



**Estudio computacional de los efectos de campos
eléctricos y magnéticos sobre el espectro
energético de un excitón en un nanocono
semiconductor tipo II**

Lorenz Jhoan Pulgar Velásquez

Universidad Magdalena

Facultad de Ingeniería
Programa Ingeniería Electrónica
Santa Marta, Colombia
2021



Estudio computacional de los efectos de campos eléctricos y magnéticos sobre el espectro energético de un excitón en un nanocono semiconductor tipo II

Lorenz Jhoan Pulgar Velásquez

Trabajo presentado como requisito parcial para optar al título de:
Ingeniero Electrónico

Director:

Ph.D José de la Cruz Sierra Ortega

Codirectora:

Ph.D Gene Elizabeth Escorcía Salas

Línea de Investigación:

Sistemas de baja dimensionalidad

Grupo de Investigación:

Teoría de la materia condensada (CMT)

Universidad del Magdalena

Facultad de Ingeniería

Programa Ingeniería Electrónica

Santa Marta, Colombia

2021

Nota de aceptación:

Aprobado por el Consejo de Programa
(Acta CIE-19-2021) en cumplimiento de los
requisitos exigidos por la Universidad del
Magdalena para optar al título de Ingeniero
electrónico

Jurado

Jurado

Santa Marta, 13 de diciembre de 2021

“El hombre no es más que una caña, la más débil de la naturaleza, pero es una caña pensante.”

~Blaise Pascal, Pensamientos.

Dedicado:

A mi padres y hermanos que con su ternura y paciencia me dieron la oportunidad de seguir adelante. A mis amigos que hacen parte fundamental de mi estabilidad emocional y me imparten la compañía en medio de los vaivenes de la vida. A mi director y su esposa por su apoyo y confianza, y sobre todo al Ser por excelencia, en el cual encuentro significado y trascendencia para afrontar el devenir de la vida con coraje y sensibilidad, puesto que, de nada sirve el intelecto sino se aprecia la vida con y desde el corazón.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis Padres por su paciencia y fortaleza en los momentos difíciles, a mis amigos por darme el aliento y la motivación de seguir esforzándome, a todos y cada uno de mis profesores en mi carrera de Ingeniería electrónica, quienes me aportaron tanto en lo técnico como en lo profesional, para ser una mejor persona y brindar un trabajo integral a nuestra sociedad. Agradezco a mi director de pasantía José de la Cruz Sierra Ortega y a mi codirectora Gene Elizabeth Escorcía Salas por su dirección y apoyo así como al grupo de investigación de Materia Condensada en la Universidad de Antioquia, especialmente a los profesores Carlos Duque y Alejandro Vinasco quienes hicieron parte importante de este trabajo de grado y de mi pasantía de investigación como también al profesor Adrián Radu quien participo en el análisis de los resultados y quien inicialmente estaba dispuesto a recibirme en Rumania. también agradezco a mi casa de estudios la Universidad del Magdalena y todo su plantel educativo y administrativo que permiten el desarrollo de la educación superior en la región del Magdalena, Colombia, y sobre todo agradezco a Dios y a la vida por darme la oportunidad de cosechar frutos que nacen del esfuerzo y del sacrificio.

RESUMEN

Utilizando la aproximación de la masa efectiva en un modelo parabólico de dos bandas, estudiamos los efectos de los parámetros geométricos sobre los estados de electrones y huecos confinados en puntos cuánticos cónicos truncados: i) GaAs-(Ga,Al)As en presencia de una impureza donadora y bajo un campo magnético aplicado y ii) CdSe-CdTe punto cuántico núcleo-corteza tipo II, variando la geometría y aplicando campos eléctricos y magnéticos. Para el primer sistema, la posición de la impureza y la dirección del campo magnético aplicado se escogieron de manera que se preservara la simetría azimutal del sistema. La solución de las ecuaciones diferenciales de valores propios para el electrón o el hueco con o sin impureza se obtuvieron usando el método de elementos finito con una discretización adaptativa de una malla triangular, y la correlación de los estados del electrón y del hueco se calcula en una aproximación perturbativa de primer orden. Este estudio muestra que el campo magnético y las impurezas donadoras son factores relevantes en las propiedades optoelectrónicas de los puntos cuánticos cónicos. Además, en el caso del punto cuántico CdSe-CdTe, en el que también se conserva la simetría axial, es posible controlar el cambio entre excitones directos e indirectos a través de la geometría. Por último, se aplican campos magnéticos y eléctricos en el caso II en donde el confinamiento diamagnético proporcionado por el campo magnético obliga a la partícula situada fuera del cono a subir a lo largo de la frontera del cono, induciendo así una polarización eléctrica a la estructura y observando oscilaciones Aharonov-Bohm.

Palabras claves: Puntos cuánticos cónicos truncados; estados excitónicos; estados con impurezas donadoras; campo magnético aplicado; campo eléctrico aplicado; puntos cuánticos de tipo II

ABSTRACT

Using the approximation of the effective mass in a two-band parabolic model, we study the effects of geometric parameters on the states of electrons and holes in two truncated conical quantum dots: i) GaAs-(Ga,Al)As in the presence of a donor impurity and under an applied magnetic field and ii) CdSe-CdTe quantum dot nucleus-crust type II changing the geometry and applying electric and magnetic fields. For the first system, the position of the impurity and the direction of the applied magnetic field have been chosen to preserve the azimuthal symmetry of the system. The finite element method obtains the solution of the differential equations of eigenvalues for the electron or the hole with or without impurity with an adaptive discretization of a triangular mesh. The correlation of the electron and hole states is calculated to a first-order perturbative approximation. This study shows that the magnetic field and donor impurities are relevant factors in the optoelectronic properties of conical quantum dots. Furthermore, in the case of the CdSe-CdTe quantum dot, in which axial symmetry is also conserved, it is possible to control the change between direct and indirect excitons through geometry. Finally, magnetic, and electric fields are applied in case II where the diamagnetic confinement provided by the magnetic field forces the particle located outside the cone to rise along the boundary of the cone, thus inducing an electrical polarization to the structure. and observing Aharonov-Bohm oscillations.

Keywords: Truncated conical quantum dots; excitonic states; states with donor impurities; applied magnetic field; applied electric field; type II quantum dots.

CONTENIDO

1. Introducción	9
2. Descripción del problema y modelo teórico	12
2.1. Descripción del problema	12
2.2. Modelo teórico.....	14
3. Resultados	18
3.1. Espectro energético de un electrón y un hueco en un nanocono truncado de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Efectos de una impureza donadora y de un campo magnético.....	19
3.2. Estados del un excitón en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en forma de cono truncado con geometría variable. Efectos de una impureza donadora y de un campo magnético	25
3.3. Cambio de excitón directo a indirecto en un punto cuántico cónico truncado de CdSe-CdTe de estructura núcleo-corteza tipo II.	31
3.4. Estados de un excitón en un punto cuántico núcleo-corteza de CdSe-CdTe de estructura tipo II bajo los efectos de campos magnéticos y eléctricos	34
4. Conclusiones	36
BIOGRAFIA.....	37

1. Introducción

El progreso actual de la nanotecnología puede considerarse como uno de los grandes avances tecnológicos que están cambiando el mundo. Esto debido al notable avance en las técnicas de fabricación de nanoestructuras con tamaños y geometrías cada vez más controladas, y el incremento de las aplicaciones propuestas en diversos campos científicos y tecnológicos para este tipo de sistemas de dimensionalidad reducida. Durante décadas, los sistemas de baja dimensionalidad han sido uno de los objetos más ampliamente investigados en la física de semiconductores debido a sus interesantes propiedades y aplicaciones, particularmente el efecto de confinamiento cuántico en estos sistemas, lo que ha permitido diseñar novedosos materiales semiconductores para dispositivos optoelectrónicos [1–4]. El interés de muchos investigadores se ha enfocado en el análisis teórico del efecto del confinamiento cuántico sobre el espectro energético de impurezas en diversas nanoestructuras, como pozos [5-7], hilos [8] y puntos (QDs) cuánticos [9-11]. En particular, en los QDs, que se forman cuando hay una diferencia en la brecha de energía entre los materiales a utilizar [12, 13], los portadores de carga (electrones y huecos) están sujetos a un confinamiento tridimensional, lo que resulta en un espectro de energía discreto para los portadores de carga y el sistema es muy sensible a cambios de nano escala en la geometría y composición, lo que genera una modificación importante en las propiedades de los semiconductores, tales como ópticas, mecánicas, eléctricas y térmicas.

Una de las características relevantes en el estudio de los QDs, es la forma geométrica de la nanoestructura. En las últimas tres décadas, se han estudiado intensamente diferentes geometrías [12-17]. Se ha demostrado que los tamaños y formas de estos sistemas cuánticos tienen más predominio en sus propiedades que en su composición [18]. Entre estas estructuras, un interés especial presenta los QDs cilíndricos [19-21]. Estos, dependiendo de su radio y relación de altura, se pueden representar como i) sistemas 1D, llamados hilos cuánticos, en los que la altura del cilindro es mucho mayor que el radio de la estructura y ii) sistemas 2D, llamados pozos-cuánticos. Más recientemente, también ha sido posible el crecimiento y estudio de QDs con una estructura de tipo nanocono [22] que tienen propiedades físicas fascinantes para el desarrollo de nuevas tecnologías. Como

resultado de estas investigaciones, hoy en día, es bien sabido que las morfologías de las nanoestructuras pueden manifestar propiedades físicas únicas del material [23], por ejemplo, los QD en forma de cono pueden ser hilos cuánticos, pozos cuánticos o QD, en función de la altura de la estructura y el ángulo sólido en su parte superior [24, 25]. Los nanohilos y nanoconos tienen una capacidad natural para capturar la luz, por lo que sus aplicaciones en la creación de dispositivos optoelectrónicos como células solares y fotodetectores tienen un futuro prometedor. Actualmente, los hilos cuánticos (nanohilos) y los puntos cuánticos en forma de cono (nanoconos) se reconocen como candidatos prometedores para la próxima generación de dispositivos a nanoescala [26-29]. Se ha demostrado durante algún tiempo una fuerte dependencia de la absorción de la luz con respecto a la geometría al hacer comparaciones de las propiedades de los nanohilos cónicos y cilíndricos [30]. Las propiedades ópticas y electrónicas de QDs cónicos, incluidos los efectos de los campos eléctricos y magnéticos y las impurezas donadoras, también se han estudiado en diferentes trabajos [31, 32].

Para el estudio de estos sistemas de interés, se requiere resolver la correspondiente ecuación de Schrödinger. Pero las soluciones analíticas de esta ecuación solo son posibles en muy limitadas situaciones [33], por lo que, en la literatura se encuentran varios métodos numéricos para resolverla y modelar diferentes propiedades de los QDs semiconductores. Sin embargo, algunas soluciones analíticas se utilizan en diversos trabajos para mostrar la validez de los cálculos numéricos. Las diferentes variantes de diagonalización, cálculo variacional, diferencias y elementos finitos se encuentran entre los métodos utilizados. En especial, el método de elementos finitos (FEM) se ha utilizado para modelar QDs desde principios de la década de 1990 [34], y en la actualidad, se pueden mencionar varios estudios que tratan sobre la estructura electrónica: efectos ópticos, estructurales, de impurezas, de transporte y de deformación en QDs [35–37]. En la referencia [38], se llevó a cabo una investigación sobre la energía de unión y la susceptibilidad para QD cilíndricos y esféricos bajo un tipo diferente de potencial de confinamiento. En trabajos recientes, se han mencionado aplicaciones interesantes en relación con los QDs. Debido a las excelentes propiedades ópticas, los QDs se pueden utilizar para la obtención de imágenes de células cancerosas [39, 40]. En [41] se desarrolla un artículo de revisión sobre administración biomédica y de fármacos mediada por QD. Los QDs

de CdSe y CdTe son candidatos para varias aplicaciones, como dispositivos de memoria y espintrónicos [42].

La separación de cargas en una nanoestructura puede ser reforzada adicionalmente por una heterojuntura tipo II, construidas a partir de dos materiales para los cuales, los bordes tanto de la banda de valencia como la de conducción de uno de los componentes son más bajos que los del otro componente. En este caso, mientras que uno de los semiconductores se comporta como la región del pozo para el electrón y la barrera para el hueco, la situación se invierte en el otro semiconductor. Por tanto, el segundo semiconductor se comporta como la región de barrera para el electrón y la región del pozo para el hueco. En puntos cuánticos tipo núcleo-corteza, formado por ejemplo por la combinación de CdTe y CdSe, se observa que: i) el material CdTe es la región de barrera/pozo para el electrón/hueco y ii) el material CdSe es la región de pozo/barrera para el electrón/hueco. En las referencias [43], las múltiples aplicaciones de los QD coloidales se presentan con amplio detalle. Se discutieron, por ejemplo: aplicaciones biofotónicas, aplicaciones en nanomedicina, farmacocinética y biodistribución, toxicidad in vitro e in vivo, efectos de confinamiento cuántico, arquitecturas de núcleo/capa, capacidad de sintonización en la ventana de transparencia biológica, oportunidad de introducir características plasmónicas sintonizables, dopaje para lograr una emisión mejorada de estados dopantes y dopaje magnético para introducir la capacidad de formación de imágenes magnéticas.

En este trabajo presentamos el estudio de los efectos producidos por campos magnéticos y eléctricos, así como la variación de los parámetros geométricos, sobre los niveles energéticos de un electrón, una impureza donadora y un excitón de hueco pesado, confinados en dos tipos de QDs cónicos: i) Un QD de GaAs-(Ga,Al)As en forma cónica truncada con una impureza donadora confinada, el cual puede modelarse mediante una interacción de Coulomb, en el modelo simple de un átomo hidrógeno y considerando los efectos de un campo magnético aplicado externamente. En este caso, el campo magnético y el centro de impurezas se considera de manera que se conserve la simetría axial del sistema; ii) Un QD tipo núcleo/corteza de CdSe-CdTe con campo magnético y eléctrico, pero sin efectos de impurezas. Una vez que las funciones de onda y las energías para el electrón y el hueco están disponibles, en presencia o ausencia de impureza, la correlación

entre ambos portadores se calcula mediante la integral de Coulomb, usando un modelo perturbativo de primer orden. Se presentan cálculos para diferentes posiciones de la impureza a lo largo del eje de simetría, considerando los efectos del campo magnético y el tamaño de la estructura. Finalmente, se reporta la integral de solapamiento, información clave para comprender el comportamiento de las energías de enlace para cada configuración (i y ii). La solución de las ecuaciones diferenciales se obtiene aplicando el FEM.

Este documento está organizado de la siguiente manera: En la Sección 2 se presenta la descripción del problema y el modelo teórico; La sección 3 está dedicada a los resultados y la discusión correspondiente; y finalmente, en la sección 4 se presentan las principales conclusiones.

2. Descripción del problema y modelo teórico

Para analizar cómo evolucionan las distribuciones espaciales de las partículas en un sistema físico en presencia de los campos externos, y calcular los espectros energéticos correspondientes, así como también otras características importantes, se requiere de un modelo matemático que permita resolver la ecuación de Schrödinger que resulte del sistema planteado. Por esta razón y con el propósito de presentar en detalles el modelo del sistema físico que se considera y la forma como se resuelve teóricamente, en esta sección se presenta la fundamentación teórica y el modelo matemático y físico utilizado en este trabajo.

2.1. Descripción del problema

Debido al notable avance en las técnicas de fabricación de nanoestructuras con tamaños y geometrías cada vez más a la medida, hoy se puede controlar su forma, dimensiones, estructura de niveles energéticos y número de portadores de carga confinados en ellos, todo esto hace que los puntos cuánticos sean un sistema muy interesante tanto para teóricos como experimentalistas, para investigar las propiedades de sistemas de pocas partículas que interactúan fuertemente. De esta manera, y tal como se comentó en la introducción (sección 1), las nanoestructuras con forma de un nanocono semiconductor tipo II, la cual consta de un núcleo de

forma cónica truncada y una corteza que lo recubre, han mostrado que dependiendo de los materiales utilizados, se puede dar el caso de que en la estructura, el electrón se encuentre dentro del cono mientras que el hueco se ubica en la matriz circundante.

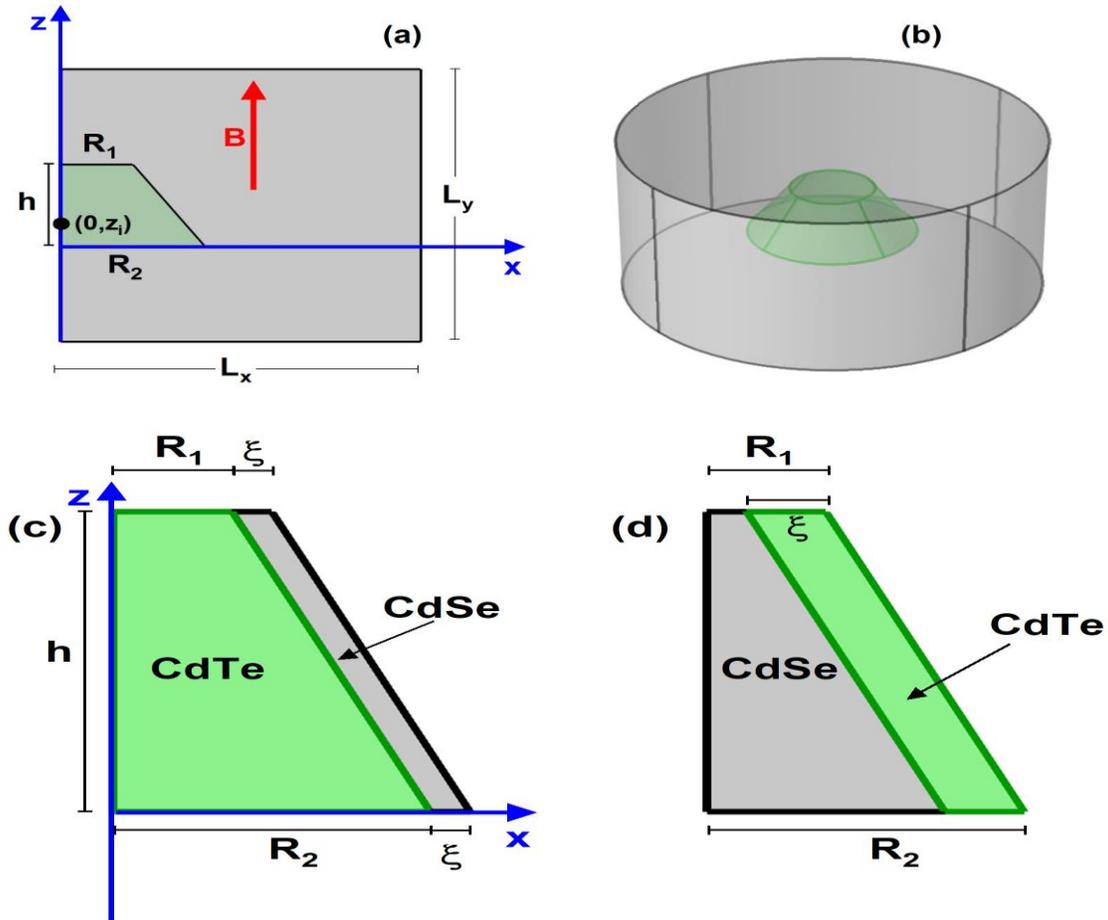


Figura 1: vista esquemática del punto cuántico truncado de forma cónica de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en (a) se representa la proyección de $\varphi = 0$, donde se indican las dimensiones del punto (R_1, R_2 y h), la posición de la impureza donadora ($0, z_i$), el marco de referencia, el campo magnético aplicado verticalmente y las dimensiones del cuadrado, en donde se aplican las condiciones de frontera y de Dirichlet ($L_x = L_y = 50 \text{ nm}$). la posición de la media altura del cono coincide con la media altura del cuadrado grande, y el marco de referencia coincide con la base del cono. En (b) se muestra la estructura obtenida al girar alrededor del eje z la estructura representada en (a). Vista esquemática de los puntos cuánticos cónicos truncados $CdTe - CdSe$ (c) y $CdSe - CdTe$ (d). el parámetro ξ corresponde a la anchura de la corteza de $CdSe$ (c) y $CdTe$ (d). R_1 y R_2 son los radios de las bases, y h es la altura del QD. en (c) y (d) se han despreciado los efectos de las impurezas y del campo magnético.

Asumiendo esta posibilidad, y con el objetivo de analizar las oscilaciones Aharonov-Bohm de los niveles de energía de los portadores de carga como función de un campo magnético o eléctrico externo, aplicado a lo largo del eje de simetría de una estructura de este tipo. En este trabajo, se considera específicamente una nanoestructura de tipo II. En la Figura 1 se muestra un esquema ilustrativo del QD de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en estudio. La figura 1(a) es una representación eje simétrico del problema ($\varphi = 0$, con φ como el ángulo azimutal) donde se muestran las dimensiones de los radios de las bases (R_1 y R_2) y la altura (h) del QD. Se han tenido en cuenta dos efectos sobre la estructura: *i*) un campo magnético estático \vec{B} , aplicado en la dirección z y *ii*) la presencia de una impureza donadora en diferentes posiciones a lo largo de la misma dirección z ($0, z_i$). En la figura 1(b) se muestra una vista tridimensional del sistema obtenida de la rotación de la figura 1(a) alrededor del eje z . En las figuras (c) y (d) se muestran las vistas esquemáticas de los QDs en forma cónica truncada de CdTe – CdSe y CdSe – CdTe sin campo magnético ni efectos de impurezas. Tenemos dos casos específicos: en la figura 1(c) un sistema de CdTe (núcleo) y CdSe (corteza), y en la figura 1(d), los materiales están invertidos, es decir, CdSe (núcleo) y CdTe (corteza). El parámetro ξ en la figura 1(c) es el grosor de CdSe, mientras que en 1(d) es el grosor de CdTe.

2.2. Modelo teórico

Usando la aproximaciones de masa efectiva y bandas parabólicas, con condiciones de frontera de Dirichlet en los bordes exteriores de la matriz de barrera y las condiciones de Ben Daniel-Duke en el QD y la interfaz barrera-matriz circundante (ver figura 1(b)), la ecuación de Schrödinger para un electrón (o hueco pesado) confinado en la estructura y bajo el efecto de un campo magnético aplicado en la dirección z , y en presencia de una impureza donadora poco profunda, se puede escribir, en coordenadas cartesianas, en la forma:

$$\left[\frac{1}{2m_j^*c} (\hat{p} - q\vec{A})^2 + V_j(x, y, z) + \frac{\kappa q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{x^2+y^2+(z-z_i)^2}} \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (1)$$

Donde $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, m_j^*c es la masa efectiva del electrón o el hueco pesado ($j = e, h$ para el electron y el hueco respectivamente, y $c = w/b$ indica el material pozo/barrera), $q = +e, -e$ son las cargas del electron y el hueco, siendo e la carga

elemental, $\kappa = -1$ para el electrón, mientras que $\kappa = +1$ es para el hueco pesado, y $\vec{A} = -\frac{B}{2}(y\hat{i} - x\hat{j})$ es el vector de potencial asociado al campo magnético aplicado, donde $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ proviene de la simetría de gauge. V_j es el potencial estructural, que es cero en la región del pozo y V_j^0 en la barrera. Adicionalmente $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \frac{C^2}{N \cdot m^2}$ y ϵ_r es la constante dieléctrica. Se han ignorado los efectos de la carga de imagen.

Expandiendo el primer término en la ecuación (1) y usando las condiciones de la simetría azimutal en la estructura, es posible considerar en coordenadas cilíndricas una solución del tipo:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_j^* c} + V_j^c(\rho, z) + \frac{\hbar^2}{2m_j^* c} \left(\frac{l}{\rho}\right)^2 - \frac{q\hbar B l}{2m_j^* c} + \frac{q^2 B^2 \rho^2}{8m_j^* c} + \frac{\kappa q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{\rho^2 + (z-z_i)^2}} \right] R(\rho, z) = E R(\rho, z) \quad (2)$$

Donde $l \in \mathbb{Z}$ es el número cuántico azimutal y ∇^2 es el operador Laplaciano. En estudios previos reportados en la literatura, se ha analizado la presión hidrostática y los efectos del tamaño sobre el factor g de electrones de conducción en pozos cuánticos de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ bajo campo magnético. Claramente, los resultados han demostrado que, dado el confinamiento cuántico, el factor g cambia drásticamente con el tamaño de la estructura con respecto a su valor en masa y que la presión hidrostática es una excelente herramienta por la cual la magnitud del factor g, e incluso el signo, se puede manipular [44,45]. En este trabajo centramos nuestro interés en los efectos de las impurezas y sus posiciones, la forma y tamaño de los QDs, así como el tipo de acoplamiento entre los materiales que componen la heteroestructura (heteroestructuras tipo I y tipo II), para electrones, huecos y excitones confinados en QD cónicos. Hemos omitido el efecto Zeeman a pesar de considerar los efectos del campo magnético, lo que da lugar a una fina división de la estructura del nivel de energía.

Una vez que las funciones de onda del estado fundamental del electrón y el hueco pesado sin correlación ($\psi_e^1(\vec{r}_e)$ y $\psi_h^1(\vec{r}_h)$, respectivamente) son obtenidas, podemos calcular la contribución excitónica de la interacción entre las dos cargas. En una

aproximación perturbativa de primer orden, la magnitud de la integral de Coulomb sería:

$$C_{eh} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int_{\Omega_h} \int_{\Omega_e} \frac{|\psi_e^1(\vec{r}_e)|^2 |\psi_h^1(\vec{r}_h)|^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} dV_e dV_h \quad (3)$$

Donde $dV_e = \rho_e d\rho_e dz_e d\varphi_e$ y $dV_h = \rho_h d\rho_h dz_h d\varphi_h$ son el diferencial de volumen en las coordenadas cilíndricas para el electrón y el hueco. En la ecuación (3), Ω_h y Ω_e indican el volumen del cilindro representado en la figura 1(b) para el hueco y el electrón, cuyo radio y altura son L_x y L_y , respectivamente. Debido a que solo estamos interesados en la magnitud de la interacción de Coulomb en la ecuación (3), omitimos el signo negativo de la energía electrostática.

Debido a la simetría azimutal, es posible escribir la parte angular de la ecuación (3) analíticamente. Esto reduce la integral de 6 a 4 variables, como se puede observar en la siguiente ecuación:

$$C_{eh} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int_{S_h} \int_{S_e} |\psi_e^1(\rho_e, z_e)|^2 |\psi_h^1(\rho_h, z_h)|^2 \left[\frac{8\pi K\left(\frac{r_p}{1+r_p}\right)}{r\sqrt{1+r_p}} \right] dV'_e dV'_h \quad (4)$$

Donde $r = \sqrt{(\rho_e - \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}$, $r_p = \frac{4\rho_e\rho_h}{r}$, $K(x)$ es la integral elíptica completa del primer tipo, $dV'_e = 2\pi\rho_e d\rho_e dz_e$, y $dV'_h = 2\pi\rho_h d\rho_h dz_h$. En la ecuación (4) la expresión dentro de los paréntesis cuadrados viene de la integral angular doble del inverso de la distancia electrón-hueco, S_h y S_e corresponde al área del rectángulo grande en la figura 1(a). Nótese que en la ecuación (3) que debido a la simetría azimutal del sistema, las funciones de onda del estado base del electrón y el hueco-pesado son independiente de las coordenadas φ_e y φ_h respectivamente.

Cabe señalar, que en este trabajo seguimos la misma estrategia utilizada anteriormente en la referencia [46] para QDs cónicos sometidos a efectos combinados de campos eléctricos y magnéticos. En la referencia [46], los cálculos de los estados de electrones y huecos son obtenidos mediante el FEM, y estos se contrastaron con los resultados obtenidos mediante un proceso de diagonalización, con una base ortonormal compuesta por un producto entre funciones de Bessel y

sinusoidales, con una coincidencia de hasta 0.1 meV. Además, se hicieron comparaciones con un modelo anterior más elaborado [47], que considera la teoría $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de 8 bandas y la interacción de configuración con desviaciones solo en un pequeño porcentaje. En la Referencia [46], y en este trabajo, la interacción Coulombiana electrón-hueco obtenida mediante un cálculo perturbativo fue corroborada con cálculos variacionales, considerando dos tipos de funciones de prueba: (i) una función de tipo hidrogenoide con un parámetro variacional [48, 49]; y (ii) una función de prueba construida por el producto de dos funciones gaussianas independientes. En el segundo caso, se utilizaron dos parámetros variacionales para describir el problema radial y el problema a lo largo de la dirección axial [50, 51] por separado. Los resultados obtenidos por el cálculo perturbativo coincidieron con los variacionales en el margen del 97% para la energía de enlace.

Una cantidad que permite complementar el análisis del excitón es la integral de solapamiento entre el electrón y el hueco-pesado en sus estados fundamentales, dichos cálculos son obtenidos en coordenadas cilíndricas usando la expresión:

$$I_{eh} = 4 \pi^2 \left| \int_S \psi_e^1(\rho, z) \psi_h^1(\rho, z) \rho \, d\rho \, dz \right|^2 \quad (5)$$

En donde se considera que el electrón y el hueco-pesado están localizados simultáneamente en el mismo lugar, (ρ, z) , del rectángulo grande en la figura 1(a) con área S .

Las funciones de onda y las correspondientes energías asociadas con la ecuación (2) se obtuvieron utilizando el método de elementos finitos FEM [52-56], tal como se implementa en el software Comsol Multiphysics [54-56], y considerando una malla controlada por el usuario para lograr un mayor control sobre la discretización. Dado que los estados cuánticos de interés corresponden a la ubicación del portador de carga en *GaAs* QD, se generaron tres elementos en esa región del sistema. Como resultado, el número de nodos de evaluación en toda la malla es 7005. Gracias a la adaptación de la malla, hay 11328 triángulos en la región *GaAs* QD y 2513 en la matriz *GaAlAs*. En el límite entre el QD y la matriz, hay 217 nodos. Otras características generales de la malla son el tamaño máximo y mínimo del elemento de 1.85 nm y 0.0062 nm, respectivamente. En un procesador Intel Core i7 de octava

generación, el tiempo de cálculo para calcular las energías en parámetros fijos es de aproximadamente 8 segundos. Para el cálculo numérico de la ecuación (4), se utilizó un código Fortran 77. A partir de los resultados obtenidos en Comsol-Multiphysics, los valores de la función de onda del estado fundamental se exportaron en una malla regular, en términos de las coordenadas (ρ, z) tomando como entrada de estas coordenadas los mismos valores para el electrón y el hueco. Dado que tenemos valores de las funciones de onda en puntos discretos de las coordenadas, la integral en la ecuación (4) se convierte en una suma de Riemann. Por último, debido a la simetría azimutal del sistema, la integración correspondiente a las coordenadas angulares φ se obtuvo mediante el uso de integrales elípticas.

3. Resultados

En el presente capítulo se presentan los resultados obtenidos al resolver las ecuaciones descritas en la sección anterior, y se hace el análisis de los efectos de la acción de los campos externos y la variación de los parámetros geométricos sobre el espectro energético del electrón, el hueco y excitón, confinados en dos tipos de puntos. Para analizar los efectos sobre los espectros energéticos del electrón, el hueco y la energía de enlace del excitón como función de los parámetros geométricos del nanocono truncado, y como función de un campo magnético, se realizaron cálculos numéricos para los primeros niveles más bajos de energía. Estas energías se obtienen al resolver el problema descrito en la sección 2.1 y considerando el modelo teórico que explicado en la sección 2.2.

En las siguientes subsecciones, los parámetros que se usan son: $m_e^{*,w} = 0.067 m_0$ (donde m_0 es la masa del electrón libre), $m_e^{*,b} = 0.092 m_0$, $m_h^{*,w} = 0.51 m_0$, $m_h^{*,b} = 0.57 m_0$, $V_e^0 = eV$, $V_h^0 = 0.17 eV$, y $\varepsilon = 13$ [46,57].

3.1. Espectro energético de un electrón y un hueco en un nanocono truncado de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Efectos de una impureza donadora y de campo magnético.

A continuación, presentamos los resultados obtenidos en el primer tipo de puntos cuánticos que se planteó en la descripción del problema. En la figura 2, se muestran las energías el estado base de un electrón y de un hueco en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncado sin y con una impureza donadora que se ubica en diferentes posiciones $(0, z_i)$. Se presentan las energías como función del radio base inferior (R_2), dejando fijo el radio superior $R_1 = 10 \text{ nm}$ y la altura $h = 15 \text{ nm}$ del punto. Se presentan los resultados para tres posiciones diferentes de la impureza donadora ($z_i = 0, 7.5 \text{ nm}$ y 15 nm).

Las figuras 2(a) y 2(b) corresponden al estado fundamental del electrón y el hueco, respectivamente. La figura 2(c) es la energía de enlace correspondiente para la impureza asociada con el electrón. La variación del radio R_2 permite modelar desde un QD cónico invertido ($R_2 = 0$), pasando por un QD cilíndrico ($R_2 = R_1 = 10 \text{ nm}$) y llegar a una QD cónico truncado. En general, se observa que al aumentar el radio R_2 hay una disminución en el efecto de confinamiento para ambos portadores de carga debido al aumento en el volumen de la estructura. Esto se refleja en una disminución sistemática en todos los niveles de energía. El estado fundamental exhibe una mayor tasa de disminución en los valores de energía en el rango $0 < R_2 < 10 \text{ nm}$. Este comportamiento se explica por el hecho de que para estos valores pequeños de R_2 , la región del vértice expulsa la función de onda de los portadores hacia la base del radio R_1 . Cuando R_2 aumenta, el estado fundamental cambia rápidamente su probabilidad máxima hacia la región inferior del punto, una condición que ocurre hasta la formación de la QD cilíndrica ($R_2 = 10 \text{ nm}$). Cuando el valor de R_2 continúa aumentando, el estado fundamental, que tiende a mostrar su densidad de probabilidad máxima en el centro de la QD (lejos de los bordes), no muestra cambios drásticos, lo que resulta en energía con una tasa baja de declive. Las diferencias más considerables entre los espectros de electrones y huecos se dan en las magnitudes de sus energías, situación que es típica de las barreras de potencial asociadas a cada partícula y de sus correspondientes masas efectivas.

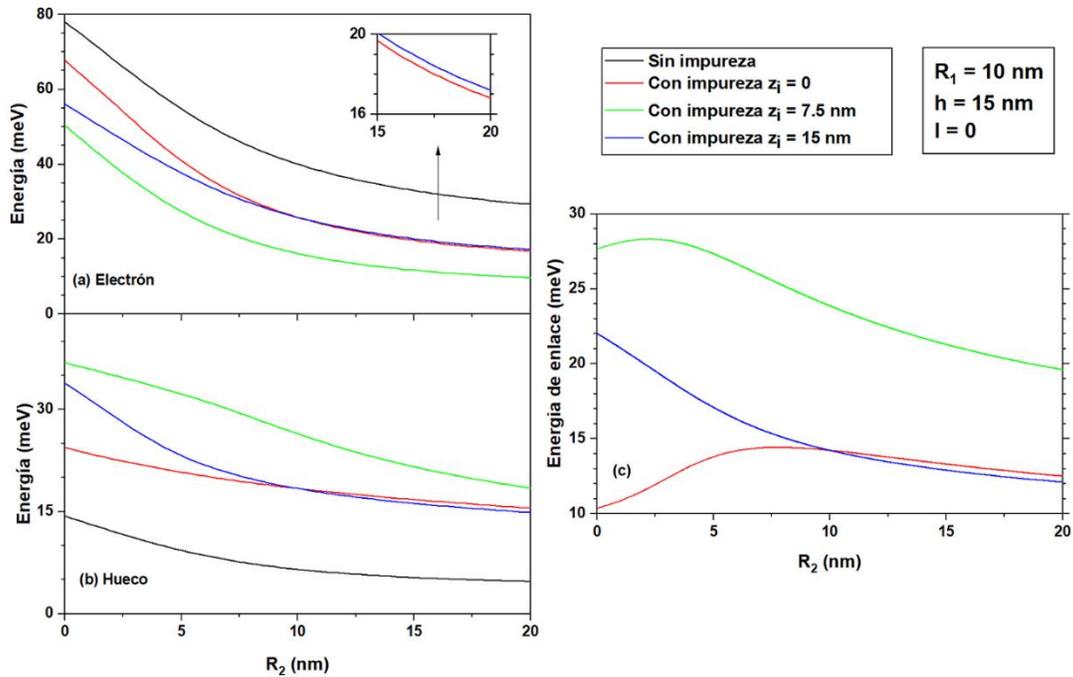


Figura 2. Energía del estado fundamental para (a) un electrón, (b) un hueco confinado en un $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncada, en función del radio inferior R_2 y (c) la energía de enlace correspondiente.

Al comparar la energía sin y con la impureza, la diferencia relacionada con la interacción entre los dos tipos de portadores y la impureza es notable. Por un lado, el electrón experimenta atracción hacia la impureza reflejada en un cambio de espectro hacia energías más bajas, mientras que el hueco pesado, por el contrario, se comporta con una interacción repulsiva con la impureza donadora, lo que provoca un aumento de energía para cada posición de impureza. En la Fig.2(a), se puede apreciar que para valores de R_2 cercanos a cero, el estado fundamental con la impureza en $z_i = 0$, es el que tiene el menor corrimiento energía en comparación con las otras dos posiciones de la impureza. Esto se debe a que existe una competencia entre el confinamiento geométrico, que hace que la función de onda se concentre en la parte superior del QD, y el efecto atractivo de la impureza que es responsable de que el electrón/hueco se desplace hacia la región inferior de la estructura. Claramente, para el estado fundamental, el efecto de interacción de Coulomb es menos significativo con respecto al efecto geométrico. Cabe señalar que la presencia de la impureza no influye en la degeneración asociada con la simetría azimutal.

La energía de enlace del estado fundamental (E_b) para las mismas tres posiciones de la impureza se obtiene por la diferencia $E_b = E_1 - E_1^i$, donde E_1 es la energía del estado fundamental del electrón en ausencia del centro de impurezas ($\kappa = 0$) y E_1^i es el correspondiente, pero en presencia de la impureza ($\kappa = -1$). Para $z_i = 0$, la energía de enlace aumenta en el rango $0 < R_2 < 7 \text{ nm}$. En el régimen de R_2 , el máximo de la densidad de probabilidad ocurre en la parte superior del QD (es decir, cerca de la superficie del radio R_1) porque el electrón tiende a estar en la región de menor confinamiento, es decir, en la región de mayor volumen local y alejada de los bordes del cono. Con la aparición de la impureza en $z_i = 0$, hay una disminución sistemática en la distancia entre el electrón e impurezas a medida que aumenta R_2 debido a la disminución del efecto repulsivo asociado con las posibles barreras presentes en el punto cuántico. Esto da como resultado un aumento en la interacción de Coulomb y, en consecuencia, en la energía de enlace. Una vez que se obtiene la forma cilíndrica del QD ($R_2 = 10 \text{ nm}$) y R_2 sigue aumentando desde allí, además se observa una reducción efectiva del efecto de confinamiento debido al aumento sistemático del volumen de la estructura. En este caso, la energía de enlace se asocia principalmente a la interacción de Coulomb, y el confinamiento geométrico asociado a la estructura se transforma en un efecto perturbativo que disminuye con el aumento de R_2 . Para el caso en el que la impureza se ubica en la mitad de la altura del QD, $z_i = 7.5 \text{ nm}$, la energía de enlace es una función creciente en el rango $0 < R_2 < 2.3 \text{ nm}$, que está asociado con la rápida saturación y débil efecto de las barreras de potencial ubicadas en el punto cuántico del cono truncado invertido ($R_2 < R_1$). Cuando $z_i = 15 \text{ nm}$, E_b es una función monótonamente decreciente de R_2 . En este caso, el aumento de R_2 implica un desplazamiento constante del máximo de densidad de probabilidad desde la parte superior de la estructura hacia la región de altura media, o incluso por debajo de ella, con un aumento permanente de la distancia media entre electrones e impurezas. Esto se refleja en una caída en la interacción electrostática y, en consecuencia, en la energía de enlace.

En la figura 3, se presentan los resultados como función del campo magnético aplicado, para $l = 0$, tanto para el electrón, figura 3(a), como para el hueco pesado, figura 3(b), confinado en un QD de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en forma de cono truncado. Para el caso sin impureza, $\kappa = 0$, el estado fundamental del electrón mantiene su

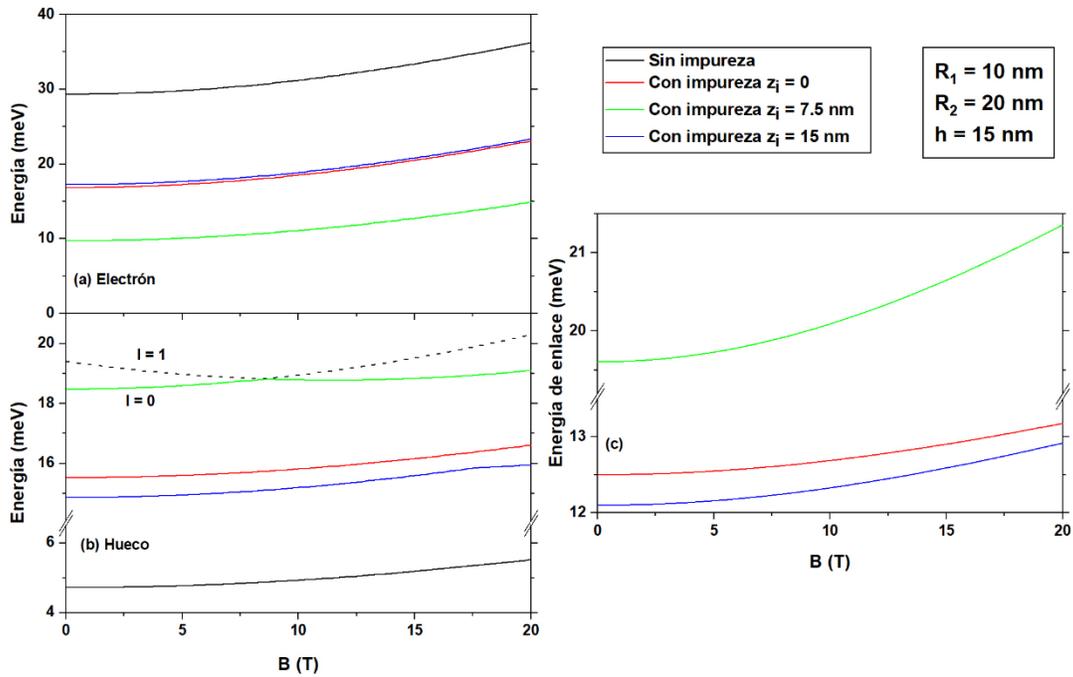


Figura 3. Nivel del estado fundamental como función de un campo magnético aplicado, para (a) un electrón, (b) un hueco confinado en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en forma de cono truncado, y (c) la energía de enlace correspondiente. Considerando la presencia de una impureza donadora que se encuentra en tres posiciones diferentes en el eje z : $z_i = 0$, $z_i = 7.5$ y $z_i = 15$ nm

simetría en todo el rango del campo magnético calculado, que corresponde a un estado similar a s con $l = 0$. En el caso del hueco pesado, hay múltiples cruces para estados excitados, ya que un conjunto pierde la degeneración acompañada de un aumento de energía, y el otro conjunto de estados, que fue parte de la degeneración en ausencia de un campo magnético, va hacia energías más bajas. Este comportamiento se puede observar, por ejemplo, para el primer estado excitado en la Fig. 3(b) con una impureza en $z_i = 7.5$ nm; el primer estado excitado ($l = 1$) va hacia energías más bajas, y, por el contrario, el estado fundamental ($l = 0$) va hacia energías más altas.

En la figura 3, se puede apreciar que el efecto combinado del campo magnético aplicado y la interacción con la impureza permite cambiar los niveles de energía del electrón y el hueco y generar un aumento en la degeneración para los estados con $l \neq 0$. El estado fundamental del electrón no correlacionado tiene su máxima densidad de probabilidad a lo largo del eje z , que coincide con la posición de la

impureza. En este caso, el campo magnético genera un confinamiento adicional hacia el eje z , reduciendo efectivamente la distancia entre electrones e impurezas, mejorando así la interacción de Coulomb. Los mayores efectos sobre las energías del sistema correlacionado ocurren para la impureza ubicada en la mitad de la altura del QD, en la figura 3(c), la línea de color verde. Esto se debe a que la influencia de la interacción de Coulomb ocurre en todas las direcciones del espacio. Para el hueco pesado, el efecto repulsivo de la impureza donadora genera un comportamiento de anillo cuántico, que se hace evidente con las oscilaciones del estado fundamental cuando se enciende el campo magnético. Por ejemplo, en la Fig. 3 el estado fundamental corresponde a $l = 0$ para $B = 0$ mientras que para $B = 15 T$ el estado fundamental ocurre con $l = +1$. Es evidente que, para la impureza en las bases inferior y superior de la estructura, el estado fundamental del hueco pesado continúa presentando el carácter oscilatorio con el campo magnético. Sin embargo, la repulsión generada por las barreras potenciales reduce la manifestación de este efecto.

En la figura 3(c), las energías de enlace del estado fundamental para el electrón confinado se presentan como una función del campo magnético aplicado para tres posiciones de impurezas donadoras consideradas, $z_i = 0$, $z_i = 7.5 nm$, y $z_i = 15 nm$. Los resultados se obtuvieron restando de la energía del estado fundamental (línea de color negro en la figura 3(a)), las energías del estado fundamental correspondientes a las tres posiciones de impurezas. Aunque el campo magnético disminuye, la variación de la energía de enlace aumenta a una velocidad baja, esto debido a que el valor esperado de $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, es decir, la comprensión de la función de onda hacia el eje z , cuando la impureza se encuentra en la parte superior o inferior del QD, para las impurezas ubicadas a la mitad de la altura del QD, $z_i = 7.5 nm$, se alcanza la interacción más significativa con el electrón. Con el aumento del campo magnético, existe una menor distancia entre el electrón y la impureza, obteniendo mayor energía de enlace. En el último caso, como se mencionó anteriormente, la interacción Coulombiana tiene un carácter simétrico cuasi-3D, excepto por las variaciones que la forma de la estructura induce en los límites entre el QD y el material circundante.

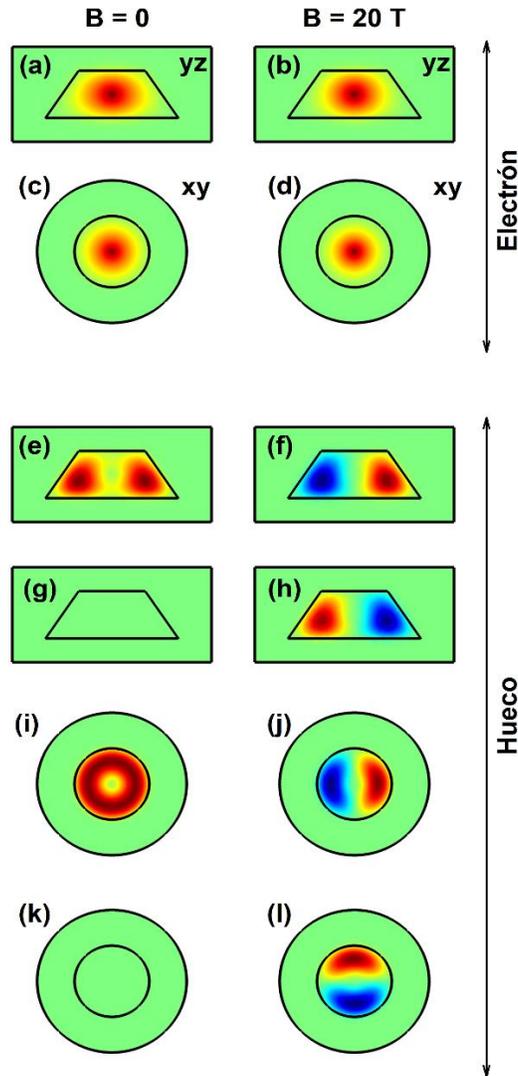


Figura 4. Proyecciones $x = 0$ (ab, eh) y $z = 7 \text{ nm}$ (cd, il) de las funciones de onda (WF) del estado fundamental del electrón y del hueco pesado en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncada, para dos valores del campo magnético aplicado verticalmente (cada columna corresponde a un valor fijo del campo magnético $B = 0$ y $B = 20$ respectivamente). Las dos primeras filas son para la parte real del electrón, las filas 3 y 5 son para la parte real del hueco, mientras que las filas 4 y 6 son para la parte imaginaria del hueco. Los cálculos son para $R_1 = 10 \text{ nm}$, $R_2 = 20 \text{ nm}$, $h = 15 \text{ nm}$, y con una impureza donadora ubicada en $z_i = 7.5 \text{ nm}$.

En la figura 4 se muestran dos conjuntos de paneles para la función de onda (WF) del estado fundamental de electrones y huecos pesados (parte derecha). Hay cortes en la primera, tercera y cuarta filas para el plano $y = 0$. Un primer conjunto corresponde a los WF de electrones, figuras 4(a-d) y el segundo, figuras 4(e-l) para huecos WF. Las partes real e imaginaria de los WF con huecos pesados

corresponden a las Figs. 4(e-f, i-j) y las figuras 4(g-h, k-l), respectivamente. El segundo conjunto de cortes es para el plano $z = 7.5 \text{ nm}$, Figs. 4(c-d, i-l), y las dos columnas son para dos valores diferentes del campo magnético aplicado. Con un estado fundamental de simetría similar a s , el electrón está ubicado fundamentalmente en el centro QD e independientemente del valor del campo magnético aplicado, pero la fuerza de confinamiento es más fuerte con el campo magnético. Esta distribución de las WF es el resultado de la atracción hacia el centro de impureza. Cuando se aplica el campo magnético, es evidente que el electrón tiene una ubicación más significativa hacia el eje axial. Tenga en cuenta que la simetría similar a s del estado fundamental del electrón se mantiene con la inclusión del campo magnético, incluso para el valor más alto de $B = 20 \text{ T}$ utilizado en este trabajo. La parte real de las WF de hueco pesado (Figuras 4(e-f, i-j)) muestra que la WF tiene la simetría del anillo en ausencia de un campo magnético ya que la impureza donadora genera repulsión electrostática en el hueco. Cuando se incluye el campo magnético, hay cambios en la simetría del estado fundamental del hueco pesado (evolucionando desde $l = 0$ para $B = 0$ hasta $l = +1$ para $B = 20 \text{ T}$; (ver la fila 5 en la figura 4). Estos resultados están de acuerdo con el estado fundamental de la figura 3(b). Para $B = 20 \text{ T}$, hay complementariedad entre los componentes real e imaginario de la WF (ver paneles (j) y (k)). Esto significa que la suma de los cuadrados de los dos componentes genera una densidad de probabilidad que muestra simetría en forma de anillo, como ocurre en ausencia de un campo magnético, ver figura 4(i).

3.2. Estados de un excitón en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en forma de cono truncado con geometría variable. Efectos de una impureza donadora y de un campo magnético

Esta subsección estudiamos la contribución excitónica en un nano cono truncado de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ considerando los efectos de una impureza donadora y un campo magnético estático. En la figura 5 se muestran los resultados para el par electrón-hueco confinados en un nanocono truncado de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ como QD en función del radio R_2 de la estructura. En la figura 5(c) se muestra la energía

Coulombiana calculada por mediante la solución de la ecuación (4), y los resultados presentados en las figuras 5(a-b) corresponden al valor esperado $\langle z_e \rangle$ y $\langle z_h \rangle$ de electrones y huecos pesados respectivamente. De la figura 5(c), se puede inferir que, independientemente de la presencia o no de la impureza donadora, con el aumento de R_2 hay una disminución en la energía de interacción electrón-hueco, lo cual se evidencia con el carácter decreciente de todas las curvas a medida que R_2 aumenta, lo cual puede explicarse por un aumento en el valor esperado de la distancia electrón-hueco -- $\langle |\vec{r}_e - \vec{r}_h| \rangle$. En ausencia de impureza, el electrón y el hueco se encuentran esencialmente en la misma posición vertical. A medida que R_2 va de cero a 20 nm, los máximos de las densidades de probabilidad de electrones y huecos cambian (con valores decrecientes de $\langle z_e \rangle$ y $\langle z_h \rangle$) desde el centro de gravedad de un cono invertido hacia el centro de gravedad de un cono truncado con un radio mayor/menor en la base inferior/superior del QD. Este hecho explica el comportamiento casi superpuesto y decreciente de $\langle z_e \rangle$ y $\langle z_h \rangle$ en las figuras 5(a-b).

Al incluir la impureza en diferentes posiciones se modifica el comportamiento de $\langle z_e \rangle$ y $\langle z_h \rangle$. Para $z_i = 0$, $|\langle z_e \rangle - \langle z_h \rangle|$ aumenta en el rango $0 < R_2 < 7 \text{ nm}$. Con el aumento de R_2 , el electrón se mueve hacia el centro de impureza; esto explica por qué va más rápido hacia valores z_e más bajos. En cambio, el hueco está sometido a dos condiciones que generan efectos inversos; por un lado, la disminución del confinamiento asociada con el aumento R_2 implica una caída en $\langle z_h \rangle$, pero la tasa de disminución es menor que la de $\langle z_e \rangle$, con un comportamiento cuasi-lineal, por otro lado, la impureza en $z_i = 0$ repele el hueco. Queremos resaltar que, para $R_2 = 0$, ocurre la situación de mayor confinamiento en el par electrón- hueco. La parte cónica del QD en $z = 0$ genera una repulsión extrema en las funciones de onda del electrón y del hueco, lo que hace que los efectos de una impureza ubicada en $z_i = 0$ sean casi indetectables. Este hecho explica el primer caso de energías casi iguales para "sin impureza" y con impureza en $z_i = 0$. Cuando se habla de confinamiento extremo, las funciones de onda de electrones y huecos son difíciles de deformar debido a los efectos de las impurezas cuando van de $z_i = 7.5 \text{ nm}$ a $z_i = 15 \text{ nm}$. Esta situación explica el segundo caso de energías casi iguales cerca de 20 meV .

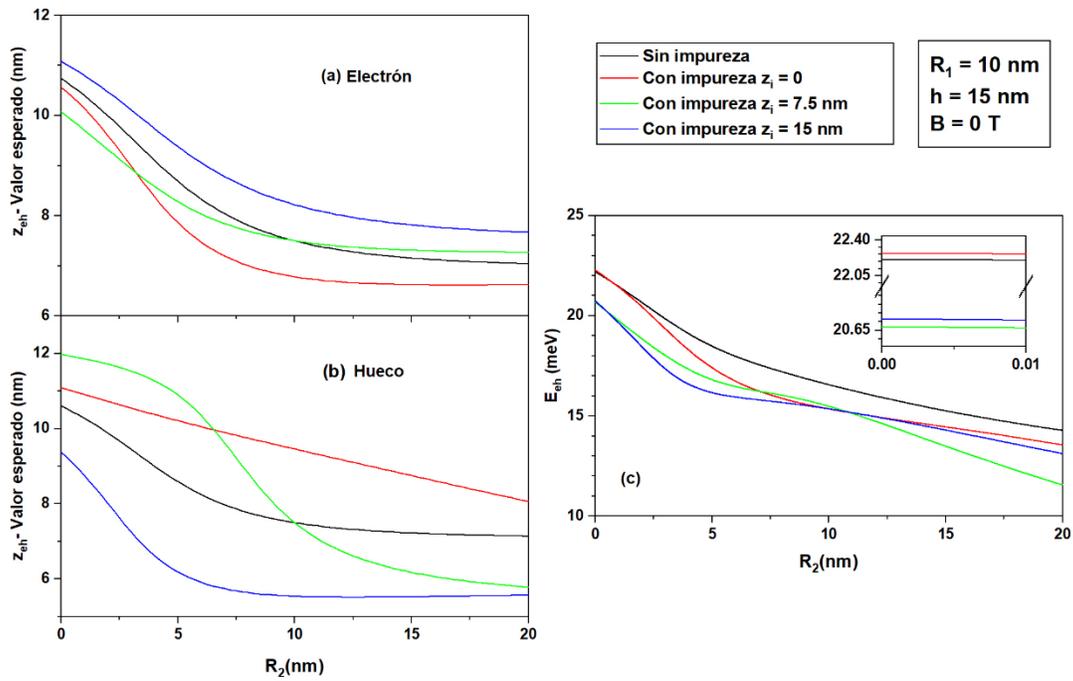


Figura 5. Caracterización de los estados de un excitón de hueco pesado en un nanocono truncado de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. como función del radio R_2 de la estructura. (a) y (b) separación promedio Z_{eh} ; y (c) interacción Coulombiana electrón-hueco.

En la figura 6, se presenta el mismo tipo de resultados que en la figura 5, pero para un QD de dimensiones fijas y en función del campo magnético aplicado. En la figura 6(a), sin impurezas, se observa que la interacción Coulombiana electrón-hueco aumenta. Este hecho se explica en gran medida por la disminución de la separación de los portadores con el aumento del campo magnético. Debido al efecto opuesto que tiene la impureza sobre el electrón y el hueco, es decir, atracción y repulsión, respectivamente, generalmente se observan energías de Coulomb más bajas en comparación con el caso de ausencia de impureza.

En las figuras 6(b-c), se grafican las energías de interacción Coulombiana para $z_i = 7.5$ nm y $z_i = 15$ nm, respectivamente, obtenidas de la figura 6(a). La idea de estos gráficos es enfatizar el comportamiento del confinamiento tanto del electrón como del hueco cuando ocurren cambios de simetría y de las funciones de onda (WF) del estado fundamental debido al efecto del campo magnético aplicado. En la figura 6(b), para $B < 8.5$ T, las WF del estado fundamental del electrón y del hueco se obtienen para $l = 0$, y en este caso, la parte imaginaria de las WF para ambos.

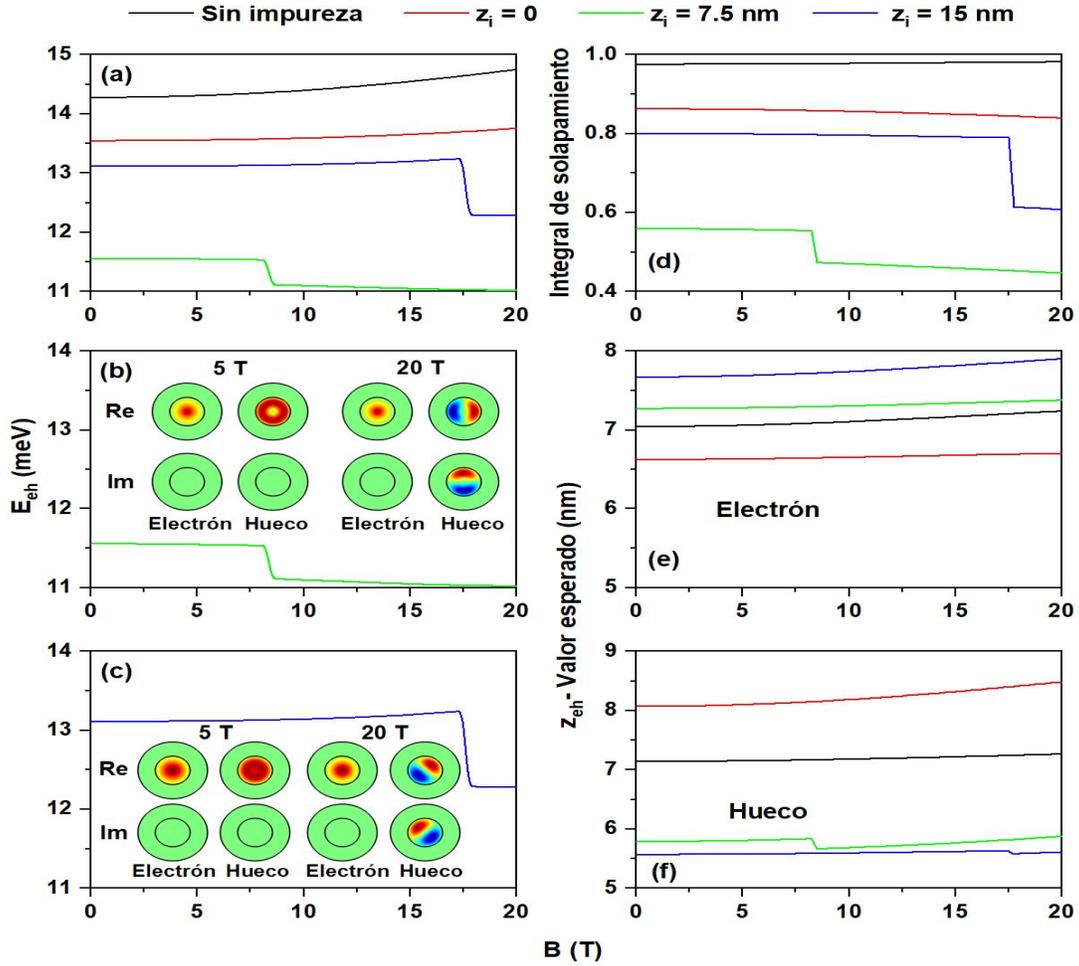


Figura 6. Caracterización de los efectos del excitón en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncada en función del campo magnético aplicado verticalmente. (a) e-h energía de Coulomb con $k = 0$ y $k \neq 0$ con tres posiciones de impurezas, (b) e-h energía de Coulomb con la impureza en $z_i = 7.5nm$, (c) e-h energía de Coulomb con la impureza en $z_i = 15nm$, (d) integral de solapamiento, (e) valor esperado en z para el electrón (f) valor esperado en z para el hueco. Los resultados son para $R_1 = 10nm, R_2 = 20nm$ y $h = 15nm$. En los paneles (b, c) se muestran pocas proyecciones de funciones de onda de electrones y huecos (partes reales e imaginarias) en el plano $z = 7.5nm$.

En las figuras 6(b-c), se grafican las energías de interacción Coulombiana para $z_i = 7.5nm$ y $z_i = 15nm$, respectivamente, obtenidas de la figura 6(a). La idea de estos gráficos es enfatizar el comportamiento del confinamiento tanto del electrón como del hueco cuando ocurren cambios de simetría y de las funciones de onda (WF) del estado fundamental debido al efecto del campo magnético aplicado. En la figura 6(b), para $B < 8.5T$, las WF del estado fundamental del electrón y del hueco se obtienen para $l = 0$, y en este caso, la parte imaginaria de las WF para ambos

portadores es cero. La simetría de tipo s para el electrón y la simetría de anillo para el hueco está claramente identificada. Para $B > 8.5 T$, el estado fundamental del hueco corresponde a $l = 1$, y aparece la complementariedad entre las partes real e imaginaria de las WF, pero se mantiene una simetría de anillo para la densidad de probabilidad. En la figura 6(c), los resultados son similares a los representados en la figura 6(b), pero en este caso, la transición la WF del hueco del estado fundamental se mueve a un valor de campo magnético más alto. El pequeño aumento observado en la energía de Coulomb para $z_i = 0$ y $z_i = 15$ nm, con la influencia del campo magnético, se debe a que a pesar de tener una integral de solapamiento (OI) menor con el aumento del campo magnético, las WF se ubican en un volumen menor, lo que aumenta el valor de integral de Coulomb. El cambio en la simetría de las WF para el estado fundamental del hueco explica los saltos en las curvas de la integral de Coulomb para $z_i = 7.5$ nm y $z_i = 15$ nm que se muestran en la figura 6(a) y detallado en las figuras 6(b) y 6(c) con las correspondientes WF de electrones y huecos para dos valores particulares del campo magnético aplicado.

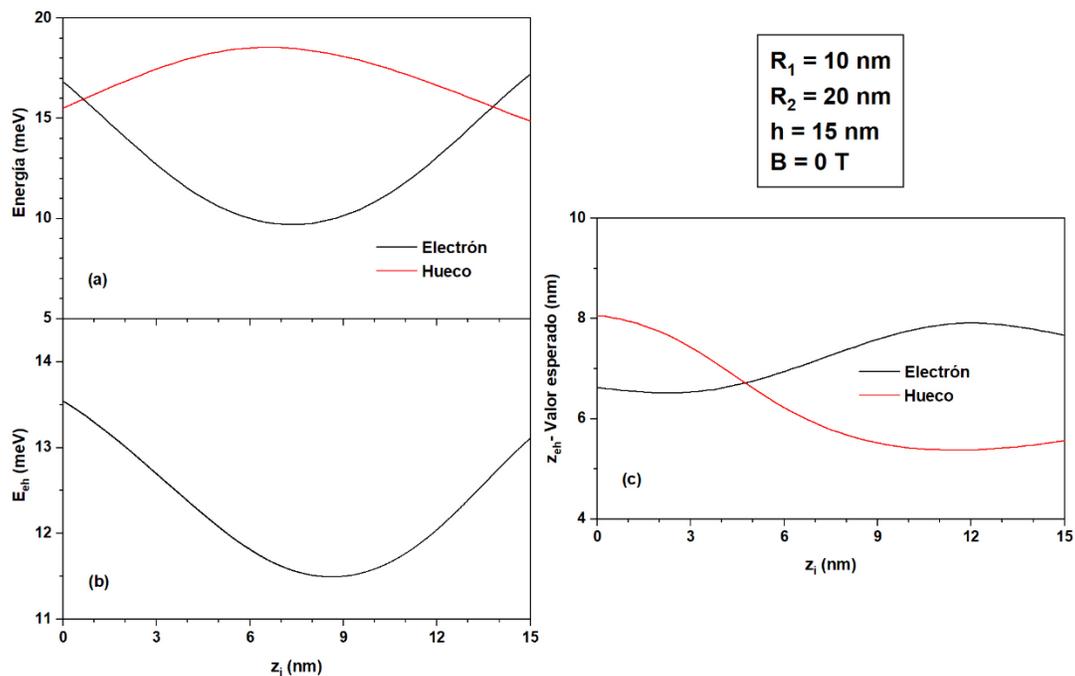


Figura 7. Caracterización de los efectos del excitón en un punto cuántico de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncada en función de la posición de impureza donadora z_i . (a) Estado fundamental para el electrón y el hueco, (b) la energía de interacción Coulombiana del para electrón-hueco y (c) el valor esperado z para cada portador.

Para tener una mejor perspectiva de los efectos de la posición de la impureza, se ha variado desde la base inferior hasta la base superior de un QD de $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cónica truncada, siempre ubicado a lo largo del eje z . Esta posición está controlada por el parámetro z_i . En la figura 7(a) se muestran las energías del estado fundamental de los electrones y los huecos, en 7(b) la interacción Coulombiana del par electrón-hueco, (c) la posición promedio del electrón y del hueco a lo largo del eje z . Los cálculos son para $R_1 = 10 \text{ nm}$, $R_2 = 20 \text{ nm}$, $h = 15 \text{ nm}$ y $B = 0$.

En la figura 7(a), se ve claramente el efecto inverso de una impureza donadora sobre el hueco y el electrón. El electrón tiene un carácter atractivo y para el hueco, es repulsivo. Cuando la impureza se encuentra en la primera mitad de la altura, es decir, $z_i \leq 7.5 \text{ nm}$, el electrón es atraído hacia una región de menor confinamiento y el hueco es expulsado hacia la región de mayor confinamiento. En la segunda mitad de la altura, es decir, para $z_i \geq 7.5 \text{ nm}$, se produce el efecto opuesto en cada portador de carga. Por lo tanto, hay energía creciente para el electrón y energía decreciente para el hueco.

La interacción Coulombiana que se muestra en la figura 7(b) disminuye hasta $z_i = 8.5 \text{ nm}$ porque estadísticamente hablando, el electrón y el hueco están siendo separados por la impureza donadora. Desde $z_i = 8.5 \text{ nm}$, la competencia entre el efecto de impureza y el confinamiento del electrón hace que el electrón permanezca en una región en la que se superpone mejor con el hueco. Dado que la impureza se encuentra en el eje z , el valor esperado de z para cada una de las partículas es una evidencia de cómo la impureza modifica las posiciones de los portadores de carga. Tenga en cuenta que la energía Coulombiana para la impureza en $z_i = 0$ es mayor que la energía para $z_i = 15 \text{ nm}$, que se justifica por la mayor separación z entre las dos partículas en $z_i = 15 \text{ nm}$ (véase la figura 7(c)). Además, tenga en cuenta que para $z_i = 4.75 \text{ nm}$, los efectos combinados de la geometría y la impureza hacen que el valor esperado de z sea el mismo para el electrón y el hueco. A ese valor de z_i , la energía de Coulomb más alta no ocurre porque debe tenerse en cuenta que hay efectos de geometría en diferentes planos z .

3.3. Cambio de excitón directo a indirecto en un punto cuántico cónico truncado de CdSe-CdTe de estructura núcleo-corteza tipo II.

En esta subsección, de acuerdo con las figuras. 1(c) y 1(d), se estudia un sistema de un punto cuántico núcleo-corteza de CdTe-CdSe y CdSe-CdTe, en el cual una transición espacial de directo e indirecto ocurre en el excitón. Los parámetros que usamos en esta subsección son: i) en CdTe $m_e = 0.096 m_0$, $m_h = 0.40 m_0$, y $\epsilon = 10.2$; ii) en CdSe $m_e = 0.120 m_0$, $m_h = 0.45 m_0$, y $\epsilon = 10.2$ [58]. Adicionalmente, $V_e^0 = 0.42 eV$ y $V_h^0 = 0.57 eV$ [58].

En la figura 8 se presenta la caracterización de los estados de excitones relacionados con el caso de la figura 1(c). Como se indicó en la sección de introducción, el CdTe se comporta como la región de barrera/pozo para electrón/hueco en este caso, y el CdSe corresponde a la región de pozo/barrera para electrón/hueco. Cuando $\xi = 0$, el electrón y el hueco están confinados en un QD cónico truncado con una barrera de potencial infinita. Cuando aparece $\xi \neq 0$, el pozo de potencial para los electrones se encuentra en la región CdSe. Para valores pequeños de ξ ($\xi < 1.5 nm$), el electrón permanece en la región CdTe debido al fuerte confinamiento en la región CdSe. Para $\xi > 1.5 nm$, el volumen de CdSe se vuelve lo suficientemente grande como para que el electrón penetre en la región donde se encuentra su pozo de potencial. En ese momento, ambos portadores de carga están ubicados en las regiones de sus propios pozos de potencial, es decir, el hueco en el CdTe y el electrón en el CdSe, y aparece un sistema excitónico espacialmente indirecto. La fuerte caída en la energía del electrón en la figura 8(a) está asociada con el cambio de la región de confinamiento y el subsecuente aumento en el volumen de la región de la capa. Las ligeras variaciones perceptibles en la energía del hueco aparecen cuando se hace presente la barrera de potencial finito ubicada en la cara lateral de la estructura. Sin embargo, a partir de un valor específico de ξ , la energía del hueco no muestra variaciones debido al volumen constante de la región central a medida que aumenta ξ . La caída de la energía de Coulomb en la figura 8(c) se explica por el hecho de que la distancia media entre el electrón y hueco aumenta con el parámetro ξ . La figura 8(d) permite identificar la

transición del excitón directo al indirecto, debido a que inicialmente las partículas están en el CdTe y a medida que ξ aumenta, el electrón se desplaza a la región CdSe, con el hueco siempre localizado en la región CdTe, alcanzando un excitón indirecto.

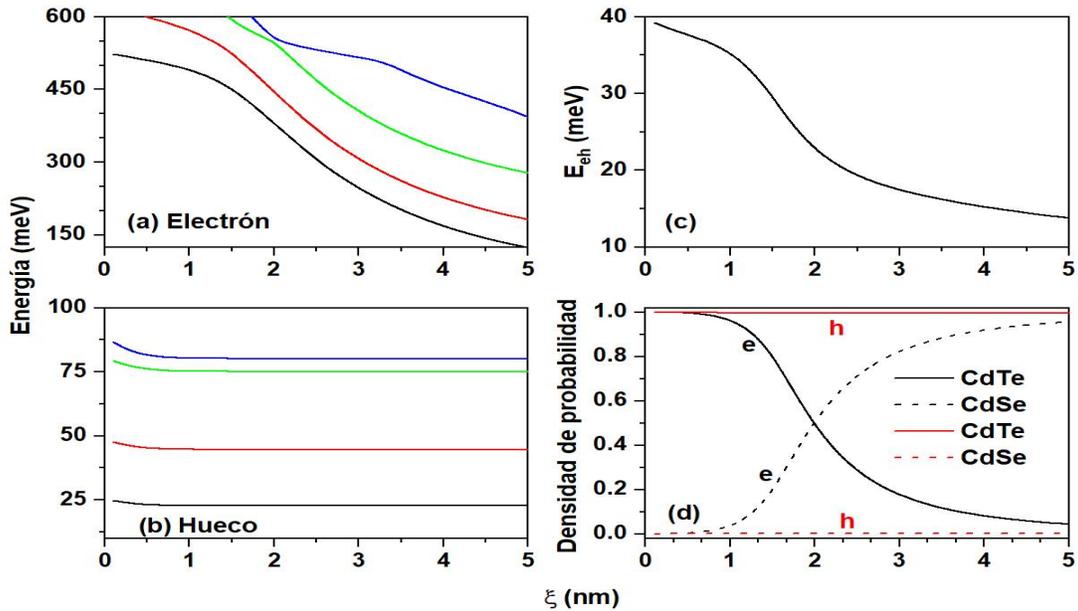


Figura 8. Caracterización de los efectos del excitón en un punto cuántico de forma cónica truncada de CdTe-CdSe en relación con el parámetro ξ . Se muestran los primeros cuartos niveles de energía para (a) el electrón y (b) el hueco. En (c) se muestra la energía de Coulomb del electrón-hueco, mientras que en (d) se representa la densidad de probabilidad tanto para el electrón como para el hueco en cada material CdTe y CdSe. Los cálculos son para $R_1 = 3 \text{ nm}$, $R_2 = 8 \text{ nm}$, $h = 12 \text{ nm}$, $B = 0$ y ausencia de impurezas.

La caracterización de los estados del excitón relacionados con el caso de la figura 1(d) se muestra en la figura 9, donde los resultados se refieren al parámetro ξ . En la figura 1(d), se puede ver que al aumentar el parámetro ξ , el volumen de la región CdSe disminuye, lo que corresponde al pozo de potencial para el electrón. En consecuencia, la energía de los niveles del electrón debe crecer con el parámetro ξ , como se muestra en la figura 9(a). Cuando $\xi \rightarrow 0$, el hueco está confinado en la región de su barrera de potencial, rodeado por un potencial infinito, y en este caso, las energías de todos los estados confinados (E) cumplen la condición $E > V_h^0 = 0.57 \text{ eV}$, como se muestra en la figura 9(b) en el régimen $\xi < 1.0 \text{ nm}$. Cuando $\xi > 1.0 \text{ nm}$, el volumen de la región de la corteza se vuelve lo suficientemente grande como para que el hueco migre hacia la región de su pozo de potencial, es decir,

hacia la región CdTe. El volumen del CdTe, región de la corteza, crece progresivamente con el parámetro ξ , y con él, el confinamiento en el hueco disminuye, lo que se manifiesta en una caída en todos los niveles de energía, situación que se muestra en la figura 9(b). Entonces podemos concluir que el sistema presenta una evolución desde un excitón espacialmente directo con el hueco y el electrón ubicados en la región CdSe hacia un excitón espacialmente indirecto para valores grandes del parámetro ξ con el electrón en la región del núcleo, cuyo volumen disminuye, y el hueco en la región de la corteza, cuyo volumen aumenta. La interpretación presentada aquí es confirmada por el comportamiento siempre decreciente de la integral de Coulomb en la figura 9(c) y las densidades de probabilidad en la figura 9(d).

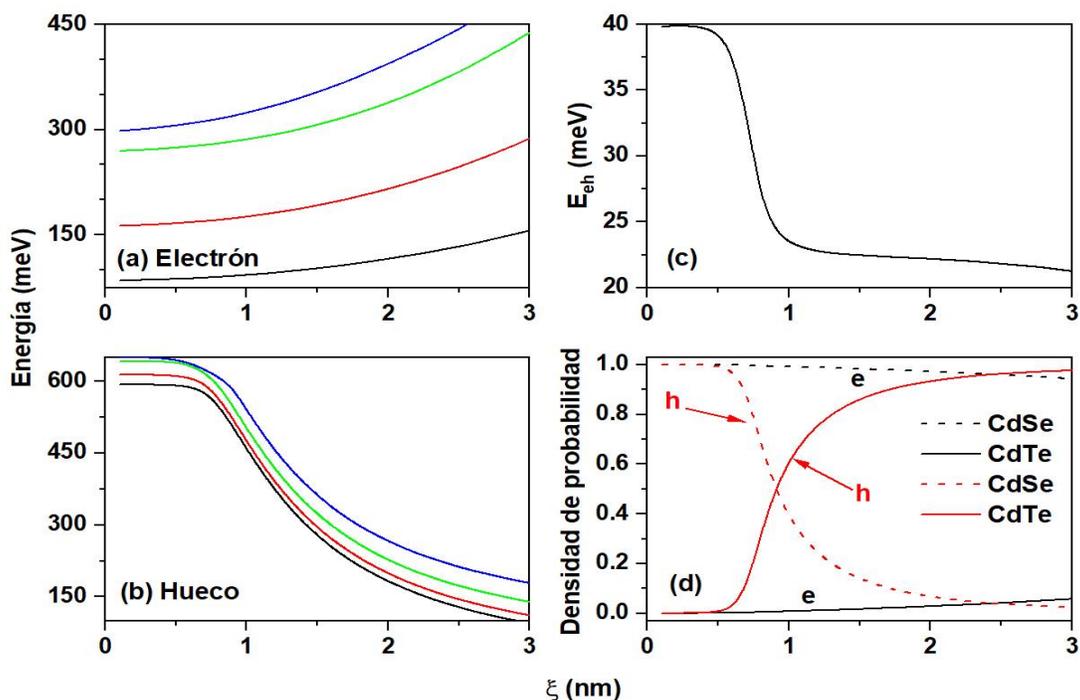


Figura 9. Caracterización de los efectos del excitón en un punto cuántico de CdSe-CdTe de forma cónica truncada, en función del parámetro ξ . Se muestran los niveles de energía más bajos para (a) el electrón y (b) el hueco. En (c) se muestran los resultados para la energía de interacción del par electrón-hueco, mientras que en (d), se presenta la densidad de probabilidad tanto para el electrón como para el hueco en cada material de CdSe y CdTe. Los cálculos son para $R_1 = 3 \text{ nm}$, $R_2 = 8 \text{ nm}$, $h = 12 \text{ nm}$, $B = 0$ y ausencia de impurezas.

3.4. Estados de un excitón en un punto cuántico núcleo-corteza de CdSe-CdTe de estructura tipo II bajo los efectos de campos magnéticos y eléctricos

En esta subsección, de acuerdo con la figura 1(c), se estudia el sistema de un punto cuántico núcleo-corteza de CdTe-CdSe, actuando como pozo el CdTe (núcleo) para el hueco y CdSe (corteza) para el electrón. Los parámetros que usamos en esta subsección son: *i*) en CdTe $m_e = 0.096 m_0$, $m_h = 0.40 m_0$, y $\epsilon = 10.2$; *ii*) en CdSe $m_e = 0.120 m_0$, $m_h = 0.45 m_0$, y $\epsilon = 10.2$ [58]. Adicionalmente, $V_e^0 = 0.42 eV$ y $V_h^0 = 0.57 eV$ [58].

Cuando se aplica un campo magnético a la nanoestructura se presenta un cambio en los niveles de energía del estado base del electrón, mostrando cruces que se conocen como oscilaciones Aharonov-Bohm, como consecuencia del incremento del campo.

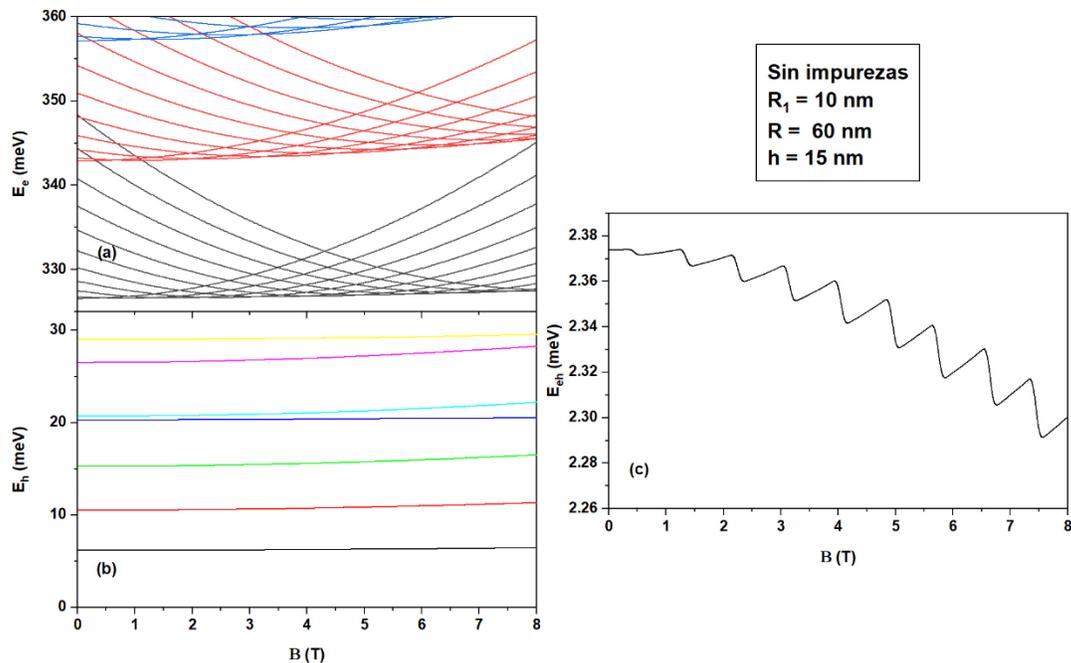


Figura 10. Caracterización de los efectos de un excitón en un punto cuántico de forma cónica truncada de CdSe-CdTe, en función del campo magnético. Se muestran los niveles de energía más bajos para (a) el electrón y (b) el hueco. En (c) se muestran los resultados para la energía de Coulomb del par electrón-hueco.

Estas oscilaciones hacen parte de la interacción de fuerzas centrífugas, paramagnéticas y diamagnéticas en el Hamiltoniano. Estas transiciones se dan en el estado base del electrón debido a cambios en los momentos angular ($l = -10, -9, -8, -7, -6, -5, -4, -3, -2, -1 - 0$) estas curvas se pueden observar en la figura 10(a). La cantidad de trayectorias de diferente momento angular dependerá del valor del campo magnético aplicado, es decir entre más grande sea el campo más niveles de diferente momento angular aparecerán.

Además, se puede observar que la interacción del campo magnético en el hueco no es tan considerada debido a que el espacio de confinamiento en este es menor, por lo tanto, solo se puede observar un cambio pequeño en la energía debido a este campo. En la figura 10(c) tenemos la energía del excitón que es traducida en la interacción Coulombiana que existe entre el hueco y el electrón, se presenta una pequeña caída energética debido al confinamiento que ejerce el campo en cada una de las partículas lo que impide que esta interacción sea mayor.

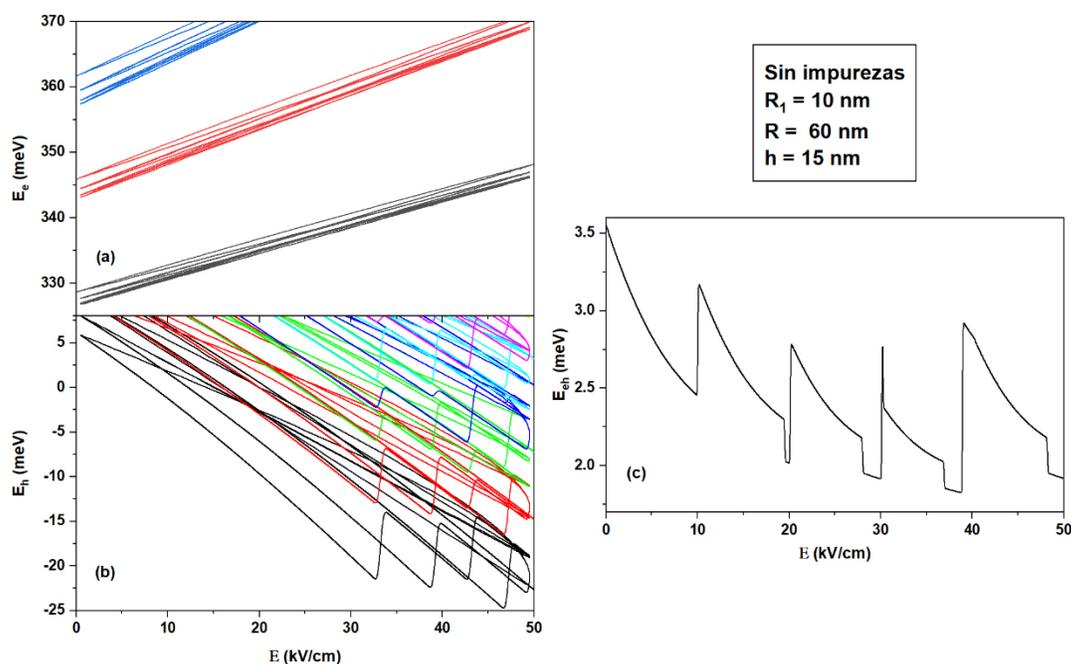


Figura 11. Caracterización de los efectos del excitón en un punto cuántico de forma cónica CdSe-CdTe truncado en función del campo eléctrico E dado en kV/cm. Se muestran los niveles de energía más bajos para el electrón (a) y el hueco (b). En (c), los resultados son para la energía de Coulomb del electrón-hueco. en cada material de CdSe y CdTe.

En la figura 11(a) podemos observar como el campo eléctrico ejerce un aumento de energía en el electrón y además un confinamiento hacia la parte inferior del nanocono, en cambio en la figura 11 (b) el campo eléctrico genera una caída en el nivel energético del hueco por la acción repulsiva y tiende a disminuir su área de acción o su densidad de probabilidad dentro del CdTe. En la gráfica del excitón la interacción Coulombiana va disminuyendo porque el campo eléctrico aleja diametralmente a las dos partículas, el electrón hacia la parte inferior y el hueco hacia la parte superior de su pozo potencial respectivamente, además los saltos en los niveles de energía corresponden a los saltos que ocurren en el hueco.

4. Conclusiones

En este trabajo, hemos estudiado los estados de un electrón y hueco en QD de GaAs-(Ga,Al)As de forma cónica, y en presencia de una impureza donadora poco profunda ubicada en el eje z y bajo los efectos de un campo magnético axial y una estructura de un QD núcleo-corteza de CdSe-CdTe sin impurezas ni efectos de campo magnético. La posición de la impureza y la dirección del campo magnético preservan la simetría axial del sistema. Se han considerado variaciones de la geometría, en cuyo caso las estructuras evolucionan de QD cónicos a QD cónicos truncados. Los cálculos se han realizado en la aproximación de masa efectiva y considerando un modelo parabólico de dos bandas. Las ecuaciones diferenciales de valores propios se han resuelto mediante un método de elementos finitos con una malla de discretización flexible. La correlación electrón-hueco se estudió con una aproximación de perturbación de primer orden.

Entre los resultados más relevantes de este estudio podemos citar: *i*) la presencia de la impureza donadora es responsable de un desplazamiento rojo/azul de las energías del electrón/hueco, *ii*) la energía de enlace del sistema electrón-impureza en general disminuye con el tamaño de la estructura; pero con excepciones para geometrías específicas, la energía de enlace es una función creciente con el radio de la base inferior del sistema, *iii*) el campo magnético aplicado es responsable de las oscilaciones del estado fundamental de la impureza y del hueco, *iv*) la energía de enlace para el sistema electrón-impureza es siempre una función creciente del campo magnético aplicado, *v*) un control para sintonizar entre el excitón directo e indirecto mediante cambios de espesor de CdSe o CdTe en el QD de tipo núcleo-

corteza, y vi) Un QD de tipo II núcleo-corteza CdSe y CdTe en donde se aplican campos magnéticos y eléctricos, lo que nos permite observar las oscilaciones Aharonov-Bohm, como consecuencia del incremento del campo magnético. Estas oscilaciones hacen parte de la interacción de fuerzas centrífugas, paramagnéticas y diamagnéticas en el Hamiltoniano.

En el caso de la energía de correlación entre los estados del electrón con impureza y del hueco con impureza, se observa que, en general, disminuyen con el tamaño de la estructura. Considerando la presencia de campos magnéticos aplicados, estos presentan un comportamiento esencialmente constante en rangos específicos del campo magnético con saltos asociados con oscilaciones del estado fundamental del hueco con impureza. La localización de los estados de electrón y hueco en presencia de impurezas y la integral de solapamiento son información esencial para interpretar adecuadamente la correlación de Coulomb entre los estados de impurezas electrónicas e impurezas huecas.

BIOGRAFIA

- [1] A. Lorke and R. J. Luyken, Many-particle ground states and excitations in nanometer-size quantum structures, *Physica B* 256-258, 424-430 (1998).
- [2] R. J. Warburton, C. Schulhauser, D. Haft, C. Schaflein, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schoenfeld, and P. M. Petroff, Giant permanent dipole moments of excitons in semiconductor nanostructures, *Phys. Rev. B* 65, 113303 (4pp) (2002).
- [3] B. Alén, J. Martínez-Pastor, D. Granados, and J. M. García, Continuum and discrete excitation spectrum of single quantum rings, *Phys. Rev. B* 72, 155331 (6pp) (2005).
- [4] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido, and N. Koguchi, Optical transitions in quantum ring complexes, *Phys. Rev. B* 72, 205301 (8pp) (2005).
- [5] G. Bastard, Hydrogenic impurity states in a quantum well: a simple model, *Phys. Rev. B* 24, 4714-4722 (1981).

- [6] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Effect of magnetic field on the energy levels of a hydrogenic impurity center in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures, *Phys. Rev. B* 31, 913-918 (1985).
- [7] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Energy levels of hydrogenic impurity states in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well structures, *Solid State Commun.* 45, 825-829 (1983).
- [8] S. V. Branis, G. Li, and K. K. Bajaj, Hydrogenic impurities in quantum wires in the presence of a magnetic field, *Phys. Rev. B* 47, 1316-1323 (1993).
- [9] J.-L. Zhu, Exact solutions for hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well, *Phys. Rev. B* 39, 8780-8783 (1989).
- [10] F. J. Ribeiro and A. Latgé, Impurities in a quantum dot: a comparative study, *Phys. Rev. B* 50, 4913-4916 (1994).
- [11] B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Electron-electron correlation in quantum dots, *Physica E* 5, 185-195 (1999).
- [12] W. Zhou and J. J. Coleman, Semiconductor quantum dots, *Curr. Opin. Solid St. M.* 20, 352-360 (2016).
- [13] S. V. Gaponenko and H. V. Demir, *Applied Nanophotonics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2019, p. 433.
- [14] N. Porrás-Montenegro, S. T. Pérez-Merchancano, and A. Latgé, Binding energies and density of impurity states in spherical GaAs-(Ga,Al)As quantum dots, *J. Appl. Phys.* 74, 7624-7626 (1993).
- [15] S. Le Goff and B. Stébé, Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors, *Phys. Rev. B* 47, 1383-1391 (1993).
- [16] M. Cristea, E. C. Niculescu, and C. R. Trusca, Optical non-linearities associated to hydrogenic impurities in InAs/GaAs self-assembled quantum dots under applied electric fields, *Philos. Mag.* 97, 3343-3360 (2017).
- [17] E. C. Niculescu, C. Stan, M. Cristea, and C. Trusca, Magnetic-field dependence of the impurity states in a dome-shaped quantum dot, *Chem. Phys.* 493, 32-41(2017).

- [18] A. Medvid, Nano-cones formed on a surface of semiconductors by laser radiation: technology, model and properties. In *Nanowires Science and Technology*, Intech, Vukovar, 2010, 61–82, p. 402.
- [19] R. Nedzinskas, V. Karpus, B. Cechavicius, J. Kavaliauskas, and G. Valusis, Electron energy spectrum in cylindrical quantum dots and rods: approximation of separation of variables, *Phys. Scripta* 90, 065801 (9pp) (2015).
- [20] N. Sil, N. Daripa, A. Kapoor, and S. K. Dey, Perturbation method for calculating impurity binding energy in an inhomogeneous cylindrical quantum dot with dielectric mismatch, *Pramana-J. Phys.* 90, 7 (6pp) (2018).
- [21] I. Mal, D. P. Samajdar, and A. John Peter, Theoretical studies on band structure and optical gain of GaInAsN/GaAs/GaAs cylindrical quantum dot, *Superlattice Microst.* 119, 103-113 (2018).
- [22] H.-M. Lin, Y.-L. Chen, J. Yang, Y.-C. Liu, K.-M. Yin, J.-J. Kai, F.-R. Chen, L.-C. Chen, Y.-F. Chen, and C.-C. Chen, Synthesis and characterization of core-shell GaP@GaN and GaN@GaP nanowires, *Nano Lett.* 3, 537- 541 (2003).
- [23] A. Medvid, A. Mychko, O. Strilchyk, N. Litovchenko, Y. Naseka, P. Onufrijevs, and A. Pludonis, Exciton quantum confinement effect in nanostructures formed by laser radiation on the surface of CdZnTe ternary compound, *Phys. Status Solidi C* 6, 209-212 (2009).
- [24] O. Maher, K. T´emim, B. Jlassi, J. Balti, and S. Jaziri, Effect of the In (Ga) inter diffusion on the optical properties in InAs/GaAs annealed quantum dots, *J. Phys. Conf. Ser.* 245, 012066 (4pp) (2010).
- [25] A. Medvid, P. Onufrijevs, and A. Mychko, Properties of nanocones formed on a surface of semiconductors by laser radiation: quantum confinement effect of electrons, phonons, and excitons, *Nanoscale Res. Lett.* 6, 582 (6pp) (2011).
- [26] S. Nadj-Perge, S. M. Frolov, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Spin-orbit qubit in a semiconductor nanowire, *Nature* 468, 1084-1087 (2010).
- [27] J. Tatebayashi, S. Kako, J. Ho, Y. Ota, S. Iwamoto, and Y. Arakawa, Roomtemperature lasing in a single nanowire with quantum dots, *Nat. Photonics* 9, 501-505 (2015).

- [28] J. Svensson, A. W. Dey, D. Jacobsson, and L.-E. Wernersson, III-V nanowire complementary metal-oxide semiconductor transistors monolithically integrated on Si, *Nano Lett.* 15, 7898-7904 (2015).
- [29] S. Heedt, W. Prost, J. Schubert, D. Grutzmacher, and T. Schapers, Ballistic transport and exchange interaction in InAs nanowire quantum point contacts, *Nano Lett.* 16, 3116-3123 (2016).
- [30] S. L. Diedenhofen, O. T. A. Janssen, G. Grzela, E. P. A. M. Bakkers, and J. Gómez Rivas, Strong geometrical dependence of the absorption of light in arrays of semiconductor nanowires, *ACS Nano* 5, 2316-2323 (2011).
- [31] R. Khordad and H. Bahramiyan, Study of impurity position effect in pyramid and cone like quantum dots, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 67, 20402 (7pp) (2014).
- [32] D. B. Hayrapetyan, E. M. Kazaryan, and H. A. Sarkisyan, Magneto-absorption in conical quantum dot ensemble: possible applications for QD LED, *Opt. Commun.* 371, 138–143 (2016).
- [33] C. Delerue and M. Lannoo, *Nanostructures Theory and Modelling*, Springer, Heidelberg, 2004, p. 304.
- [34] Y. Wang, J. Wang, and H. Guo, Magnetoconductance of a stadium-shaped quantum dot: a finite-element-method approach, *Phys. Rev. B* 49, 1928–1934 (1994).
- [35] W.-M. Zhou, C.-Y. Wang, Y.-H. Chen, and Z.-G. Wang, Finite element analysis of stress and strain distributions in InAs/GaAs quantum dots, *Chinese Phys.* 15, 1315–1319 (2006).
- [36] H. Satori and A. Sali, The finite element simulation for the shallow impurity in quantum dots, *Physica E* 48, 171–175 (2013).
- [37] G. Jurczak and P. D lu'zewski, Finite element modelling of threading dislocation effect on polar GaN/AlN quantum dot, *Physica E* 95, 11–15 (2018).
- [38] M. Solaimani, Binding energy and diamagnetic susceptibility of donor impurities in quantum dots with different geometries and potentials, *Mater. Sci. Eng. B-Adv* 262, 114694 (10pp) (2020).

- [39] S. Khaledian, F. Nalaini, M. Mehrbakhsh, M. Abdoli, and S. Salehi Zahabi, Applications of novel quantum dots derived from layered materials in cancer cell imaging, *FlatChem* 27, 100246 (14pp) (2021).
- [40] S. R. Nxele and T. Nyokong, The effects of the composition and structure of quantum dots combined with cobalt phthalocyanine and an aptamer on the electrochemical detection of prostate specific antigen, *Dyes Pigments* 192, 109407 (14pp) (2021).
- [41] B. Gidwani, V. Sahu, S. S. Shukla, R. Pandey, V. Joshi, V. K. Jain, and A. Vyas, Quantum dots: prospectives, toxicity, advances and applications, *J. Drug Deliv. Sci. Tec.* 61, 102308 (16pp) (2021).
- [42] P. Kumar, Semiconductor (CdSe and CdTe) quantum dot: synthesis, properties and applications, *Mater. Today- Proc.* (2021).
- [43] Xu, G. Zeng, S. Zhang, B. Swihart, M.T. Yong, K-T. Prasad, P.N. New Generation Cadmium-Free Quantum Dots for Biophotonics and Nanomedicine. *Chem. Rev.* 2016, 116, 12234–12327.
- [44] Porras-Montenegro, N. Duque, C.A. Reyes-Gómez, E. Oliveira, L.E. Effects of hydrostatic pressure on the electron gk factor and g-factor anisotropy in GaAs (Ga,Al)As quantum wells under magnetic fields. *J. Phys. Condens. Matter* 2008, 20, 465220.
- [45] Porras-Montenegro, N. Raigoza, N. Reyes-Gómez, E. Duque, C.A. Oliveira, L.E. Effects of hydrostatic pressure on the conduction electron g-factor in GaAs- $Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum wells. *Phys. Status Solidi B* 2009, 246, 648–651.
- [46] Heyn, C. Radu, A. Vinasco, J.A. Laroze, D. Restrepo, R.L. Tulupenko, V. Hieu, N.N. Phuc, H.V.; Mora-Ramos, M.E. Ojeda, J.H. et al. Exciton states in conical quantum dots under applied electric and magnetic fields. *Opt. Laser Technol.* 2021, 139, 106953.
- [47]. Graf, A. Sonnenberg, D. Paulava, V. Schliwa, A. Heyn, Ch. Hansen, W. Excitonic states in GaAs quantum dots fabricated by local droplet etching. *Phys. Rev. B* 2014, 89, 115314.

- [48]. López, S.Y. Porrás-Montenegro, N. Duque, C.A. Excitons in coupled quantum dots: Hydrostatic pressure and electric field effects. *Phys. Status Solidi B* 2009, 246, 630–634.
- [49]. López, S.Y. Mora-Ramos, M.E. Duque, C.A. Photoluminescence energy transitions in $GaAs - Ga_1 - xAl_xAs$ double quantum wells: Electric and magnetic fields and hydrostatic pressure effects. *Physica B* 2009, 404, 5181–5184.
- [50]. Mora-Ramos, M.E. Barseghyan, M.G. Duque, C.A. Excitons in cylindrical GaAs Pöschl-Teller quantum dots: Hydrostatic pressure and temperature effects. *Physica E* 2010 43, 338–344.
- [51]. Mora-Ramos, M.E. Barseghyan, M.G. Duque, C.A. Excitons in a cylindrical GaAs Pöschl-Teller quantum dot. *Phys. Status Solidi B* 2011, 248, 1412–1419.
- [52] J. A. Vinasco, A. Radu, R. L. Restrepo, A. L. Morales, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, Magnetic field effects on intraband transitions in elliptically polarized laser-dressed quantum rings, *Opt. Mater.* 91, 309-320 (2019).
- [53] COMSOL Multiphysics, v. 5.4. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [54] COMSOL Multiphysics Reference Guide, Stockholm, Sweden (May 2012).
- [55] COMSOL Multiphysics Users Guide, Stockholm, Sweden (May 2012).
- [56] Christian Heyn and C. A. Duque, Donor impurity related optical and electronic properties of cylindrical GaAs- Al_xGa_{1-x}As quantum dots under tilted electric and magnetic fields, *Sci. Rep.* 10, 9155 (18pp) (2020).
- [57] Christian Heyn, A. Radu, J. A. Vinasco, D. Laroze, R. L. Restrepo, V. Tulupenko, Nguyen N. Hieu, Huynh V. Phuc, M. E. Mora-Ramos, J. H. Ojeda, A. L. Morales, and C. A. Duque, Exciton states in conical quantum dots under applied electric and magnetic fields, *Opt. Laser Technol.* 139, 106953 (13pp) (2021).
- [58] S. Suresh and C. Arunseshan, Dielectric Properties of Cadmium Selenide (CdSe) Nanoparticles synthesized by solvothermal method, *Appl. Nanosci.* 4, 179–184 (2014).