente contando el espín) y se denotan como $X \uparrow, X \downarrow, Y \uparrow, Y \downarrow, Z \uparrow, Z \downarrow$. Nuevamente, la notación sirve para denotar que las funciones tienen simetría de las funciones atómicas P_x, P_y y P_z .

Si tomamos, por conveniencia, al vector \vec{k} orientado a lo largo de la dirección z y se considera el Hamiltoniano que corresponde a los primeros cuatro términos de la ecuación (4.4.2). La interacción mutua entre la banda de conducción y las bandas de valencia hace que las bandas sean doblemente degeneradas.

Proponemos como base de la representación al conjunto de funciones $|iS \downarrow\rangle, |(X - iY) \uparrow / \sqrt{2}\rangle, |Z \downarrow\rangle, |(X + iY) \uparrow / \sqrt{2}\rangle, |iS \uparrow\rangle, |-(X + iY) \downarrow / \sqrt{2}\rangle, |Z \uparrow\rangle$ y $|(X - iY) \downarrow / \sqrt{2}\rangle$. Las primeras cuatro funciones son respectivamente, degeneradas con respecto a las últimas cuatro.

Lo que se logra hacer en el artículo de Kane, es representar al Hamiltoniano por medio de una matriz de 8×8 , que es diagonal por bloques de orden 4×4 y se escribe como

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix}, \quad (4.4.5)$$

donde

$$H = \begin{pmatrix} E_S & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_P - \frac{\Delta}{3} & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & 0 \\ kP & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & E_P & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_P + \frac{\Delta}{3} \end{pmatrix}, \quad (4.4.6)$$

la constante positiva Δ es el desdoblamiento espín-órbita de la banda de valencia. Y junto con la cantidad real P se definen como

$$\Delta = \frac{3\hbar i}{4m^2c^2} \langle X | \frac{\partial V}{\partial x} \hat{P}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{P}_x | Y \rangle \quad (4.4.7)$$

$$P = -i \frac{\hbar}{m} \langle S | \hat{P}_z | Z \rangle, \quad (4.4.8)$$

E_S y E_P se refieren a los autovalores del Hamiltoniano de la ecuación (4.4.4). E_S corresponde a la banda de conducción y E_P a la banda de valencia (si el vector de onda no está en la dirección z , el Hamiltoniano puede transformarse en el Hamiltoniano (4.4.5) mediante una rotación de las funciones base).

La ecuación secular que se deriva de diagonalizar el Hamiltoniano (4.4.5) tiene la siguiente forma

$$E'_k [E'_k(E'_k - E_g)(E'_k + \Delta) - k^2 P^2 (E'_k + \frac{2}{3}\Delta)] = 0, \quad (4.4.9)$$

donde E'_k esta dada por (4.4.3) y se redefine $E_s = E_g$ (como la energía del gap en el punto Γ o el punto $k = 0$).

Las soluciones de la ecuación (4.4.9), considerando únicamente el orden más bajo de k^2 son

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} && \text{(banda de huecos pesados, "hh",)} \\ E(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + E_G && \text{(banda de conducción, "e",)} \\ E(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} && \text{(banda de huecos ligeros, "lh",)} \\ E(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} - \Delta && \text{(banda de spin-orbit split-off, "so",)} \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

donde las masas efectivas estan dadas por

$$\frac{m_0}{m_e} = 1 + \frac{2 E_P}{3 E_G} + \frac{1}{3} \frac{E_G}{E_G + \Delta}, \quad (4.4.11)$$

$$\frac{m_0}{m_h} = 1 - \frac{2 E_P}{3 E_G}, \quad (4.4.12)$$

$$\frac{m_0}{m_{so}} = 1 - \frac{1}{3} \frac{E_P}{3(E_G + \Delta)}, \quad (4.4.13)$$

la ecuación en la que estamos interesados es la expresión para la masa efectiva de los portadores de carga de la banda de conducción, es decir, (4.4.11).

Capítulo 5

Heteroestructuras semiconductoras

Como discutimos en el capítulo 4, una de las formas de considerar el efecto de la red cristalina en el movimiento de un electrón cerca del mínimo (o máximo) de energía $\varepsilon(\vec{k})$; es considerar que su movimiento está descrito por el de un electrón con una masa efectiva m^* . La forma de definir la masa efectiva esta dada por relación (4.2.13) como

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right) \Big|_0, \quad (5.0.1)$$

Medidas experimentales de la masa efectiva han probado que esta es una cantidad anisotrópica, es decir, que no es la misma en todas direcciones como bien encontramos en la ecuación (5.0.1). Además, se encontró que para estructuras de arseniuro de galio (GaAs) la masa efectiva de los electrones de conducción tiene un valor de $m^* = 0.67m_0$, donde m_0 es la masa de un electrón en el vacío.

En física de semiconductores una *heterounión* se produce cuando dos materiales con diferente gap energético y con la misma estructura cristalina se ponen en contacto físico por una intercara plana; en el equilibrio termodinámico, ocurre una alineación muy particular entre las bandas de valencia y de conducción de los materiales, la alineación de estas bandas produce una barrera de potencial para los portadores de carga. Una *heteroestructura semiconductoras* esta compuesta por dos o más heterouniones.

La masa efectiva de los portadores de carga en una heteroestructura dependerá de en que material se encuentran dichos portadores, visto como un sistema completo, la masa efectiva depende de la posición de los portadores de carga.

5.1. Pozo de potencial de barrera finita

Supongamos que tenemos dos materiales semiconductores con la misma estructura cristalina los cuales denotamos como material '1' y material '2'. El material 2 tiene un gap energético dado por E_{g2} ; el cual es mayor que el gap energético del material 1, E_{g1} .

Para el punto \vec{k} en el espacio recíproco donde se ubica el gap energético tenemos la representación (simplificada) de la figura 5.1.1.

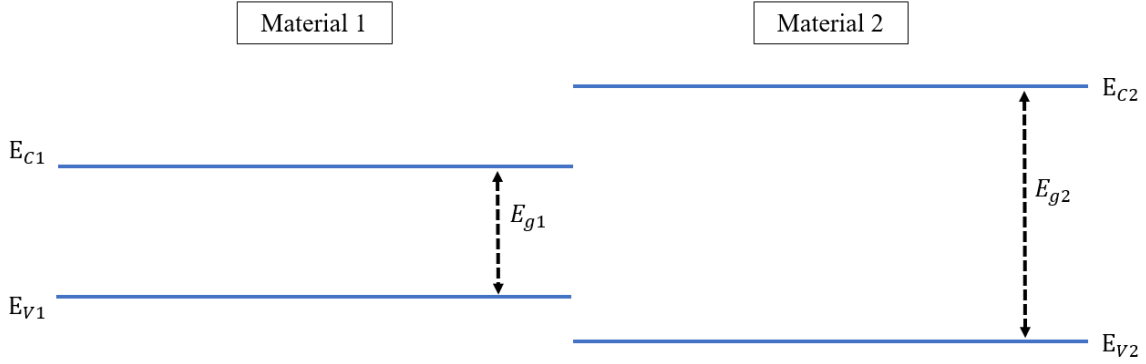


Figura 5.1.1: Diagrama de las bandas de valencia y conducción para dos materiales '1' y '2' con diferentes gap energéticos denotados por E_{g1} y E_{g2} respectivamente, los cuales están ubicados en el mismo punto dentro de la zona de Brillouin.

Ahora, cuando dos semiconductores con el mismo tipo de estructura cristalina están formando una heterounión, las bandas se alinean en la forma que resulta más conveniente termodinámicamente. En general, ocurre una situación similar a la que se ejemplifica a continuación en la figura 5.1.2.

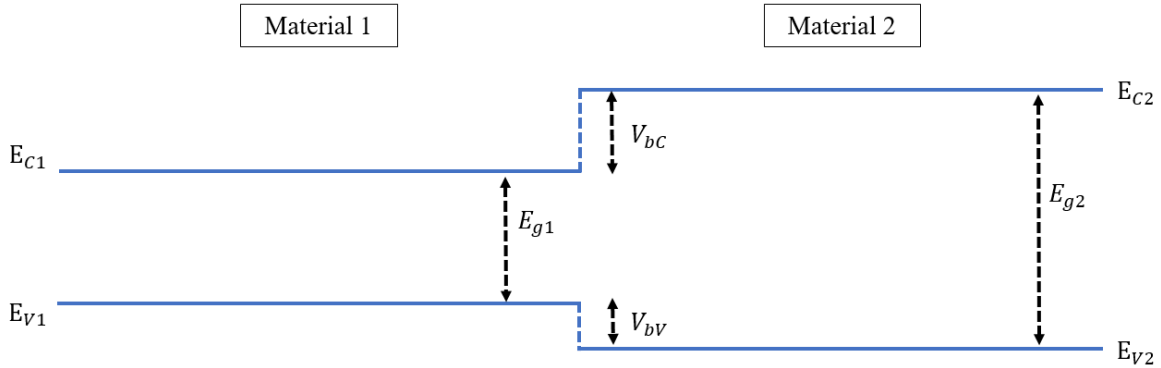


Figura 5.1.2: Diagrama de la unión de las bandas de valencia y de conducción en una heterounión.

Como se puede observar, no necesariamente las bandas del material 1 se alinean al centro del gap del segundo material, más bien, una porción de la diferencia de gap energético $\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1}$ forma una barrera de potencial V_{bC} en la banda de conducción y el resto conforma otra barrera de potencial V_{bV} para los huecos en la banda de valencia.

La cantidad que nos da esta proporción se conoce como *band-offset* y tiene un valor particular para cada par de materiales 1 y 2 que se consideren. De acuerdo a esto,

$$V_{bC} = Q_C(E_{g2} - E_{g1}) = Q_C \Delta E_g, \quad (5.1.1)$$

$$V_{bV} = Q_V(E_{g2} - E_{g1}) = Q_V \Delta E_g, \quad (5.1.2)$$

y se cumple que

$$Q_C + Q_V = 1. \quad (5.1.3)$$

Para un sistema conformado por arseniuro de galio (GaAs) y arseniuro de galio-aluminio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$),

es decir,

Material 1: GaAs, y Material 2: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,

es conocido que el sistema es descrito por un valor de band-offset de $Q_C = 0.69$ y $Q_V = 0.31$, esto quiere decir que la barrera para los electrones en la B.C. es más alta que la de los huecos en la B.V..

Ahora, si colocamos al mismo material 2 (o a otro igualmente compatible) del lado izquierdo del material 1 en la figura 5.1.2, el perfil de la B.C. que resulta corresponde a lo que en mecánica cuántica se denomina como *pozo de potencial de profundidad finita*. Un ejemplo de esto se muestra a continuación en la figura 5.1.3 donde nos enfocamos en los electrones de conducción de modo que por simplicidad denotamos $V_{bC} = V_b$.

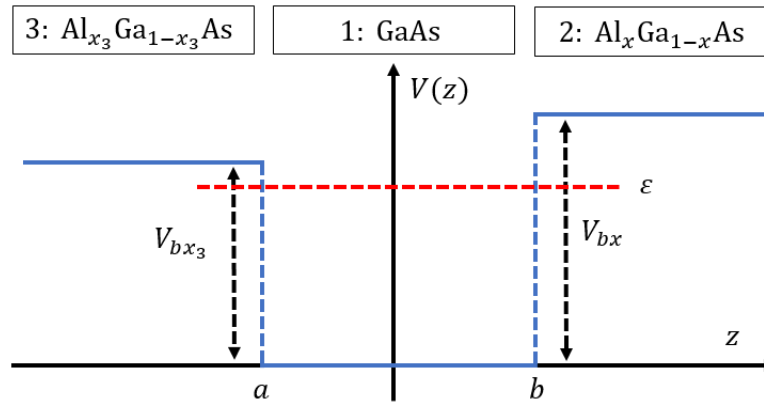


Figura 5.1.3: Pozo de potencial de profundidad finita formado por una heteroestructura compuesta por tres materiales de tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con distinta concentración de aluminio. En rojo se muestra un nivel de energía para el cual los portadores de carga resultan en un movimiento cuantizado.

El movimiento de los electrones de conducción con energía ε mayor que la energía del fondo del pozo en el material 1 y menor que el mínimo entre la altura de las barreras V_{bx} y V_{bx_3} , resulta estar *cuantizado*. De manera que existen solamente valores discretos de la energía ε para los cuales hay estados permitidos lo que produce *subbandas* dentro de la propia banda de conducción. Los niveles discretos de ε representan los mínimos energéticos de las subbandas en las que se desdobra la B.C. producto del confinamiento espacial de los electrones. El perfil de energía se extiende a lo largo de la dirección perpendicular a las superficies separadoras (que suelen llamarse intercaras o interfases).

5.2. Método de la función envolvente

Existe un modelo conocido como *aproximación de la función envolvente* [10], que nos permite estudiar estos estados de conducción sin necesidad de considerar el potencial periódico microscópico asociado a la red cristalina. Para dar cuenta del efecto de la red se emplea el concepto de *masa efectiva* descrito antes.

De modo que la ecuación satisfecha por esa función envolvente tiene exactamente la forma de la

ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z), \quad (5.2.1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los portadores de carga y los valores de la energía ε que resultan serán, precisamente los mínimos energéticos de las subbandas descritas antes.

En la ecuación (5.2.1), $V(z)$, es la función energía potencial representada en la figura 5.1.3, es decir,

$$V(z) = \begin{cases} V_{bx3} & z < a, \\ 0 & a \leq z \leq b, \\ V_{bx} & z > b, \end{cases} \quad (5.2.2)$$

pero resulta que la masa efectiva de los portadores de carga no es la misma en cada una de las 3 regiones de la heteroestructura. Es por este motivo que una descripción correcta de los estados electrónicos en la banda de conducción debe realizarse a través de una modificación de la ecuación (5.2.1). Esta es conocida como ecuación de BenDaniel-Duke [3], la cual tiene en cuenta la dependencia en la dirección espacial z de la función masa efectiva y se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} \right) + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z). \quad (5.2.3)$$

A diferencia de la ecuación (5.2.1) para la cual las condiciones de frontera en las intercaras $z = a$ y $z = b$ implican la continuidad de la función de onda envolvente y de su primera derivada en estos puntos; la ecuación de BenDaniel-Duke implica la continuidad de la función de onda envolvente y del cociente $\psi'(z)/m^*(z)$.

5.3. Masa efectiva en materiales con estructuras tipo zinc-blenda

Para semiconductores con estructura de zinc-blenda, como el caso de los materiales que estamos considerando, existe un modelo que describe el movimiento de los electrones y huecos con vectores de onda de Bloch en las proximidades del punto Γ de la ZB, incluyendo los efectos de la interacción espín-órbita. Este modelo se conoce como el modelo de Kane [13].

El modelo de Kane nos proporciona una expresión para la masa efectiva de los electrones en la B.C. en el punto $\vec{k} = \vec{0}$ la cual esta dada por (4.4.11). Se sabe que para que esta ecuación reproduzca los resultados experimentales medidos para arseniuro de galio-aluminio es necesario introducir un factor δ [15, 17], con lo cual nos queda la siguiente expresión

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \frac{2 E_P}{3 E_g} + \frac{1}{3} \frac{E_P}{E_g + \Delta} + \delta, \quad (5.3.1)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre, E_g es el gap del material en el punto Γ ; Δ es la energía de desdoblamiento de la banda de valencia (producto de la interacción espín-órbita) y E_P es un parámetro del modelo, conocido como *energía de Kane*, que se introduce fenomenológicamente con la intención

de que pueda determinarse por otras vías (tanto teóricas como experimentales). Para los semiconductores del grupo III-V como son los arseniuros, fosforos y antimoniuros de aluminio, galio e indio; este parámetro es conocido desde hace tiempo. Finalmente el parámetro δ se introduce en la expresión de Kane para reproducir medidas experimentales.

En general, suponiendo que en todo momento podemos considerar a $Q_c = 0.69$ para el band-offset de la banda de conducción (independientemente del valor de la fracción molar de aluminio, x), se tiene que estas energías pueden describirse por medio de las siguientes relaciones

$$E_g(x) = xE_{g(\text{AlAs})} + (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + bx(1-x), \quad (5.3.2)$$

$$E_P(x) = xE_{P(\text{AlAs})} + (1-x)E_{P(\text{GaAs})}, \quad (5.3.3)$$

$$\Delta(x) = x\Delta_{(\text{AlAs})} + (1-x)\Delta_{(\text{GaAs})}. \quad (5.3.4)$$

En la ecuación (5.3.2) el parámetro ‘b’ se conoce como *parámetro de arqueo* (del inglés *bowing parameter*) y para nuestras estructuras está determinado, de acuerdo con Vurgaftman et al. [20], por

$$b(x) = -0.127 + 1.310x \text{ en eV}, \quad (5.3.5)$$

este parámetro b es el que da cuenta de la desviación en el gap energético E_g de una relación lineal con la concentración de aluminio, x . Esa relación lineal, que suponemos válida para las otras dos cantidades E_P y Δ , corresponde a la forma general de la llamada *Ley de Vegard*, la cual es,

$$f(x) = xf_1 + (1-x)f_2. \quad (5.3.6)$$

Sustituyendo las expresiones (5.3.2)-(5.3.5) en la ecuación (5.3.1) obtenemos una expresión para la masa efectiva m^* en función de la concentración de aluminio x .

$$\frac{m_0}{m^*(x)} = 1 + \frac{2 E_P(x)}{3 E_g(x)} + \frac{1}{3} \frac{E_P(x)}{E_g(x) + \Delta(x)} + \delta(x), \quad (5.3.7)$$

donde el factor $\delta(x)$ esta dado por

$$\delta(x) = -3.93 + 0.488x + 4.93x^2. \quad (5.3.8)$$

5.4. Función masa efectiva dependiente de la posición

Supongamos que buscamos producir un perfil de potencial de barrera finita de la forma general siguiente

$$V(z) = \begin{cases} V(z) & a \leq z \leq b, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (5.4.1)$$

donde este potencial $V(z)$ tiene valor igual a cero en los puntos $z < a$ y $z > b$ así como un mínimo dentro del intervalo $a \leq z \leq b$.

Supongamos que tenemos una heterounión como se muestra a continuación en la figura 5.4.1.

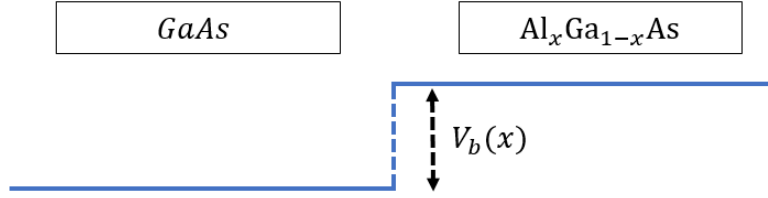


Figura 5.4.1: Heterounión hecha por arseniuro de galio fijo y un material $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$; la altura de la barrera de potencial V_b será función de la contracción de aluminio del material de la derecha, es decir, $V_b = V_b(x)$.

Aplicando, aplicando la ecuación del band-offset (5.1.1) a la situación mostrada antes, obtenemos

$$V_b(x) = Q_c[E_g(x) - E_{g(\text{GaAs})}]. \quad (5.4.2)$$

Incrementando escalonadamente la concentración de aluminio del material de la derecha, podemos crear un potencial (en la B.C.) de la forma que se muestra en la figura 5.4.2.

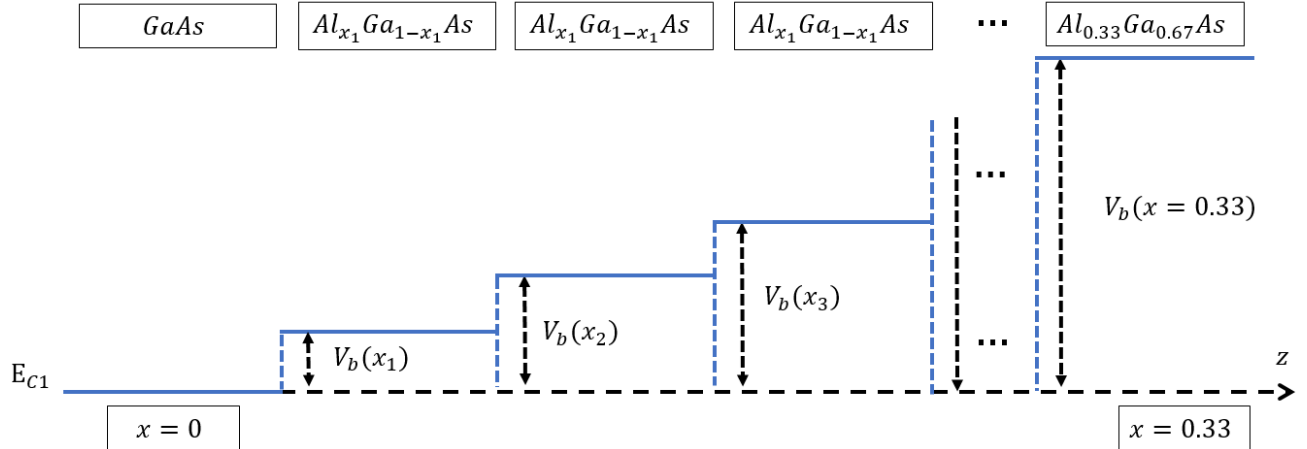


Figura 5.4.2: Forma general de construir un pozo de potencial (en la B.C.) de barrera finita.

Los autores Vurgaftman et al, presentan una expresión para el bowing parameter de aleaciones tipo AlGaAs de corrección para el gap de energético E_g en el punto Γ , es decir, E_g^Γ . El valor recomendado esta dado por (5.3.5); así que la ecuación (??) queda como

$$V_b^i(z) = Q_C \underbrace{[xE_{g(\text{AlAs})} + (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + -0.127x + 1.437x^2 - 1.310x^3 - E_{g(\text{GaAs})}]}_{=E_g(x)}. \quad (5.4.3)$$

Para cada punto z dentro del intervalo $a \leq z \leq b$, resolvemos esta ecuación para encontrar la concentración de aluminio del material que se necesita colocar en dicha región de la barrera. De las

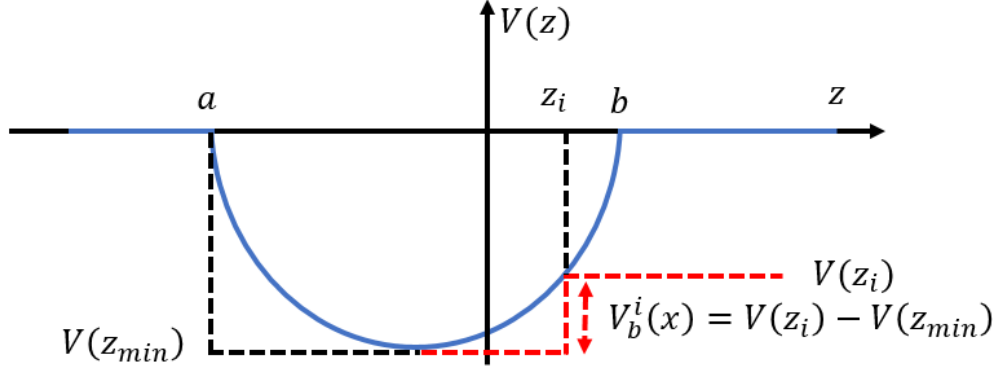


Figura 5.4.3: Determinación de la altura de la barrera a partir de la expresión analítica para el potencial $V(z)$ (5.4.1).

tres posibles soluciones elegimos la que se encuentre entre $x = 0$ hasta $x = 0.33$ en cada punto. Repitiendo este proceso encontramos la concentración de aluminio en distintos puntos z_i , con esta concentración de aluminio evaluamos la ecuación (5.3.7) y con este proceso construimos una función masa efectiva escalonada o constante a secciones. Si aproximamos esta como una función de masa efectiva constante, obtenemos que

$$m(z)^* = \begin{cases} m^*(z) & a \leq z \leq b, \\ m_B^* = \text{const} & z < a \text{ y } z > b, \end{cases} \quad (5.4.4)$$

En las las regiones $z < a$ y $z > b$ fijamos una concentración de aluminio $x = 0.33$. De manera que se mantiene una masa efectiva de la barrera denotada por m_B^* la cual es constante. El valor numérico de esta masa se determina en el apéndice D.

El motivo por el cual la fracción molar de aluminio que consideramos va desde $x = 0$ en el fondo del potencial (GaAs) hasta $x = 0.33$ en las barreras es que el arseniuro de aluminio (AlAs) es un semiconductor de gap indirecto. Esto quiere decir que, el mínimo de la banda de conducción cae en un punto \vec{k} (dentro de la zona de Brillouin) distinto al punto donde se encuentra el máximo de la banda de conducción. Por el contrario, el arseniuro de galio es gap directo; el punto donde se encuentra el máximo de la B.V. y el mínimo de la B.C. coincide con $\vec{k} = \vec{0}$ y es conocido como el punto Γ .

En resumen, consideramos que la fracción de aluminio de las aleaciones de tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ pueden llegar hasta un máximo en el cual no toda la aleación se vuelva de gap indirecto, esta fracción molar máxima será tomada como $x = 0.33$.

5.5. Soluciones del Hamiltoniano de BenDaniel-Duke

Por lo tanto, reducimos nuestro problema a buscar soluciones a la ecuación de Schrödinger con masa efectiva dependiente de la posición, ó ecuación de BenDaniel-Duke,

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{BDD}}(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z), \quad (5.5.1)$$

con un pozo cuántico de la forma y la masa efectiva dependiente de la posición de la forma

$$V(z) = \begin{cases} V(z) & a \leq z \leq b, \\ 0 & z < a \text{ y } z > b, \end{cases} \quad \text{y } m^*(z) = \begin{cases} m^*(z) & a \leq z \leq b, \\ m_B^* = \text{const} & z < a \text{ y } z > b, \end{cases} \quad (5.5.2)$$

Antes de buscar soluciones a la ecuación (5.5.1), conviene pasar a un sistema de unidades en el que no aparezcan constantes. El sistema que empleamos se conoce como *sistema de unidades atómicas efectivas* (Apéndice D).

La ecuación de BenDaniel-Duke adimensional, es la siguiente

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{BDD}} \psi(z) = -\frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + V(z) \psi(z) = \varepsilon \psi(z), \quad (5.5.3)$$

donde $m_B^* = \text{cte}$ es la masa efectiva de los portadores de carga en las barreras. Las unidades atómicas efectivas están dadas por:

$$\zeta = a_B^* z, \quad \bar{\varepsilon} = \text{Ry}^* \varepsilon, \quad \text{y} \quad \bar{V}(\zeta) = \text{Ry}^* V(\zeta), \quad (5.5.4)$$

donde ζ es la variable dimensional que medimos en metros y $\bar{\varepsilon}$ son las energías en unidades de eV. Los valores específicos de los parámetros a_B^* (radio de Bohr efectivo) y Ry^* (rydberg efectivo) están dados por (Apéndice D),

$$a_B^* = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_r}{m_B^*e^2} = (115.7605)a_0 = 6.1255 \text{ nm}, \quad (5.5.5)$$

$$\text{Ry}^* = \frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} = \frac{1}{(1384.3155)} \text{Ry} = 9.82435 \text{ meV},$$

El método *aproximado* que proponemos para buscar soluciones a la ecuación (5.5.3) se conoce como *método de Fourier* ó *método de diagonalización*. El método en realidad es exacto, pero implica una suma infinita que en la mayoría de los casos no se puede evaluar, por lo que se hace necesario finalizar la suma en algún número de términos finito; de ahí el carácter aproximado del método.

Supongamos que en el caso general la solución $\psi_\ell(z)$ se puede representar por un desarrollo de Fourier sobre una base ortonormal $\{|\phi_n(z)\rangle\}$,

$$\psi_\ell(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n\ell} |\phi_n(z)\rangle, \quad (5.5.6)$$

donde $c_{n\ell}$ son los coeficientes del desarrollo, y los subíndices se deben interpretar como la componente n -ésima del ℓ -ésimo autoestado con energía E_ℓ .

El conjunto ortonormal $\{|\phi_n(z)\rangle\}$ se elige por conveniencia, pero siempre teniendo en cuenta las características generales que los estados $\psi(z)$ deben tener. La base que elegimos debe formar una base

ortonormal en el espacio de Hilbert. Como el conjunto es ortonormal, se cumple que

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (5.5.7)$$

Ahora, sustituyendo la solución (5.5.6) en la ecuación (5.5.3), posteriormente efectuando el producto interno con un elemento arbitrario de la base $\langle \phi_m |$ y finalmente, aplicando la condición de ortonormalidad, llegamos a la expresión en la forma

$$\sum_n c_n \left\{ - \langle \phi_m | \frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) | \phi_n \rangle + \langle \phi_m | V(z) | \phi_n \rangle \right\} - \sum_n c_n \varepsilon_\ell \delta_{mn} = 0,$$

definimos

$$H_{mn}^{\text{BDD}} := H_{mn} = T_{mn} + V_{mn} = - \langle \phi_m | \frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m(z)} \frac{d}{dz} \right) | \phi_n \rangle + \langle \phi_m | V(z) | \phi_n \rangle, \quad (5.5.8)$$

esta cantidad representa a la llamada *Matriz Hamiltoniana de BenDaniel-Duke*, en unidades atómicas efectivas. Entonces, la ecuación de BenDaniel-Duke nos quedará como

$$\sum_n c_n [H_{mn} - \varepsilon_\ell \delta_{mn}] = 0. \quad (5.5.9)$$

Claramente, estamos buscando soluciones distintas de cero, por consiguiente, el determinante del sistema de ecuaciones debe anularse. De modo tal que nos encontramos con un problema característico (o un problema de valores y vectores propios); cuando se resuelve este problema a partir de

$$\text{Det}[\hat{\mathcal{H}} - \varepsilon_\ell \mathcal{I}] = 0. \quad (5.5.10)$$

La representación matricial del problema es la siguiente,

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots \\ H_{21} & H_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\ell} \\ c_{2\ell} \\ \vdots \end{pmatrix} = \varepsilon_\ell \begin{pmatrix} c_{1\ell} \\ c_{2\ell} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (5.5.11)$$

Resolver este problema de autovalores, es equivalente a resolver la ecuación de Schrödinger (5.5.3). Sin embargo, resolver (5.5.11) consiste en diagonalizar una matriz de infinito por infinito. Por este motivo, el problema práctico consiste en finalizar el desarrollo (5.5.4) hasta un cierto número finito $N_{\text{máx}} := N$, entre mayor sea este número, el método será más aproximado a la solución real.

Con esto en mente, nuestro trabajo consiste en diagonalizar la matriz Hamiltoniana de BenDaniel-Duke, de dimensiones finitas. Entonces, la función de onda del ℓ -ésimo estado del pozo de potencial se obtiene como simplemente

$$\psi_\ell(z) = \sum_{n=0}^N c_{n\ell} |\phi_n(z)\rangle. \quad (5.5.12)$$

Los elementos de la matriz Hamiltoniana de BenDaniel-Duke están dados por

$$T_{mn} = -\langle \phi_m | \frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m(z)} \frac{d}{dz} \right) | \phi_n \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z) \frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \phi_n(z) dz, \quad (5.5.13)$$

$$V_{mn} = \langle \phi_m | V(z) | \phi_n \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z) V(z) \phi_n(z) dz, \quad (5.5.14)$$

podemos reescribir el término de energía cinética T_{mn} dado por (5.5.13) como

$$T_{mn} = - \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z) \frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} (\phi_n(z)) dz + \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z) \frac{m_B^*}{(m^*(z))^2} \frac{d}{dz} (m^*(z)) \phi_n(z) dz. \quad (5.5.15)$$

Dado que los pozos de potencial de barrera finita que estudiaremos tienen un mínimo, sabemos que cerca de este punto la expresión para el potencial puede desarrollarse en una serie como

$$V(z) = \beta^2 (z - z_{min})^2 \quad \text{para } z \in (z_{min} - \delta, z_{min} + \delta), \quad (5.5.16)$$

Por lo tanto, tomamos como base de soluciones ortonormales y cuadro integrable, a la base de soluciones del oscilador armónico (consultar el apéndice D.4), las cuales son de la forma

$$\{\phi_n(z)\} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!}} H_n(z) e^{-z^2} : n \in \mathbb{N}_0 \right\}, \quad (5.5.17)$$

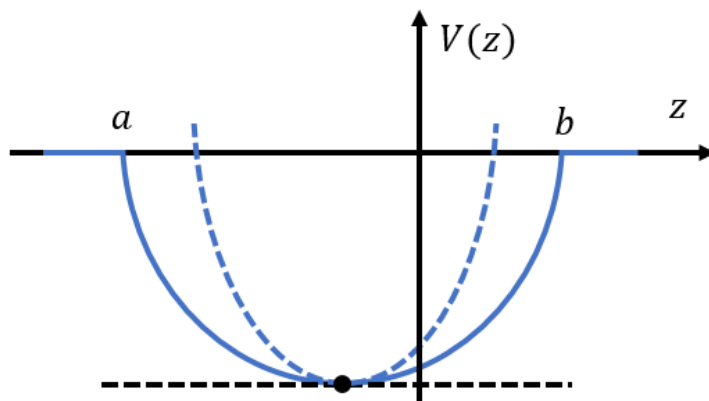


Figura 5.5.1: Desarrollo en serie de potencias de Taylor de un potencial arbitrario centrado en el mínimo. La línea punteada representa el potencial de oscilador armónico.

Capítulo 6

Potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci

Definimos los potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci empleando las *funciones hiperbólicas de Fibonacci* y *funciones hiperbólicas generalizadas de Fibonacci* [9] ajustadas a perfil finito.

6.1. Definición de los pozos de potencial de Fibonacci y k-Fibonacci

En primer lugar, utilizando la definición de la función *coseno hiperbólico de tipo Fibonacci* (Apéndice F),

$$\text{cFh}(z) := \frac{\phi^{2z+1} + \phi^{-(2z+1)}}{\sqrt{5}}, \quad (6.1.1)$$

en donde ϕ se conoce como *proporción áurea* y tiene un valor de,

$$\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad (6.1.2)$$

aclaremos que así como existe la función coseno hiperbólico de Fibonacci, existe una función *seno hiperbólico de Fibonacci*, $\text{sFh}(z)$, sin embargo, esta función no puede emplearse para modelar ningún pozo de potencial de barrera finita (Apéndice F).

Podemos extender la definición de las funciones hiperbólicas de Fibonacci a las *funciones hiperbólicas de tipo k-Fibonacci* como se muestra a continuación,

$$\text{cF}_k\text{h}(z) := \frac{\sigma_k^{2z+1} - \sigma_k^{-(2z+1)}}{\sqrt{k^2 + 4}}, \quad (6.1.3)$$

donde σ_k es alguna raíz positiva de la ecuación característica asociada a la secuencia de k-Fibonacci.

Entonces σ_k esta determinada por,

$$\sigma_k = \frac{k + \sqrt{k^2 + 4}}{2}, \quad \text{con } k \text{ entero,} \quad (6.1.4)$$

este parámetro σ_k , cumple con la propiedad $\sigma_k + \sigma_k^{-1} = \sqrt{k^2 + 4}$, además con $k = 1$ recuperamos la proporción áurea.

Con el objetivo de que la función coseno hiperbólico de tipo k-Fibonacci sea simétrica con respecto al eje $z = 0$, realizamos un cambio de variables $t \rightarrow 2z + 1$, para finalmente obtener la definición (regresamos $t \rightarrow z$)

$$\text{cF}_k\text{h}(z) = \frac{\sigma_k^z - \sigma_k^{-z}}{\sigma_k + \sigma_k^{-1}}, \quad (6.1.5)$$

Con esto en mente, definimos lo llamamos pozos de potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci:

■ **Potencial de Fibonacci:**

$$V_F(z) := \begin{cases} \text{cFh}(z) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cFh}(z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (6.1.6)$$

donde, recordemos que $\text{cFh}(z)$ esta definida como,

$$\text{cFh}(z) = \frac{\phi^{2z+1} + \phi^{-(2z+1)}}{\sqrt{5}}, \quad (6.1.7)$$

Observemos que hemos definido este potencial de modo que es simétrico con respecto a $z = -1/2$, esto lo hemos hecho a propósito para comparar los resultados con los potenciales simétricos.

■ **Definición del potencial de k-Fibonacci:**

$$V_{k-F}(z) := \begin{cases} \text{cF}_k\text{h}(z) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k\text{h}(z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (6.1.8)$$

donde la función $\text{cF}_k\text{h}(z)$ esta definida como,

$$\text{cF}_k\text{h}(z) = \frac{\sigma_k^z + \sigma_k^{-z}}{\sigma_k + \sigma_k^{-1}}, \quad (6.1.9)$$

Para modelar pozos de potencial de barrera finita con las funciones $\text{cFh}(z)$ y $\text{cF}_k\text{h}(z)$, introducimos el parámetro V_{par} , este será ajustado de modo que la altura máxima del potencial sea de 41.2244 Ry* (rydberg efectivos, apéndice D).

Capítulo 7

Respuesta óptica en sistemas de baja dimensión

Una vez explicada la metodología necesaria para desarrollar el cálculo de autoestados en distintos pozos de potencial. Vamos a explicar el origen de ciertas fórmulas que nos servirán para calcular el coeficiente de absorción óptica de las heteroestructuras bajo estudio.

7.1. Óptica no lineal

En general, en un medio dieléctrico con una densidad no nula de momento dipolar dieléctrico, la respuesta de polarización esta dada por

$$\vec{P}(t) = \epsilon_0 \chi(t) \vec{E}(t), \quad (7.1.1)$$

donde ϵ_0 es la permitividad dieléctrica del vacío, $\vec{E}(t)$ es el campo eléctrico y $\chi(t)$ es el tensor de la susceptibilidad dieléctrica del medio.

En la óptica no lineal, la respuesta óptica se puede describir generalizando la expresión (7.1.1), escribiendo la polarización $\hat{P}(t)$ como una serie de potencias de la intensidad del campo eléctrico,

$$\hat{P}(t) = \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} \tilde{E}(t) + \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t) + \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t) + \dots \right) = \tilde{P}^{(1)}(t) + \tilde{P}^{(2)}(t) + \tilde{P}^{(3)}(t) \dots, \quad (7.1.2)$$

las cantidades $\chi^{(2)}$ y $\chi^{(3)}$ se conocen como susceptibilidades ópticas no lineales de segundo y tercer orden, respectivamente. Donde suponemos que los campos $\tilde{P}(t)$ y $\tilde{E}(t)$ son magnitudes escalares y que la polarización en un instante de tiempo t depende solamente del valor instantáneo de la intensidad del campo eléctrico, ω . Esto implica que el medio es no dispersivo (sin pérdidas); pero lo que ocurre es que, en general, las susceptibilidades no lineales son también funciones de las frecuencias de los campos aplicados.

Entonces llamaremos a $\tilde{P}^{(2)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t)$ como la polarización no lineal de segundo orden y a $\tilde{P}^{(3)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t)$ como la polarización no lineal de tercer orden. Los procesos físicos que ocurren

como resultado de la polarización de segundo orden $\tilde{P}^{(2)}$ tienden a ser distintos de aquellos que ocurren como resultado de la polarización de tercer orden, $\tilde{P}^{(3)}(t)$. Además las interacciones ópticas no lineales de segundo orden pueden ocurrir únicamente en cristales no centrosimétricos, es decir, en cristales que no tienen simetría de inversión. Como los líquidos, gases, sólidos amorfos (vidrio, por ejemplo) y muchos otros cristales tienen este tipo de simetría, $\chi^{(2)}$ se anula idénticamente en ellos, y por consecuencia esos materiales no pueden producir interacciones ópticas no lineales de segundo orden. Por otra parte, las interacciones ópticas no lineales de tercer orden (descritas por la susceptibilidad $\chi^{(3)}$) pueden ocurrir tanto en medios centrosimétricos como no centrosimétricos.

En cuanto a orden de magnitud, se tiene que, para la materia condensada $\chi^{(1)}$ es del orden de la unidad. Por otra parte, se encuentra que $\chi^{(2)} \approx (4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^4 / m^2 e^5$ y $\chi^{(3)} \approx (4\pi\epsilon_0)^6 \hbar^8 / m^4 e^{10}$ [4].

Ahora, recordando que nosotros hemos planteado que el campo eléctrico de la señal que incide sobre nuestro sistema (digamos, un haz de luz láser) se representa como

$$\tilde{E}(t) = E e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad (7.1.3)$$

para la polarizabilidad de segundo orden $\tilde{P}^{(2)} = \epsilon_0 \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t)$ tenemos:

$$\tilde{P}^{(2)}(t) = 2\epsilon_0 \chi^{(2)} E E^* + (\epsilon_0 \chi^{(2)}(\omega) e^{-i2\omega t} + \text{c.c.}). \quad (7.1.4)$$

Vemos que la polarización de segundo orden consiste de una contribución de frecuencia cero, ó DC (primer término) y de una contribución a frecuencia 2ω . La primera contribución lleva a un proceso en el que no se genera radiación electromagnética, sino a un proceso conocido como *rectificación óptica*, en el cual se crea un campo eléctrico estático a través del cristal no lineal. Por otra parte, el segundo término no conduce a la generación de radiación con una frecuencia doble a la incidente ó, como también se llama, de segundo armónico.

7.2. Modelo de Paspalakis Boviatsis y Baskoutas

El modelo propuesto por los autores Paspalakis et al [16] consiste en considerar el efecto de un campo eléctrico monocromático de la forma:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t), \quad (7.2.1)$$

donde E_0 es la amplitud de campo eléctrico y ω es la frecuencia angular del mismo. Dentro de la aproximación de un sistema de dos niveles, la dinámica del sistema bajo la interacción de un campo electromagnético se modela por el Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = [\hbar\omega_1 - \mu_{11}E(t)]|1\rangle\langle 1| + [\hbar\omega_2 - \mu_{22}E(t)]|2\rangle\langle 2| - \mu_{12}E(t)(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|), \quad (7.2.2)$$

donde $|1\rangle$ y $|2\rangle$ representan los estados inicial y final respectivamente, cada uno de ellos con energías $\hbar\omega_1$ y $\hbar\omega_2$. Además se considera que, usando la aproximación dipolar eléctrica, la parte de interacción del hamiltoniano (7.2.2) implica asumir la hermiticidad a través de tomar $\mu_{12} = \mu_{21}$.

Las ecuaciones de movimiento a resolver para los elementos de la matriz densidad son:

$$i\hbar \frac{d\rho_{12}(t)}{dt} = [\hbar(\omega_1 - \omega_2) - (\mu_{11} - \mu_{22})E(t)]\rho_{12}(t) - \mu_{12}E(t)\Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2}\rho_{12}(t) \quad (7.2.3)$$

$$i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} = 2\mu_{12}E(t)[\rho_{21}(t) - \rho_{12}(t)] - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1] \quad (7.2.4)$$

donde se ha tenido en cuenta que $\Delta(t) = \rho_{22}(t) - \rho_{11}(t)$; $\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$ y que $\rho_{11}(t) + \rho_{22}(t)$ por la normalización de la matriz densidad $\hat{\rho}$; además de que $\rho_{nm}(t) = \langle n|\hat{\rho}(t)|m\rangle$ denotan los elementos de la propia matriz densidad.

Seguimos los pasos detallados en el apéndice E para dar soluciones al sistema de ecuaciones de movimiento (7.2.3) y (7.2.4).

Finalmente es conocido que el coeficiente de absorción óptica y el cambio del índice de refracción se obtienen en términos de la susceptibilidad, como

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega_{21}}{nc} \text{Im}[\chi(\omega)]. \quad (7.2.5)$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2} \text{Re}[\chi(\omega)]. \quad (7.2.6)$$

En nuestro problema, estas expresiones adquieren la forma final siguiente

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega_{21}}{nc} \text{Im}[\chi(\omega)] = \frac{\omega_{21}N\mu_{12}^2T_2}{\epsilon_0\hbar nc} \frac{\left| J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right)^2 - J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right)^2 \right|}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2T_1T_2E_0^2/\hbar^2}, \quad (7.2.7)$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2} \text{Re}[\chi(\omega)] = -\frac{N\mu_{12}^2T_2^2(\omega_{21} - \omega)}{2\epsilon_0\hbar n^2} \frac{\left[J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) + J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) \right]^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2T_1T_2E_0^2/\hbar^2}, \quad (7.2.8)$$

donde $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$, T_1 y T_2 denotan los tiempos de relajación de cada estado, E_0 es la amplitud de campo eléctrico incidente, N es la densidad volumétrica de electrones, n es el índice de refracción aparente y aparecen las funciones de Bessel de primer tipo J_0 y J_2 . Además, se define

$$\bar{\mu}_{12} = \mu_{12} \left[J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) + J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) \right]. \quad (7.2.9)$$

Capítulo 8

Resultados

Comenzamos por mostrar las funciones de masa efectiva dependiente de la posición de distintas heteroestructuras así como los niveles energéticos determinados por el método de Fourier.

Trabajamos en el sistema de unidades atómicas efectivas de la forma,

$$\zeta = a_B^* z, \quad \bar{\varepsilon} = \text{Ry}^* \varepsilon, \quad \text{y} \quad \bar{V}(\zeta) = \text{Ry}^* V(\zeta), \quad (8.0.1)$$

donde ζ es la variable con dimensiones de longitud mientras que $\bar{\varepsilon}$ y $\bar{V}(\zeta)$ son las variables con unidades de energía. Los valores específicos de los parámetros a_B^* (radio de Bohr efectivo) y Ry^* (rydberg efectivo) están dados por (apéndice D),

$$\begin{aligned} a_B^* &= \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_r}{m_B^*e^2} = (115.7605)a_0 = 6.1255 \text{ nm}, \\ \text{Ry}^* &= \frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} = \frac{1}{(1384.3155)}\text{Ry} = 9.82435 \text{ meV}, \end{aligned} \quad (8.0.2)$$

8.1. Potencial de Fibonacci

En primer lugar, definimos nuestro pozo de potencial de Fibonacci con una pequeña modificación respecto a la ecuación (6.1.6),

$$V_F(\alpha, z) := \begin{cases} \text{cFh}(\alpha, z) - V_{\text{par}} & \text{Si } \text{cFh}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{Cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.1.1)$$

introduciendo un factor α que aparece en la función $\text{cFh}(z)$ como,

$$\text{cFh}(\alpha, z) = \frac{\phi^{2\alpha z+1} + \phi^{-(2\alpha z+1)}}{\sqrt{5}}, \quad (8.1.2)$$

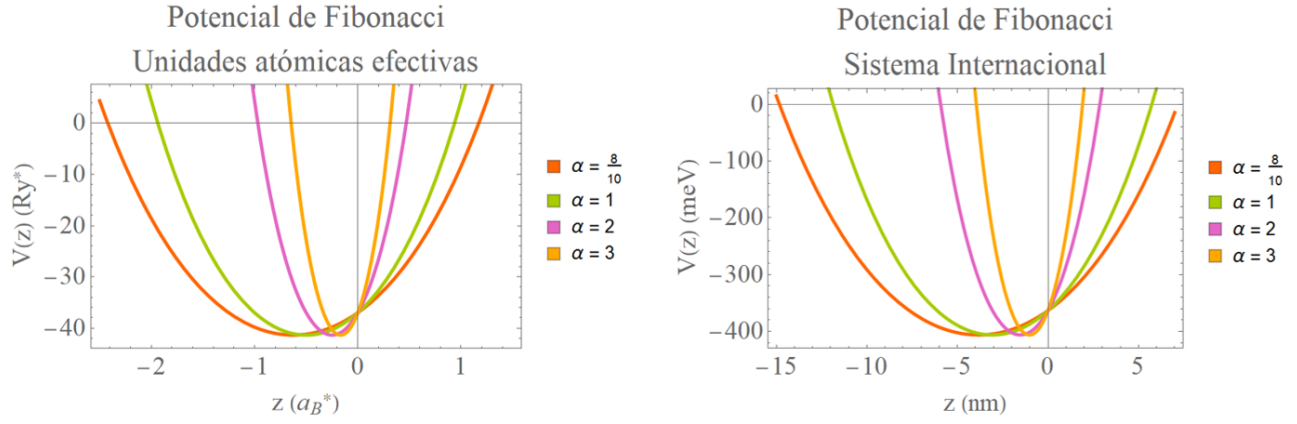


Figura 8.1.1: Potencial de fibonacci definido por (8.1.1), diagrama con distintos parámetros α y con $V_{\text{par}} = 769.791$ meV constante en todos los casos.

El valor del parámetro V_{par} que aparece en (8.1.1) que ajusta la profundidad del pozo es

$$V_{\text{par}} = 769.791 \text{ meV.} \quad (8.1.3)$$

Mientras que el espesor del potencial para distintos valores α son los siguientes,

$$\begin{aligned} \alpha = 1 &\Rightarrow D = 2.87312 a_B^* = 17.5996 \text{ nm,} \\ \alpha = 2 &\Rightarrow D = 1.43656 a_B^* = 8.79979 \text{ nm,} \\ \alpha = 3 &\Rightarrow D = 0.957706 a_B^* = 5.86653 \text{ nm.} \end{aligned} \quad (8.1.4)$$

8.1.1. Potencial Fibonacci con $\alpha = 1$

Comenzamos por considerar el caso $\alpha = 1$, en esta situación encontramos la concentración de aluminio, la masa efectiva dependiente de la posición, ver la figura 8.1.2.

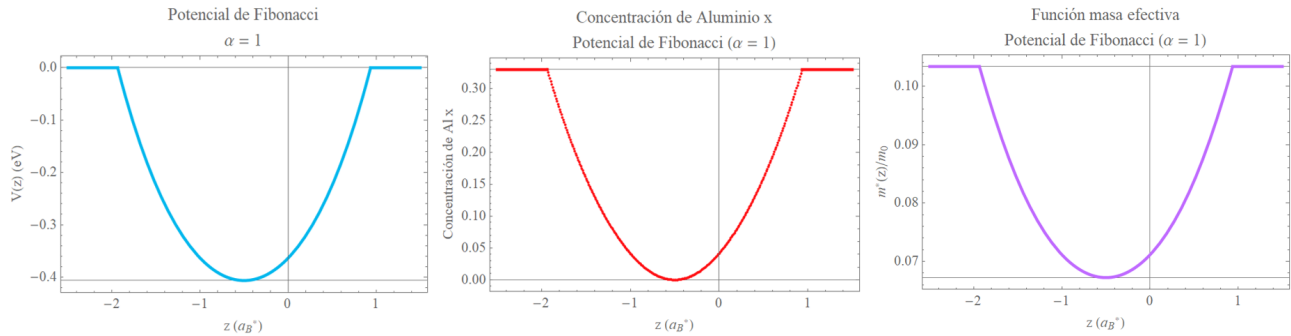


Figura 8.1.2: Potencial de Fibonacci $\alpha = 3$. En rojo se muestra la concentración de aluminio y de morado tenemos la función masa efectiva dependiente de la posición.

Realizando un desarrollo en series de los primeros 70 elementos en la base del oscilador armónico,

encontramos que el pozo de potencial de Fibonacci con $\alpha = 1$ tiene un total de 4 estados con energías

$$\varepsilon_1 = -357.473 \text{ meV}, \quad \varepsilon_2 = -256.337 \text{ meV}, \quad \varepsilon_3 = -155.719 \text{ meV} \text{ y } \varepsilon_4 = -58.8169 \text{ meV}, \quad (8.1.5)$$

el diagrama de los autoestados y niveles permitidos en cada situación; aparecen en la figura 8.1.3.

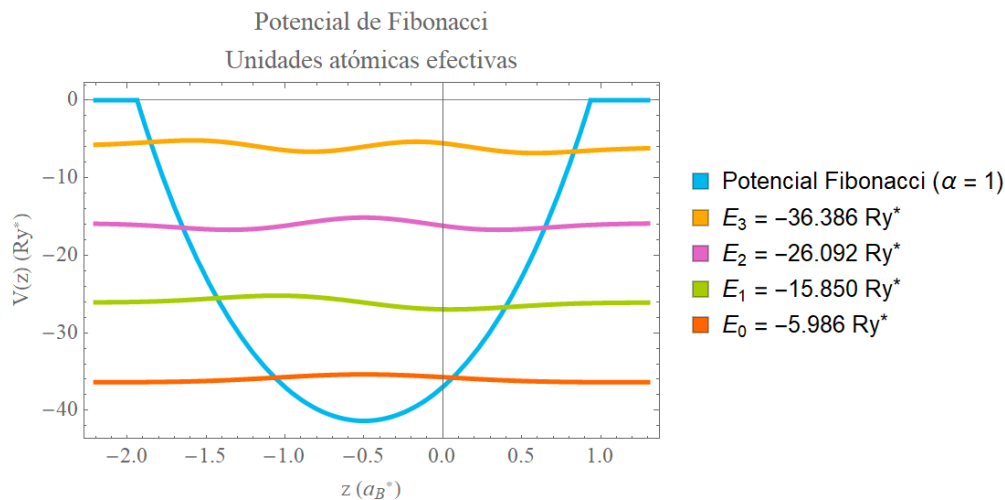


Figura 8.1.3: Estados y energías del pozo de potencial de Fibonacci con $\alpha = 1$.

por último, mostramos el comportamiento de la densidad de probabilidad de cada uno los estados en la figura 8.1.4.

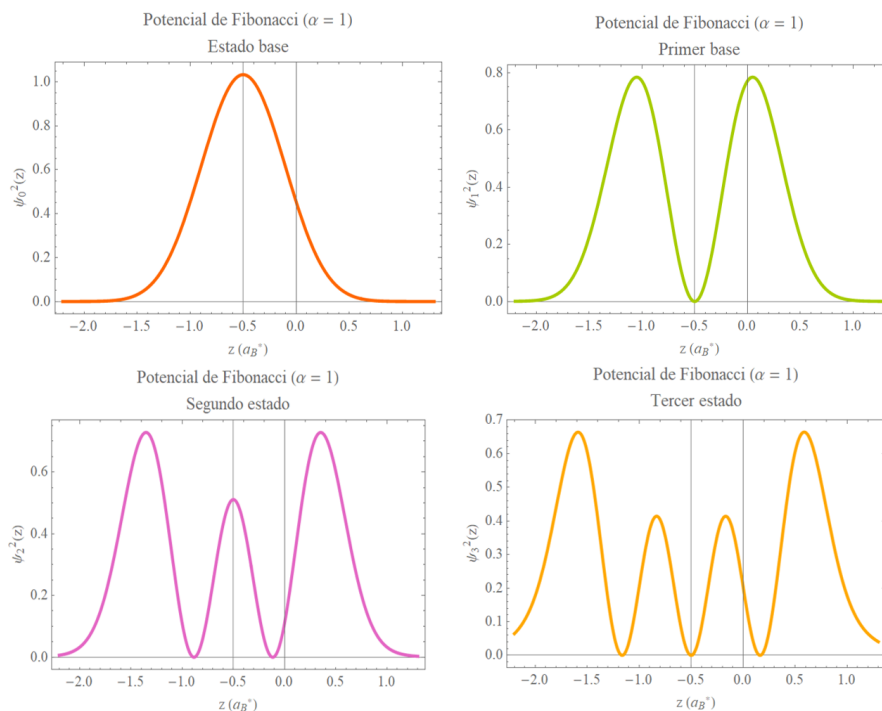


Figura 8.1.4: Densidad de probabilidad para los estados del pozo de potencial de Fibonacci con $\alpha = 1$.

8.1.2. Potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$

Ahora para el potencial de Fibonacci con el mismo parámetro $V_{\text{par}} = 78.35 \text{ Ry}^*$, pero ahora con $\alpha = 2$, es decir,

$$V_{\text{F}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\phi^{2\alpha+1} + \phi^{-(2\alpha z+1)} \right) - V_{\text{par}} & \text{Si } \text{cFh}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{Cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.1.6)$$

para este potencial encontramos la siguiente concentración de aluminio y la siguiente función de masa efectiva dependiente de la posición que incluimos como figura 8.1.5.

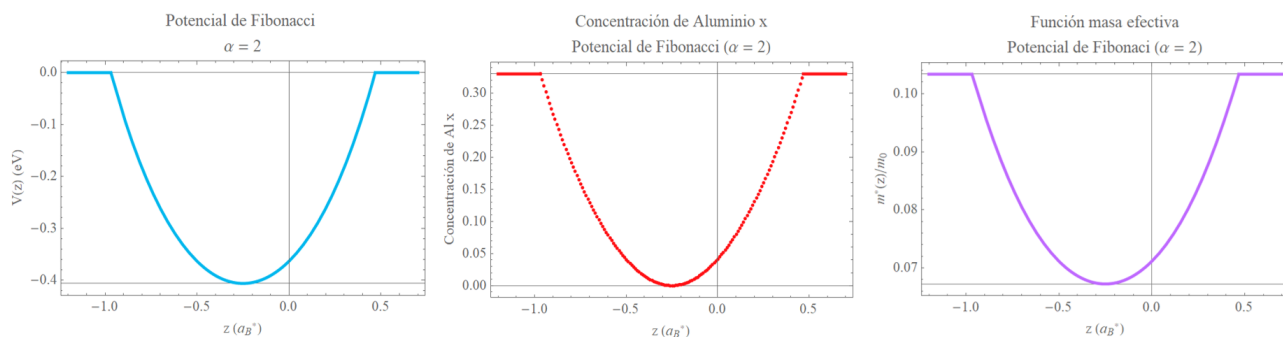


Figura 8.1.5: Pozo de potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$. En rojo tenemos su respectiva concentración de aluminio necesaria para formar la heteroestructura y del lado derecho (en morado) su función de masa efectiva.

Los estados de este perfil de potencial se muestran en la figura 8.1.6.

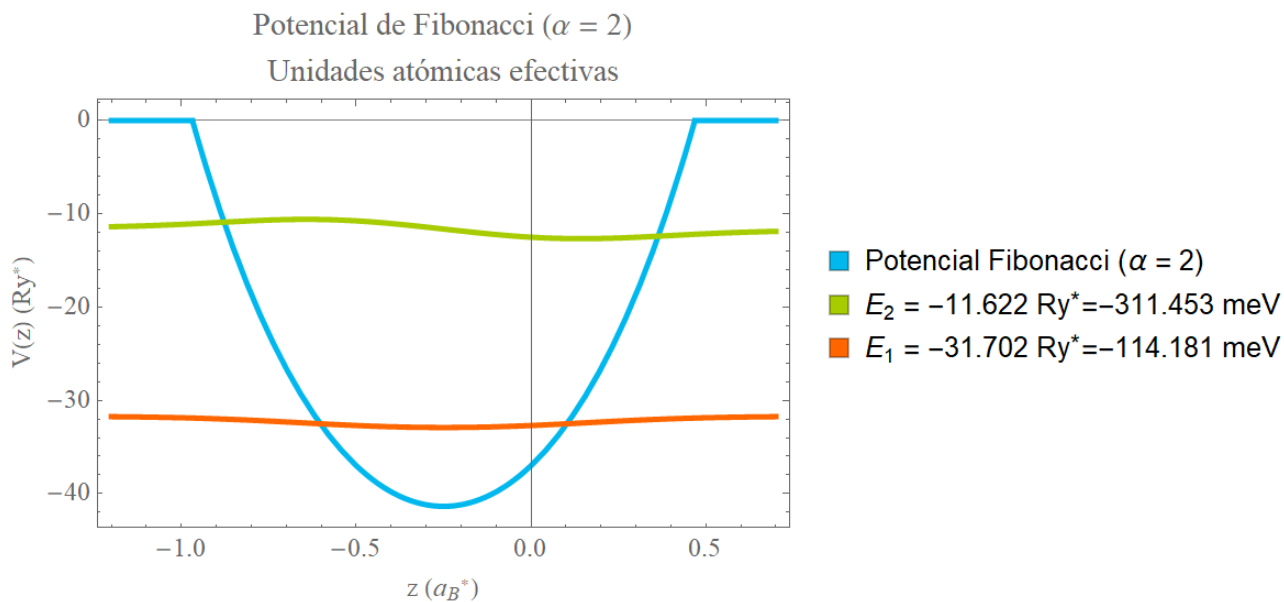


Figura 8.1.6: Estados del pozo de potencial Fibonacci con $\alpha = 2$. Del lado derecho tenemos el valor de las energías en unidades atómicas efectivas.

Cada uno de los dos estados ahí mostrados tienen una energía dada por

$$\varepsilon_1 = -311.454 \text{ meV}, \text{ y } \varepsilon_2 = -114.181 \text{ meV}, \quad (8.1.7)$$

de modo que bajo estos parámetros, el potencial de Fibonacci genera un sistema de dos niveles, la densidad de probabilidad de ambos estados se muestra a continuación en la figura 8.1.7.

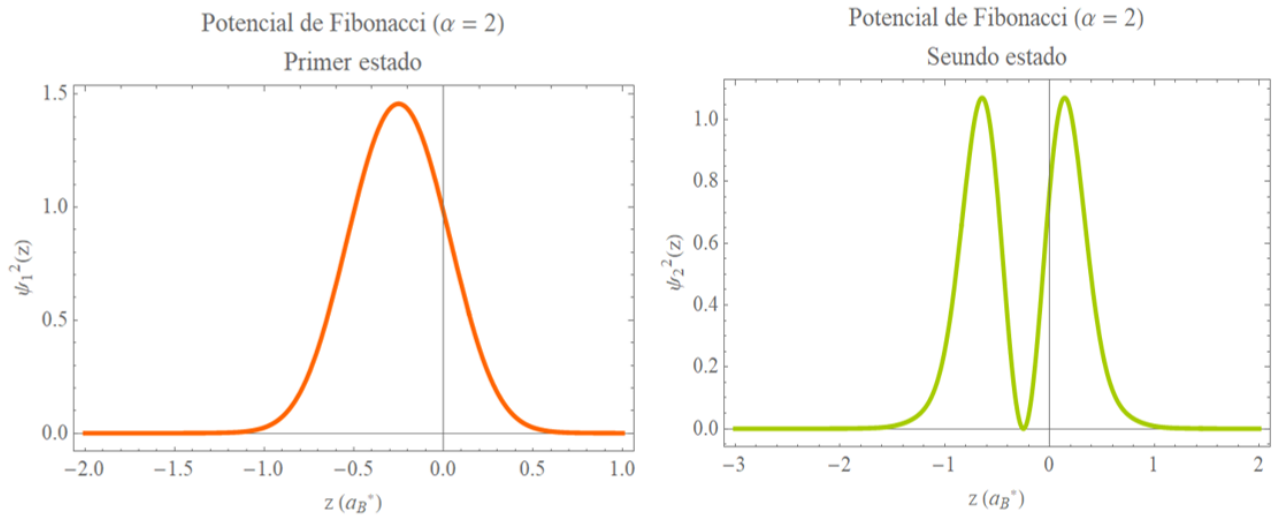


Figura 8.1.7: Densidad de probabilidad de los dos estados correspondientes al pozo de potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$.

8.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$

Ahora, el pozo de potencial de k-Fibonacci se define como (6.1.8),

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) - V_{\text{par}} & \text{Si } \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{Cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.2.1)$$

donde el parámetro α nos permite controlar el ancho el pozo de potencial y aparece como sigue:

$$\text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) = \frac{\sigma_k^{\alpha z} + \sigma_k^{-\alpha z}}{\sigma_k + \sigma_k^{-1}}, \quad \text{con } \sigma_k = \frac{k + \sqrt{k^2 + 4}}{2}. \quad (8.2.2)$$

El potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 1$, cumple la ecuación:

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{5}} (\sigma_1^{\alpha z} + \sigma_1^{-\alpha z}) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.2.3)$$

en donde el valor de $\sigma_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \phi$. Con estos datos, el parámetro V_{par} que mejor ajusta a nuestros requerimientos cuando $k = 1$ tiene un valor de,

$$V_{\text{par}} = 769.775 \text{ meV}, \quad (8.2.4)$$

Si graficamos la expresión (8.2.3) para distintos valores del parámetro α obtenemos la figura 8.2.1.

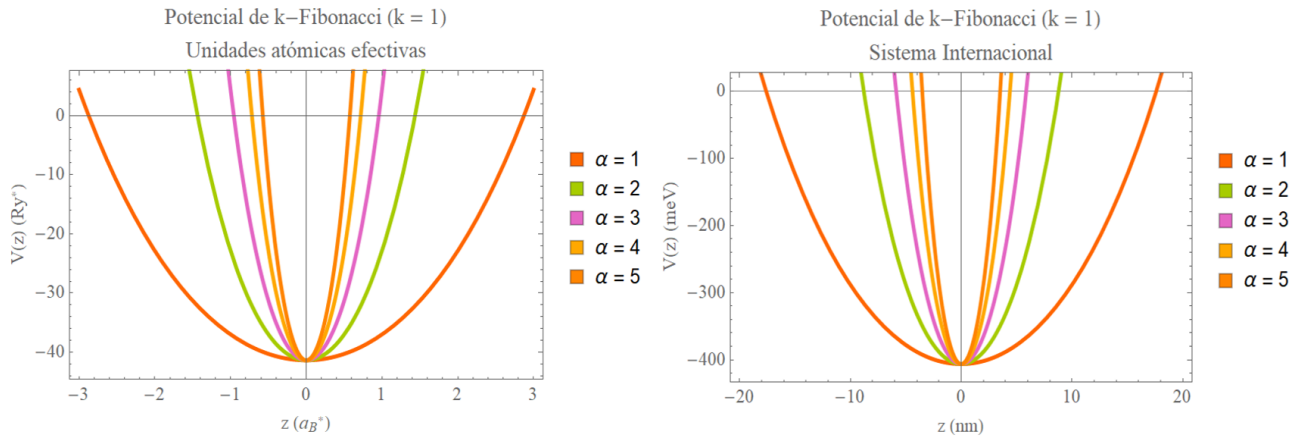


Figura 8.2.1: Pozo de potencial k-Fibonacci (con $k = 1$). Del lado izquierdo corresponde con el potencial en unidades atómicas efectivas y el lado derecho con el sistema internacional de unidades.

En ambos casos tenemos distintos valores de α .

En el caso en que $k = 1$ y V_{par} tenga el valor (8.2.4); encontramos que para los distintos valores de

α tenemos los siguientes espesores para el potencial,

$$\begin{aligned}
 \alpha = 1 &\Rightarrow D = 5.74614 a_B^* = 35.1986 \text{ nm}, \\
 \alpha = 2 &\Rightarrow D = 2.87307 a_B^* = 17.5993 \text{ nm}, \\
 \alpha = 3 &\Rightarrow D = 1.91538 a_B^* = 11.7329 \text{ nm}, \\
 \alpha = 4 &\Rightarrow D = 1.43653 a_B^* = 8.79964 \text{ nm}, \\
 \alpha = 5 &\Rightarrow D = 1.14923 a_B^* = 7.03971 \text{ nm}.
 \end{aligned}
 \tag{8.2.5}$$

8.2.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 3$

Los casos con $\alpha = 1$ y $\alpha = 2$ resultan con un espesor mayor a 10 nm por lo cual descartamos estas posibilidades; ya que estamos interesados en propiedades cuánticas producidas por el confinamiento espacial de los electrones de conducción.

Cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger con masa dependiente de la posición para el potencial (8.2.4) con un desarrollo en serie de los primeros 70 términos de la base del oscilador armónico, obtenemos los tres estados de la figura 8.2.2. Además, encontramos que las energías de los tres estados (correspondientes al pozo de potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 2$) son

$$\varepsilon_1 = -334.058 \text{ meV}, \varepsilon_2 = -182.903 \text{ meV}, \text{ y } \varepsilon_3 = -42.7616 \text{ meV}.
 \tag{8.2.6}$$

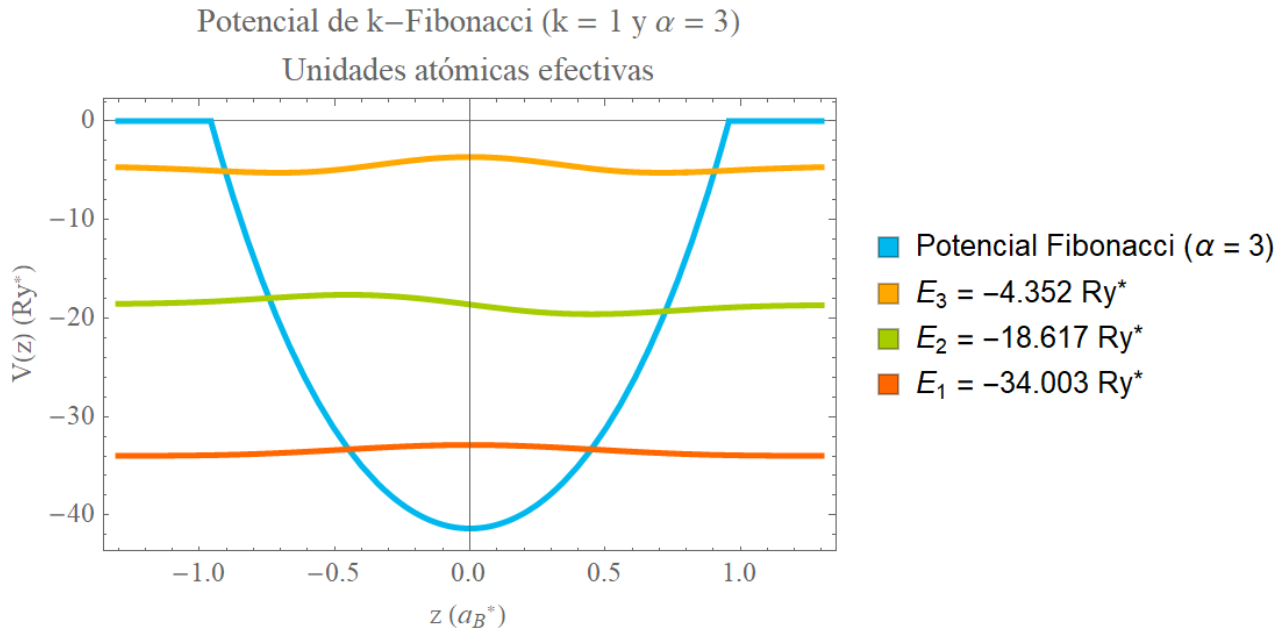


Figura 8.2.2: Pozo de potencial k-Fibonacci, con $k = 1$ y sus correspondientes autoestados determinados por el método de Fourier con 70 términos en la base. En unidades atómicas efectivas.

Mientras que el gráfico de la concentración de aluminio necesaria para formar esta heteroestructura y el perfil de la función masa efectiva se muestran a continuación en la figura 8.2.3.

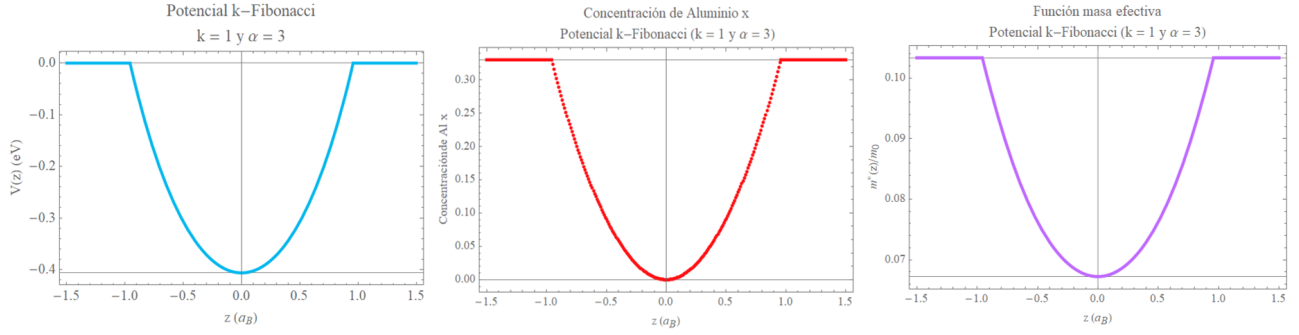


Figura 8.2.3: En azul corresponde al potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 3$, en rojo se representa la concentración de aluminio y en morado se corresponde con la función de masa efectiva dependiente de la posición asociada a tal potencial.

8.2.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 4$

Si ahora consideramos el parámetro $\alpha = 4$, manteniendo $V_{\text{par}} = 769.775$ meV. En este caso, el perfil de potencial se define como

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\sigma_1^{4z} + \sigma_1^{-4z} \right) & \text{Si } cF_k h(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{Cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.2.7)$$

con $\sigma_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \phi$.

En primer lugar encontramos la siguiente concentración de aluminio y la función masa efectiva que aparecen en la figura 8.2.4.

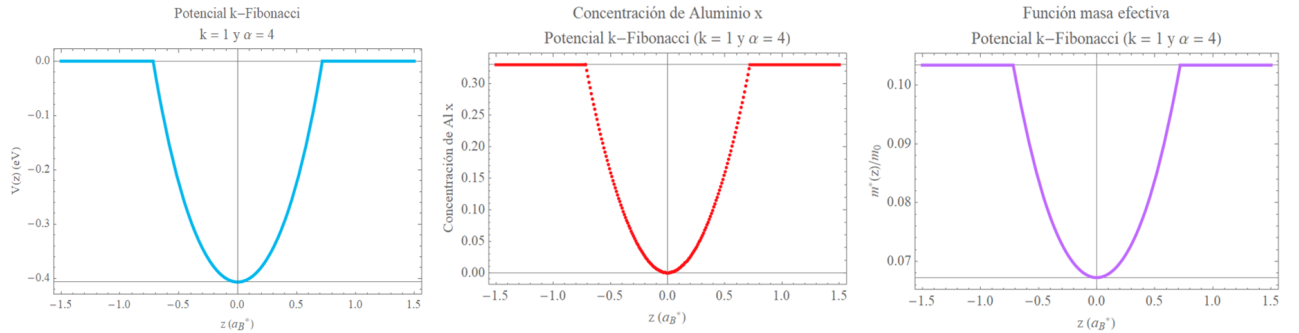


Figura 8.2.4: De izquierda a derecha corresponde el potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 4$, en el centro corresponde a la concentración de Al y la derecha corresponde la función masa efectiva dependiente de la posición para este potencial.

Si buscamos soluciones a la ecuación de Schödinger con este potencial K-Fibonacci por medio del método del desarrollo explicado antes en la sección 5.5. Utilizando 80 elementos en la base encontramos dos estados permitidos con energías de valor

$$\varepsilon_1 = -311.438 \text{ meV, y } \varepsilon_2 = -114.167 \text{ meV.} \quad (8.2.8)$$

el gráfico del potencial con sus respectivos estados es la figura 8.2.5.

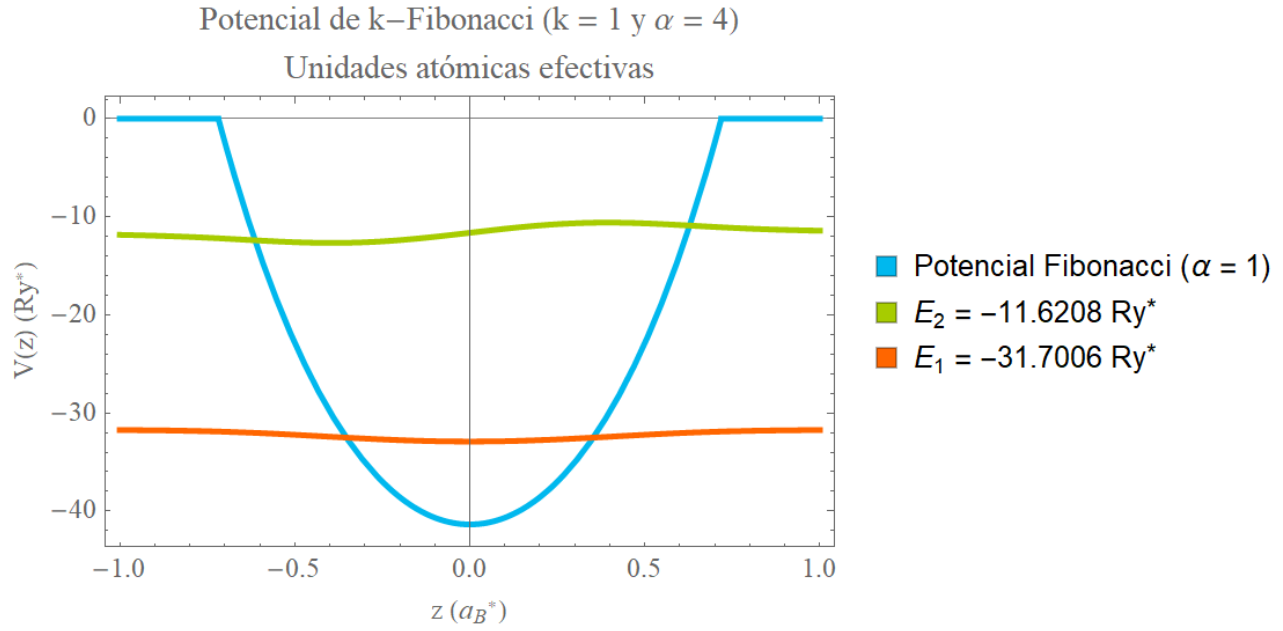


Figura 8.2.5: Potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y un parámetro $\alpha = 4$. Encontramos dos estados permitidos en esta estructura.

8.2.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 5$

Ahora, si $\alpha = 5$, manteniendo $V_{\text{par}} = 769.775 \text{ meV}$,

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\sigma_1^{5z} + \sigma_1^{-5z} \right) & \text{Si } cF_k h(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{Cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.2.9)$$

como en las situaciones anteriores, mostramos la concentración de aluminio y la función masa efectiva asociada a este potencial en las siguientes imágenes,

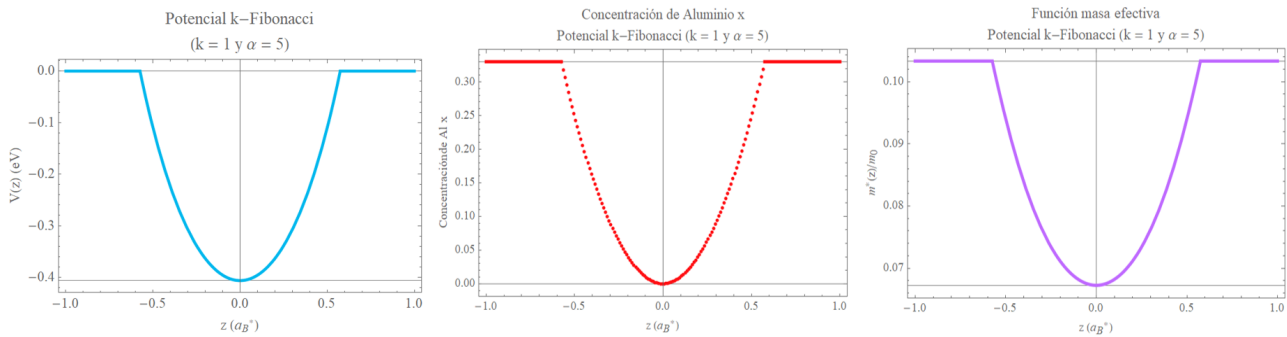


Figura 8.2.6: De izquierda a derecha tenemos el potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 5$, en el centro se muestra la concentración de Al y en la derecha tenemos la función masa efectiva dependiente de la posición para este potencial.

Buscando un desarrollo en serie de 80 términos, encontramos dos niveles permitidos con las siguientes

energías,

$$\varepsilon_1 = -289.792 \text{ meV}, \text{ y } \varepsilon_2 = -55.4704 \text{ meV}. \quad (8.2.10)$$

el gráfico del potencial con sus respectivos estados se muestra a en la figura 8.2.7.

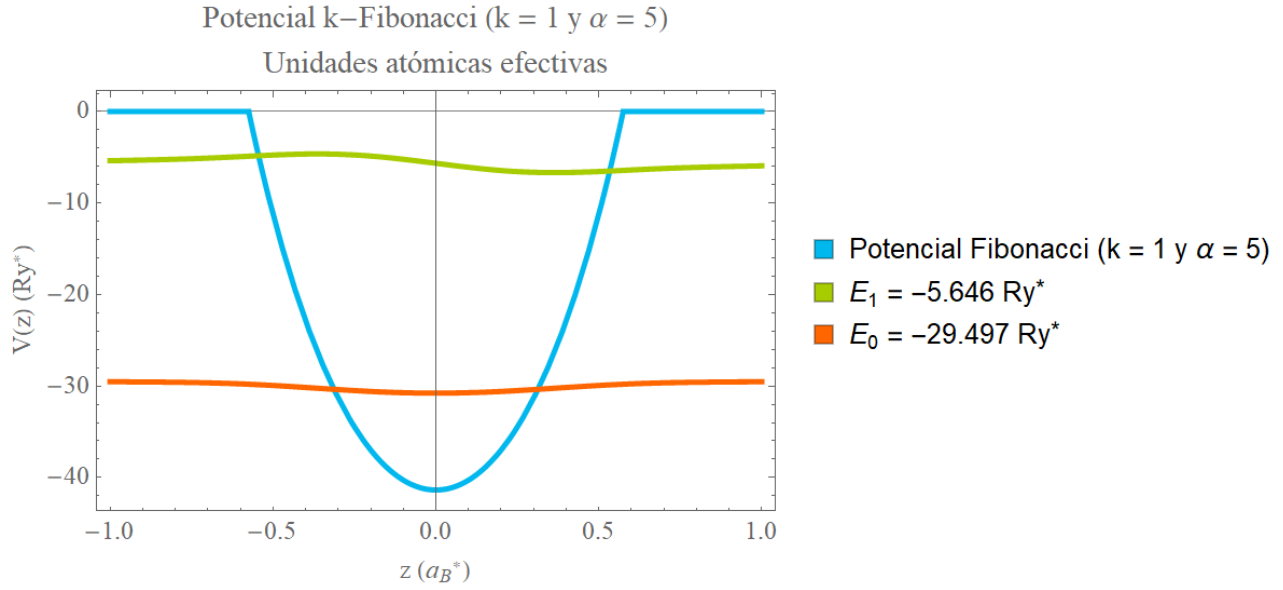


Figura 8.2.7: Los dos estados del potencial de k-Fibonacci con $k = 1$ y un parámetro $\alpha = 5$; obtenidos con un desarrollo de 80 elementos en la base.

8.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$.

Definimos el potencial de k-Fibonacci (con $k = 2$) como

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}}(\sigma_2^{-\alpha z} + \sigma_2^{-\alpha z}) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k\text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.3.1)$$

donde

$$\sigma_2 = \frac{2 + \sqrt{8}}{2} = \frac{1 + \sqrt{2}}{1}. \quad (8.3.2)$$

Para este perfil de potencial, consideramos los siguientes parámetros,

$$V_{\text{par}} = 693.667 \text{ meV}, \quad (8.3.3)$$

para los siguientes parámetros, tenemos los siguientes espesores,

$$\begin{aligned} \alpha = 1 &\Rightarrow D = 3.4686 a_B^* = 21.2473 \text{ nm}, \\ \alpha = 2 &\Rightarrow D = 1.7343 a_B^* = 10.6236 \text{ nm}, \\ \alpha = 3 &\Rightarrow D = 1.1562 a_B^* = 7.08242 \text{ nm}, \end{aligned} \quad (8.3.4)$$

8.3.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 2$

Dado que el potencial con $\alpha = 1$ es muy ancho, los efectos cuánticos debidos al confinamiento espacial son muy pequeños, entonces comencemos directamente por un pozo de potencial que sea más estrecho.

De entrada consideremos $\alpha = 2$, entonces el potencial a resolver está dado por,

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}}(\sigma_1^{2z} + \sigma_1^{-2z}) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k\text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.3.5)$$

donde $\sigma_2 = \frac{1+\sqrt{2}}{1}$.

En primer lugar la concentración de aluminio y la función de masa efectiva dependiente de la posición asociadas a este potencial se muestran en la figura 8.3.1.

Ahora, cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger por el método de diagonalización con 70 elementos en la base; obtenemos que el sistema cuenta con tres estados permitidos de energías:

$$\varepsilon_1 = -327.741 \text{ meV}, \varepsilon_2 = -162.549 \text{ meV}; \text{ y } \varepsilon_3 = -17.4959, \quad (8.3.6)$$

Los estados permitidos así como sus energías estan en la figura 8.3.2.

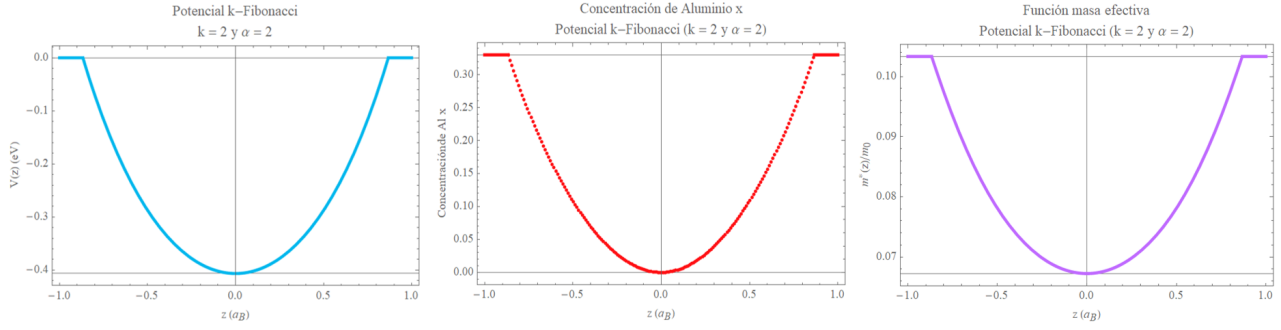


Figura 8.3.1: En color azul corresponde al potencial de k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 2$. En el gráfico del centro le corresponde a la concentración de átomos de aluminio y la gráfica derecha corresponde a la función de masa efectiva dependiente de la posición para este potencial.

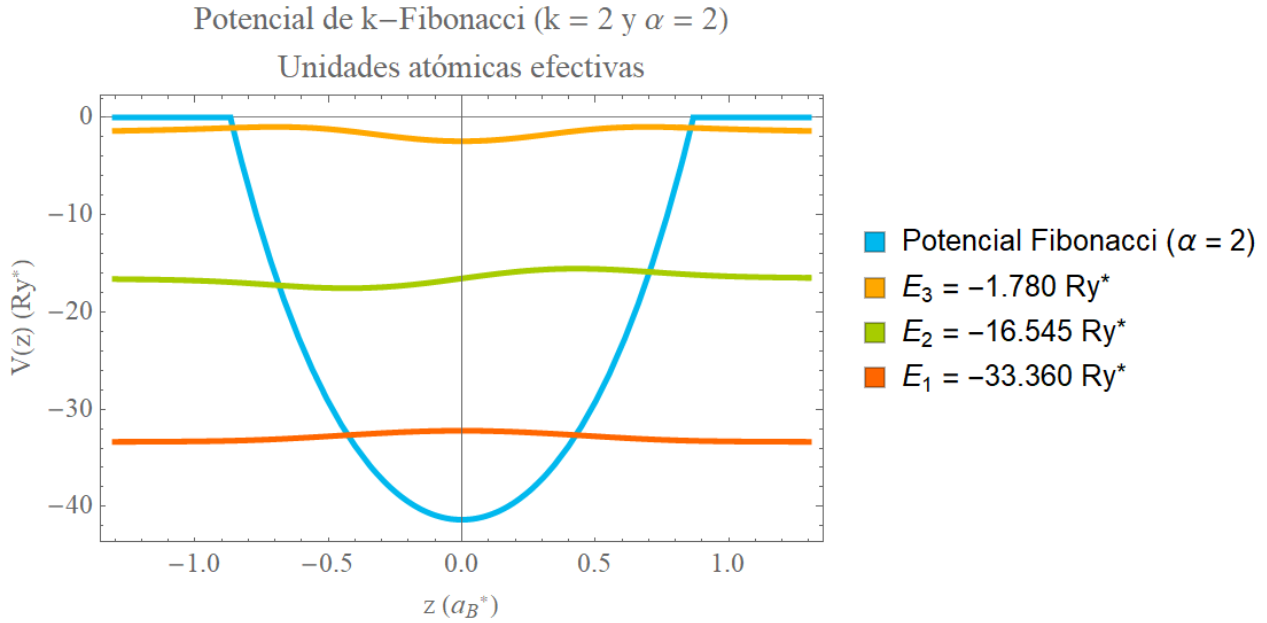


Figura 8.3.2: Estados y niveles energéticos del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 2$.

8.3.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$

Sea $\alpha = 3$, entonces el potencial a resolver en esta ocasión está dado por,

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}}(\sigma_1^{3z} + \sigma_1^{-3z}) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k\text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.3.7)$$

donde $\sigma_2 = \frac{1+\sqrt{2}}{1}$.

En esta situación, el comportamiento de la concentración de aluminio y la función de masa efectiva dependiente de la posición asociados a este potencial se muestran en la figura 8.3.3.

$$\varepsilon_1 = -291.455 \text{ meV y } \varepsilon_2 = -58.6282 \text{ meV,} \quad (8.3.8)$$

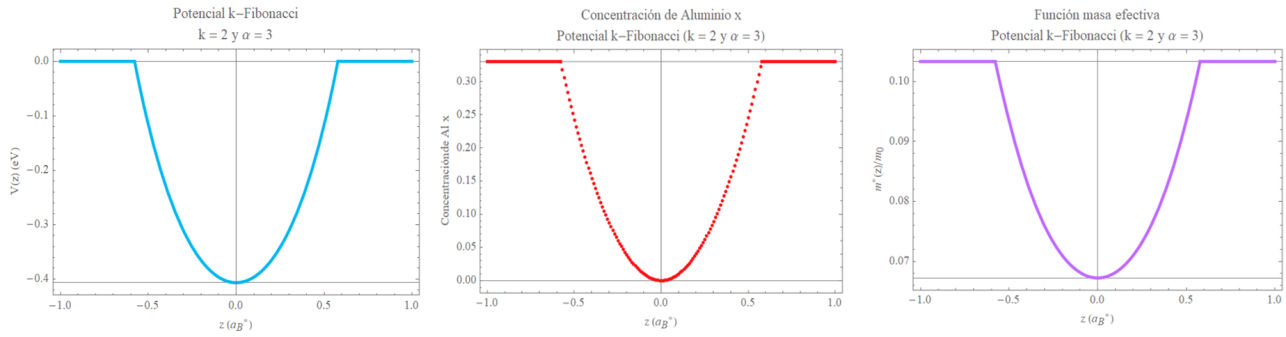


Figura 8.3.3: En color azul corresponde al potencial de k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$. En el gráfico del centro le corresponde a la concentración de átomos de aluminio y la gráfica derecha corresponde a la función de masa efectiva dependiente de la posición para este potencial.

Ahora, cuando resolvemos la ecuación de Schrödinger por el método de diagonalización con 70 elementos en la base; obtenemos que el sistema cuenta con tres estados permitidos de energías, Los estados permitidos así como sus energías están en la figura 8.3.4.

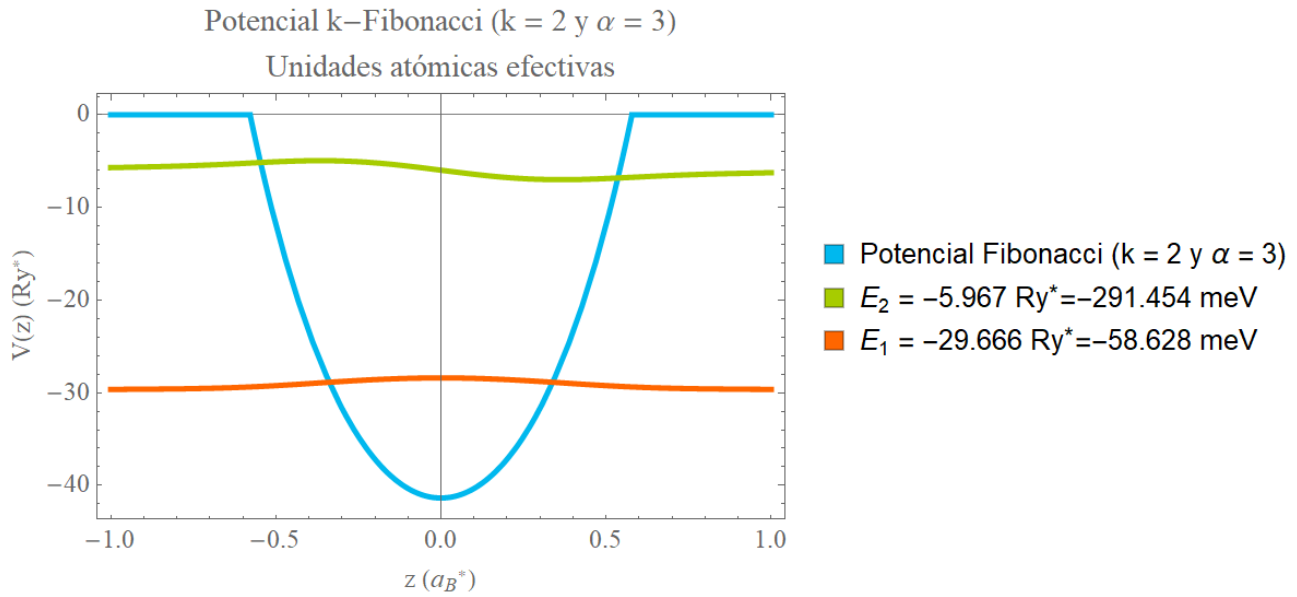


Figura 8.3.4: Estados y niveles energéticos correspondientes al pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$.

8.4. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$

Definimos el potencial como

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{13}} (\sigma_3^{-\alpha z} + \sigma_3^{-\alpha z}) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.4.1)$$

donde ahora

$$\sigma_3 = \frac{3 + \sqrt{13}}{2}, \quad (8.4.2)$$

para este potencial consideramos el siguiente parámetro para ajustarlo a barrera finita,

$$V_{\text{par}} = 393.72 \text{ meV}, \quad (8.4.3)$$

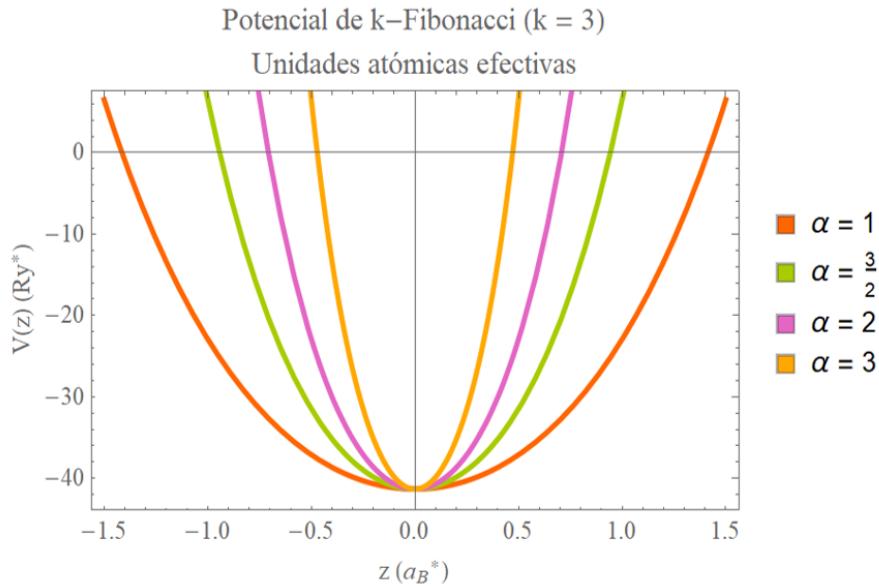


Figura 8.4.1: Perfil del pozo de potencial k-Fibonacci (con $k = 3$) y distintos parámetros α .

El parámetro α nos sirve para manipular el espesor del pozo (figura 8.4.1). Para algunos parámetros, de estos parámetros encontramos que

$$\begin{aligned} \alpha = 1 &\Rightarrow D = 2.8287 a_B^* = 17.3275 \text{ nm}, \\ \alpha = \frac{3}{2} &\Rightarrow D = 1.8858 a_B^* = 11.5517 \text{ nm}, \\ \alpha = 2 &\Rightarrow D = 1.41435 a_B^* = 8.66375 \text{ nm}, \\ \alpha = 3 &\Rightarrow D = 0.9429 a_B^* = 5.77583 \text{ nm}, \end{aligned} \quad (8.4.4)$$

8.4.1. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3/2$

Dado que para el parámetro $\alpha = 1$, los efectos cuánticos son muy pequeños, entonces vamos a despreciar esta situación. Comenzamos por el caso $\alpha = 3/2$. De modo que nuestro potencial estará dado por

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\sigma_1^{3z/2} + \sigma_1^{-3z/2} \right) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k h(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.4.5)$$

donde $\sigma_3 = \frac{3+\sqrt{15}}{2}$. Para este potencial encontramos la siguiente concentración de aluminio y función de masa efectiva que se muestran en la figura 8.4.2.

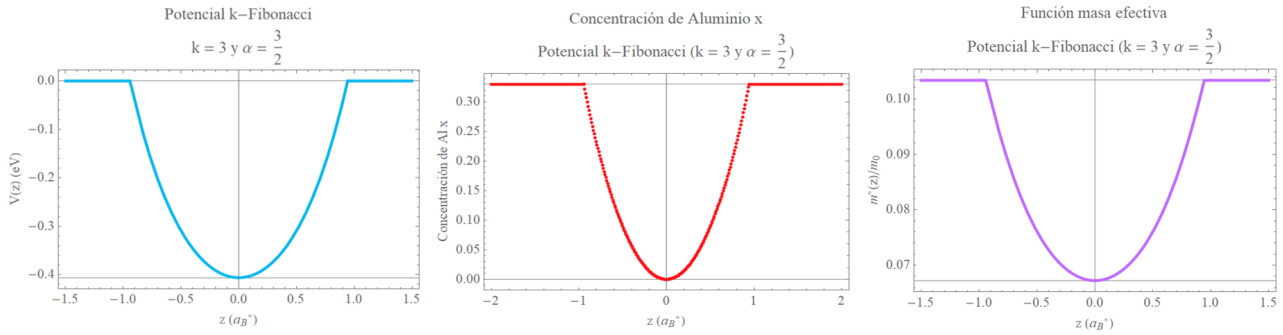


Figura 8.4.2: La gráfica de la izquierda en color azul corresponde al perfil del potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3/2$. En rojo corresponde a la concentración de Aluminio y en morado a la función de masa efectiva dependiente de la posición.

Mientras que los autoestados del potencial obtenidos están en la figura 8.4.3.

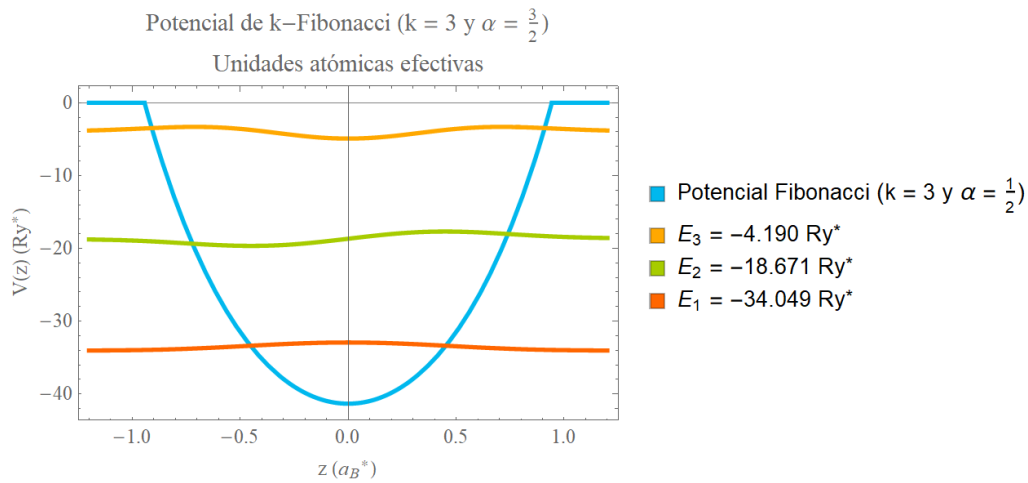


Figura 8.4.3: Estados del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3/2$ utilizando un desarrollo de 70 elementos en la base.

Con 70 términos encontramos que estos tres estados tienen energías de

$$\varepsilon_1 = -334.516 \text{ meV y } \varepsilon_2 = -183.438 \text{ meV, } \varepsilon_2 = -41.1692 \text{ meV,} \quad (8.4.6)$$

8.4.2. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$

Para $k = 3$ y un parámetro $\alpha = 2$, el potencial correspondiente es

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\sigma_3^{2z} + \sigma_3^{-2z} \right) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.4.7)$$

con $\sigma_3 = \frac{3+\sqrt{15}}{2}$. El perfil del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$; la concentración de aluminio y su correspondiente función de masa efectiva dependiente de la posición se encuentran en la figura 8.4.4.

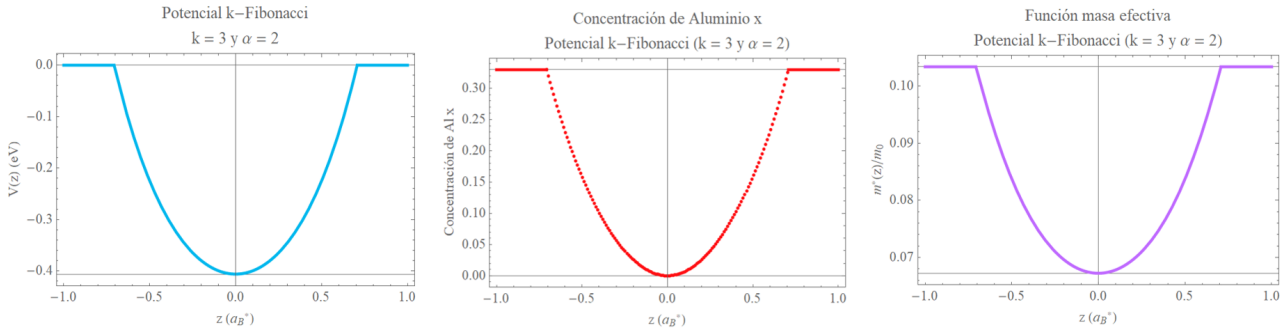


Figura 8.4.4: En color azul tenemos el potencial de k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$, en rojo la concentración de aluminio y en morado la función de masa efectiva dependiente de la posición.

Planteando el método de Fourier en este potencial con 80 elementos en la base, obtenemos dos estados de la figura ??; y los niveles de energía permitidos en este potencial son,

$$\varepsilon_1 = -311.861 \text{ meV y } \varepsilon_2 = -114.013 \text{ meV,} \quad (8.4.8)$$

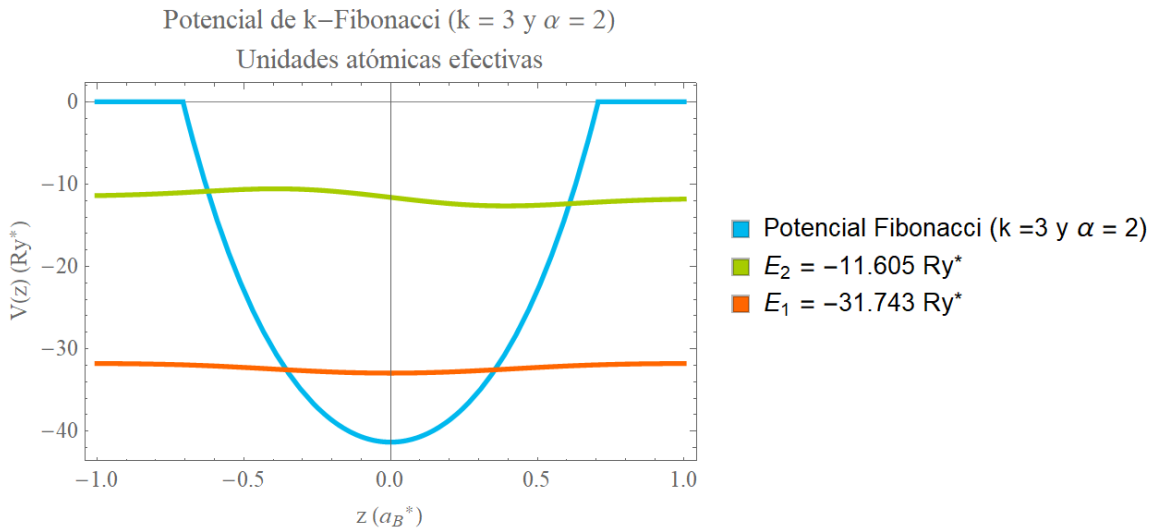


Figura 8.4.5: Estados y niveles energéticos del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$.

8.4.3. Potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3$

Finalmente, considerando $k = 3$ y un parámetro $\alpha = 3$, el potencial a resolver es

$$V_{\text{kF}}(\alpha, z) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\sigma_3^{3z} + \sigma_3^{-3z} \right) - V_{\text{par}} & \text{si } \text{cF}_k \text{h}(\alpha, z) \leq V_{\text{par}}, \\ 0 & \text{cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (8.4.9)$$

con $\sigma_3 = \frac{3+\sqrt{15}}{2}$. El perfil del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 2$ definido por (8.4.9); la concentración de aluminio y su correspondiente función de masa efectiva dependiente de la posición se encuentran en la figura siguiente.

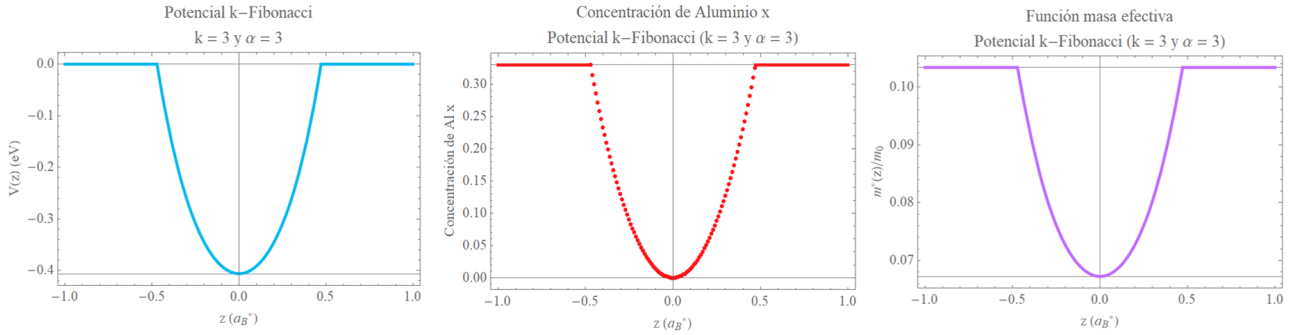


Figura 8.4.6: Potencial de k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3$ con su correspondiente concentración de aluminio y su función de masa efectiva dependiente de la posición.

Planteando el método de Fourier en este potencial con 80 elementos en la base, que los valores de las energías del estados permitidos en este potencial son,

$$\varepsilon_1 = -269.497 \text{ meV y } \varepsilon_2 = -13.284 \text{ meV,} \quad (8.4.10)$$

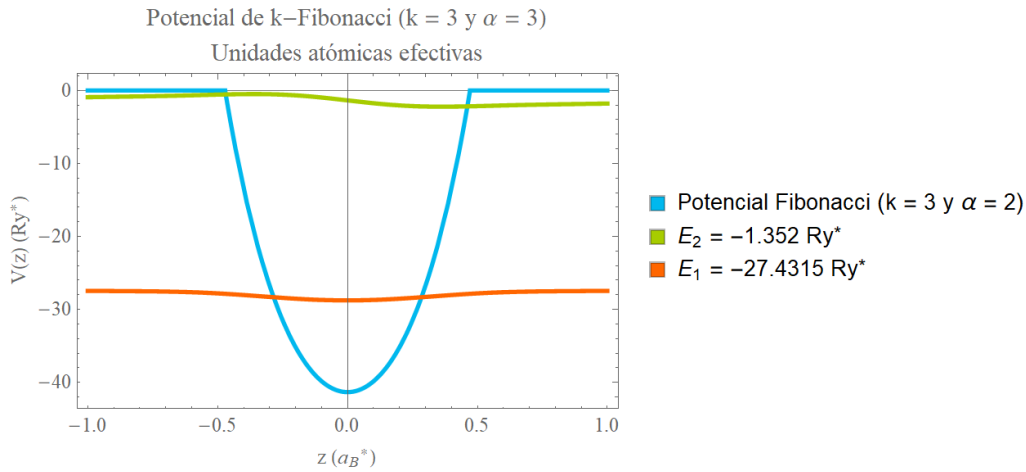


Figura 8.4.7: Estados y n energéticos del pozo de potencial k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3$.

La energía del segundo estado, $\varepsilon_2 = -13.284 \text{ meV}$, produce un nivel energético débilmente confinado, esto quiere decir una energía externa pequeña puede afectar a los electrones que se encuentren en este nivel.

8.5. Respuesta óptica para los potenciales de Fibonacci

Finalmente, recordemos las expresiones deducidas para el coeficiente de absorción óptica y para el cambio del índice de refracción

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega_{21} N \mu_{12}^2 T_2}{\epsilon_0 \hbar n c} \frac{\left| J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 - J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 \right|}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}, \quad (8.5.1)$$

además, se define

$$\bar{\mu}_{12} = \mu_{12} \left[J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]. \quad (8.5.2)$$

Para evaluar esta expresión en los sistemas cuánticos antes descritos, asumimos que la polarización del campo electromagnético incidente esta en la dirección z , de modo que

$$\hat{\mu} = -ez, \quad (8.5.3)$$

donde e es la carga fundamental del electrón. Al igual que lo hace el autor Paspalakis [16], en un sistema cuántico basado en arseniuro de galio (como las de nosotros), consideramos un índice de refracción $n = 3.55$, tiempos de relajación $T_1 = 10^{-11}$ s, $T_2 = 5 \times 10^{-12}$ s y una densidad de electrones $N = 1 \times 10^{23} \text{m}^{-3}$ (del orden del número de Avogadro). El resto de cantidades físicas involucradas son constantes universales con valores bien conocidos. Además, tomamos la convención $|1\rangle$ y $|2\rangle$ para denotar los estados inicial y final, respectivamente.

Para dar los resultados, definimos la intensidad óptica incidente como

$$I = \frac{1}{2} n \epsilon_0 c E_0^2. \quad (8.5.4)$$

8.5.1. Coeficiente de absorción óptica para potenciales de Fibonacci

Para el potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$, encontramos una frecuencia de de transición dada por,

$$\omega_{21} = 2.99839 \times 10^{14} \frac{1}{\text{s}}, \quad (8.5.5)$$

Mientras que el coeficiente de absorción óptica de este sistema se muestra en la figura 8.5.1.

En el caso del mismo potencial de Fibonacci con $\alpha = 3$, encontramos una frecuencia de de transición de,

$$\omega_{21} = 3.87811 \times 10^{14} \frac{1}{\text{s}}, \quad (8.5.6)$$

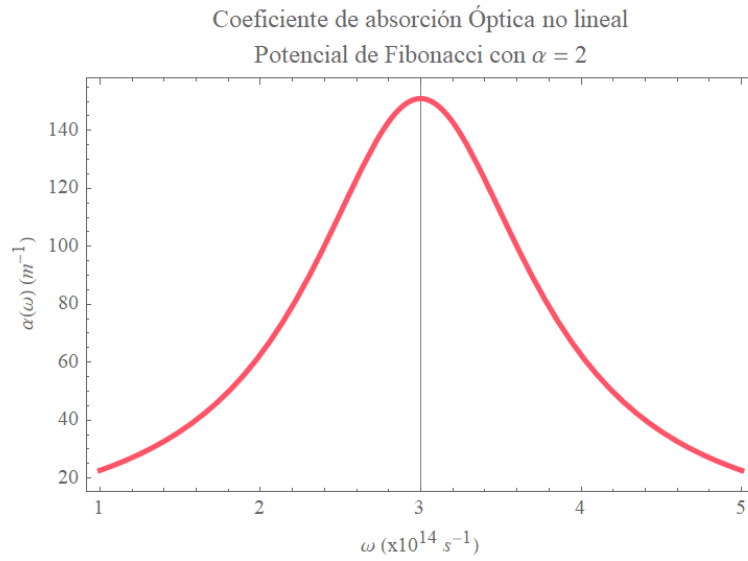


Figura 8.5.1: Coeficiente de absorción óptica para el potencial de Fibonacci con $\alpha = 2$. Esta situación corresponde a $I = \frac{1}{2} \times 10^{11} \text{ W/m}^2$.

El coeficiente de absorción óptica no lineal correspondiente se muestra en la figura 8.5.2.

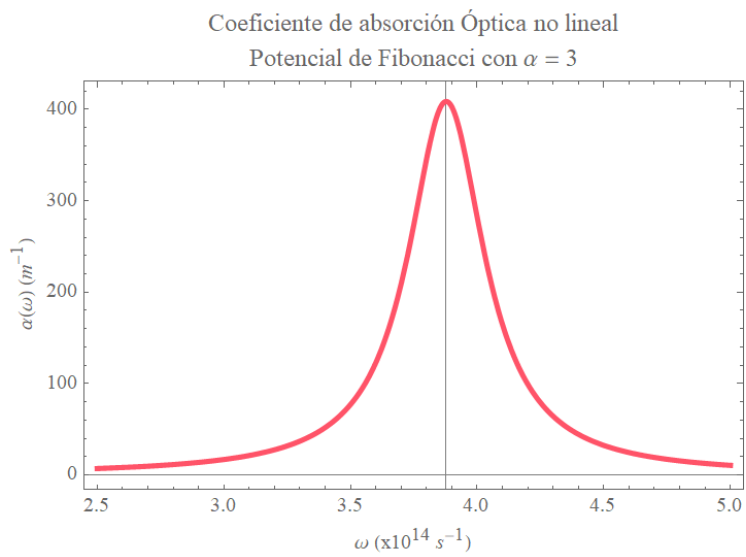


Figura 8.5.2: Coeficiente de absorción óptica para el potencial de Fibonacci con $\alpha = 3$. Esta situación corresponde a $I = \frac{1}{2} \times 10^{11} \text{ W/m}^2$.

8.5.2. Coeficiente de absorción óptica para potenciales de k-Fibonacci

Para el potencial k-Fibonacci con $k = 1$ y $\alpha = 2$, encontramos una frecuencia de de transición de

$$\omega_{21} = 3.56152 \times 10^{14} \frac{1}{s}, \quad (8.5.7)$$

El coeficiente de absorción óptica de este sistema se comporta como se muestra en la figura 8.5.2.

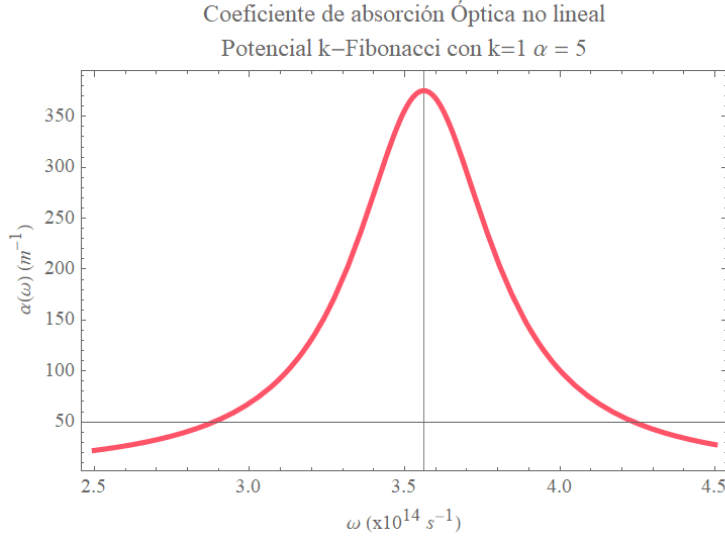


Figura 8.5.3: Coeficiente de absorción óptica para un potencial de k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 5$. Esta situación corresponde a $I = \frac{1}{2} \times 10^{11} \text{ W/m}^2$.

Para el caso de un potencial de k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$, con una frecuencia ω_{21} de magnitud,

$$\omega_{21} = 3.89425 \times 10^{14} \frac{1}{s}, \quad (8.5.8)$$

El coeficiente de absorción óptica se muestra en la figura 8.5.4.

Finalmente, para el caso de $k = 3$ y $\alpha = 3$, se obtiene una frecuencia de transición igual a

$$\omega_{21} = 3.89425 \times 10^{14} \frac{1}{s}, \quad (8.5.9)$$

El coeficiente de absorción óptica se muestra en la figura 8.5.5.

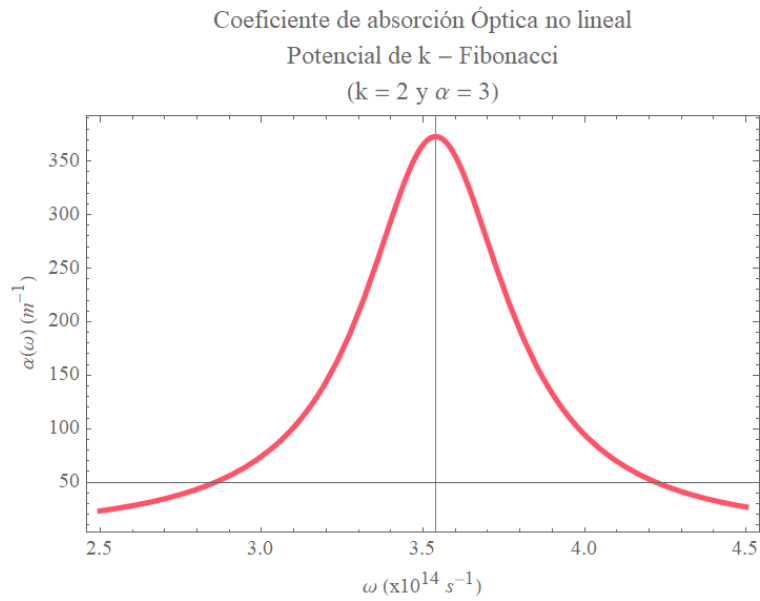


Figura 8.5.4: Coeficiente de absorción óptica para el potencial de k-Fibonacci con $k = 2$ y $\alpha = 3$. El gráfico corresponde a $I = \frac{1}{2} \times 10^{11} \text{ W/m}^2$

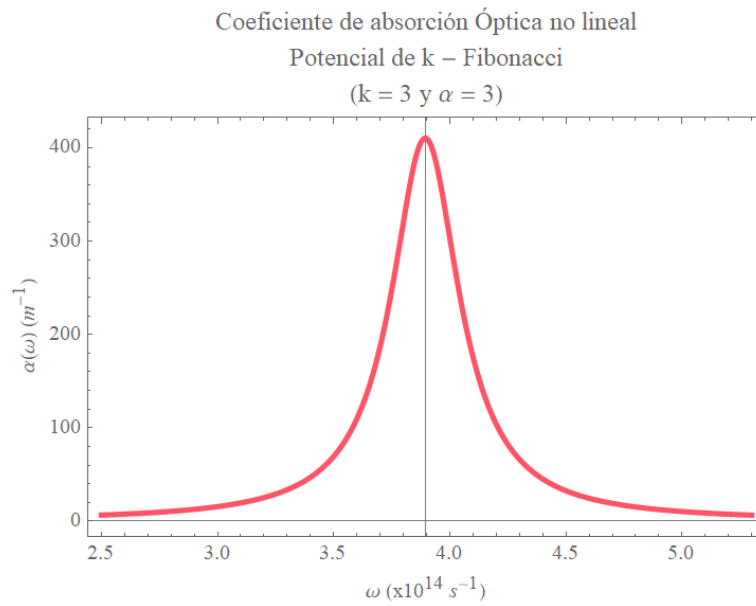


Figura 8.5.5: Coeficiente de absorción óptica para el potencial de k-Fibonacci con $k = 3$ y $\alpha = 3$. El gráfico corresponde a $I = \frac{1}{2} \times 10^{11} \text{ W/m}^2$

Capítulo 9

Conclusiones

Presentamos el método general para la descripción de los estados electrónicos de conducción en pozos cuánticos unidimensionales formados por nanoestructuras semiconductoras basadas en aleaciones de tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

El planteamiento del problema es el resultado de la implementación de distintos métodos, resultados y datos reportados en la literatura aplicados de manera autoconsistente para predecir resultados que tienen sentido físico.

Utilizamos las *funciones hiperbólicas e hiperbólicas generalizadas de tipo Fibonacci* para la descripción de perfiles de potencial de barrera finita. Plantear resolver la situación de estos potenciales como un problema de masa dependiente de la posición, es algo donde la literatura al respecto es, cuando menos, muy escasa. Así que los resultados obtenidos son los primeros de su clase.

- **El parámetro V_{par} :** que aparece en las definiciones de los potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci ((8.1.1) y (8.2.1)); nos permite ajustar la profundidad del potencial a esta profundidad máxima, $h_{\text{máx}} = 406.342$ meV. Para este parámetro; recomendamos los siguientes valores

$$\begin{aligned} \text{Potencial Fibonacci: } V_{\text{par}} &= 769.791 \text{ meV,} \\ \text{Potencial k-Fibonacci con } k = 1: V_{\text{par}} &= 769.775 \text{ meV,} \\ \text{Potencial k-Fibonacci con } k = 2: V_{\text{par}} &= 693.667 \text{ meV,} \\ \text{Potencial k-Fibonacci con } k = 3: V_{\text{par}} &= 393.72 \text{ meV.} \end{aligned} \tag{9.0.1}$$

Los cuales están reportados como ecuaciones (8.1.5), (8.2.4), (8.3.3) y (8.4.3), respectivamente.

Si consideramos los mismos potenciales con un parámetro V_{par} menor, el potencial resultante tendrá menos estados permitidos. Por el contrario, con un parámetro mayor produce más estados de confinamiento (o estados permitidos). Sin embargo, esto se lograría posiblemente incrementando la concentración de átomos en la barrera por encima de $x = 0.33$, pero esto vuelve a la aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de gap indirecto y por lo tanto un potencial de mayor profundidad no puede ser estudiado por el método que nosotros hemos implementado en este trabajo.

- **El parámetro α :** que aparece en la definición de ambos potenciales de Fibonacci y k-Fibonacci (ver las ecuaciones (8.1.1) y (8.2.1), respectivamente); nos permite ajustar el ancho de nuestro potencial.

Para el caso del potencial de Fibonacci, encontramos espesores D para distintos valores de α dados por

$$\text{Fibonacci: } \begin{cases} \alpha = 1 & \Rightarrow D = 17.5996 \text{ nm,} \\ \alpha = 2 & \Rightarrow D = 8.79979 \text{ nm,} \\ \alpha = 3 & \Rightarrow D = 5.86653 \text{ nm,} \end{cases} \quad (9.0.2)$$

como reportamos en la ecuación (8.1.6).

Por otro lado, para los tres potenciales de k-Fibonacci, encontramos los siguientes espesores (para distintos α)

$$\begin{aligned} k = 1 : & \begin{cases} \alpha = 1 & \Rightarrow D = 35.1986 \text{ nm,} \\ \alpha = 2 & \Rightarrow D = 17.5993 \text{ nm,} \\ \alpha = 3 & \Rightarrow D = 11.7329 \text{ nm,} \\ \alpha = 4 & \Rightarrow D = 8.79964 \text{ nm,} \\ \alpha = 5 & \Rightarrow D = 7.03971 \text{ nm,} \end{cases} \\ k = 2 : & \begin{cases} \alpha = 1 & \Rightarrow D = 21.2473 \text{ nm,} \\ \alpha = 2 & \Rightarrow D = 10.6236 \text{ nm,} \\ \alpha = 3 & \Rightarrow D = 7.08242 \text{ nm,} \end{cases} \\ k = 3 : & \begin{cases} \alpha = 1 & \Rightarrow D = 17.3275 \text{ nm,} \\ \alpha = \frac{3}{2} & \Rightarrow D = 11.5517 \text{ nm,} \\ \alpha = 2 & \Rightarrow D = 8.66375 \text{ nm,} \\ \alpha = 3 & \Rightarrow D = 5.77583 \text{ nm,} \end{cases} \end{aligned} \quad (9.0.3)$$

reportados como ecuaciones (8.2.5), (8.3.4) y (8.4.4) respectivamente.

Los resultados obtenidos por medio del método de Fourier reproducen (o verifican) propiedades que podemos anticipar teóricamente.

Por ejemplo, debido a la definición del pozo de potencial de Fibonacci; este potencial no es simétrico con respecto a $z = 0$, no obstante el potencial tiene distintos ejes de simetría dependiendo del valor α (como se muestra en figura 8.1.2); para el caso particular de $\alpha = 1$ el potencial tiene por eje de simetría al eje $z = -1/2$, debido al teorema de Floquet, esperamos que la densidad de probabilidad de los estados permitidos tengan el mismo eje de simetría. La densidad de probabilidad de los estados en esta situación aparecen en la figura 8.1.5 y se comprueba que se preserva dicho eje de simetría como esperamos por simple inspección del potencial.

Nos limitamos a estudiar aquellos casos en el que los espesores de cada pozo sean cercanos a $D \approx 10$ nm. Esto para incrementar las propiedades cuánticas del sistema y al mismo tiempo mantener abierta la posibilidad de desarrollar experimentalmente estas nanoestructuras.

- **Masa efectiva dependiente de la posición:** Un detalle importante a destacar es que la función masa efectiva dependiente de la posición encontrada en cada caso presenta siempre el mismo perfil que el pozo de potencial al cual corresponde. No podemos generalizar y decir que la función de masa efectiva siempre tendrá el mismo comportamiento sin importar que potencial que se considere. Más bien, encontramos un caso particular donde las condiciones del problema permiten este comportamiento singular de la masa efectiva.

Otro detalle es que en todas las situaciones se muestra que la masa efectiva en el fondo del potencial es igual a $m_{\text{GaAs}}^* = 0.067m_0$; este dato es conocido desde hace tiempo por medidas experimentales y es el valor de la masa efectiva en el arseniuro de galio GaAs.

Para el pozo de potencial de Fibonacci, encontramos los siguientes niveles de energía permitidos (los cuales están reportados como ecuaciones (8.1.5) y (8.1.7))

$$\begin{aligned} \text{Fibonacci } \alpha = 1 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -357.473 \text{ meV}, & \varepsilon_2 = -256.337 \text{ meV}, \\ \varepsilon_3 = -155.719 \text{ meV} & \text{y } \varepsilon_4 = -58.8169 \text{ meV}, \end{cases} \\ \text{Fibonacci } \alpha = 2 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -311.454 \text{ meV}, & \text{y } \varepsilon_2 = -114.181 \text{ meV}, \end{cases} \end{aligned} \quad (9.0.4)$$

Para el pozo de potencial de k-Fibonacci (con $k = 1$) encontramos las siguientes energías de confinamiento,

$$\begin{aligned} \text{k-F } k = 1 \text{ y } \alpha = 3 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -334.058 \text{ meV}, & \varepsilon_2 = -182.903 \text{ meV}, & \text{y } \varepsilon_3 = -42.7616 \text{ meV}. \end{cases} \\ \text{k-F } k = 1 \text{ y } \alpha = 4 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -311.438 \text{ meV}, & \text{y } \varepsilon_2 = -114.167 \text{ meV}. \end{cases} \\ \text{k-F } k = 1 \text{ y } \alpha = 5 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -289.792 \text{ meV}, & \text{y } \varepsilon_2 = -55.4704 \text{ meV}. \end{cases} \end{aligned} \quad (9.0.5)$$

que corresponden a lo reportado como ecuaciones (8.2.6), (8.2.8) y (8.2.10).

Vamos a comparar esto con los niveles de energía del pozo k-Fibonacci con $k = 2$, en los cuales obtenemos los siguientes niveles

$$\begin{aligned} \text{k-F } k = 2 \text{ y } \alpha = 2 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -327.741 \text{ meV}, & \varepsilon_2 = -162.549 \text{ meV}; & \text{y } \varepsilon_3 = -17.4959, \\ \varepsilon_4 = -11.4959, & \text{y } \varepsilon_5 = -11.4959, \end{cases} \\ \text{k-F } k = 2 \text{ y } \alpha = 3 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -291.455 \text{ meV}, & \varepsilon_2 = -58.6282, \end{cases} \end{aligned} \quad (9.0.6)$$

que corresponden a lo reportado como ecuaciones (8.3.6) y (8.3.8).

Finalmente, el pozo k-Fibonacci con $k = 3$ obtenemos los siguientes niveles

$$\begin{aligned} \text{k-F } k = 3 \text{ y } \alpha = \frac{3}{2} : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -334.516 \text{ meV} & \text{y } \varepsilon_2 = -183.438 \text{ meV}, & \varepsilon_3 = -41.1692 \text{ meV}, \\ \varepsilon_4 = -41.1692 \text{ meV}, & \text{y } \varepsilon_5 = -41.1692 \text{ meV}, \end{cases} \\ \text{k-F } k = 3 \text{ y } \alpha = 2 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -311.861 \text{ meV} & \text{y } \varepsilon_2 = -114.013 \text{ meV}, \end{cases} \\ \text{k-F } k = 3 \text{ y } \alpha = 3 : & \begin{cases} \varepsilon_1 = -269.497 \text{ meV} & \text{y } \varepsilon_2 = -13.284 \text{ meV}, \end{cases} \end{aligned} \quad (9.0.7)$$

que corresponden a lo reportado como ecuaciones (8.4.6), (8.4.8) y (8.4.10).

- **Sistemas de tres o más niveles:** Observemos la siguiente característica, para los potenciales k-Fibonacci,

- Con el potencial de Fibonacci y $\alpha = 1$ el espesor es $D = 17.56$ nm.
- Con $k = 1$ y $\alpha = 3$ el espesor es $D = 11.7329$ nm.
- Con $k = 2$ y $\alpha = 2$ el espesor es $D = 10.6236$ nm.
- Con $k = 3$ y $\alpha = 3/2$ el espesor es $D = 11.5517$ nm.

Resultan todos en un sistema de tres niveles de energía (cuatro en el caso del potencial de Fibonacci). Los últimos niveles presentar una energía de ligadura muy pequeña, es decir son estados bajamente ligados.

- **Sistema de dos niveles:** Cuando disminuimos el espesor de estos potenciales (incrementando el parámetro α), encontramos sistemas cuánticos de dos niveles permitidos. Los niveles de estos sistemas se reubican ligeramente pero siguen siendo estados confinados. Estos potenciales tiene un espesor D menor a 10 nanometros y nos permiten aplicar el modelo de PBB sin problema.

Por lo tanto, encontramos que en una heteroestructura semiconductor, la B.C. se divide a su vez en distintos niveles energéticos permitidos que se se conocen como subbandas de energías.

El coeficiente de absorción óptica no lineal dado por la ecuación (8.5.1) es válido para sistemas cuánticos de dos niveles (Apéndice E). Por este motivo es que nos enfocamos en encontrar potenciales de Fibonacci que permitan tales condiciones. Aquellos que tienen más de dos niveles energéticos no pueden ser estudiados bajo este modelo.

El cálculo del coeficiente de absorción óptica no lineal en distintos pozos de potenciales complementa nuestro estudio teórico de los estados electrónicos de conducción.

Finalmente expresamos la posibilidad de aplicar este método al estudio de diferentes perfiles de potencial; siempre y cuando estos sean de altura finita con un altura máxima de $h_{\text{máx}} = 406.342$ meV. En cada caso será necesario realizar el cálculo de la función de masa efectiva tal y como se describe en el capítulo 5.

Por lo tanto, cumplimos con nuestros objetivos.

Apéndice A

Aproximación adiabática

Pretendemos resolver la ecuación de Schrödinger siguiente,

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \mathcal{E}\Psi, \quad (\text{A.0.1})$$

donde Ψ es la función de onda de electrones y núcleos atómicos, y $\hat{\mathcal{H}}$ es el operador Hamiltoniano el cual está dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2 + V(\vec{r}, \vec{R}), \quad (\text{A.0.2})$$

y además la energía de interacción entre cargas eléctricas es de la forma

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K e^2}{R_{JK}} + \sum_{i < k} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i < J} \frac{Z_J e^2}{r_{iJ}}, \quad (\text{A.0.3})$$

en donde m es la masa del electrón, M_J es la masa del J -ésimo núcleo, \vec{r}_i y \vec{R}_J son los vectores de posición del i -ésimo electrón y el J -ésimo núcleo respectivamente, R_{JK} , r_{ij} y r_{iJ} son las distancias entre los correspondientes núcleos y electrones y Z_J es el número atómico del J -ésimo núcleo.

Buscamos simplificar la ecuación (2.1.1) utilizando el hecho de que la masa de los electrones m es mucho más pequeña que las masas de los núcleos atómicos M_J . Esto nos permite despreciar el término $-\frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2$ asociado a la energía cinética de los núcleos.

Proponemos como *ansatz* representar la función de onda del sistema completo (electrones y núcleos) en la forma

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(\vec{r}, \vec{R}) \Phi(\vec{R}), \quad (\text{A.0.4})$$

tal representación de la función de onda es una aproximación, ya que estrictamente hablando el cociente $\Psi(\vec{r}, \vec{R})/\psi(\vec{r}, \vec{R})$ depende de \vec{r}_i , pero suponemos que $\Phi(\vec{R})$ no depende de estas variables.

Entonces la función de onda de los electrones ψ que se mueven en un potencial periódico generado por la presencia de los núcleos atómicos, satisface la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \psi(\vec{r}, \vec{R}) = \varepsilon \psi(\vec{r}, \vec{R}). \quad (\text{A.0.5})$$

Ahora \vec{R}_J dejan de ser variables de una ecuación diferencial y se convierten en parámetros del potencial producido por los núcleos atómicos $V(\vec{r}, \vec{R})$. La función de onda ψ y las energías ε de la ecuación (A.0.1) dependerán de \vec{R}_J como parámetros, es decir, $\psi = \psi(\vec{r}, R_J)$ y $\varepsilon = \varepsilon(R_J)$.

Sustituyendo la aproximación (A.0.4) en la ecuación (A.0.1) (y teniendo en cuenta (A.0.5)), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \left[\psi \nabla_{\vec{R}_J}^2 \Phi + 2(\nabla_{\vec{R}_J} \psi \nabla_{\vec{R}_J} \Phi) + \Phi \nabla_{\vec{R}_J}^2 \psi \right] + \varepsilon \psi \Phi = \mathcal{E} \psi \Phi. \quad (\text{A.0.6})$$

Donde hemos considerado que $\Phi(\vec{R})$ es independiente de \vec{r}_i , para obtener el término

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_{\vec{r}_i}^2 + V(\vec{r}, \vec{R}) \right] \psi(\vec{r}, \vec{R}) \Phi(\vec{R}) = \varepsilon(\vec{R}) \psi(\vec{r}, \vec{R}) \Phi(\vec{R}),$$

Por otro lado, cuando el operador $\nabla_{\vec{R}_J}^2$ actúa sobre el producto $\psi \Phi$ en el que cada miembro del producto depende en \vec{R}_J , obtenemos

$$\frac{\partial(\psi \Phi)}{\partial X^2} = \psi \frac{\partial \Phi}{\partial X^2} + 2 \frac{\partial \psi}{\partial X} \frac{\partial \Phi}{\partial X} + \Phi \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2},$$

donde X es la coordenada ortogonal de \vec{R}_J . Lo mismo es válido en las otras dos proyecciones. Con estos dos resultados es que obtenemos la ecuación (A.0.6).

Sin pérdida de generalidad, podemos asumir que la función de onda del electrón ψ es real (excluyendo la presencia de corrientes macroscópicas en el cristal); en este caso la condición de normalización nos lleva a

$$\int \psi^2 d\vec{r} = 1, \quad (\text{A.0.7})$$

donde la integración se realiza con respecto a las coordenadas del electrón y se integra sobre todo el volumen del cristal.

De esta condición tenemos que

$$\nabla_{\vec{R}_J} \int \psi^2 d\vec{r} = 2 \int \psi \nabla_{\vec{R}_J} \psi d\vec{r} = 0. \quad (\text{A.0.8})$$

Realicemos lo siguiente, multipliquemos la ecuación (A.0.3) por ψ e integramos con respecto a $d\vec{r}$. Realizando esto (y utilizando las dos ecuaciones anteriores), obtenemos la siguiente expresión

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2 \Phi + \left[\varepsilon(R) - \frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \int \psi \nabla_{\vec{R}_J}^2 \psi d\vec{r} \right] \Phi = \mathcal{E} \Phi, \quad (\text{A.0.9})$$

un análisis más cuidadoso muestra que \sum_J que está dentro de los paréntesis cuadrados de la última expresión puede ser despreciado. La razón es que debido a los pequeños valores en los promedios m/M_J , la función de donde $\psi(\vec{r}, \vec{R})$ es de muy baja dependencia en \vec{R}_J , así que los términos conteniendo $\nabla_{\vec{R}_J}^2 \psi$ pueden ser despreciados.

Por otro lado, se puede demostrar que si incluimos estos términos obtenemos correcciones del orden de $(m/M_J)^{1/4}$ a distintas cantidades físicas.

Por lo tanto, despreciando el factor \sum_J mencionado, obtenemos la ecuación en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_J \frac{1}{M_J} \nabla_{\vec{R}_J}^2 \Phi + \varepsilon(R) \Phi = \mathcal{E} \Phi, \quad (\text{A.0.10})$$

esta es una ecuación de Schrödinger para la función Φ . Esta expresión es la que empleamos en el capítulo 3.1.

Apéndice B

Funciones de Bloch

En primer lugar, recordemos que las funciones de Bloch son de la forma:

$$\psi(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (\text{B.0.1})$$

donde la simetría traslacional de la red cristalina se mantiene en la amplitud $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_n)$.

B.1. Factor de normalización

Por otro lado, sabemos que el vector de onda del electrón puede representarse como

$$\vec{k} = \frac{g_1}{G}\vec{b}_1 + \frac{g_2}{G}\vec{b}_2 + \frac{g_3}{G}\vec{b}_3 \quad (g_i = 0, 1, 2, \dots, G-1); \quad (\text{B.1.2})$$

donde G es un número impar grande y \vec{b}_1 , \vec{b}_2 y \vec{b}_3 son los vectores de la base en la red recíproca. De modo que, \vec{k} toma G^3 valores cuasi-discretos.

Debemos llegar a la misma expresión para \vec{k} si separamos la región principal del cristal en la forma de un paralelepípedo con bordes $G\vec{a}_1$, $G\vec{a}_2$, $G\vec{a}_3$ y el volumen $V = G^3\Omega_0$ (donde $\Omega_0 = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ es el volumen de la celda unitaria del cristal).

Además, imponemos condiciones de frontera cíclicas de Born-Kármán, es decir que las funciones de onda de Bloch (B.0.1) no cambien cuando las coordenadas se desplacen por un vector $G\vec{a}_i$ ($i = 1, 2, 3$).

La región en donde \vec{k} toma valores distintos físicamente (no equivalentes) está definida por el intervalo

$$-\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_i < \pi \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{B.1.3})$$

lo que se conoce como la zona de Brillouin.

Sustituyendo la expresión del vector \vec{k} dada por la ecuación (B.1.2), obtenemos la relación equivalente

$$-\frac{G}{2} < g_i < \frac{G}{2} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{B.1.4})$$

de modo que, en esta región de variación, el vector \vec{k} asume G^3 cuasivalores discretos.

Si las funciones de onda de Bloch (4.2.1) están normalizadas dentro de la región principal del cristal, entonces se cumple,

$$\int_V \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})d^3r = \int_{G^3\Omega_0} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r = 1. \quad (\text{B.1.5})$$

Como $|u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2$ es periódica (con períodos determinados por los vectores base de la red), sigue que

$$G^3 \int_{\Omega_0} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r = 1, \quad (\text{B.1.6})$$

donde la integración se realiza sobre la celda unitaria del cristal. En algunos casos, se introduce a las funciones de Bloch el factor $G^{-3/2}$ de manera explícita, de modo que la función de onda del electrón queda como

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{G^{3/2}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (\text{B.1.7})$$

Con las funciones de Bloch así definidas obtenemos la condición de normalización en la forma

$$\int_{\Omega_0} |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 d^3r = 1, \quad (\text{B.1.8})$$

y en este caso el valor promedio es $|\bar{u}_{\vec{k}}| = \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}}$, sin embargo, en la mayoría de la literatura (incluyendo este trabajo) se omite este factor de normalización y las funciones de Bloch que se utilizan son como las definidas al inicio en la ecuación (B.0.1).

B.2. Funciones de Bloch en la ecuación de Schrödinger

Cuando sustituimos las funciones de Bloch dadas por

$$\psi(\vec{k}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (\text{B.2.1})$$

en la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{B.2.2})$$

nos queda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) + V(\vec{r})u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \varepsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (\text{B.2.3})$$

donde el operador de Laplace $\nabla^2 \equiv \text{div}(\text{grad}) = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ actuará sobre el producto de dos funciones de \vec{r} ($\vec{r} = (x, y, z)$): $u_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Para esto, hacemos uso la siguiente identidad

$$\nabla^2 \left(f(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \right) = \text{div}[\text{grad}(f\phi)] + \phi \nabla^2 f + 2(\text{grad}(f) \cdot \text{grad}(\phi)), \quad (\text{B.2.4})$$

con $f = u_{\vec{k}}(\vec{r})$ y $\phi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, obtenemos

$$\begin{aligned} \text{grad}(f) &= \text{grad}(u_{\vec{k}}), & \text{grad}(\phi) &= i\vec{k}\phi, \\ \nabla^2 f &= \nabla^2 u_{\vec{k}}, & \nabla^2 \phi &= -k^2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \end{aligned}$$

de modo que la identidad (B.2.3) nos queda como

$$\nabla^2 (f\phi) = \nabla^2 \left(u_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) = \left[\nabla^2 u_{\vec{k}} + 2i\vec{k} \cdot \text{grad}(u_{\vec{k}}) - k^2 u_{\vec{k}} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (\text{B.2.5})$$

sustituyendo este término en la ecuación de Schrödinger, tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 u_{\vec{k}} + 2i\vec{k} \cdot \text{grad}(u_{\vec{k}}) - k^2 u_{\vec{k}} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + V(\vec{r}) u_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \varepsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}},$$

eliminando el factor exponencial de ambos lados y reordenando los términos, obtenemos la expresión en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u_{\vec{k}} + V(\vec{r}) u_{\vec{k}} - i \frac{\hbar^2}{m} \left(\vec{k} \cdot \nabla u_{\vec{k}} \right) = \left(\varepsilon_{\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_{\vec{k}}, \quad (\text{B.2.6})$$

que es la ecuación que trabajamos en la sección 4.2.

Apéndice C

Teorema de Wannier

Sabemos que la relación de dispersión de la energía debe de tener la periodicidad del cristal, es decir,

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(\vec{k} + \vec{b}_g), \quad (\text{C.0.1})$$

lo que significa que $\varepsilon_n(\vec{k})$ puede ser expandida en una serie de Fourier de tres dimensiones en el espacio recíproco como

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} c_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_{\vec{l}}}, \quad (\text{C.0.2})$$

donde $\vec{l} = \{l_1, l_2, l_3\}$ son índices enteros del vector de red directa.

Si en este desarrollo en series de Fourier hacemos el cambio $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{b}_g$ vamos a obtener el factor $\exp(i\vec{b}_g \cdot \vec{a}_{\vec{l}}) = \exp(i2m\pi) = 1$, con m un entero. De modo que este desarrollo en serie verifica la condición de periodicidad (C.0.1).

Ahora, calculemos el resultado de aplicar el operador $\exp(\vec{a}_{\vec{l}} \cdot \nabla)$ en la función de onda de Bloch $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Expandiendo la exponencial en una serie de potencias de Taylor, obtenemos

$$\begin{aligned} \exp(\vec{a}_{\vec{l}} \cdot \nabla) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= [1 + \vec{a}_{\vec{l}} \cdot \nabla + \frac{1}{2!} (\vec{a}_{\vec{l}} \cdot \nabla)^2 + \dots] \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \vec{a}_{\vec{l}} \cdot \nabla \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha, \beta}^{1,2,3} \vec{a}_{\vec{l}\alpha} \vec{a}_{\vec{l}\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} [\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})] + \dots \\ &= \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_{\vec{l}}), \end{aligned} \quad (\text{C.0.3})$$

donde la serie obtenida puede ser a su vez considerada como un desarrollo en series de Taylor en potencias de las componentes ortonormales del vector $\vec{a}_{\vec{l}}$.

Ahora, sustituyendo $\vec{k} \rightarrow -i\nabla$ en el desarrollo en series de Fourier de la energía dado por (C.0.2); y haciendo uso de este último resultado, obtenemos

$$\begin{aligned}
\varepsilon_n(-i\nabla)\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{l}} c_{\vec{l}} e^{i\vec{a}_{\vec{l}}\cdot\nabla}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{l}} c_{\vec{l}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}_{\vec{l}}) \\
&= \sum_{\vec{l}} c_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_{\vec{l}}}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}),
\end{aligned}$$

por lo tanto, verificamos que

$$\varepsilon_n(-i\nabla)\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{C.0.4})$$

la relación (C.0.4) se conoce como el teorema de Wannier. En su deducción se supone que la relación para la energía $\varepsilon_n(\vec{k})$ es no degenerada para el valor dado de \vec{k} .

Por otro lado, supongamos que, en adición al potencial periódico $V(\vec{r})$, tenemos un campo $u(\vec{r})$ actuando sobre el electrón de conducción del cristal (por ejemplo, un campo eléctrico externo o el potencial debido a la impureza de algún ion). Entonces nuestro nuevo Hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_B + \hat{\mathcal{W}}, \quad (\text{C.0.5})$$

donde

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_B &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}), \\
\hat{\mathcal{W}} &= u(\vec{r}),
\end{aligned} \quad (\text{C.0.6})$$

en esa situación, la ecuación de Schrödinger asume la forma

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) + u(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}). \quad (\text{C.0.7})$$

Consideremos un sistema cerrado de funciones de Bloch $\{\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})\}$ que cumplen la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano de Bloch, $\hat{\mathcal{H}}_B$, es decir,

$$\hat{\mathcal{H}}_B\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_n(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{C.0.8})$$

entonces, proponemos a la función de onda $\psi(\vec{r})$ como un desarrollo en el sistema de funciones de Bloch como

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \sum_{\vec{k}} c_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{C.0.9})$$

donde $c_{n\vec{k}}$ son los coeficientes de expansión.

Sustituyendo a $\psi(\vec{r})$ en la ecuación de Schrödinger (C.0.7), y tomando en cuenta que $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ son autofunciones del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_B$, nos queda

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{r}) = \sum_n \sum_{\vec{k}} c_{n\vec{k}} [\varepsilon_n(\vec{k}) + u(\vec{r})] \psi_{n\vec{k}} = \varepsilon\psi(\vec{r}),$$

utilizando el teorema de Wannier (C.0.4), obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{r}) = \sum_n [\varepsilon_n(-i\nabla) + u(\vec{r})] \sum_{\vec{k}} c_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}} = \varepsilon\psi(\vec{r}),$$

si aproximamos las soluciones como las funciones de Bloch de la n-ésima banda, entonces obtenemos

$$[\varepsilon_n(-i\nabla) + u(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}), \quad (\text{C.0.10})$$

que es la expresión equivalente a la ecuación de Schrödinger (C.0.7) y es la expresión que aparece en la sección 4.2 como ecuación (4.2.10).

Apéndice D

Unidades Atómicas efectivas

En primer lugar, supongamos que nuestro sistema de referencia esta en términos de la coordenada ζ (zeta griega, la cual se mide en unidades de metros o nanometros) y además tenemos las energías \bar{E} y el potencial $\bar{V}(\zeta)$ (en unidades de Joules o eV), entonces proponemos el siguiente cambio de unidades

$$\text{Unidades atómicas efectivas: } \begin{cases} \zeta = a^* z, \\ \bar{E} = \text{Ry}^* E \\ \bar{V}(\zeta) = \text{Ry}^* V(\zeta), \end{cases} \quad (\text{D.0.1})$$

donde z , E y $V(\zeta)$ son cantidades adimensionales.

En este sistema de unidades atómicas efectivas, las posiciones se miden en múltiplos del *radio de Bohr efectivo*, el cual esta definido como

$$a^* := \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_r^*}{m^*e^2}, \quad (\text{D.0.2})$$

y las energías estan medidas en términos de *Rydberg efectivos* los cuales se definen por

$$\text{Ry}^* := \frac{\hbar^2}{2m^*(a^*)^2}, \quad (\text{D.0.3})$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones en la B.C., \hbar es la constante de Planck, e es la carga eléctrica fundamental y ϵ_r^* es la constante dieléctrica del medio.

Observemos que incluimos el factor 1/2 al definir los Rydberg efectivos. Sin este factor numérico las unidades de energía se conocen como *Hartree's efectivos*. Al momento de incluir este factor conseguimos que la ecuación de Schrödinger se desprenda del factor que aparece en la energía cinética.

Podemos expresar los radios de Bohr efectivos en términos del radio de Bohr en el vacío como sigue,

$$a^* = \frac{\epsilon_r^*/\epsilon_0}{m^*/m_0} \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{m_0e^2} = \frac{\epsilon_r^*/\epsilon_0}{m^*/m_0} a_0, \quad (\text{D.0.4})$$

donde a_0 es el *radio de Bohr en el vacío*, m_0 es la masa de los electrones libres y ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío.

Similarmente, podemos expresar los Rydberg efectivos en términos de los Rydbergs en el vacío como sigue

$$\text{Ry}^* = \frac{(m^*/m_0)}{(\epsilon_r^*/\epsilon_0)^2} \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} = \frac{m^*/m_0}{(\epsilon_r^*/\epsilon_0)^2} \text{Ry}. \quad (\text{D.0.5})$$

Sin embargo, como discutimos en la sección 5, la masa efectiva depende de la región en el pozo en la que nos ubiquemos, de modo que estas unidades atómicas efectivas dependen de en que región del pozo nos encontremos.

D.1. Unidades atómicas efectivas de la barrera

Para mantener una unidad de medida constante, elegimos los parámetros de la barrera, donde tenemos una concentración de átomos de aluminio $x = 0.33$, de modo que el radio de Bohr efectivo a^* , la masa efectiva m^* y la constante dieléctrica ϵ_r (que aparecen en las ecuaciones (D.0.4) y (D.0.5)) se denotan como $a^* = a_B^*$, $m^* := m_B^*$ y $\epsilon_r^* := \epsilon_B^*$, tal y como se muestra a continuación en la figura D.1.1.

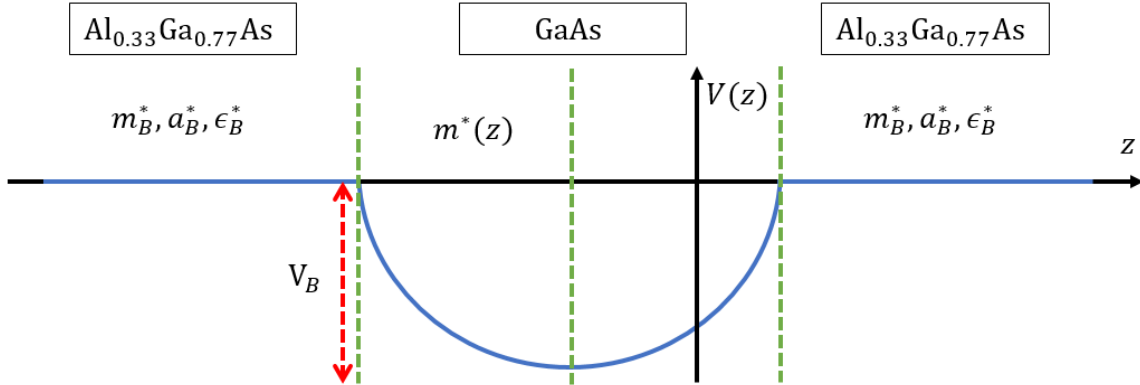


Figura D.1.1: Parámetros de la barrera, en la región del pozo la masa efectiva tiene la forma funcional $m^*(z)$.

Entonces, nuestras unidades atómicas efectivas están dadas por

$$\text{Unidades atómicas efectivas: } \begin{cases} \zeta = a_B^* z, \\ \bar{E} = \text{Ry}^* E \\ \bar{V}(\zeta) = \text{Ry}^* V(\zeta), \end{cases} \quad (\text{D.1.1})$$

donde el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo de la barrera están dados por

$$a_B^* = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_B^*}{m_B^*e^2} = \frac{\epsilon_B^*/\epsilon_0}{m_B^*/m_0} a_0 \quad \text{y} \quad \text{Ry}^* = \frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} = \frac{m_B^*/m_0}{(\epsilon_B^*/\epsilon_0)^2} \text{Ry}. \quad (\text{D.1.2})$$

Para determinar el valor de la masa efectiva en las barreras, m_B^* , utilizamos la fórmula de Kane, con el factor de corrección δ , dada por (5.3.7), es decir

$$\frac{m_0}{m^*(x)} = 1 + \frac{2 E_P(x)}{3 E_g(x)} + \frac{1}{3} \frac{E_P(x)}{E_g(x) + \Delta(x)} + \delta(x), \quad (\text{D.1.3})$$

donde las energías están dadas por las ecuaciones (5.3.2)-(5.3.5), es decir,

$$E_g(x) = x E_{g(\text{AlAs})} + (1-x) E_{g(\text{GaAs})} + bx(1-x), \quad (\text{D.1.4})$$

$$E_P(x) = x E_{P(\text{AlAs})} + (1-x) E_{P(\text{GaAs})}, \quad (\text{D.1.5})$$

$$\Delta(x) = x \Delta_{(\text{AlAs})} + (1-x) \Delta_{(\text{GaAs})}, \quad (\text{D.1.6})$$

$$\delta(x) = -3.93 + 0.488x + 4.93x^2, \quad (\text{D.1.7})$$

los valores de estas energías los obtenemos del artículo de Vurgaftman et al [20], y se encuentran en la tabla D.1.1.

Parámetros	AlAs (en eV)	GaAs (en eV)
E_G	3.099	1.519
E_P	21.1	28.8
Δ_{SO}	0.28	0.341

Cuadro D.1.1: Constantes de los semiconductores de tipo AlAs en la tabla II y GaAs en la tabla I; reportados por Vurgaftman et al [20].

Además, el bowing parameter, b , que aparece en la ecuación (D.1.2) esta dado en el mismo artículo por $b(x) = -0.127 + 4.93x^2$ (en eV).

Similarmente, proponemos a la constante dieléctrica como una ley de Vegard de la forma

$$\epsilon_r(x) = \epsilon_r^{(\text{AlAs})} x + \epsilon_r^{(\text{GaAs})} (1-x), \quad (\text{D.1.8})$$

para los valores de la constante dieléctrica estática empleamos los datos que se reportan en <https://cleanroom.byu.edu/semiconductor-constants>, con lo cual tenemos

$$\epsilon_r^{(\text{AlAs})} = 10.06\epsilon_0 \quad \text{y} \quad \epsilon_r^{(\text{GaAs})} = 12.9\epsilon_0, \quad (\text{D.1.9})$$

Así, nos quedan las expresiones siguientes,

$$E_g(x) = [3.099x + 1.519(1-x) + (-0.127x + 1.310x^2)(1-x)] \text{ eV}, \quad (\text{D.1.10})$$

$$E_P(x) = [21.1x + 28.8(1-x)] \text{ eV}, \quad (\text{D.1.11})$$

$$\Delta(x) = [0.28x + 0.341(1-x)] \text{ eV}, \quad (\text{D.1.12})$$

$$\frac{1}{\epsilon_0} \epsilon_r(x) = 10.06x + 12.9(1-x). \quad (\text{D.1.13})$$

De estas expresiones, obtenemos los valores de la barrera siguientes,

Parámetros (Al _{0.33} Ga _{0.67} As)	Valor
$E_g^B = E_g(x = 0.33)$	2.1079 eV
$E_P^B = E_P(x = 0.33)$	26.259 eV
$\Delta_B = \Delta(x = 0.33)$	0.32087 eV
$\epsilon_B^* = \epsilon_r(x = 0.33)$	11.9628 ϵ_0
$\delta_B = \delta(x = 0.33)$	-3.23208

Cuadro D.1.2: Parámetros del material en la barrera.

Con la tabla D.1.2 y la expresión (D.1.3); obtenemos una proporción entre la masa de los electrones en el vacío m_0 y la masa efectiva de los electrones en el material de la barrera m_B^* igual a

$$\frac{m_0}{m_B^*} = 9.67671 \quad \Rightarrow \quad m_B^* = \frac{m_0}{9.67671} = 9.412 \times 10^{-32} \text{ kg}, \quad (\text{D.1.14})$$

y la constante dieléctrica estática del material en las barreras esta dada por $\epsilon_B^* = 11.9628\epsilon_0$,

Por lo tanto, nuestras unidades efectivas (D.1.2), estarán dadas por

$$\begin{aligned} a_B^* &= \frac{\epsilon_B^*/\epsilon_0}{m_B^*/m_0} a_0 = (115.7605)a_0 = 6.1255 \text{ nm}, \\ \text{Ry}^* &= \frac{m_B^*/m_0}{(\epsilon_B^*/\epsilon_0)^2} \text{Ry} = \frac{1}{(1384.3155)} \text{Ry} = 9.82435 \text{ meV}, \end{aligned} \quad (\text{D.1.15})$$

de modo que nuestras variables de distancia z y energía E son adimensionales, para recuperar las cantidades dimensionales realizamos el cambio inverso que aparece en (D.1.1).

D.2. Altura de la barrera

A partir de esto, podemos determinar el valor de la altura máxima de nuestro pozo de potencial, (utilizando la ecuación (??)) que nos dice

$$V(z) = Q_C[xE_{g(\text{AlAs})} + (1-x)E_{g(\text{GaAs})} + bx(1-x) - E_{g(\text{GaAs})}], \quad (\text{D.2.1})$$

y con los parámetros de la tabla D.1.1, obtenemos

$$V_b(x = 0.33) = 406.341 \text{ meV}, \quad (\text{D.2.2})$$

entonces, la altura máxima de nuestro pozo de potencial fijando GaAs en el fondo y Al_{0.33}Ga_{0.67}As en las barreras será de

$$\frac{V_b(x = 0.33)}{\text{Ry}^*} = \frac{406.341 \text{ meV}}{9.8568 \text{ meV}} = 41.2244 \quad (\text{D.2.3})$$

D.3. Ecuación de BenDaniel-Duke en unidades atómicas efectivas

Comenzamos con la ecuación de BenDaniel-Duke (5.5.1) (haciendo el cambio de variable $z \rightarrow \zeta$),

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{BDD}}\psi(\zeta) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{d\zeta} \left(\frac{1}{\bar{m}^*(\zeta)} \frac{d}{d\zeta} \right) \psi(\zeta) + \bar{V}(\zeta)\psi(\zeta) = \bar{E}\psi(\zeta), \quad (\text{D.3.1})$$

con un pozo de potencial y una masa efectiva de la forma

$$\bar{V}(\zeta) = \begin{cases} 0 & \zeta < b \\ \bar{V}(\zeta) & b \leq \zeta \leq a \\ 0 & \zeta > a \end{cases} \quad \text{y} \quad \bar{m}^*(\zeta) = \begin{cases} m_B^* = \text{const} & \zeta < b \\ \bar{m}^*(\zeta) & b \leq \zeta \leq a \\ m_B^* = \text{const} & \zeta > a \end{cases} \quad (\text{D.3.2})$$

En la regiones $\zeta < b$ y $\zeta > a$ (región I), tenemos un único material semiconductor, en este caso $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$; en tanto en la zona $a \leq \zeta \leq b$ (región II), tenemos una estructura donde en el fondo del potencial corresponde a tomar $x = 0$ en la aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Definimos nuestras unidades atómicas efectivas con los parámetros del material de la región I. Considerando la masa efectiva en la barrera dada por (??),

$$m_B^* = \frac{m_0}{9.67671} = 9.412 \times 10^{-32} \text{ kg} = \text{cte.} \quad (\text{D.3.3})$$

Realizando el cambio $\zeta = a_B^* z$, la ecuación (D.3.1), nos queda como

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{BDD}}\psi(z) = -\frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} \frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + \bar{V}(z)\psi(z) = \bar{E}\psi(z), \quad (\text{D.3.4})$$

ahora, hacemos el cambio $\bar{V}(z) = \text{Ry}^* V(z)$ y $\bar{E} = \text{Ry}^* E$ (de acuerdo con nuestra definición de las unidades atómicas, $\hbar^2/2m_B^*(a_B^*)^2 = \text{Ry}^*$) de modo que la ecuación (D.3.4) se reduce a simplemente

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{BDD}}\psi(z) = -\frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (\text{en Ry}^*) \quad (\text{D.3.5})$$

por lo tanto, la correspondiente ecuación adimensional de masa efectiva dependiente de la posición es

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{BDD}}\psi(z) = -\frac{d}{dz} \left(\frac{m_B^*}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (\text{D.3.6})$$

con z en múltiplos de a_B^* y energías E y $V(z)$ en múltiplos de Ry^* . Esta es la ecuación que empleamos en la sección 5.5.

D.4. Base completa en el espacio de Hilbert en unidades atómicas efectivas

Supongamos que buscamos encontrar soluciones para un pozo de potencial conocido como *potencial de oscilador armónico* de la forma:

$$V(\zeta) = \frac{1}{2}m_B^*\omega^2\zeta^2, \quad (\text{D.4.1})$$

entonces, la ecuación de Schrödinger para el potencial de oscilador armónico está dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + \frac{1}{2}m_{1/3}^*\omega^2\zeta^2\psi = \bar{E}\psi(\zeta), \quad (\text{D.4.2})$$

para simplificar la ecuación anterior, introducimos la siguiente cantidad adimensional ξ , definida como

$$\zeta = a_B^*\xi \quad (\text{D.4.3})$$

en donde a_B^* es el radio de Bohr efectivo definido en el apéndice D. Con este cambio, la ecuación del oscilador armónico (D.4.2) nos queda como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m_B^*\omega^2(a_B^*)^2\xi^2\psi(\xi) = \bar{E}\psi(\xi). \quad (\text{D.4.4})$$

Observemos que las unidades involucradas son,

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_B^*(a_B^*)^2} \right] = \text{Energía} = \left[\frac{1}{2}m_B^*\omega^2(a_B^*)^2 \right] = [\bar{E}]. \quad (\text{D.4.5})$$

Recordemos que definimos un Rydberg efectivo como $1\text{Ry}^* = \hbar^2/(2m_B^*(a_B^*)^2)$; entonces si pensamos que nuestras energías \bar{E} se miden en múltiplos E de Rydbergs y además la energía potencial es algún múltiplo β^2 de esta cantidad, la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico se puede escribir en unidades atómicas efectivas como simplemente

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \beta^2\xi^2 + E \right) \psi(\xi) = 0, \quad (\text{D.4.6})$$

el factor β^2 es una constante de proporcionalidad que nos indica cuantos Rydbergs efectivos de energía tiene nuestro potencial armónico, es decir, nos regula que tanto se abre o cierra la parábola.

Esta ecuación ya es una ecuación adimensional, es decir, todas las cantidades involucradas son únicamente números. Sin embargo, podemos buscar eliminar la constante β^2 haciendo el reescalamiento siguiente,

$$\xi := \beta^{-1/2}z, \quad (\text{D.4.7})$$

por lo tanto la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico (D.4.2) en unidades atómicas efectivas se escribe como

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - z^2 + \varepsilon\right)\psi(z) = 0, \quad (\text{D.4.8})$$

donde hemos eliminado la constante β que aparece en todos los términos. Siempre podemos volver a las cantidades dimensionales ζ y \bar{E} realizando el cambio de unidades inverso.

Nuestro problema ahora, es resolver la ecuación (D.4.8) y además obtener los valores permitidos de la constante ε , y por lo tanto de las energías del oscilador armónico. Como ansatz proponemos que las soluciones sean de la forma siguiente

$$\psi(z) = h(z)e^{-z^2/2}, \quad (\text{D.4.9})$$

entonces, sustituyendo el ansatz en la ecuación de Schrödinger (D.4.8), obtenemos la ecuación equivalente para $h(z)$, la cual es

$$\frac{d^2h}{dz^2} - 2z\frac{dh}{dz} + (\varepsilon - 1)h(z) = 0. \quad (\text{D.4.10})$$

Recordemos que la ecuación diferencial de Hermite, es

$$\frac{d^2H(z)}{dz^2} - 2z\frac{dH(z)}{dz} + 2nH(z) = 0, \quad (\text{D.4.11})$$

para que (D.4.10) sea igual a la ecuación de Hermite (D.4.11), se necesita que

$$\varepsilon - 1 = 2n \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = 2n + 1 \quad (\text{D.4.12})$$

entonces, una de las soluciones de la ecuación diferencial (D.4.11) son los polinomios de Hermite, $h(z) = H_n(z)$. Por lo tanto, las soluciones del oscilador armónico (normalizadas) estarán dadas por

$$\psi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}2^n n!}} e^{-z^2/2} H_n(z); \quad \varepsilon_n = 2n + 1. \quad (\text{D.4.13})$$

Los polinomios de Hermite dados por $\{H_n(z) : n \in \mathbb{N}\}$, junto con la función peso $W(z) = e^{-z^2}$ forman una base ortogonal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$,

$$\langle H_n(z) | H_m(z) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{z^2} H_n(z) H_m(z) dz = c'_n \delta_{nm}. \quad (\text{D.4.14})$$

Además, tienen como función generadora a

$$G(z, t) = e^{-t^2+2tz} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z) \frac{t^n}{n!}, \quad (\text{D.4.15})$$

a partir de esta función generadora, podemos obtener la formula de Rodrigues para los polinomios de Hermite,

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n(e^{-z^2})}{dz^n}, \quad (\text{D.4.16})$$

y además, aplicando la función generadora uno puede verificar que la constante de normalización es precisamente

$$c'_n = \pi^{1/2} 2^n n!. \quad (\text{D.4.17})$$

Por lo tanto, las soluciones del oscilador armónico

$$\psi_n(z) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!}} e^{-z^2/2} H_n(z) : n \in \mathbb{N}_0 \right\}, \quad (\text{D.4.18})$$

forman un conjunto completo cuadrado integrable y lo podemos utilizar como nuestra base para el desarrollo en el método de Fourier.

Apéndice E

Respuesta óptica. Modelo de Paspalakis, Baviatsis y Baskoutas

Vamos a derivar aquí las expresiones que Paspalakis, Bociatsis y Baskoutas (PBB) presentan en su artículo [16] para estudiar la absorción y la rectificación óptica en puntos cuánticos asimétricos de dos niveles.

Comenzamos por considerar un sistema cuántico de dos niveles de energía bajo la acción de un campo electromagnético de la forma

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t), \quad (\text{E.0.1})$$

donde E_0 es la amplitud de campo eléctrico y ω es la frecuencia angular del campo eléctrico aplicado. Dentro de la aproximación de un sistema de dos niveles, la dinámica del sistema bajo la interacción de un campo electromagnético esta modelada por el Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = [\hbar\omega_1 - \mu_{11}E(t)]|1\rangle\langle 1| + [\hbar\omega_2 - \mu_{22}E(t)]|2\rangle\langle 2| - \mu_{12}E(t)(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|), \quad (\text{E.0.2})$$

donde $|1\rangle$ y $|2\rangle$ representan los estados inicial y final respectivamente, cada uno de ellos con energías $\hbar\omega_1$ y $\hbar\omega_2$. Además, usando la aproximación dipolar eléctrica, la parte de interacción del hamiltoniano (7.2.2) implica asumir la hermiticidad a través de tomar $\mu_{12} = \mu_{21}$.

Las ecuaciones de movimiento para los elementos de la matriz de densidad son:

$$i\hbar \frac{d\rho_{12}(t)}{dt} = [\hbar(\omega_1 - \omega_2) - (\mu_{11} - \mu_{22})E(t)]\rho_{12}(t) - \mu_{12}E(t)\Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2}\rho_{12}(t) \quad (\text{E.0.3})$$

$$i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} = 2\mu_{12}E(t)[\rho_{21}(t) - \rho_{12}(t)] - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1] \quad (\text{E.0.4})$$

donde se ha tenido en cuenta que $\Delta(t) = \rho_{22}(t) - \rho_{11}(t)$; $\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$ y que $\rho_{11}(t) + \rho_{22}(t)$ por la normalización de la matriz densidad $\hat{\rho}$; además de que $\rho_{nm}(t) = \langle n|\hat{\rho}(t)|m\rangle$ denotan los elementos de la propia matriz densidad.

Antes de proceder, observemos que si escribimos con más detalle el Operador Hamiltoniano que aparece en la ecuación (E.0.2), encontramos que

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_2 - \mu_{22}E(t) & -\mu_{12}E(t) \\ -\mu_{12}E(t) & \hbar\omega_1 - \mu_{11}E(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.0.5})$$

que como cualquier otro operador 2×2 hermítico, se puede escribir como una combinación lineal de las matrices de Pauli:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (\text{E.0.6})$$

cuyas relaciones de conmutación son

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (\text{E.0.7})$$

donde

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } (i,j,k) \in \{(1,2,3), (2,3,1), (3,1,2)\}; \\ -1 & \text{si } (i,j,k) \in \{(3,2,1), (1,3,2), (2,1,3)\}; \\ 0 & \text{si } i = j \text{ ó } i = k \text{ ó } j = k; \end{cases} \quad (\text{E.0.8})$$

Dado que el Hamiltoniano dado por (E.0.5) es real, en lugar de utilizar la base canónica dada por (??), emplearemos la base alternativa compuesta por los elementos $\{\sigma_0, \sigma_+, \sigma_-, \sigma_3\}$ con σ_{\pm} definidas mediante

$$\sigma_{\pm} := \sigma_1 \pm i\sigma_2 \quad \Rightarrow \quad \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (\text{E.0.9})$$

Al hacer el desarrollo del Hamiltoniano expresado en (E.0.5), se encuentra que

$$\hat{\mathcal{H}} = A\sigma_0 + B\sigma_+ + C\sigma_- + D\sigma_3;$$

encontramos que

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}[\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)], \\ B = C &= -\mu_{12}E(t), \\ D &= \frac{1}{2}[\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)], \end{aligned}$$

donde hemos denotado a $\hbar\omega_{21} = \hbar\omega_2 - \hbar\omega_1$ y $\mu_p = \mu_{22} - \mu_{11}$. Por consiguiente, podemos denotar a nuestro Hamiltoniano como sigue

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}[\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)]\sigma_0 + \frac{1}{2}[\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)]\sigma_3 - \mu_{12}E(t)(\sigma_+ + \sigma_-). \quad (\text{E.0.10})$$

La idea del enfoque es mantener en las ecuaciones de movimiento para la matriz densidad la contribución de los dipolos permanentes. Entonces, lo que se trata de hacer es aplicar una transformación unitaria a $\hat{\rho}$, que se puede escribir como

$$\hat{\rho}^T = \hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^{-1}; \quad \hat{\rho} = \hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T\hat{U}, \quad (\text{E.0.11})$$

donde \hat{U} es la matriz de transformación unitaria que cumple con la propiedad

$$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \mathcal{I}. \quad (\text{E.0.12})$$

donde \mathcal{I} representa la matriz identidad.

La ecuación de movimiento

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\right)_{\text{rel}}, \quad (\text{E.0.13})$$

donde hemos incluido de manera fenomenológica el término de relajación.

Entonces, antes de aplicar la transformación unitaria a la ecuación de movimiento, comencemos por calcular el término

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^{-1}) = i\hbar\left[\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{\rho}\hat{U}^{-1} + \hat{U}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{U}^{-1} + \hat{U}\hat{\rho}\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t}\right] \\ &= i\hbar\left[\hat{U}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{U}^{-1} + \frac{\partial\hat{U}}{\partial t}(\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T\hat{U})\hat{U}^{-1} + \hat{U}(\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T\hat{U})\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t}\right] \\ &= i\hbar\left[\hat{U}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{U}^{-1} + \frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T + \hat{\rho}^T\hat{U}\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t}\right], \end{aligned}$$

aquí hemos tenido en cuenta la propiedad de unicidad de la matriz \hat{U} dada por (E.0.12). De esta expresión podemos resolver para encontrar

$$i\hbar\hat{U}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{U}^{-1} = i\hbar\left[\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t} - \frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T - \hat{\rho}^T\hat{U}\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t}\right]. \quad (\text{E.0.14})$$

Por otro lado, si tenemos en cuenta la propiedad de unicidad de la matriz \hat{U} dada por (E.0.12), encontramos que

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hat{U}\hat{U}^{-1}) = \frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1} + \hat{U}\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t} = \frac{\partial\mathcal{I}}{\partial t} = 0,$$

de donde obtenemos la igualdad

$$\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1} = -\hat{U}\frac{\partial\hat{U}^{-1}}{\partial t}. \quad (\text{E.0.15})$$

Por lo tanto, sustituyendo (E.0.15) en la ecuación (E.0.14) nos queda:

$$i\hbar\hat{U}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\hat{U}^{-1} = i\hbar\left[\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t} - \frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T + \hat{\rho}^T\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\right]. \quad (\text{E.0.16})$$

De modo que, ahora si aplicando la transformación unitaria a la ecuación de movimiento (E.0.13), nos queda

$$\begin{aligned} i\hbar\hat{U}\frac{d\hat{\rho}}{dt}\hat{U}^{-1} &= \hat{U}[\hat{\mathcal{H}},\hat{\rho}]\hat{U}^{-1} + i\hbar\hat{U}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\right)_{\text{rel}}\hat{U}^{-1} \\ &= \left(\hat{U}\hat{\mathcal{H}}\hat{\rho}\hat{U}^{-1} - \hat{U}\hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^{-1}\right) + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}}, \end{aligned}$$

donde definimos la cantidad

$$\hat{U}\left(\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\right)_{\text{rel}}\hat{U}^{-1} := \left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}}. \quad (\text{E.0.17})$$

Continuando con la transformación, insertamos la transformación unidad $\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \mathcal{I}$ convenientemente como

$$\begin{aligned} i\hbar\hat{U}\frac{d\hat{\rho}}{dt}\hat{U}^{-1} &= \hat{U}\hat{\mathcal{H}}(\hat{U}^{-1}\hat{U})\hat{\rho}\hat{U}^{-1} - \hat{U}\hat{\rho}(\hat{U}^{-1}\hat{U})\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^{-1} + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}} \\ &= \hat{\mathcal{H}}^T\hat{\rho}^T - \hat{\rho}^T\hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}}, \end{aligned}$$

ahora vamos a sustituir el término a la izquierda por la ecuación (E.0.16)

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t} &= \hat{\mathcal{H}}^T\hat{\rho}^T - \hat{\rho}^T\hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\hat{\rho}^T - i\hbar\hat{\rho}^T\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1} + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}} \\
&= \left(\hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\right)\hat{\rho}^T - \hat{\rho}^T\left(\hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}\right) + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}} \\
&= \left[\hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}, \hat{\rho}^T\right] + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}},
\end{aligned}$$

lo cual puede denotarse como

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}}_{tf}, \hat{\rho}^T\right] + i\hbar\left(\frac{\partial\hat{\rho}^T}{\partial t}\right)_{\text{rel}}, \quad (\text{E.0.18})$$

donde hemos definido el Hamiltoniano transformado ($\hat{\mathcal{H}}_{tf}$) como

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf} := \hat{\mathcal{H}}^T + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^{-1} + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^{-1}; \quad (\text{E.0.19})$$

La transformación unitaria \hat{U} se puede ir haciendo por pasos sucesivos. Por ejemplo, si queremos que nuestro Hamiltoniano transformado no contenga el término a la derecha de (E.0.10), podemos hacer una transformación

$$\hat{U}_0 = \exp(\xi_0\sigma_0); \quad (\text{E.0.20})$$

con ξ definida como

$$\xi_0 = \frac{i}{2\hbar} \left[\hbar(\omega_1 + \omega_2)t - (\mu_{11} + \mu_{22}) \int_0^t E(t')dt' \right], \quad (\text{E.0.21})$$

donde el tiempo t se considera mucho más pequeño que cualquiera de los tiempos de relajación T_1 y T_2 .

El Hamiltoniano transformado según (E.0.20) va a contener el término

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\hat{U}_0}{\partial t}\hat{U}_0^{-1} &= i\hbar\hat{U}_0\hat{U}_0^{-1}\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{i}{2\hbar}\left(\hbar(\omega_1 + \omega_2)t - (\mu_{11} + \mu_{22})\int_0^t E(t')dt'\right)\sigma_0\right] \\
&= i\hbar\left[\frac{i}{2\hbar}\left(\hbar(\omega_1 + \omega_2) - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)\right)\right]\sigma_0 \\
&= -\frac{1}{2}\left[\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)\right]\sigma_0
\end{aligned}$$

Por otra parte, recordando que σ_0 conmuta con todas las demás matrices de Pauli, tenemos que

$$\hat{U}_0\hat{\mathcal{H}}\hat{U}_0^{-1} = \frac{1}{2}[\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)]\sigma_0 + \frac{1}{2}[\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)]\sigma_3 - \mu_{12}E(t)(\sigma_+ + \sigma_-),$$

con esto, nuestro Hamiltoniano transformado dado por la ecuación (E.0.19) bajo la transformación \hat{U}_0

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(0)} = \hat{U}_0 \hat{\mathcal{H}} \hat{U}_0^{-1} + i\hbar \frac{\partial \hat{U}_0}{\partial t} \hat{U}_0^{-1},$$

con las dos igualdades anteriores, tenemos

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(0)} = \frac{1}{2} [\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)] \sigma_3 - \mu_{12} E(t) (\sigma_+ + \sigma_-), \quad (\text{E.0.22})$$

este Hamiltoniano transformado ya no tiene el primer término del lado derecho que aparece en la ecuación (E.0.10), el que va acompañado de σ_0 .

Una segunda transformación unitaria nos permite eliminar la dependencia temporal explícita que el campo $E(t)$ introduce en los elementos diagonales, es decir, el primer término a la derecha en la ecuación (E.0.22) (recordemos que σ_3 es diagonal). Esta segunda transformación unitaria se define a través del operador unitario

$$\hat{U}_1 = \exp(\xi_1 \sigma_3), \quad (\text{E.0.23})$$

con

$$\xi_1 = \frac{i}{2\hbar} \left(\hbar\omega_{21} t - \mu_p \int_0^t E(t') dt' \right), \quad (\text{E.0.24})$$

con la misma posición sobre el tiempo hecha antes en la transformación unitaria \hat{U}_0 . Si usamos la forma explícita para el campo eléctrico $E(t)$ dada por (E.0.1), tenemos que

$$\xi_1 = \frac{i}{2} \left(\omega_{21} t - \frac{\mu_p}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t) \right), \quad (\text{E.0.25})$$

Ahora toca realizar la transformación del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(0)}$, para esto, de la ecuación (E.0.19) obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)} = \hat{U}_1 \hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(0)} \hat{U}_1^{-1} + i\hbar \frac{\partial \hat{U}_1}{\partial t} \hat{U}_1^{-1}, \quad (\text{E.0.26})$$

podemos ver que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{U}_1}{\partial t} \hat{U}_1^{-1} &= i\hbar \hat{U}_1 \hat{U}_1^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i}{2\hbar} \left(\hbar\omega_{21} t - \mu_p \int_0^t E(t') dt' \right) \sigma_3 \right] \\ &= i\hbar \left[\frac{i}{2\hbar} \left(\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t) \right) \sigma_3 \right] \\ &= -\frac{1}{2} [\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)] \sigma_3, \end{aligned}$$

por otra parte, podemos ver que

$$\hat{U}_1 \hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(0)} \hat{U}_1^{-1} = \frac{1}{2} [\hbar\omega_{21} - \mu_p E(t)] \sigma_3 - \mu_{12} E(t) [\exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_+ \exp(-\xi_1 \sigma_3) + \exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_- \exp(-\xi_1 \sigma_3)];$$

dado que σ_3 conmuta consigo misma. Con estos dos resultados, la transformación (E.0.26) queda como

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)} = -\mu_{12} [\exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_+ \exp(-\xi_1 \sigma_3) + \exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_- \exp(-\xi_1 \sigma_3)] E(t). \quad (\text{E.0.27})$$

Ahora necesitamos interpretar que significa una transformación del tipo

$$\exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_{\pm} \exp(-\xi_1 \sigma_3), \quad (\text{E.0.28})$$

en primer lugar, observemos que

$$\begin{aligned} \sigma_+ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_+^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{0}, \\ \sigma_- &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_-^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{0}, \end{aligned}$$

entonces, si usamos la definición de $\exp(\hat{A})$ en términos de la correspondiente serie de potencias de Maclaurin, vamos a encontrar que

$$\begin{aligned} \exp(\sigma_{\pm}) &= 1 + \sigma_{\pm} + \frac{1}{2!} \sigma_{\pm}^2 + \frac{1}{3!} \sigma_{\pm}^3 + \frac{1}{4!} \sigma_{\pm}^4 + \dots \\ &= 1 + \sigma_{\pm} + \left[\frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} \sigma_{\pm}^1 + \frac{1}{4!} \sigma_{\pm}^2 + \dots \right] \sigma_{\pm}^2 \\ &= 1 + \sigma_{\pm}, \end{aligned}$$

y con esto, podemos escribir

$$\sigma_{\pm} = \exp(\sigma_{\pm}) - 1,$$

de modo que la transformación (E.0.28) queda como

$$\begin{aligned} \exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_{\pm} \exp(-\xi_1 \sigma_3) &= \exp(\xi_1 \sigma_3) (\exp(\sigma_{\pm}) - 1) \exp(-\xi_1 \sigma_3) \\ &= \exp(\xi_1 \sigma_3) \exp(\sigma_{\pm}) \exp(-\xi_1 \sigma_3) - 1. \end{aligned}$$

Para evaluar el producto de exponenciales operacionales podemos usar la llamada identidad de Campbell-Baker-Hausdorff (o identidad de Weyl),

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right), \quad (\text{E.0.29})$$

y tener en cuenta la regla de conmutación,

$$[\sigma_{\pm}, \sigma_3] = \mp 2\sigma_{\pm},$$

que se deriva usando (E.0.7).

De esta manera, en primer lugar vamos a obtener

$$\exp(\xi_1 \sigma_3) \exp(\sigma_{\pm}) = \exp\left(\xi_1 \sigma_3 + \hat{\sigma}_{\pm} + \frac{\xi_1}{2}[\sigma_3, \sigma_{\pm}]\right) = \exp\left(\xi_1 \sigma_3 + (1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm}\right),$$

En segundo lugar, vamos a calcular (utilizando nuevamente la identidad (E.0.29))

$$\begin{aligned} \exp\left(\xi_1 \sigma_3 + (1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm}\right) \exp(-\xi_1 \sigma_3) &= \exp\left[\xi_1 \sigma_3 + (1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm} - \xi_1 \sigma_3 - \frac{\xi_1}{2}[\xi_1 \sigma_3 + (1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm}, \sigma_3]\right] \\ &= \exp\left[(1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm} - \frac{\xi_1^2}{2}[\sigma_3, \sigma_3] - \frac{\xi_1}{2}(1 \pm \xi_1)[\sigma_{\pm}, \sigma_3]\right] \\ &= \exp\left[(1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm} \pm \xi_1(1 \pm \xi_1)\sigma_{\pm}\right] \\ &= \exp\left[(1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm}\right] \\ &= 1 + (1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm} + \frac{1}{2!}[(1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm}]^2 + \frac{1}{3!}[(1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm}]^3 + \dots \\ &= 1 + (1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm}, \end{aligned}$$

esto quiere decir que (E.0.28) queda como

$$\exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_{\pm} \exp(-\xi_1 \sigma_3) = 1 + (1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm} - 1 = (1 \pm \xi_1)^2 \sigma_{\pm}.$$

Por otra parte, la condición de suponer que $t \ll T_1, T_2$ permite suponer a su vez que $\xi_1 \ll 1$. Con esto es posible aproximar

$$(1 \pm \xi)^2 \approx [\exp(\pm \xi)]^2 = \exp(\pm 2\xi),$$

con lo cual se obtiene que la transformación (E.0.28) en la forma

$$\exp(\xi_1 \sigma_3) \sigma_{\pm} \exp(-\xi_1 \sigma_3) = \exp(\pm 2\xi_1) \sigma_{\pm}, \quad (\text{E.0.30})$$

y el Hamiltoniano transformado $\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)}$ dado por (E.0.27) se escribe como

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)} = -\mu_{12}[\exp(+2\xi_1)\sigma_+ + \exp(-2\xi_1)\sigma_-]E(t),$$

con ξ_1 dado por (E.0.25).

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)} = -\mu_{12} \left[e^{+i\left(\omega_{21}t - \frac{\mu_P}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)\right)} \sigma_+ + e^{-i\left(\omega_{21}t - \frac{\mu_P}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)\right)} \sigma_- \right] E(t). \quad (\text{E.0.31})$$

Podemos expresar este Hamiltoniano de forma matricial utilizando (E.0.9) como

$$\hat{\mathcal{H}}_{tf}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -\mu_{12} e^{+i\left[\omega_{21}t - \frac{\mu_P}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)\right]} E(t) \\ -\mu_{12} e^{-i\left[\omega_{21}t - \frac{\mu_P}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)\right]} E(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.0.32})$$

Esta clase de procedimiento se puede continuar o, simplemente utilizar este Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{ef}^{(1)}$ para determinar la ecuación de movimiento de la matriz densidad transformada $\hat{\rho}^{(1)}$. Una vez resuelta $\hat{\rho}^{(1)}$, la transformación unitaria inversa nos regresaría la forma de $\hat{\rho}(t)$ para nuestro sistema, y con ella, procederíamos a calcular la polarización.

Sin embargo, PBB, proceden de otro modo. Con el propósito de verificar lo que realizan estos autores, permitámonos aquí seguir el desarrollo planteado en su artículo

$$\mu_{12} = \mu_{12} \exp \left[-i(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{i(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t) \right], \quad (\text{E.0.33})$$

con lo que, un término del tipo $\mu_{12}\rho_{12}(t)$ en la ecuación (E.0.4) quedaría invariante ante una transformación como la que hemos realizado, si se introduce el cambio de variables

$$\begin{aligned} \sigma_{12}(t) &= \rho_{12}(t) \exp \left[+i(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{i(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t) \right], \\ \sigma_{21}(t) &= \rho_{21}(t) \exp \left[-i(\omega_1 - \omega_2)t - \frac{i(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t) \right], \end{aligned} \quad (\text{E.0.34})$$

dejando la ecuación sin alterar. Eso es, precisamente, lo que hacen PBB (ver la ecuación (4) del artículo).

Una vez identificado este detalle del modelo, lo que queda es proceder de acuerdo a lo que ya hemos visto en las secciones anteriores. Con el cambio de variable (E.0.34), podemos calcular

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho_{12}(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left\{ \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} \right\} \\
&= \frac{d\sigma_{12}(t)}{dt} e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} + \\
&\quad - \left[i(\omega_1 - \omega_2) - \frac{i(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar} E_0 \cos(\omega t) \right] \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]},
\end{aligned}$$

entonces, la ecuación de movimiento (E.0.3), se obtiene multiplicando ambos lados la igualdad anterior por $i\hbar$ e igualando con el miembro derecho que aparece en (E.0.3),

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{12}(t)}{dt} &= i\hbar \frac{d\sigma_{12}(t)}{dt} e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} + \\
&\quad + \left[\hbar(\omega_1 - \omega_2) + (\mu_{22} - \mu_{11})E(t) \right] \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} \\
&= [\hbar(\omega_1 - \omega_2) - (\mu_{11} + \mu_{22})E(t)] \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} \\
&\quad - \mu_{12}E(t)\Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]}
\end{aligned}$$

eliminando el término en común que aparece de ambos lados de la igualdad, obtenemos la expresión siguiente

$$i\hbar \dot{\sigma}_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} = -\mu_{12}E(t)\Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]},$$

de modo que la ecuación de movimiento en nuestro cambio de variables se escribe como

$$i\hbar \dot{\sigma}_{12}(t) = -\mu_{12}E(t)\Delta(t) e^{+i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t), \quad (\text{E.0.35})$$

esta ecuación coincide con la ecuación (5) del artículo de PBB.

Igualmente para la ecuación de movimiento (E.0.4) en el cambio de variables descrito en (E.0.34) queda como

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} &= 2\mu_{12}E(t)[\rho_{21}(t) - \rho_{12}(t)] - \frac{i\hbar}{T_1} [\Delta(t) + 1] \\
&= 2\mu_{12}E(t) \left\{ \sigma_{21}(t) e^{+i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} \right. \\
&\quad \left. - \sigma_{12}(t) e^{-i[(\omega_1 - \omega_2)t + \frac{(\mu_{22} - \mu_{11})}{\hbar\omega} E_0 \sin(\omega t)]} \right\} - \frac{i\hbar}{T_1} [\Delta(t) + 1],
\end{aligned}$$

de donde, tenemos la ecuación de movimiento en las nuevas coordenadas como

$$i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} = 2\mu_{12}E(t) \left\{ \sigma_{21}(t)e^{+i[(\omega_1-\omega_2)t + \frac{(\mu_{22}-\mu_{11})}{\hbar\omega}E_0 \sin(\omega t)]} - \sigma_{12}(t)e^{-i[(\omega_1-\omega_2)t + \frac{(\mu_{22}-\mu_{11})}{\hbar\omega}E_0 \sin(\omega t)]} \right\} - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1], \quad (\text{E.0.36})$$

esta ecuación coincide con la ecuación (6) del artículo de PBB.

Ahora, en estas dos últimas ecuaciones de movimiento (E.0.35) y (E.0.36) vamos a escribir al campo eléctrico en término de exponenciales como sigue,

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t) = \frac{E_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (\text{E.0.37})$$

y además, vamos a utilizar la identidad

$$e^{ix \sin \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) e^{in\theta}, \quad (\text{E.0.38})$$

Consecuencia: $e^{-ix \sin \theta} = e^{ix \sin -\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) e^{-in\theta}$,

donde $J_n(x)$ es la función de Bessel de primer tipo, de orden n .

Primeramente, para la ecuación de movimiento (E.0.35) nos queda

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\sigma}_{12}(t) &= -\frac{\mu_{12}E_0}{2} \left[e^{i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}E_0\right) \sin(\omega t)} \right. \\ &\quad \left. + e^{i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}E_0\right) \sin(\omega t)} \right] \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t) \\ &= -\frac{\mu_{12}E_0}{2} \left[e^{i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) e^{in\omega t} \right. \\ &\quad \left. + e^{i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) e^{in\omega t} \right] \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t), \end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\sigma}_{12}(t) &= -\frac{\mu_{12}E_0}{2} \left[e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) e^{i(n+1)\omega t} \right. \\ &\quad \left. + e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) e^{i(n-1)\omega t} \right] \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t), \end{aligned} \quad (\text{E.0.39})$$

la cual coincide con la ecuación (9) del artículo de PBB.

Análogamente para la ecuación de movimiento (E.0.36) nos queda:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} = & \mu_{12}E_0 \left[\sigma_{21}(t)e^{i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}\right)E_0} \sin(\omega t) \right. \\
& + \sigma_{21}(t)e^{i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}\right)E_0} \sin(\omega t) \\
& - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}\right)E_0} \sin(-\omega t) \\
& \left. - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} e^{i\left(\frac{\mu_{22}-\mu_{11}}{\hbar\omega}\right)E_0} \sin(-\omega t) \right] - \frac{i\hbar}{T_1} [\Delta(t) + 1],
\end{aligned}$$

de modo que aplicando la identidad (??)

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} = & \mu_{12}E_0 \left[\sigma_{21}(t)e^{i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{in\omega t} \right. \\
& + \sigma_{21}(t)e^{i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{in\omega t} \\
& - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega_1-\omega_2-\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{-in\omega t} \\
& \left. - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega_1-\omega_2+\omega)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{-in\omega t} \right] - \frac{i\hbar}{T_1} [\Delta(t) + 1],
\end{aligned} \tag{E.0.40}$$

Vamos a fijarnos en la suma que está del lado derecho entre paréntesis cuadrados en la ecuación (E.0.39)

$$e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{i(n+1)\omega t} + e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{i(n-1)\omega t},$$

si nosotros estamos interesados en lo que ocurre cuando la frecuencia angular del campo electromagnético incidente ω está cerca de la resonancia con la transición $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$, es decir, $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1 \approx \omega$, en el límite realista cuando $\hbar\omega \gg |\mu_{12}E_0|$, nos podemos quedar únicamente con los términos que contengan $\omega - \omega_{21}$ en las exponenciales (que son los términos que se verán reflejados en términos resonantes del tipo $(\omega - \omega_{21})^{-1}$); cuando se toman las transformadas de Fourier se pasa a la representación espectral).

Analizando la expresión de arriba, nos damos cuenta que los términos que nos interesan son: el que tiene $n = 0$ en el primer sumando y $n = 2$ en el segundo sumando.

El resto de los términos en las sumas son altamente no resonantes y se omitirán. Esto resulta en una “versión extendida” de la RWA. La expresión anterior queda simplemente

$$e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_0 \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) + e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_2 \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right);$$

y la ecuación de movimiento quedará como

$$i\hbar\dot{\sigma}_{12}(t) = -\frac{\mu_{12}E_0}{2} \left[e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right] \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma_{12}(t). \quad (\text{E.0.41})$$

Vamos a definir

$$\bar{\mu}_{12} = \mu_{12} \left[J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right], \quad (\text{E.0.42})$$

y además introducimos un nuevo cambio de variables

$$\sigma(t) = \sigma_{12}(t) e^{-i(\omega-\omega_{21})t}, \quad (\text{E.0.43})$$

de este cambio de variables, la ecuación de movimiento (E.0.41) nos queda como

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\sigma}_{12}(t) &= i\hbar\dot{\sigma}(t) e^{i(\omega-\omega_{21})t} + i\hbar\sigma(t) [i(\omega-\omega_{21})] e^{i(\omega-\omega_{21})t} \\ &= -\frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{2} e^{i(\omega-\omega_{21})t} \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma(t) e^{i(\omega-\omega_{21})t}, \end{aligned}$$

eliminando el factor exponencial que aparece en ambos lados de la igualdad, podemos obtener

$$i\hbar\dot{\sigma}(t) = -i(\omega-\omega_{21})\hbar\sigma(t) - \frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{2} \Delta(t) - \frac{i\hbar}{T_2} \sigma(t),$$

por lo tanto, la primer ecuación de movimiento se transforma en

$$\dot{\sigma}(t) = -\left[i(\omega-\omega_{21}) + \frac{1}{T_2} \right] \sigma(t) + i\frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{2\hbar} \Delta(t), \quad (\text{E.0.44})$$

Por otro lado, la otra ecuación de movimiento (E.0.40) se puede escribir como

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\Delta(t)}{dt} &= \mu_{12}E_0 \left[\sigma_{21}(t) e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{i(n+1)\omega t} \right. \\ &\quad + \sigma_{21}(t) e^{-i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{i(n-1)\omega t} \\ &\quad - \sigma_{12}(t) e^{i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{-i(n-1)\omega t} \\ &\quad \left. - \sigma_{12}(t) e^{i(\omega_2-\omega_1)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0 \right) e^{-i(n+1)\omega t} \right] - \frac{i\hbar}{T_1} [\Delta(t) + 1], \end{aligned}$$

de esta expresión nos interesamos en aquellos que tienen la frecuencia del campo electromagnético incidente ω cercana a la frecuencia resonancia $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$, entonces nos queda simplemente

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\Delta(t)}{dt} &= \mu_{12}E_0 \left[\sigma_{21}(t)e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) + \sigma_{21}(t)e^{i(\omega-\omega_{21})t} J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) \right. \\
&\quad \left. - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega-\omega_{21})t} J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega-\omega_{21})t} J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) \right] - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1], \\
&= \mu_{12}E_0 \left[J_0\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) + J_2\left(\frac{|\mu_{22}-\mu_{11}|}{\hbar\omega}E_0\right) \right] \left[\sigma_{21}(t)e^{i(\omega-\omega_{21})t} - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega-\omega_{21})t} \right] \\
&\quad - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1] \\
&= \bar{\mu}_{12}E_0 \left[\sigma_{12}^*(t)e^{i(\omega-\omega_{21})t} - \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega-\omega_{21})t} \right] - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1],
\end{aligned}$$

con el cambio de variables definido en (E.0.43), finalmente nos queda que la segunda ecuación de movimiento se transforma como

$$i\hbar \dot{\Delta}(t) = \bar{\mu}_{12}E_0 \left[\sigma^*(t) - \sigma(t) \right] - \frac{i\hbar}{T_1}[\Delta(t) + 1]$$

que finalmente nos lleva a

$$\dot{\Delta}(t) = -\frac{1}{T_1}[\Delta(t) + 1] - i\frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{\hbar} \left[\sigma^*(t) - \sigma(t) \right]. \quad (\text{E.0.45})$$

Por lo tanto, las ecuaciones de movimiento a trabajar son (E.0.43), (E.0.44) y (E.0.45) que vale la pena reescribir,

$$\sigma(t) = \sigma_{12}(t)e^{-i(\omega-\omega_{21})t}, \quad (\text{E.0.46})$$

$$\dot{\sigma}(t) = -\left[i(\omega - \omega_{21}) + \frac{1}{T_2} \right] \sigma(t) + i\frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{2\hbar} \Delta(t), \quad (\text{E.0.47})$$

$$\dot{\Delta}(t) = -\frac{1}{T_1}[\Delta(t) + 1] - i\frac{\bar{\mu}_{12}E_0}{\hbar} \left[\sigma^*(t) - \sigma(t) \right]. \quad (\text{E.0.48})$$

Es importante destacar que en estas ecuaciones permanece presenta la información acerca de los dipolos permanentes μ_{11} y μ_{22} a través del término $\bar{\mu}_{12}$ definido antes, incluso después de aplicar la RWA.

En el artículo PBB, resuelven las ecuaciones anteriores con las condiciones estacionarias

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = 0, \quad \frac{d\Delta(t)}{dt} = 0.$$

Haciendo $\Omega = \bar{\mu}_{12}E_0/2\hbar$ en la ecuación (E.0.47) es posible obtener

$$\dot{\sigma}(t) = 0 = -\left[i(\omega - \omega_{21}) + \frac{1}{T_2}\right]\sigma(t) + i\Omega\Delta(t) \Rightarrow \sigma(t) = \frac{i\Omega\Delta(t)}{T_2^{-1} - i(\omega_{21} - \omega)},$$

y se realiza algo similar para obtener

$$\Delta(t) = -1 - 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t),$$

que forman el sistema de ecuaciones a resolver, con esto nos queda

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= \frac{i\Omega\Delta(t)}{T_2^{-1} - i(\omega_{21} - \omega)} = -\frac{i\Omega[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)]}{T_2^{-1} - i(\omega_{21} - \omega)} \\ &= -\frac{i\Omega[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)][T_2^{-1} + i(\omega_{21} - \omega)]}{T_2^{-2} + i(\omega_{21} - \omega)^2} \\ &= \frac{\Omega T_2^2(\omega_{21} - \omega)[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2} - i\frac{\Omega T_2[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}, \end{aligned}$$

escribiendo a $\sigma(t) = \text{Re}\sigma(t) + i\text{Im}\sigma(t)$, encontramos que

$$\text{Im}\sigma(t) = \frac{\Omega T_2[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2} = -\frac{\Omega T_2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2} - \frac{4\Omega^2 T_1 T_2 \text{Im}\sigma(t)}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2},$$

de donde podemos obtener la relación siguiente,

$$\left(1 + \frac{4\Omega^2 T_1 T_2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}\right) \text{Im}\sigma(t) = -\frac{\Omega T_2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2},$$

finalmente obtenemos

$$\text{Im}\sigma(t) = -\frac{\Omega T_2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2},$$

similarmente, para la parte real tenemos que,

$$\text{Re}\sigma(t) = \frac{\Omega T_2^2(\omega_{21} - \omega)[1 + 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t)]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2},$$

al sustituir $\text{Im}\sigma(t)$ nos queda

$$\text{Re}\sigma(t) = -\frac{(\omega_{21} - \omega)\Omega T_2^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2},$$

de modo que juntando la parte real e imaginaria de $\sigma(t)$ encontramos que este está dado por

$$\sigma(t) = \text{Re}\sigma(t) + i\text{Im}\sigma(t) = -\Omega T_2 \frac{(\omega_{21} - \omega)T_2 + i}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2},$$

y podemos encontrar que para $\Delta(t)$ nos queda

$$\begin{aligned} \Delta(t) &= -1 - 4\Omega T_1 \text{Im}\sigma(t) = -1 + 4\Omega T_1 \frac{\Omega T_2^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2} \\ &= -\frac{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2}, \end{aligned}$$

de modo que hasta el momento tenemos

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= -\Omega T_2 \frac{(\omega_{21} - \omega)T_2 + i}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2}, \\ \Delta(t) &= -\frac{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + 4T_1 T_2 \Omega^2}, \end{aligned}$$

sustituyendo $\Omega = \bar{\mu}_{12} E_0 / 2\hbar$ encontramos que

$$\sigma(t) = -\frac{\bar{\mu}_{12} E_0 T_2}{2\hbar} \frac{(\omega_{21} - \omega)T_2 + i}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}, \quad (\text{E.0.49})$$

$$\Delta(t) = -\frac{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}, \quad (\text{E.0.50})$$

las cuales son precisamente las soluciones que aparecen en el artículo PBB. Un detalle importante a destacar es que $\Delta(t)$ en realidad no depende del tiempo.

Haciendo N la concentración por unidad de volumen de electrones en el punto cuántico, la polarización se obtiene de

$$P = N \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mu}) - N \text{Tr}(\hat{\rho}^{(0)} \hat{\mu}^{(0)}). \quad (\text{E.0.51})$$

Para el caso inicial de equilibrio, $\hat{\rho}_{ij}^{(0)} = \rho_{ii}^{(0)} \delta_{ij}$ y $\hat{\mu}^{(0)}$ es el operador del momento dipolar eléctrico permanente que es igual a μ_{11} , dado que antes que la radiación incida en el sistema se supone que todos los electrones se encuentran en el estado básico $|1\rangle$. Entonces

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^{(0)} \hat{\mu}^{(0)}) = \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} \rho_{11}^{(0)} & 0 \\ 0 & \rho_{22}^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_{11} & 0 \\ 0 & \mu_{11} \end{pmatrix} \right] = (\rho_{11}^{(0)} + \rho_{22}^{(0)}) \mu_{11} = \mu_{11},$$

donde hemos utilizado la propiedad $\text{Tr}\hat{\rho}^{(0)} = \rho_{11}^{(0)} + \rho_{22}^{(0)} = 1$. De modo que la polarización (E.0.51) queda dada por

$$\begin{aligned} P &= N\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mu}) - N\mu_{11} \\ &= N[\rho_{11}\mu_{11} + \rho_{22}\mu_{22} + (\rho_{12} + \rho_{21})\mu_{12}] - N\mu_{11} \\ &= N(\rho_{12} + \rho_{21})\mu_{12} + N(\rho_{11}\mu_{11} + \rho_{22}\mu_{22}) - N\mu_{11}. \end{aligned}$$

Ahora, usando el hecho de que $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$, sumando y restando esta cantidad, vamos a obtener que

$$P = N(\rho_{12} + \rho_{21})\mu_{12} + N(\rho_{11}\mu_{11} + \rho_{22}\mu_{22}) - N\mu_{11} = P_1 + P_2, \quad (\text{E.0.52})$$

donde

$$P_1 = \frac{1}{2}N(\mu_{22} - \mu_{11})(1 + \Delta), \quad P_2 = N\mu_{12}(\rho_{12} + \rho_{21}). \quad (\text{E.0.53})$$

La parte P_1 de la polarización es la contribución estática (ya que hemos obtenido que $\Delta(t)$, en realidad no depende del tiempo, ver (E.0.50)) y determina la respuesta que es proporcional únicamente al módulo cuadrado del campo $E(t)$. El término estático es entonces

$$P_1 = \frac{1}{4}\epsilon_0\chi^{(0)}E_0^2, \quad (\text{E.0.54})$$

Lo cual constituye el llamado *Coefficiente de rectificación óptica no lineal*. Sustituyendo Δ dado por (E.0.50) en (E.0.52), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}\epsilon_0\chi^{(0)}E_0^2 &= \frac{1}{2}N(\mu_{22} - \mu_{11})\left[1 - \frac{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}\right] \\ &= \frac{1}{2}N(\mu_{22} - \mu_{11})\left[\frac{\bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}\right] \end{aligned}$$

de donde, utilizando $\bar{\mu}_{12}$ dado por (E.0.42) podemos resolver para obtener,

$$\chi^{(0)} = \frac{2N|\mu_{22} - \mu_{11}|^2 \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2}{\epsilon_0 \hbar^2} \frac{\left[J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2}. \quad (\text{E.0.55})$$

El término P_2 sí contiene una dependencia temporal dado que se reescribirá utilizando el cambio de coordenadas (E.0.34) y (E.0.46),

$$P_2 = N\mu_{12} \left[\sigma(t) e^{i\omega t - i\frac{(\mu_{22} - \mu_{11})E_0}{\hbar\omega} \sin(\omega t)} + \sigma^*(t) e^{-i\omega t + i\frac{(\mu_{22} - \mu_{11})E_0}{\hbar\omega} \sin(\omega t)} \right],$$

nuevamente utilizaremos la identidad (E.0.38) para poner

$$\begin{aligned}
P_2 = N\mu_{12} & \left[\sigma(t)e^{i\omega t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) e^{-in\omega t} \right. \\
& \left. + \sigma^*(t)e^{-i\omega t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) e^{in\omega t} \right]
\end{aligned} \tag{E.0.56}$$

por otro lado, por definición

$$P_2 = \frac{1}{2}\epsilon_0 E_0 [\chi(\omega)e^{-i\omega t} + \chi(-\omega)e^{i\omega t}], \tag{E.0.57}$$

para la respuesta de polarización ante un campo eléctrico no estático, $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$, el uso de la versión modificada de la RWA que nos deja los correspondientes términos exponenciales en la forma (E.0.56)

$$\begin{aligned}
P_2(\omega) &= \frac{1}{2}\epsilon_0 E_0 \chi(\omega) e^{-i\omega t}, \\
&= N\mu_{12} \left[\sigma(t) J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) e^{-i\omega t} + \sigma^*(t) J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) e^{-i\omega t} \right]
\end{aligned}$$

de donde obtenemos que

$$\chi(\omega) = \frac{2N\mu_{12}}{\epsilon_0 E_0} \left[\sigma(t) J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + \sigma^*(t) J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right] \tag{E.0.58}$$

a partir de las conocidas fórmulas

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega_{21}}{nc} \text{Im}[\chi(\omega)], \tag{E.0.59}$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2} \text{Re}[\chi(\omega)], \tag{E.0.60}$$

podemos determinar los coeficientes de absorción óptica y de cambio relativo de índice de refracción dependientes de la intensidad de la luz incidente

$$I = \frac{n\epsilon_0 c}{2} E_0^2. \tag{E.0.61}$$

Así, sustituyendo $\sigma(t)$ y $\sigma^*(t)$ dada por (E.0.49), obtenemos

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= \frac{2N\mu_{12}}{\epsilon_0 E_0} \left[-\frac{\bar{\mu}_{12} E_0 T_2}{2\hbar} \frac{(\omega_{21} - \omega)T_2 + i}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\bar{\mu}_{12} E_0 T_2}{2\hbar} \frac{(\omega_{21} - \omega)T_2 - i}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right] \\
&= \frac{N\mu_{12}\bar{\mu}_{12}T_2}{\epsilon_0 \hbar} \left[-(\omega_{21} - \omega)T_2 \frac{\left[J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \right. \\
&\quad \left. + i \frac{\left[J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) - J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \right],
\end{aligned}$$

Entonces, las correspondientes parte real e imaginarias con $\bar{\mu}_{12}$ dado por (E.0.42) son

$$\text{Im}[\chi(\omega)] = \frac{N\mu_{12}^2 T_2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\left[J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 - J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 \right]}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \quad (\text{E.0.62})$$

$$\text{Re}[\chi(\omega)] = -\frac{N\mu_{12}^2 T_2^2 (\omega_{21} - \omega)}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\left[J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \quad (\text{E.0.63})$$

con lo que usando las fórmulas (E.0.59) y (E.0.60) nos va a quedar

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega_{21}}{nc} \text{Im}[\chi(\omega)] = \frac{\omega_{21} N \mu_{12}^2 T_2}{\epsilon_0 \hbar n c} \frac{\left| J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 - J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right)^2 \right|}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \quad (\text{E.0.64})$$

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2} \text{Re}[\chi(\omega)] = -\frac{N \mu_{12}^2 T_2^2 (\omega_{21} - \omega)}{2\epsilon_0 \hbar n^2} \frac{\left[J_2\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) + J_0\left(\frac{|\mu_{22} - \mu_{11}|}{\hbar\omega} E_0\right) \right]^2}{1 + T_2^2(\omega_{21} - \omega)^2 + \bar{\mu}_{12}^2 T_1 T_2 E_0^2 / \hbar^2} \quad (\text{E.0.65})$$

y con esto concluimos.

Apéndice F

Funciones hiperbólicas de tipo Fibonacci y k Fibonacci

Como es conocido, las funciones hiperbólicas clásicas se definen como

$$\begin{aligned}\sinh(z) &= \frac{e^z - e^{-z}}{2}, \\ \cosh(z) &= \frac{e^z + e^{-z}}{2},\end{aligned}\tag{F.0.1}$$

por otro lado, recientemente se han definido las *funciones hiperbólicas de Fibonacci* [9], como

$$\begin{aligned}\text{sFh}(z) &= \frac{\phi^{2z} - \phi^{-2z}}{\sqrt{5}}, \\ \text{cFh}(z) &= \frac{\phi^{2z+1} + \phi^{-(2z+1)}}{\sqrt{5}},\end{aligned}\tag{F.0.2}$$

donde sFh y cFh son llamadas *hyperbolic Fibonacci sine and cosine functions*, respectivamente (en español reciben el nombre de *funciones seno y coseno hiperbólicos tipo Fibonacci*), donde

$$\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}.\tag{F.0.3}$$

Estas funciones pueden ser extendidas a *funciones hiperbólicas tipo k-Fibonacci* como sigue

$$\begin{aligned}\text{sF}_k\text{h}(z) &= \frac{\sigma_k^{2z} - \sigma_k^{-2z}}{\sqrt{k^2 + 4}}, \\ \text{cF}_k\text{h}(z) &= \frac{\sigma_k^{2z+1} - \sigma_k^{-2z+1}}{\sqrt{k^2 + 4}},\end{aligned}\tag{F.0.4}$$

bajo la condición de que σ_k es una raíz positiva de la ecuación característica asociada a la secuencia

k-Fibonacci, esto es,

$$\sigma_k = \frac{k + \sqrt{k^2 + 4}}{2}, \quad (\text{F.0.5})$$

observemos que $sF_k h(z)$ es simétrico con respecto al origen, mientras que el gráfico de $cF_k h(z)$ es simétrico con respecto al eje $z = -1/2$. Si realizamos el cambio $2z + 1 = x$ en la función $cF_k h(z)$, la simetría en la nueva variable t será con respecto al eje $t = 0$. Por este motivo, de ahora en adelante, las *funciones hiperbólicas de tipo k-Fibonacci* se definen como simplemente

$$\begin{aligned} sF_k h(z) &= \frac{\sigma_k^z - \sigma_k^{-z}}{\sigma_k + \sigma_k^{-1}}, \\ cF_k h(z) &= \frac{\sigma_k^z - \sigma_k^{-z}}{\sigma_k + \sigma_k^{-1}}, \end{aligned} \quad (\text{F.0.6})$$

dado que $\sigma_k + \sigma_k^{-1} = \sqrt{k^2 + 4}$.

El gráfico de las funciones $sFh(z)$ y $cFh(z)$ se muestran a continuación

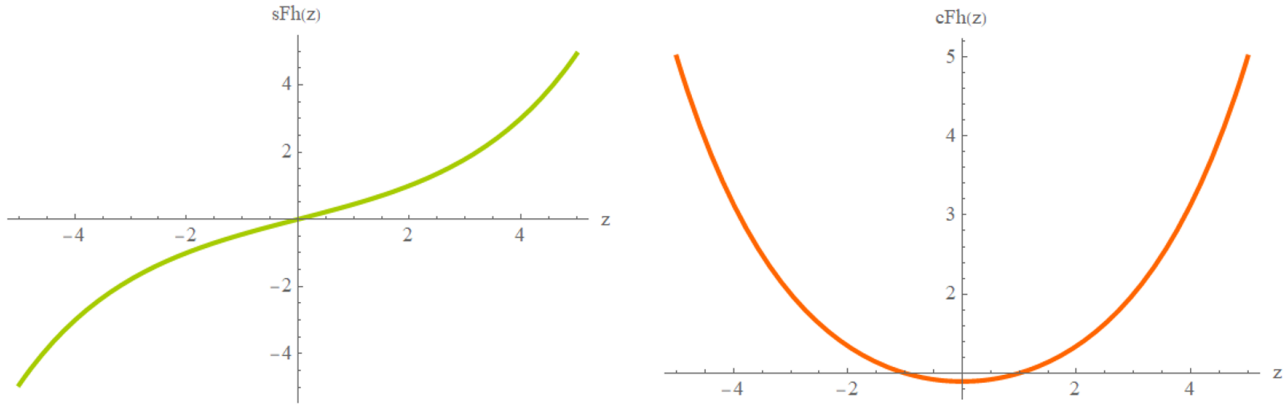


Figura F.0.1: *Funciones hiperbólicas de tipo Fibonacci*, $sFh(z)$ en la izquierda y $cFh(z)$ en la derecha; observemos que la función $cFh(z)$ se encuentra desplazada para ser simétrica con el eje $z = 0$.

De las funciones hiperbólicas de tipo Fibonacci (y su generalización k-Fibonacci), podemos ver que la función que nos genera un posible perfil de pozo de potencial de barrera finita es la función $cFh(z)$ y $cF_k h(z)$, es por este motivo que omitimos la funciones $sFh(z)$ y $sF_k h(z)$.

Bibliografía

- [1] Neil W Ashcroft, N David Mermin, et al. Solid state physics, 1976.
- [2] Gerald Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. 1990.
- [3] DJ BenDaniel and CB Duke. Space-charge effects on electron tunneling. *Physical review*, 152(2):683, 1966.
- [4] Robert W Boyd. *Nonlinear optics*. Academic press, 2020.
- [5] HR Christiansen and MS Cunha. Solutions to position-dependent mass quantum mechanics for a new class of hyperbolic potentials. *Journal of Mathematical Physics*, 54(12):122108, 2013.
- [6] Rami Ahmad El-Nabulsi. A generalized self-consistent approach to study position-dependent mass in semiconductors organic heterostructures and crystalline impure materials. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 124:114295, 2020.
- [7] Rami Ahmad El-Nabulsi. Dynamics of position-dependent mass particle in crystal lattices microstructures. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 127:114525, 2021.
- [8] Rami Ahmad El-Nabulsi. Quantum dynamics in low-dimensional systems with position-dependent mass and product-like fractal geometry. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, page 114827, 2021.
- [9] Sergio Falcon and Angel Plaza. The k-fibonacci hyperbolic functions. *Chaos, Solitons & Fractals*, 38(2):409–420, 2008.
- [10] Paul Harrison and Alex Valavanis. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2016.
- [11] Philip Hofmann. *Solid state physics: an introduction*. John Wiley & Sons, 2015.
- [12] M Jaros. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, 1991.
- [13] Evan O Kane. Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261, 1957.
- [14] Charles Kittel, Paul McEuen, and Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*, volume 8. Wiley New York, 1996.
- [15] DA Ospina, ME Mora-Ramos, and CA Duque. Effects of hydrostatic pressure and electric field on the electron-related optical properties in gaas multiple quantum well. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 17(2):1247–1254, 2017.

- [16] Emmanuel Paspalakis, John Boviatsis, and Sotirios Baskoutas. Effects of probe field intensity in nonlinear optical processes in asymmetric semiconductor quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 114(15):153107, 2013.
- [17] KA Rodríguez-Magdaleno, Miguel Eduardo Mora-Ramos, R Pérez-Álvarez, and Juan Carlos Martínez-Orozco. Effect of the hydrostatic pressure and shell's al composition in the intraband absorption coefficient for core/shell spherical gaas/alxga1- xas quantum dots. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 108:104906, 2020.
- [18] Oldwig von Roos. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. *Physical Review B*, 27(12):7547, 1983.
- [19] QHF Vrehen. Interband magneto-optical absorption in gallium arsenide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 29(1):129–141, 1968.
- [20] I Vurgaftman, J áR Meyer, and L áR Ram-Mohan. Band parameters for iii–v compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11):5815–5875, 2001.
- [21] Claude Weisbuch and Borge Vinter. *Quantum semiconductor structures: fundamentals and applications*. Elsevier, 2014.