

Excitones confinados en puntos cuánticos esféricos prolatos

A. Corella-Madueño^a, R.A. Rosas^a, J.L. Marín^b y R. Riera^b

^aDepartamento de Física, Universidad de Sonora,
Apartado Postal 1626, Hermosillo, Sonora.

^bDepartamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora,
Apartado Postal A-088, Hermosillo, Sonora.

Recibido el 20 de junio de 2002; aceptado el 29 de enero de 2004

Se usa el método variacional para resolver en forma aproximada la ecuación de onda de Schrödinger asociada a un excitón de Wannier-Mott confinado en un punto cuántico de forma esférica. Se analiza el efecto que el confinamiento tiene sobre la energía del estado base del par electrón-hueco atrapado en una cristalita con esta geometría, considerando paredes tanto impenetrables como penetrables, según convenga, imponiendo las condiciones adecuadas en la frontera. Los resultados de este estudio, que se muestran a continuación, se comparan con los obtenidos por otros autores mediante métodos más sofisticados, así como con experimentos realizados con cristalitas de CdS contenidas en materiales de diferente composición. En el caso de una barrera de potencial finita, se predice un tamaño crítico de la cristalita a partir del cual el excitón se desconfinan, lo cual contrasta con el modelo de barrera de potencial infinita en donde el excitón nunca puede escapar de la región donde se encuentra.

Descriptores: Excitones de Wannier-Mott; puntos cuánticos

The variational method is used to solve in approximately way the Schrödinger's wave equation associated to a Wannier-Mott exciton confined within a spheroidal quantum dot. The confinement effect on the ground-state energy of the electron-hole pair trapped inside a crystallite with this geometry, and with soft or hard walls, is analyzed. The walls can be modeled as finite or infinite potential barriers with suitable border conditions, which will depend on the considered case. The results of this work are compared with those obtained by other authors through more sophisticated methods. A comparison with experimental data of CdS crystallites embedded in materials of different composition is made, too. For a finite potential barrier, a critical size of the crystallite from which the exciton escapes of the quantum dot, is predicted. This is in opposition with the infinite potential barrier model where the exciton never can leave the region where it is confined.

Keywords: Wannier-Mott excitons; quantum dots.

PACS: 61.46.+w; 73.21.La

1. Introducción

En las últimas dos décadas, el estudio teórico y experimental de excitones confinados en microcristales semiconductores se ha convertido en un tema de gran interés, debido a que en tales estructuras se modifica la energía de los estados excitónicos de Wannier-Mott, lo cual produce cambios importantes en las propiedades ópticas de las cristalitas con respecto a las propiedades ópticas correspondientes que presentan los sistemas no confinados del mismo material [1-5].

Durante este tiempo, se han desarrollado teorías que toman en cuenta la dependencia de los niveles de energía de los excitones confinados en pequeños puntos cuánticos esféricos, en función de sus dimensiones. Existen dos casos límite que dependen de la relación entre el radio r_0 del punto cuántico y el radio de Bohr efectivo a_B del excitón. Para $r_0/a_B \gg 1$, el excitón puede visualizarse como una cuasi-partícula moviéndose en el interior del punto cuántico con sólo un pequeño incremento de su energía debido al confinamiento; en este caso, el modelo de pozo de potencial infinito (dentro del esquema de aproximación de la masa efectiva de dos bandas (EMA)) da una descripción razonable del corrimiento de la energía del estado base del excitón observado experimentalmente. Esto último se cumple para otros tipos de tratamientos como, por ejemplo, el basado en el modelo de orbital de enlace efectivo (EBOM) [6]. En el límite opuesto, $r_0/a_B \leq 1$, el

efecto del confinamiento es más intenso y el electrón y el hueco podrían considerarse como partículas individuales en sus respectivos estados base, con muy poca correlación espacial entre ellos. En este régimen (llamado régimen de confinamiento fuerte) el excitón en el punto cuántico "siente" intensamente los efectos de la frontera, y el incluir una barrera de potencial de confinamiento finita se vuelve un requerimiento importante que debe ser tomado en cuenta. Este modelo de barrera de potencial de altura finita permite describir mejor las observaciones experimentales de las propiedades ópticas de pequeñas cristalitas [1, 7].

Adicionalmente, el estudio de impurezas hidrogenoides atrapadas en sólidos ha puesto en evidencia algunas limitaciones del modelo de confinamiento en cajas esféricas, ya que este tipo de modelo no permite describir en forma correcta algunas de las propiedades observadas experimentalmente. Por ejemplo, el desdoblamiento hiperfino observado en hidrógeno atómico en cuarzo α , muestra la presencia de componentes anisótropas distintas de cero [8]; además, los estudios experimentales realizados mediante la técnica de microscopía electrónica en cúmulos semiconductores muestran la existencia de micropartículas, cuyas formas varían desde cuasi-esféricas hasta piramidales [1]. Lo anterior ha motivado la utilización de modelos teóricos que involucran cajas de confinamiento no esféricas [9-15]. De esta manera, los resultados teóricos y experimentales muestran que las propiedades físi-

cas de los sistemas confinados dependen tanto del grado de confinamiento como de la geometría del sistema confinado.

En la siguiente sección, presentamos el modelo teórico empleado para estudiar la energía del estado base de un excitón confinado en un punto cuántico con forma de un elipsoide prolato. El modelo contiene información acerca de la altura de la barrera de potencial que confina al excitón.

En las Sec. 3 y 4 se presentan las funciones de onda variacionales propuestas como solución aproximada de la ecuación de onda de Schödinger para los casos de frontera impenetrable y penetrable, respectivamente, así como los desarrollos matemáticos pertinentes. En cada caso se hace una comparación de los resultados teóricos obtenidos con los datos experimentales disponibles. Finalmente, algunas discusiones de los resultados son consideradas como conclusiones del trabajo.

2. El modelo y la teoría aplicada

En la teoría de bandas de energía de un sólido cristalino, un excitón de Wannier-Mott es una cuasi-partícula que se forma durante la excitación del cristal cuando un electrón es transferido de la banda de valencia a la banda de conducción. En esta situación, los estados de la banda de valencia son removidos y es posible considerar, si se desprecia la interacción coulombiana entre los electrones, que el electrón de la banda de conducción queda ligado a un hueco de la banda de valencia a través de una interacción de tipo coulombiano. En este modelo el hueco tiene asociada una carga positiva y una masa efectiva. El estado queda caracterizado físicamente por un electrón y un hueco orbitando uno alrededor del otro, y que puede propagarse libremente por el cristal. La energía de ligadura de estos excitones es menor que el ancho de la banda prohibida y su radio es, por tanto, mayor que el parámetro de la red. Esto implica que la dinámica del excitón es equivalente a la de un par de cargas de signos opuestos moviéndose en un material con una cierta constante dieléctrica.

En el esquema de la aproximación de la masa efectiva de dos bandas, los niveles de energía se pueden obtener mediante un modelo de tipo hidrogenoide en el cual el hueco juega el papel del núcleo. Cuando el movimiento de este sistema se restringe espacialmente al interior de una nanoestructura de forma esferoidal, las coordenadas más adecuadas para describirlo son las coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, φ) definidas como

$$\xi = \frac{(r_1 + r_2)}{2R}, \quad \eta = \frac{(r_1 - r_2)}{2R}, \quad \varphi = \varphi, \quad (1)$$

donde r_1 y r_2 son las distancias desde cualquier punto a dos puntos fijos (llamados focos) separados por una distancia $2R$. En estas coordenadas,

$$\{\xi = \text{constante}, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi\} \quad (2)$$

define una familia de elipsoides de revolución alrededor del eje z , mientras que

$$\{1 \leq \xi < \infty, \quad \eta = \text{constante}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi\} \quad (3)$$

define una familia de hiperboloides de revolución alrededor del eje z . En ambos casos, $2R$ es la distancia interfocal y φ es el ángulo azimut usual [16]. En la Fig. 1, se muestran las coordenadas esferoidales prolatas.

Un modelo de hamiltoniano adecuado para la descripción de este sistema (tomando $\hbar = e = 1$) es

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{1}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{1}{\varepsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_h + V_e, \quad (4)$$

donde ε es la constante dieléctrica del material, m_h, m_e, \mathbf{r}_h y \mathbf{r}_e son las masas efectivas y las posiciones del hueco y del electrón, respectivamente, y se ha tomado a uno de los focos del esferoide como punto de referencia para localizarlos, como se muestra en la Fig. 2; V_h y V_e representan la altura de la barrera de potencial de confinamiento para el hueco y para el electrón, respectivamente.

Las posiciones del hueco y del electrón quedan especificadas en estas coordenadas por

$$r_h = R(\xi + \eta) \quad \text{y} \quad r_e = R(\xi' + \eta'). \quad (5)$$

En coordenadas esferoidales, el operador laplaciano puede escribirse como

$$\nabla^2 = \frac{1}{R^2 (\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (6)$$

El potencial atractivo hueco-electrón puede escribirse como un desarrollo en serie de productos de polinomios aso-

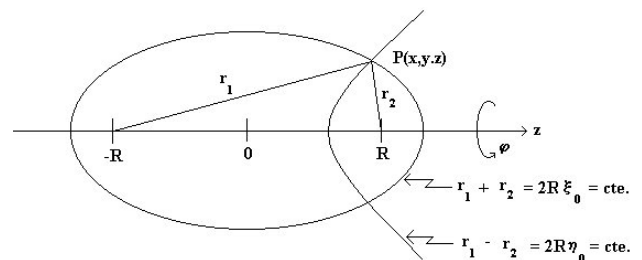


FIGURA 1. Diagrama esquemático de las coordenadas esferoidales prolatas.

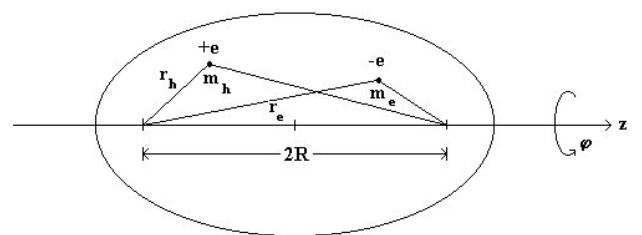


FIGURA 2. Diagrama esquemático de las coordenadas del excitón.

ciados de Legendre:

$$V_{eh} = \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} = \frac{1}{R} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sum_{m=0}^{\ell} \epsilon_m i^m \left[\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \right]^2 \times \cos m(\varphi - \varphi') P_{\ell}^m(\eta) P_{\ell}^m(\eta') f_{\ell}^m(\xi, \xi') \quad (7)$$

donde

$$f_{\ell}^m(\xi, \xi') = \begin{cases} f_{\ell_1}^m(\xi, \xi') = P_{\ell}^m(\xi') Q_{\ell}^m(\xi), & \xi > \xi' \\ f_{\ell_2}^m(\xi, \xi') = P_{\ell}^m(\xi) Q_{\ell}^m(\xi'), & \xi < \xi' \end{cases} \quad (8)$$

ϵ_m es el factor de Neumann: $\epsilon_0 = 1, \epsilon_n = 2 (n = 1, 2, 3, \dots)$ [17].

3. Excitones confinados en puntos cuánticos esféricos con frontera impenetrable

Cuando el movimiento del excitón se restringe al interior de un punto cuántico esférico prolatado impenetrable, definido como

$$\{\xi = \xi_0, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}, \quad (9)$$

entonces el potencial de confinamiento queda especificado por:

$$V_h = V_e = \begin{cases} 0, & 1 \leq \xi, \quad \xi' \leq \xi_0 \\ \infty, & \xi_0 < \xi, \quad \xi' < \infty, \end{cases} \quad (10)$$

La función de onda propuesta debe satisfacer las siguientes condiciones en la frontera

$$\begin{aligned} \psi(\xi = \xi_0, \eta, \varphi; \xi', \eta', \varphi') &= 0, \\ \psi(\xi, \eta, \varphi; \xi' = \xi_0, \eta', \varphi') &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

La estructura del hamiltoniano, Ec. (4), es similar a la del átomo de helio confinado en un elipsoide impenetrable estudiado en la Ref. 14, pero en este caso, el término coulombiano de repulsión electrón-electrón se ha reemplazado por una interacción atractiva entre el electrón y el hueco, y se han eliminado los términos que representan la interacción del núcleo del átomo de helio con cada uno de los electrones. La estrategia a seguir es la misma que en el tratamiento del átomo de helio confinado, es decir, la función de onda de prueba para el excitón se construye como el producto de dos funciones hidrogenoides del tipo 1s. De acuerdo con esto, la función de onda del estado base en la región interior ($1 \leq \xi, \xi' \leq \xi_0$) se define como

$$\psi = A \exp[-\alpha R(\xi + \eta)] \times \exp[-\alpha R(\xi' + \eta')] (\xi - \xi_0) (\xi' - \xi_0), \quad (12)$$

donde α es un parámetro variacional que se determinará al momento de realizar la minimización de la energía total, con

la restricción adicional impuesta por la Ec. (11). Para satisfacer esta condición se han incluido las dos funciones auxiliares $(\xi - \xi_0)$ y $(\xi' - \xi_0)$ que obligan a la función de onda total ψ a cancelarse en la frontera.

La constante de normalización A se calcula de

$$\int_V |\psi|^2 d^3\mathbf{r} = \int_V |\phi_h|^2 d^3\mathbf{r}_h \int_V |\phi_e|^2 d^3\mathbf{r}_e = A^2 [I_N]^2 = 1, \quad (13)$$

donde ϕ_h y ϕ_e son las funciones de onda del hueco y del electrón definidas, respectivamente, como

$$\begin{aligned} \phi_h &= \sqrt{A} \exp[-\alpha R(\xi + \eta)] (\xi - \xi_0) \\ \phi_e &= \sqrt{A} \exp[-\alpha R(\xi' + \eta')] (\xi' - \xi_0) \end{aligned} \quad (14)$$

e

$$I_N = 2\pi R^3 \int_{-1}^1 \int_1^{\xi_0} \exp[-2\alpha R(\xi + \eta)] \times (\xi - \xi_0)^2 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta. \quad (15)$$

La energía total del excitón, en su estado base, está dada por

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle T_h \rangle + \langle T_e \rangle + \langle V_{eh} \rangle \\ &= \frac{1}{m_h^*} \left\langle \phi_h \left| -\frac{1}{2} \nabla_h^2 \right| \phi_h \right\rangle + \frac{1}{m_e^*} \left\langle \phi_e \left| -\frac{1}{2} \nabla_e^2 \right| \phi_e \right\rangle \\ &\quad + \left\langle -\frac{1}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\mu^*} \left\langle \phi \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \phi \right\rangle + \left\langle \psi \left| -\frac{1}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right| \psi \right\rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

donde

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_h^*} + \frac{1}{m_e^*} \quad (17)$$

es la masa reducida efectiva del excitón y la función de onda ϕ es de la forma de ϕ_h (o ϕ_e) definidas por la Ec. (14). En la expresión obtenida para la energía total del excitón dada por la Ec. (16) se usó la independencia entre las coordenadas de integración para cada partícula (hueco, electrón), lo cual permite separar las integrales correspondientes a cada partícula para realizar el cálculo; las integrales obtenidas tienen formas similares, diferenciándose únicamente por un factor de masa efectiva.

La integral correspondiente a la energía cinética queda

$$\begin{aligned} \left\langle \phi \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \phi \right\rangle &= -\frac{1}{2} \alpha^2 + \frac{\alpha}{R} \left\langle \phi \left| \frac{1}{|\xi + \eta|} \right| \phi \right\rangle \\ &\quad - \frac{1}{R^2} \left\langle \phi \left| \frac{\xi - \alpha R(\xi^2 - 1)}{(\xi - \xi_0)(\xi^2 - \eta^2)} \right| \phi \right\rangle, \end{aligned} \quad (18)$$

donde

$$\left\langle \phi \left| \frac{1}{\xi + \eta} \right| \phi \right\rangle = 2\pi R^2 A \int_{-1}^1 \int_1^{\xi_0} \exp[-2\alpha R(\xi + \eta)] \times (\xi - \xi_0)^2 (\xi - \eta) d\xi d\eta \quad (19)$$

y

$$\left\langle \phi \left| \frac{\xi - \alpha R(\xi^2 - 1)}{(\xi - \xi_0)(\xi^2 - \eta^2)} \right| \phi \right\rangle = 2\pi R^3 A \times \int_{-1}^1 \int_1^{\xi_0} \exp[-2\alpha R(\xi + \eta)] [\xi - \alpha R(\xi^2 - 1)] \times (\xi - \xi_0) d\xi d\eta. \quad (20)$$

La evaluación de los elementos de matriz en el término de la atracción coulombiana hueco-electrón con la función de onda de prueba propuesta, ψ , involucra la integración sobre los ángulos azimutales, la cual puede realizarse inmediatamente, conservándose únicamente el término con $m = 0$ de la Ec. (7). Esto último es debido a la simetría del sistema bajo rotaciones alrededor del eje z . Consecuentemente, los polinomios asociados de Legendre se convierten en polinomios ordinarios de Legendre. Una evaluación completa de la expresión resultante para los elementos de matriz se realizó en la Ref. 14.

Ahora se discutirán los resultados obtenidos por aplicación del método variacional para calcular la energía del estado base de un excitón confinado en un punto cuántico esférico. Con el propósito de comparar estos resultados con los obtenidos mediante otros métodos de cálculo y con algunos resultados experimentales, se usarán los valores de los parámetros físicos pertenecientes a puntos cuánticos compuestos por CdS y GaAs. Para el CdS, esos valores son: $m_h^* = 0.53 m_0$, $m_e^* = 0.18 m_0$, y $\varepsilon = 5.5$, luego, la masa reducida efectiva es $\mu^* = 0.13 m_0$, un bohr efectivo es $a_B = 21.65 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 120.87 meV. Para el GaAs, los valores correspondientes son: $m_h^* = 0.09 m_0$ (hueco ligero), $m_e^* = 0.067 m_0$, y $\varepsilon = 12.5$, luego, la masa reducida efectiva es $\mu^* = 0.04 m_0$, un bohr efectivo es $a_B = 172.22 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 6.69 meV. La cantidad m_0 corresponde a la masa del electrón libre.

En la Fig. 3, se muestran tres curvas de energía del estado base de un excitón confinado en cristalitas esféricas de CdS, como una función del volumen, con distancias focales $R = 21.66, 10.83$ y 2.17 \AA . El menor valor de R corresponde a una caja cuasi-esférica y la curva de energía obtenida para este valor tiene el mismo comportamiento que la obtenida en la Ref. 7. En ese trabajo, Einevoll realiza un estudio teórico del confinamiento del excitón en puntos cuánticos esféricos de CdS utilizando un esquema que combina el modelo de orbital de enlace efectivo (EBOM) para describir al hueco y la aproximación de la masa efectiva para describir el comportamiento del electrón. En dicho esquema la función de onda de las dos partículas es separable cuando se encuentran

en el régimen de confinamiento fuerte donde los efectos de correlación entre ellas son muy pequeños; como consecuencia de la forma separable de la función de onda, el cálculo de la energía del excitón se realiza en dos partes, una parte que corresponde a la energía del hueco y una parte a la del electrón, las cuales a su vez están acopladas por un término coulombiano (la ecuación obtenida con el método descrito tiene la misma forma que la Ec. (16) de este trabajo). En la Ref. 6, Wang y Herron reportan resultados experimentales donde analizan la dependencia en el tamaño del estado más bajo de energía de un excitón en cúmulos de CdS localizados dentro de un material orgánico; y en la Ref. 19, Ekimov *et al* reportan resultados experimentales para cristalitas de CdS en vidrios de silicato.

En la misma Fig. 3 puede notarse cómo la no esfericidad de la caja, asociada a los valores de R más grandes, en la región de confinamiento fuerte, produce un mayor incremento en la energía del estado base del excitón; pero, a medida que el volumen aumenta, la caja se vuelve cada vez más esférica tal que en la región de confinamiento débil el excitón no “distingue” si se encuentra en una caja con R grande o con R pequeña.

La Fig. 4, muestra los resultados obtenidos para la energía del estado base de un excitón confinado en cristalitas esféricas de GaAs, como una función del volumen, correspondientes a los valores de $R = 172.22, 86.11$ y 17.22 \AA . La curva de energía para $R = 17.22 \text{ \AA}$ corresponde a una cristalita cuasi-esférica y tiene el mismo comportamiento que la obtenida por Xiao [18], para el caso de campo magnético igual a cero. En esta referencia el punto cuántico está modelado por un potencial parabólico isotrópico y además se encuentra

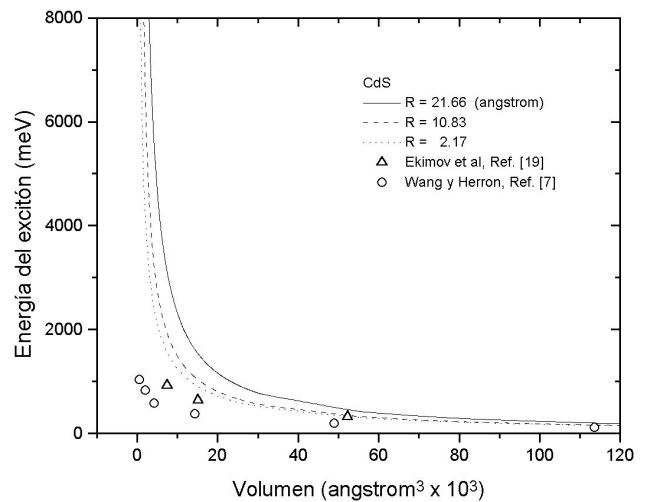


FIGURA 3. Energía del excitón en cristalitas esféricas de CdS en función del volumen. Para el CdS: $m_h^* = 0.53 m_0$, $m_e^* = 0.18 m_0$ y $\varepsilon = 5.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.13 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 21.65 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 120.87 meV. Los resultados teóricos corresponden al caso de barrera de potencial infinita. Los datos experimentales corresponden a los de las Refs. 19 y 7.

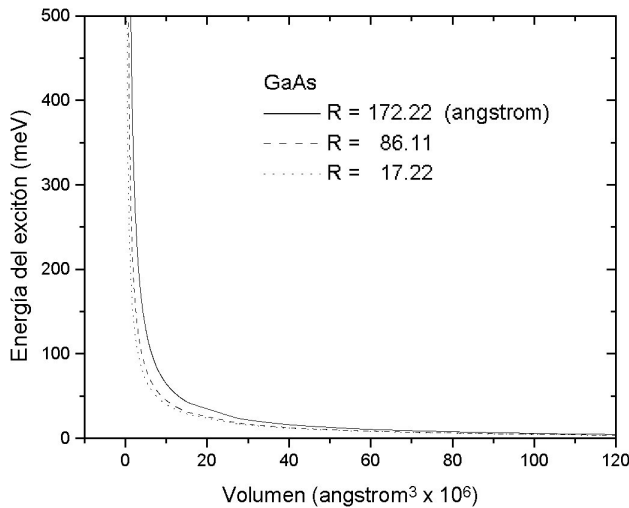


FIGURA 4. Energía del excitón en cristalitas esféricas de GaAs en función del volumen. Para el GaAs: $m_h^* = 0.09 m_0$ (hueco ligero), $m_e^* = 0.067 m_0$ y $\epsilon = 12.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.04 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 172.22 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 6.69 meV. Los resultados corresponden al caso de barrera de potencial infinita.

en un campo magnético uniforme; los resultados en esta referencia son obtenidos por aplicación del método variacional dentro del esquema de la aproximación de la masa efectiva.

En la Tabla I, se muestran los valores de las energías del estado base de un excitón confinado en cristalitas esféricas de CdS y de GaAs en función del semieje mayor, para distintas distancias focales R . Los valores en las cuatro columnas del lado izquierdo están dados en unidades atómicas.

4. Excitones confinados en puntos cuánticos esféricos con frontera penetrable

En este caso, considerando la misma barrera V_0 para electrones y huecos, el potencial de confinamiento queda especificado por

$$V_h = V_e = \begin{cases} 0, & 1 \leq \xi, \quad \xi' \leq \xi_0 \\ V_0, & \xi_0 < \xi, \quad \xi' < \infty, \end{cases} \quad (21)$$

donde V_0 simula, físicamente, el escalón de potencial efectivo promedio creado por la diferencia en la composición química entre la cristalita y el material donde se encuentra inmersa.

La función de onda de prueba del estado base para las regiones interior y exterior, se define como

$$\psi = \begin{cases} \psi_i = A \exp[-\alpha R(\xi + \eta)] \\ \quad \times \exp[-\alpha R(\xi' + \eta')] \\ \quad \times (\xi_0 - \alpha\xi)(\xi_0 - \alpha\xi'), & 1 \leq \xi, \quad \xi' \leq \xi_0 \\ \psi_e = B \exp[-\beta R(\xi + \xi')] \\ \quad \times \exp[-\alpha R(\eta + \eta')], & \xi_0 < \xi, \quad \xi' < \infty, \end{cases} \quad (22)$$

donde α y β son dos parámetros variacionales por determinar. La forma seleccionada para la función de onda permite que

se satisfagan las constricciones adicionales impuestas por las condiciones en la frontera:

$$\frac{1}{\mu_i^*} \psi_i \left. \frac{\partial \psi_i}{\partial \xi_i} \right|_{\xi, \xi' = \xi_0} = \frac{1}{\mu_e^*} \psi_e \left. \frac{\partial \psi_e}{\partial \xi_e} \right|_{\xi, \xi' = \xi_0}, \quad (23)$$

donde se ha introducido la masa reducida efectiva del excitón μ^* .

En la Ec. (23), se ha establecido una diferencia entre las masas reducidas efectivas del excitón cuando se encuentra adentro y afuera del punto cuántico debido a que estas regiones están compuestas por diferentes materiales. Es más probable que el electrón se desconfine antes que el hueco y puede considerarse, con buena aproximación, que la variación de la masa reducida efectiva del excitón se debe principalmente al cambio en la masa efectiva del electrón, mientras que la masa efectiva del hueco permanece igual.

Aplicando las condiciones en la frontera, Ec. (23), se obtiene la siguiente relación entre los parámetros variacionales α y β :

$$\beta = q \left[\frac{\alpha(1 - \alpha)R\xi_0 + \alpha}{(1 - \alpha)R\xi_0} \right] \quad (24)$$

donde $q = \mu_e^*/\mu_i^*$. La relación entre los parámetros α y β significa que sólo se requiere determinar uno de ellos.

La condición de continuidad de la función de onda en la frontera de la caja,

$$\psi_i|_{\xi, \xi' = \xi_0} = \psi_e|_{\xi, \xi' = \xi_0}, \quad (25)$$

relaciona a las constantes A y B :

$$B = A(1 - \alpha)^2 \xi_0^2 \exp[2R\xi_0(\beta - \alpha)] \quad (26)$$

de manera que pueden determinarse mediante la condición de normalización

$$\langle \psi_i | \psi_i \rangle + \langle \psi_e | \psi_e \rangle = A^2 I_{N_i}^2 + B^2 I_{N_e}^2 = 1. \quad (27)$$

De aquí

$$A = \left\{ I_{N_i}^2 + \left[(1 - \alpha)^2 \xi_0^2 \exp[2R\xi_0(\beta - \alpha)] \right]^2 I_{N_e}^2 \right\}^{-1/2}, \quad (28)$$

donde

$$I_{N_i} = 2\pi R^3 \int_{-1}^1 \int_{-1}^{\xi_0} \exp[-2\alpha R(\xi + \eta)] \times (\xi_0 - \alpha\xi)^2 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta \quad (29)$$

$$I_{N_e} = 2\pi R^3 \int_{-1}^1 \int_{\xi_0}^{\infty} \exp[-2R(\beta\xi + \alpha\eta)] \times (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta. \quad (30)$$

TABLA I. Energía del excitón en cristalitas esféricas de CdS y de GaAs en función del semieje mayor. Para el CdS: $m_h^* = 0.53 m_0$, $m_e^* = 0.18 m_0$ y $\epsilon = 5.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.13 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 21.65 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 120.87 meV. Para el GaAs: $m_h^* = 0.09 m_0$ (hueco ligero), $m_e^* = 0.067 m_0$ y $\epsilon = 12.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.04 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 172.22 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 6.69 meV. Los resultados corresponden al caso de barrera de potencial infinita.

| Unidades atómicas | | | CdS | | | GaAs | | | |
|--------------------|--------------------|----------|----------------------|----------------|------------------------|-----------------------|----------------|------------------------|------------------|
| R = 0.1 (bohr) | | | R = 2.17 (angstrom) | | | R = 17.22 (angstrom) | | | |
| V_0 (hartree) | $R\xi_0$ (bohr) | α | Energía (hartree) | V_0 (meV) | $R\xi_0$ (angstrom) | Energía (meV) | V_0 (meV) | $R\xi_0$ (angstrom) | Energía (meV) |
| Infinito | 0.150 | 0.970 | 357.637 | Infinito | 3.249 | 43227.314 | Infinito | 25.834 | 2392.166 |
| | 0.200 | 1.057 | 147.865 | | 4.332 | 17872.289 | | 34.445 | 989.038 |
| | 0.250 | 0.901 | 83.612 | | 5.415 | 10106.063 | | 43.056 | 559.262 |
| | 0.300 | 0.739 | 54.161 | | 6.498 | 6546.374 | | 51.667 | 362.271 |
| | 0.350 | 0.612 | 37.936 | | 7.581 | 4585.257 | | 60.278 | 253.745 |
| | 0.400 | 0.520 | 27.976 | | 8.664 | 3381.444 | | 68.890 | 187.126 |
| | 0.450 | 0.453 | 21.405 | | 9.747 | 2587.204 | | 77.501 | 143.174 |
| | 0.500 | 0.404 | 16.838 | | 10.830 | 2035.201 | | 86.112 | 112.626 |
| | 0.550 | 0.368 | 13.536 | | 11.913 | 1636.081 | | 94.723 | 90.539 |
| | 0.650 | 0.319 | 9.188 | | 14.080 | 1110.588 | | 111.946 | 61.459 |
| | 0.750 | 0.290 | 6.545 | | 16.246 | 791.726 | | 129.168 | 43.780 |
| | 0.850 | 0.272 | 4.827 | | 18.412 | 583.421 | | 146.390 | 32.286 |
| | 1.085 | 0.251 | 2.584 | | 23.497 | 312.357 | | 186.823 | 17.286 |
| Unidades atómicas | | | CdS | | | GaAs | | | |
| R = 0.5 (bohr) | | | R = 10.83 (angstrom) | | | R = 86.11 (angstrom) | | | |
| Infinito | 0.525 | 0.037 | 171.021 | Infinito | 11.372 | 20671.123 | Infinito | 90.418 | 1143.924 |
| | 0.550 | 0.062 | 81.907 | | 11.913 | 9900.038 | | 94.723 | 547.860 |
| | 0.575 | 0.091 | 52.447 | | 12.455 | 6339.192 | | 99.029 | 350.806 |
| | 0.600 | 0.118 | 37.843 | | 12.996 | 4574.095 | | 103.334 | 253.127 |
| | 0.625 | 0.144 | 29.161 | | 13.538 | 3524.660 | | 107.640 | 195.052 |
| | 0.650 | 0.168 | 23.428 | | 14.080 | 2831.730 | | 111.946 | 156.706 |
| | 0.675 | 0.190 | 19.374 | | 14.621 | 2341.742 | | 116.251 | 129.590 |
| | 0.700 | 0.210 | 16.366 | | 15.163 | 1978.096 | | 120.557 | 109.466 |
| | 0.725 | 0.227 | 14.051 | | 15.704 | 1698.336 | | 124.862 | 93.985 |
| | 0.775 | 0.257 | 10.740 | | 16.787 | 1298.092 | | 133.474 | 71.835 |
| | 0.825 | 0.279 | 8.502 | | 17.870 | 1027.582 | | 142.085 | 56.866 |
| | 0.875 | 0.296 | 6.901 | | 18.953 | 834.133 | | 150.696 | 46.160 |
| | 0.925 | 0.308 | 5.709 | | 20.036 | 689.997 | | 159.307 | 38.184 |
| Unidades atómicas | | | CdS | | | GaAs | | | |
| R = 1.0 (bohr) | | | R = 21.65 (angstrom) | | | R = 172.22 (angstrom) | | | |
| Infinito | 1.010 | -0.017 | 220.481 | Infinito | 21.877 | 26649.313 | Infinito | 173.946 | 1474.752 |
| | 1.020 | -0.018 | 108.391 | | 22.094 | 13101.181 | | 175.668 | 725.009 |
| | 1.030 | 0.018 | 71.122 | | 22.311 | 8596.453 | | 177.391 | 475.721 |
| | 1.040 | 0.018 | 52.546 | | 22.527 | 6351.224 | | 179.113 | 351.472 |
| | 1.050 | 0.018 | 41.432 | | 22.744 | 5007.903 | | 180.835 | 277.133 |
| | 1.060 | 0.020 | 34.044 | | 22.960 | 4114.906 | | 182.557 | 227.716 |
| | 1.070 | 0.023 | 28.782 | | 23.177 | 3478.872 | | 184.280 | 192.518 |
| | 1.080 | 0.026 | 24.847 | | 23.394 | 3003.218 | | 186.002 | 166.196 |
| | 1.090 | 0.030 | 21.795 | | 23.610 | 2634.336 | | 187.724 | 145.782 |
| | 1.110 | 0.037 | 17.375 | | 24.043 | 2100.057 | | 191.169 | 116.215 |
| | 1.130 | 0.043 | 14.333 | | 24.477 | 1732.373 | | 194.613 | 95.868 |
| | 1.150 | 0.050 | 12.115 | | 24.910 | 1464.365 | | 198.058 | 81.037 |
| | 1.170 | 0.057 | 10.430 | | 25.343 | 1260.672 | | 201.502 | 69.765 |

La funcional de la energía puede escribirse como

$$\langle E \rangle = \langle T_{int} \rangle + \langle T_{ext} \rangle + \langle V_{eh}^{(int)} \rangle + \langle V_{eh}^{(ext)} \rangle + \langle V_h \rangle + \langle V_e \rangle. \quad (31)$$

Los sub (super) índices indican los valores esperados de los distintos tipos de energía en el interior y en el exterior del punto cuántico.

La energía cinética en el interior está dada por

$$\langle T_i \rangle = -\frac{1}{2\mu_i^*} A^2 I_{N_i} I_{k_i} \quad (32)$$

donde

$$I_{k_i} = \frac{1}{A} \left[\alpha^2 A I_{N_i} - \frac{2\alpha}{R} \left\langle \phi_i \left| \frac{1}{\xi + \eta} \right| \phi_i \right\rangle + \frac{2\alpha}{R^2} \left\langle \phi_i \left| \frac{\alpha R (\xi^2 - 1) - \xi}{(\xi_0 - \alpha\xi) (\xi^2 - \eta^2)} \right| \phi_i \right\rangle \right] \quad (33)$$

con la función de onda ϕ_i definida por

$$\phi_i = \sqrt{A} \exp[-\alpha R (\xi + \eta)] (\xi_0 - \alpha\xi) \quad (34)$$

y las integrales son de la forma

$$\left\langle \phi_i \left| \frac{1}{\xi + \eta} \right| \phi_i \right\rangle = 2\pi R^3 A \int_{-1}^1 \int_1^{\xi_0} \exp[-2\alpha R (\xi + \eta)] (\xi_0 - \alpha\xi)^2 (\xi - \eta) d\xi d\eta \quad (35)$$

$$\left\langle \phi_i \left| \frac{\alpha R (\xi^2 - 1) - \xi}{(\xi_0 - \alpha\xi) (\xi^2 - \eta^2)} \right| \phi_i \right\rangle = 2\pi R^3 A \int_{-1}^1 \int_1^{\xi_0} \exp[-2\alpha R (\xi + \eta)] (\xi_0 - \alpha\xi) [\alpha\xi (\xi^2 - 1) - \xi] d\xi d\eta. \quad (36)$$

La energía cinética en el exterior:

$$\langle T_e \rangle = -\frac{1}{2\mu_e^*} B^2 I_{N_e} I_{k_e}, \quad (37)$$

donde

$$I_{k_e} = \frac{1}{B} \left[\left\langle \phi_e \left| \frac{\beta^2 \xi^2 - \alpha^2 \eta^2}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle + \frac{2}{R} \left\langle \phi_e \left| \frac{\beta\xi + \alpha\eta}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle + (\alpha^2 - \beta^2) \left\langle \phi_e \left| \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle \right] \quad (38)$$

con la función de onda ϕ_e definida por

$$\phi_e = \sqrt{B} \exp[-R (\beta\xi + \alpha\eta)] \quad (39)$$

y las integrales son de la forma

$$\left\langle \phi_e \left| \frac{\beta^2 \xi^2 - \alpha^2 \eta^2}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle = 2\pi R^3 B \int_{-1}^1 \int_{\xi_0}^{\infty} \exp[-2R (\beta\xi + \alpha\eta)] (\beta^2 \xi^2 - \alpha^2 \eta^2) d\xi d\eta, \quad (40)$$

$$\left\langle \phi_e \left| \frac{\beta\xi + \alpha\eta}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle = 2\pi R^3 B \int_{-1}^1 \int_{\xi_0}^{\infty} \exp[-2R (\beta\xi + \alpha\eta)] (\beta\xi + \alpha\eta) d\xi d\eta, \quad (41)$$

$$\left\langle \phi_e \left| \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \right| \phi_e \right\rangle = 2\pi R^3 B \int_{-1}^1 \int_{\xi_0}^{\infty} \exp[-2R (\beta\xi + \alpha\eta)] d\xi d\eta. \quad (42)$$

Los términos de energía potencial electrón-hueco en el interior y en el exterior quedan

$$\begin{aligned} \langle V_{eh}^{(i)} \rangle &= -\frac{1}{\varepsilon} (2\pi)^2 A^2 R^5 \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_1^{\xi_0} \int_1^{\xi_0} e^{-2\alpha R \xi} e^{-2\alpha R \xi'} (\xi_0 - \alpha\xi)^2 (\xi_0 - \alpha\xi')^2 f_{\ell}(\xi, \xi') \\ &\quad \times \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi d\xi' \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} (2\pi)^2 A^2 R^5 \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_1^{\xi_0} e^{-2\alpha R \xi'} (\xi_0 - \alpha\xi')^2 \left\{ \int_1^{\xi'} e^{-2\alpha R \xi} (\xi_0 - \alpha\xi)^2 f_{\ell_1}(\xi, \xi') \right. \\ &\quad \times \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi \\ &\quad \left. + \int_{\xi'}^{\xi_0} e^{-2\alpha R \xi} (\xi_0 - \alpha\xi)^2 f_{\ell_2}(\xi, \xi') \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi \right\} d\xi' \quad (43) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle V_{eh}^{(e)} \rangle &= -\frac{1}{\varepsilon} (2\pi)^2 B^2 R^5 \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_{\xi_0}^{\infty} \int_{\xi_0}^{\infty} e^{-2\beta R\xi} e^{-2\beta R\xi'} f_{\ell}(\xi, \xi') \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi d\xi' \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} (2\pi)^2 B^2 R^5 \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_{\xi_0}^{\infty} e^{-2\beta R\xi} e^{-2\beta R\xi'} \left\{ \int_{\xi_0}^{\xi'} e^{-2\beta R\xi} f_{\ell_2}(\xi, \xi') \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi \right. \\ &\quad \left. + \int_{\xi'}^{\infty} e^{-2\beta R\xi} f_{\ell_1}(\xi, \xi') \left[\xi^2 \xi'^2 (I_0)^2 - (\xi^2 + \xi'^2) I_0 I_2 + (I_2)^2 \right] d\xi \right\} d\xi' \quad (44) \end{aligned}$$

Las integrales I_0 e I_2 , están definidas como en la Ref. 14:

$$I_p = \int_{-1}^1 \eta^p e^{-2aR\eta} P_{\ell}(\eta) d\eta \quad (p = 0, 2) \quad (45)$$

donde $P_{\ell}(\eta)$ son polinomios ordinarios de Legendre.

Finalmente, los términos correspondientes a la barrera de potencial pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \langle V_h \rangle + \langle V_e \rangle &= B^2 (V_h + V_e) I_{N_e}^2 = 2A^2 V_0 \\ &\times \left[(1 - \alpha^2) \xi_0^2 \exp[2R\xi_0(\beta - \alpha)] \right]^2 I_{N_e}^2 \quad (46) \end{aligned}$$

La Fig. 5, muestra las curvas de energía del estado base de un excitón confinado en una cristalita esferoideal de CdS como una función del volumen, con distancia focal $R = 2.17 \text{ \AA}$, para dos valores distintos de la altura de la barrera de potencial: $V_0 = 7500$ y 1000 meV . En esta figura puede notarse que, a medida que el volumen del esferoide se reduce, la energía del excitón aumenta gradualmente hasta alcanzar un valor máximo y después disminuye rápidamente. El punto donde el máximo de la curva ocurre, puede interpretarse como el tamaño crítico del esferoide para el cual el excitón

se desconfinan. El valor máximo en la energía coincide aproximadamente con la altura de la barrera de potencial, como era de esperarse. Cuando el electrón se encuentra en un medio no confinado, la energía decae rápidamente hasta que el hueco también sale, obteniéndose un excitón libre y la energía disminuirá hasta la energía característica del sistema no confinado. En esta figura también se muestran los resultados experimentales de las Refs. 19 y 7. La concordancia entre la predicción teórica y los datos experimentales indica que es esencial considerar barreras de potencial finitas para la estimación de la energía de este tipo de sistemas. Esta afirmación ha sido comprobada con anterioridad por Marín *et al.* en la Ref. 20, donde se muestra que en el régimen de confinamiento fuerte un punto cuántico no debe modelarse con una barrera de potencial de altura infinita.

En la Fig.6, se muestran las curvas de energía del estado base de un excitón en una cristalita esferoideal de GaAs como una función del semieje mayor, con $R = 17.22 \text{ \AA}$, para las siguientes alturas de la barrera de potencial: $V_0 = 415$ y 55 meV . En este caso, el comportamiento es similar al des-

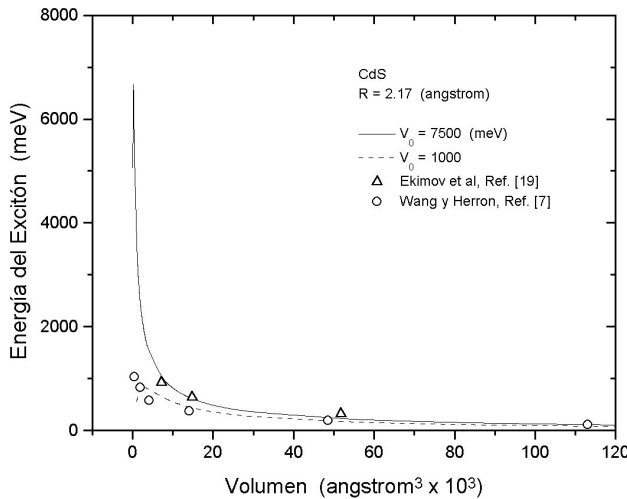


FIGURA 5. Energía del excitón en cristalitas esferoideales de CdS en función del volumen. Para el CdS: $m_h^* = 0.53 m_0$, $m_e^* = 0.18 m_0$ y $\varepsilon = 5.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.13 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 21.65 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 120.87 meV . Los resultados teóricos corresponden al caso de barrera de potencial finita: $V_h = V_e = 7500 \text{ meV}$ y $V_h = V_e = 1000 \text{ meV}$. Los datos experimentales corresponden a los de las Refs. 19 y 7.

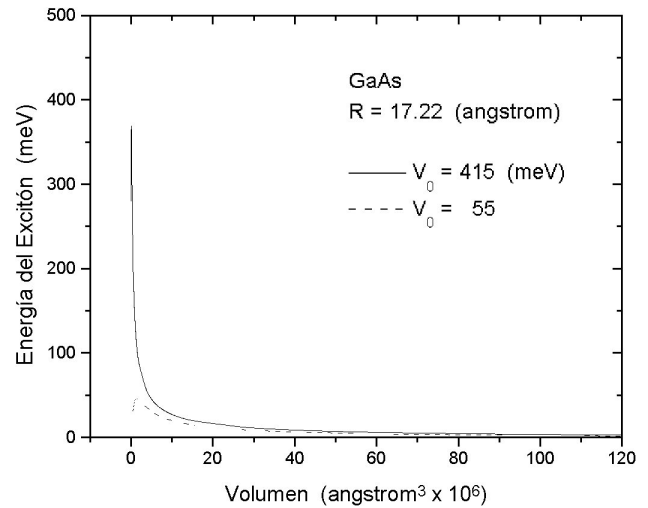


FIGURA 6. Energía del excitón en cristalitas esferoideales de GaAs en función del volumen. Para el GaAs: $m_h^* = 0.09 m_0$ (hueco ligero), $m_e^* = 0.067 m_0$ y $\varepsilon = 12.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.04 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 172.22 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 6.69 meV . Los resultados corresponden al caso de barrera de potencial finita: $V_h = V_e = 415 \text{ meV}$ y $V_h = V_e = 55 \text{ meV}$.

crito para el excitón confinado en CdS, es decir, puede predecirse de nuevo la existencia de un punto crítico a partir del cual el excitón se desconfinan, ocurriendo el escape del excitón del punto cuántico al momento en que el valor de su energía está muy próximo al de la altura de la barrera de potencial.

En la Tabla II, se muestran los valores de las energías del estado base de un excitón confinado en cristalitas esféricas de CdS y de GaAs en función del semieje mayor. Para CdS, la distancia focal es $R = 2.17 \text{ \AA}$, con dos valores distintos de la altura de la barrera de potencial: $V_0 = 1000$ y 7500 meV . Para GaAs, $R = 17.22 \text{ \AA}$, con las siguientes alturas de la

barrera de potencial: $V_0 = 55$ y 415 meV . Los valores en las cuatro columnas del lado izquierdo están dados en unidades atómicas.

Para entender mejor los resultados descritos anteriormente, considérese la Fig. 7, donde se muestran esquemáticamente los niveles de energía, por separado, para el electrón y el hueco que forman al excitón confinado en la cristalita esférica. Las líneas continuas representan las energías de estas partículas para un volumen de la esfera dado; las líneas punteadas representan los nuevos niveles de energía que se obtienen cuando la cristalita disminuye sus dimensiones. Pa-

TABLA II. Energía del excitón en cristalitas esféricas de CdS y de GaAs en función del semieje mayor. Para el CdS: $m_h^* = 0.53 m_0$, $m_e^* = 0.18 m_0$ y $\epsilon = 5.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.13 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 21.65 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 120.87 meV . Los resultados para CdS corresponden a los valores de barrera de potencial finita: $V_h = V_e = 1000 \text{ meV}$ y $V_h = V_e = 7500 \text{ meV}$. Para el GaAs: $m_h^* = 0.09 m_0$ (hueco ligero), $m_e^* = 0.067 m_0$ y $\epsilon = 12.5$; la masa reducida efectiva del excitón es $\mu^* = 0.04 m_0$ y m_0 es la masa del electrón libre; un bohr efectivo es $a_B = 172.22 \text{ \AA}$ y un hartree efectivo = 6.69 meV . Los resultados para GaAs corresponden a los valores de barrera de potencial finita: $V_h = V_e = 55 \text{ meV}$ y $V_h = V_e = 415 \text{ meV}$.

| Unidades atómicas | | | CdS | | | GaAs | | | |
|--------------------|--------------------|----------|----------------------|----------------|------------------------|----------------------|----------------|------------------------|------------------|
| R = 0.1 (bohr) | | | R = 2.17 (angstrom) | | | R = 17.22 (angstrom) | | | |
| V_0 (hartree) | $R\xi_0$ (bohr) | α | Energía (hartree) | V_0 (meV) | $R\xi_0$ (angstrom) | Energía (meV) | V_0 (meV) | $R\xi_0$ (angstrom) | Energía (meV) |
| 8.274 | 0.300 | 0.762 | 4.649 | 1000 | 6.498 | 561.930 | 55.342 | 51.667 | 31.097 |
| | 0.320 | 0.768 | 5.477 | | 6.931 | 662.047 | | 55.112 | 36.637 |
| | 0.340 | 0.772 | 6.068 | | 7.365 | 733.378 | | 58.556 | 40.585 |
| | 0.360 | 0.776 | 6.468 | | 7.798 | 781.722 | | 62.001 | 43.260 |
| | 0.380 | 0.780 | 6.711 | | 8.231 | 811.202 | | 65.445 | 44.891 |
| | 0.400 | 0.783 | 6.826 | | 8.664 | 824.996 | | 68.890 | 45.655 |
| | 0.420 | 0.786 | 6.832 | | 9.098 | 825.785 | | 72.334 | 45.698 |
| | 0.440 | 0.789 | 6.751 | | 9.531 | 816.014 | | 75.779 | 45.158 |
| | 0.550 | 0.795 | 5.505 | | 11.913 | 665.420 | | 94.723 | 36.824 |
| | 0.650 | 0.789 | 4.222 | | 14.080 | 510.262 | | 111.946 | 28.238 |
| 0.750 | 0.772 | 3.211 | 16.246 | 388.076 | 129.168 | 21.476 | | | |
| 0.850 | 0.745 | 2.462 | 18.412 | 297.611 | 146.390 | 16.470 | | | |
| 1.085 | 0.638 | 1.377 | 23.497 | 166.468 | 186.823 | 9.212 | | | |
| 62.054 | 0.160 | 0.646 | 49.821 | 7500 | 3.466 | 6021.810 | 415.066 | 27.556 | 333.242 |
| | 0.180 | 0.629 | 55.342 | | 3.899 | 6689.135 | | 31.000 | 370.171 |
| | 0.200 | 0.619 | 53.553 | | 4.332 | 6472.964 | | 34.445 | 358.209 |
| | 0.240 | 0.609 | 43.280 | | 5.199 | 5231.216 | | 41.334 | 289.491 |
| | 0.300 | 0.609 | 29.551 | | 6.498 | 3571.745 | | 51.667 | 197.658 |
| | 0.360 | 0.631 | 20.840 | | 7.798 | 2518.891 | | 62.001 | 139.393 |
| | 0.400 | 0.644 | 16.895 | | 8.664 | 2042.104 | | 68.890 | 113.008 |
| | 0.440 | 0.690 | 13.920 | | 9.531 | 1682.466 | | 75.779 | 93.106 |
| | 0.550 | 0.712 | 8.727 | | 11.913 | 1054.869 | | 94.723 | 58.376 |
| | 0.650 | 0.721 | 6.075 | | 14.080 | 734.273 | | 111.946 | 40.634 |
| 0.750 | 0.731 | 4.409 | 16.246 | 532.925 | 129.168 | 29.492 | | | |
| 0.850 | 0.732 | 3.301 | 18.412 | 398.961 | 146.390 | 22.078 | | | |
| 1.085 | 0.733 | 1.818 | 23.497 | 219.739 | 186.823 | 12.160 | | | |

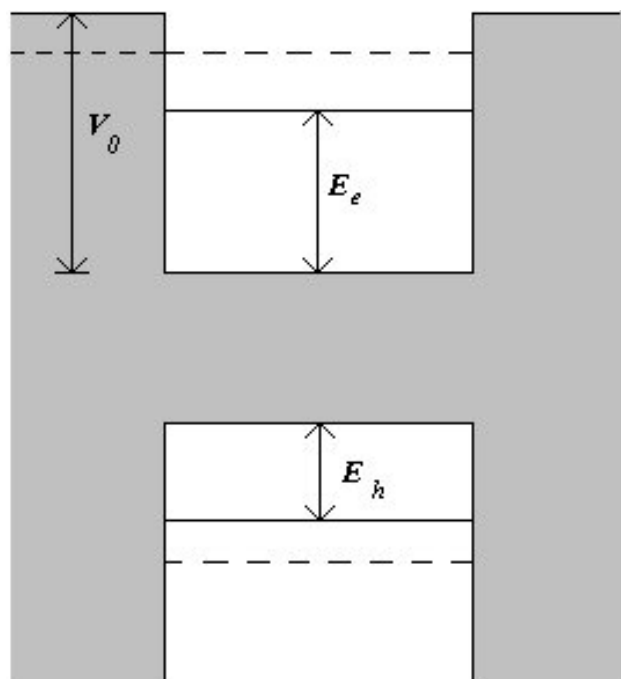


FIGURA 7. Diagrama esquemático de los niveles de energía del electrón y del hueco que forman el excitón confinado en la cristallita esferoideal. Los potenciales de confinamiento son iguales para el hueco y el electrón: $V_h = V_e = V_0$.

ra un tamaño crítico de la esferita el electrón del excitón se desconfina poco antes de que la energía del excitón alcance la altura de la barrera de potencial V_0 , lo que está indicado por la continuación de la línea punteada hacia el exterior de la caja. El escape del electrón ocurre por debajo del valor V_0 , ya que es imposible para un excitón ocupar estados electrónicos. Es preciso destacar que la descripción anterior no es una consecuencia del modelo escogido, puesto que una discusión

similar de los resultados ha sido realizada ya por Einevoll en la Ref. 6.

5. Conclusiones

En este trabajo se ha aprovechado el modelo teórico desarrollado en la Ref. 14, donde se estudia el átomo de helio confinado en una caja esferoideal prolata, considerando la analogía que existe entre ese sistema de dos electrones y un núcleo fijo y el excitón de Wannier-Mott. Para adaptar el modelo del átomo de dos electrones al estudio del excitón, fue necesario eliminar del modelo el núcleo fijo y cambiar el signo en el término de interacción coulombiana. Esta adaptación permite describir de una manera razonable el comportamiento de un excitón confinado en cristallitas esferoideales inmersas en materiales de distinta composición, lográndose realizar algunas predicciones teóricas importantes que contienen la información física que se esperaba.

Se estudió el comportamiento de la energía de un excitón de Wannier-Mott confinado en un punto cuántico esferoideal encontrándose que para un valor dado de la altura de la barrera de potencial existe un radio crítico a partir del cual ocurre el desconfinamiento del excitón debido a su escape de la región de confinamiento.

Por último, es preciso mencionar que el conocimiento de las propiedades del excitón bajo estas condiciones representaría un importante avance en el campo de las nanoestructuras semiconductoras por sus posibles aplicaciones tecnológicas.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado parcialmente por CONACYT bajo contrato No. 35220-E y por SEP/SESIC/PROMEP.

1. Y. Wang y N. Herron, *J. Phys. Chem.* **95** (1991) 525.
2. M. Yamamoto, R. Hayashi, K. Tsunetomo, K. Khono y Y. Osaka, *Jap. J. Appl. Phys.* **30** (1991) 136.
3. L.E. Brus, *J. Chem.* **90** (1986) 2555.
4. L.E. Brus, *IEEE J. Quant. Electron.* **22** (1986) 3410.
5. R.A. Morgan, S.H. Park, S.W. Koch y N. Peyghambarian, *Semicond. Sci. Technol.* **5** (1990) 544.
6. G.T. Einevoll, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 3410.
7. Y. Wang y N. Herron, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 7253.
8. B.D. Perelson y J.A. Weil, *J. Magn. Reson.* **15** (1974) 594.
9. E. Ley-Koo y S.A. Cruz, *J. Chem. Phys.* **74** (1981) 4603.
10. R. LeSar y D.R. Herschbach, *J. Phys. Chem.* **85** (1981) 2798.
11. R. LeSar y D.R. Herschbach, *J. Phys. Chem.* **87** (1983) 5202.
12. J.L. Marín y G. Muñoz, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **287** (1993) 281.
13. A. Echevarría-Montano y J. Tutor-Sánchez, *Rev. Mex. Fís.* **45** (1999) 47.
14. A. Corella-Madueño, R.A. Rosas, J.L. Marín y R. Riera, *Int. J. Quant. Chem.* **77** (2000) 509.
15. A. Corella-Madueño, R.A. Rosas, J.L. Marín, R. Riera, and G. Campoy (enviado a *Int. J. Quant. Chem.*).
16. G. Arfken, *Mathematical methods for physicist*, (Academic: New York 1971).
17. P.M. Morse y H. Feshbach, *Methods of theoretical physics*, Part II, (McGraw-Hill: New York 1953).
18. Z. Xiao, *J. Appl. Phys.* **86** (1999) 4509.
19. A.I. Ekimov, A.I.L. Efros y A.A. Onuschenko, *Solid State Commun.* **56** (1985) 921.
20. J.L. Marín, R. Riera y S.A. Cruz, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** (1998) 1349.