



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

**Estudio del espectro energético de los sistemas
de una y dos partículas, fuertemente
confinados en anillos cuánticos uniformes y
con deformaciones estructurales, bajo la
influencia de campos externos.**

Yoder Alberto Suaza Tabares.

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias

Programa de Maestría en Física

Medellín, Colombia

2014.

Estudio del espectro energético de los sistemas de una y dos partículas, fuertemente confinados en anillos cuánticos uniformes y con deformaciones estructurales, bajo la influencia de campos externos.

Yoder Alberto Suaza Tabares.

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias-Física

Director

Ph. D. JAIRO HUMBERTO MARÍN CADAVID

Línea de Investigación:

Sistemas de baja dimensionalidad.

Grupo de investigación:

Materiales cerámicos y vítreos.

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias

Programa de Maestría en Física

Medellín

2014.

A mi Padre, ... a Sofía y Amelí, por supuesto.

Agradecimientos.

Al profesor Jairo Humberto Marín, por guiarme, acompañarme y permitirme recorrer con él los caminos de la pasión por la física. Al profesor Marlon Rincón Fulla por la constante disposición para apoyar mi trabajo y la calma y claridad a la hora de compartir sus conocimientos, y a mi compañero Javier Posada por que ha sido un amigo y testigo de todo el trasegar por esta aventura. En general a mi grupo de trabajo por brindarme además de conocimientos y apoyo académico, el regocijo de una amistad. También agradezco a la Universidad Nacional de Colombia por abrirme sus puertas y darme la posibilidad de trabajar por mi sueño y de apoyar mi participación en diferentes eventos académicos.

Resumen.

En este trabajo se analiza el comportamiento de diferentes sistemas de uno y dos electrones: $1e^-$, $e-e$, D^0 y D_2^+ confinados en nano-estructuras semiconductoras en forma de anillo o de cinta, cuando el sistema completo se encuentra bajo la influencia de campos externos, tanto magnético como de presión hidrostática. Dichos sistemas pueden ser perfectamente lisos o presentar rugosidades que se modelan a través de funciones matemáticas de naturaleza sinusoidal. Se implementan modelos teóricos basados en las técnicas de aproximación adiabática y diagonalización matricial, para calcular numéricamente la estructura energética de los diferentes sistemas. Adicionalmente, se desarrollan algoritmos matemáticos que facilitan los procesos de programación computacional en el lenguaje Fortran, cuyos parámetros se obtienen apoyados en algunas evidencias experimentales que permiten confeccionar los programas sobre la base de datos reales asociados con mediciones estructurales de los anillos o de las cintas cuánticas.

Palabras clave: anillos cuánticos, cintas cuánticas, espectro energético, presión hidrostática, campo magnético.

Abstract

In this work, the behavior of different systems of one or two electrons: $1e^-$, $e-e$, D^0 y D_2^+ confined in semiconductors nano-structures in ring or ribbon shape is analyzed, when the whole system is under the influence of the extern fields, both magnetic and of hydrostatic pressure. Such systems can be perfectly flat or present stringencies that are modeled through mathematical functions of sinusoidal nature. Theoretical models are implemented, those based on the adiabatical approximation techniques and matrix diagonalization to compute numerically the energetic structure of the different systems. Additionally, mathematical algorithms are developed. Those algorithms facilitate computational program processes in Fortran language. Each parameter is obtained

supported on some experimental evidences that allow making programs on the actual data associated with structural measurements of the rings or quantum ribbons.

Keywords: quantum rings, quantum ribbons, energy spectrum, hydrostatic pressure, magnetic field.

Contenido.

Resumen.....	V
Lista de figuras.....	VIII
Lista de tablas.....	XI
Símbolos y abreviaturas.....	XII
Introducción.....	1
1. Marco teórico.....	7
1.1 Sistemas de pocas partículas.....	7
1.1.1 Sistemas móviles.....	8
1.1.2 Sistemas inmóviles.....	8
1.2 Aproximación adiabática.....	11
1.3 Metodología aplicada al caso de anillos cuánticos.....	14
2. Sistemas de dos partículas en anillos cuánticos muy delgados.....	17
2.1 Sistema de dos electrones espacialmente separados en anillos acoplados verticalmente.....	18
2.2 Ión D^- con electrones confinados en un anillo.....	28
2.3 Complejo molecular D_2^0	37
3. Sistema de una partícula en una cinta cuántica de altura variable.....	51
4. Conclusiones.....	63
Eventos.....	65
Publicaciones.....	66
Bibliografía.....	67

Lista de figuras

Pág.

Figura 1.1. Diversas morfologías de SAQDs obtenidas experimentalmente: pirámide cónica (superior izquierda), anillo (superior centro), domo de camello (superior derecha), pirámide de base cuadrada (inferior izquierda) y poliédrica (inferior derecha) [15-16].....	2
Figura 1.2. Imágenes reales de un grupo de dos anillos cuánticos semiconductores obtenidos mediante la técnica de Stranski-Krastanov y observados mediante técnicas de microscopía de fuerza atómica. La figura izquierda corresponde a anillos simples y la otra a anillos dobles dispuestos de modo concéntrico [20].....	4
Figura 1.3. Perfil de la sección transversa de un anillo cuántico obtenido por la técnica de Stranski-Krastanov [27].....	5
Figura 1.4. Representación esquemática de los sistemas móviles (parte superior) e inmóviles (parte inferior) de acuerdo a la clasificación de Lampert.....	9
Figura 1.5. Representación esquemática de un punto cuántico con morfología arbitraria pero con simetría axial tal como parecen sugerir las mediciones estructurales y las diferentes imágenes obtenidas por microscopía de fuerza atómica.	11
Figura 2.1 Representación gráfica de dos anillos acoplados verticalmente cada uno albergando un único electrón.....	18
Figura 2.2. Niveles de energía $E(M, m, s)$ para dos electrones en anillos concéntricos.....	23
Figura 2.3 Energía del estado base de un sistema bi-electrónico como una función el radio más externo y con distancia entre anillos constante.....	25
Figura 2.4 Energía bi-electrónica total renormalizada como una función del radio más externo para la configuración de anillo doble.....	27
Figura 2.5 Ión D^- en un anillo cuántico toroidal bajo la presencia de un campo magnético y presión hidrostática.....	29
Figura 2.6. Energía total $E(M, m, s)$ de un D^- Vs. Posición del donador ξ para dos valores diferentes de presión hidrostática aplicada $P = 0$ (línea sólida) y $P = 30$ kbar (línea punteada).....	33
Figura 2.7 Potencial promedio total como función de la posición angular relativa entre los dos electrones.....	34
Figura 2.8. Algunos niveles de energía $E(M, m, s)$ del D^- en función del campo magnético aplicado.....	35

- Figura 2.9** Evolución de tres diferentes estados de energía $E(M, m, s)$ del D^- con el radio central del anillo.....36
- Figura 2.10** Representación tri-dimensional para una molécula bi-hidrogenoide D_2^0 bajo presión hidrostática y campo magnético uniforme.....37
- Figura 2.11.** Comparación entre las energías de los estados 1s, 2p, y 2s de un donador neutro localizado en el centro de un SQD y el estado 1s de un donador neutro localizado en el centro de un QHT. Las curvas se han realizado como función del radio del SQD...43
- Figura 2.12.** Comparación entre los estados de energía 1s-,2p y 2s de una impureza donadora neutra, localizada en el centro de una esfera confinada (línea solida) y el estado 1s de una impureza donadora neutra localizada en el centro de un horn torus cuántico(línea a trazos). Las curvas de energía han sido realizadas en función del radio del punto cuántico esférico.....45
- Figura 2.13.** Energía del estado base de un D_2^0 como función del radio medio del anillo externo para diferentes valores de la presión hidrostática: 0, 15 y 30 kbar. El recuadro muestra la curva para grandes valores del radio medio exterior.....46
- Figura 2.14.** Energía total de un D_2^0 como función de la separación impureza-impureza para dos valores diferentes de presión hidrostática: 0 y 30kbar y tres valores diferentes de campo magnético: 0, 2.006, y 3.009T. El recuadro muestra el potencial efectivo correspondiente para D_2^0 a un campo magnético 0 y tres valores diferentes para la presión hidrostática: 0, 15, y 30 kbar (línea sólida, línea a trazos, y línea punteada respectivamente), y una distancia donador-donador igual a 40nm.....47
- Figura 2.15.** Energía de enlace como función del radio medio exterior.....48
- Figura 2.16.** Niveles de energía del D_2^0 como función del campo magnético para tres valores de presión hidrostática.....49
- Figura 3.1** Representación esquemática de varias cintas cuánticas $n=0,1, 4$ en presencia de campo magnético.....52
- Figura 3.2** Perfiles del potencial de confinamiento para un número de protuberancias $n=1$ (imagen izquierda) y $n= 4$ (imagen derecha) con diferentes valores del parámetro $\alpha = 0.1, 0.3$ y 0.454
- Figura 3.3** Evolución del espectro de energía para un electrón en una cinta cuántica.....56
- Figura 3.4** Evolución del espectro de energía para un electrón en una cinta cuántica con una protuberancia y dos valores diferentes de α : 0.1 (figura izquierda) y 0.2 (figura derecha).....57

Figura 3.5 Evolución del espectro energético de un electrón en una cinta con parámetro de rugosidad $\alpha = 0.3$ y tres protuberancias $n = 1, 2, 4$**59**

Figura 3.6 Evolución del espectro energético de un electrón en una cinta con parámetro de rugosidad $\alpha = 0.4$ y tres protuberancias $n = 1, 2, 4$**60**

Lista de tablas.

Tabla 1. Niveles de energía renormalizada para un sistema bi-electrónico en un anillo....**22**

Tabla 2. Comparación entre las energías de enlace de un ion D^- en SQD [40] con los de un ion D^- en QHT. Con radios entre $2.8 a_0^*$ y $10 a_0^*$ **41**

Símbolos y abreviaturas.

Símbolo	Término
<i>AA</i>	Aproximación adiabática.
<i>BD</i>	Sistemas de baja dimensionalidad.
<i>DCQD</i>	Anillo cuántico concéntrico doble.
<i>E_b</i>	Energía de enlace.
<i>E_d</i>	Energía de disociación.
<i>P</i>	Presión hidrostática.
<i>QD</i>	Punto cuántico.
<i>QHT</i>	Quantum Horn torus.
<i>QR</i>	Anillo cuántico.
<i>QW</i>	Hilo cuántico.
<i>SQD</i>	Punto cuántico esférico.
<i>TQR</i>	Anillo cuántico toroidal.

Introducción

En los últimos años hemos sido testigos de un crecimiento constante en las aplicaciones tecnológicas, especialmente en el área de las comunicaciones y de la computación. En gran parte, esto es el resultado del desarrollo acelerado que ha tenido la física del estado sólido y en particular lo que concierne al crecimiento de novedosas estructuras semiconductoras. Entre las técnicas de crecimiento que permiten tener un control atómico del sistema correspondiente, se puede destacar la de epitaxia de haces moleculares, deposición metal-orgánica de vapor químico, litografía y epitaxia en fase-líquida y de goteo [1]. Mediante estas técnicas ha sido posible fabricar sistemas de baja dimensionalidad (BD) con tamaños que oscilan entre 1 y 100nm y cuyas interfaces son muy bien definidas y casi exentas de defectos [2-5]. En general, para fabricar las nanoestructuras BD se utilizan materiales semiconductores compuestos, que permiten formar juntas bien definidas a través de un cambio súbito de la concentración de uno de los componentes. Los materiales más ampliamente usados para este propósito son: GaAs-AsIn, GaInAs-GaAlAs, In-GaInAs, InP-GaAs, GaSb-GaAs, InAs-Si, InSb-CdTe, debido a características de parámetros de red y de su gap de energía que favorecen el confinamiento de los portadores de carga. Entre los sistemas semiconductores BD más importantes que se han obtenido, se pueden mencionar los pozos (QW) [6], hilos (QWW) [7] y puntos (QD) cuánticos [8], los cuales son de naturaleza 2, 1 y 0 dimensional, respectivamente.

Recientemente, V. Ya. Prinz [9-10] ha descrito las propiedades y los métodos de fabricación de cintas semiconductoras de InGaAs/GaAs cuyos espesores son del orden de dos mono-capas atómicas. Una característica general de los sistemas BD y de las cintas cuánticas es que las longitudes de onda de De Broglie de los portadores de carga que en ellos se confinan, resultan ser inferior a la menor de las dimensiones de la nano-estructura. Este hecho se traduce en una reducción efectiva en la dimensionalidad del espacio en el cual se mueve la partícula, llegando a ser de 2, 1 o 0 dimensiones según se confinen en un QW, QWW, o un QD.

De la diversidad de sistemas BD susceptibles de crecer, no cabe duda que los más llamativos son los QDs debido a su confinamiento en las tres direcciones. En los últimos años, los investigadores han centrado su atención en la obtención de QDs de diversas morfologías mediante la técnica de Stranski-Krastanov (S-K) [3].

De manera muy breve, puede decirse que los QDs auto-ensamblados (SAQDs) se forman cuando un semiconductor se deposita sobre un sustrato que tiene un parámetro de red ligeramente diferente. Este es el caso de la deposición de In(Ga)As sobre un sustrato de GaAs, donde la diferencia entre los parámetros de la red llegan a ser del 7%. El tamaño y la forma de los SAQDs se pueden modificar variando las condiciones de tensión-relajación asociadas con la diferencia entre los parámetros de la red de los semiconductores base, así como la temperatura y la velocidad de crecimiento.

Usando diferentes técnicas de medición como: Microscopía de fuerza atómica [11], de barrido y de tunelamiento [12], reflexión electrónica a altas energías [13] y microscopía electrónica de transmisión [14], se ha logrado establecer que los SAQDs pueden tener forma de pirámide cónica, disco, lente, anillo o volcán [15-16] donde sus alturas (2-4nm) son generalmente mucho menores que los radios de sus bases (20-50nm), hecho que juega un papel fundamental en el desarrollo del presente trabajo.

En la figura 1 se muestran imágenes de diferentes tipos de puntos cuánticos, las cuales se han obtenido por técnicas microscópicas

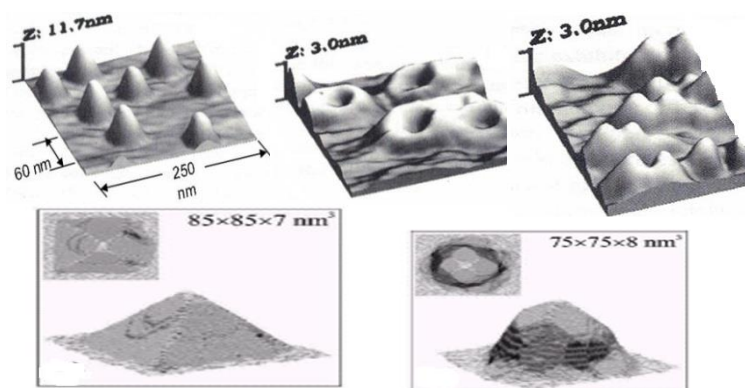


Figura 1.1. Diversas morfologías de SAQDs obtenidas experimentalmente: pirámide cónica (superior izquierda), anillo (superior centro), domo de camello (superior derecha), pirámide de base cuadrada (inferior izquierda) y poliédrica (inferior derecha).

A pesar de que existe una gran variedad de QDs con diversas morfologías, aquellos en forma de anillos, llaman especialmente nuestra atención dado que las variaciones del radio interno y externo constituyen grados de libertad adicionales, con el propósito de analizar su incidencia en el espectro energético de los sistemas estudiados. En general, un anillo representa un punto cuántico, que para fines prácticos puede visualizarse como un hilo que se dobla en forma de bucle. La diferencia morfológica entre los anillos, en comparación con los demás QDs, está relacionada con la existencia del orificio en la parte central (ver figura 1). Este orificio es responsable del surgimiento de novedosos efectos cuánticos cuando se coloca en presencia de campos magnéticos externos. Esto se debe a que el flujo penetrante en el interior del anillo, conduce a la existencia de fenómenos cuánticos nunca antes observados, siendo este el caso de las llamadas oscilaciones Aharonov-Bohm [17] y de las denominadas corrientes persistentes [18] (corrientes en condiciones de equilibrio termodinámico), las cuales pueden detectarse a través de mediciones de magnetización del objeto [19].

Los trabajos pioneros en el desarrollo de las técnicas experimentales para la obtención de anillos cuánticos semiconductores (QRs) se deben a Axel Lorke [20] y colaboradores. Este grupo de investigadores usando técnicas de auto-ensamblado obtuvo puntos como los mostrados en la figura 2, los cuales se caracterizan por tener alturas del orden de los 2nm, los espesores, (diferencia entre radio exterior e interior), son de aproximadamente 20nm, mientras que sus radios medios llegan a ser hasta de 50nm. Posteriormente, Mano y colaboradores [21] como resultado de un estudio óptico sistemático y de la aplicación de la técnica de auto-ensamble de epitaxia de goteo, reportaron la existencia de anillos cuánticos concéntricos de GaAs/AlGaAs. Este reporte unido a otro tipo de resultados experimentales que describen la formación de anillos acoplados verticalmente, abrieron mucho más las posibilidades de controlar el espectro de energía de los sistemas partículas en estas nano-estructuras semiconductoras. La importancia de estos sistemas de doble anillo radica en que la separación entre anillos, para el caso de acople vertical, o la razón entre los radios, para el caso de anillos concéntricos, introduce un grado de libertad adicional con el cual se puede aún más controlar la estructura de energía.

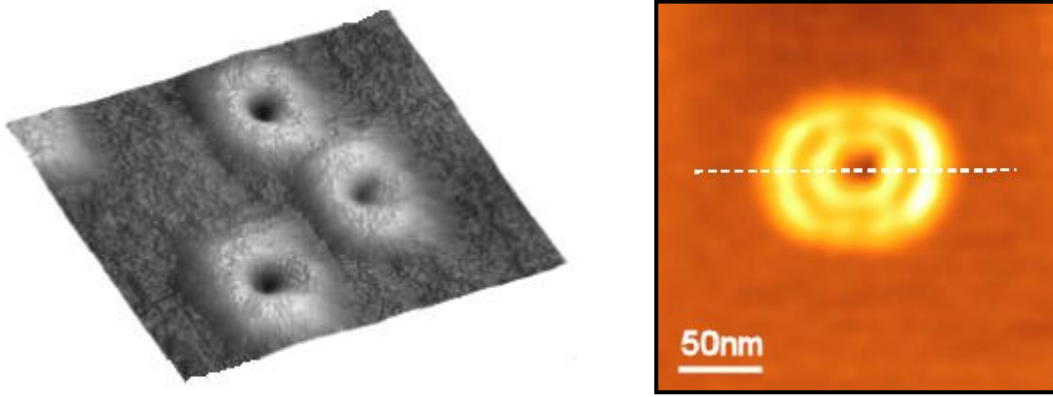


Figura 1.2. *Imágenes reales de un grupo de dos anillos cuánticos semiconductores obtenidos mediante la técnica de Stranski-Krastanov y observados mediante técnicas de microscopía de fuerza atómica. La figura izquierda corresponde a anillos simples y la otra a anillos dobles dispuestos de modo concéntrico.*

La gran mayoría de trabajos teóricos realizados sobre sistemas de una partícula en anillos de sección constante y exenta de rugosidades [22-26], han mostrado que el espectro energético es fuertemente dependiente de la morfología y tamaños de los QDs, así como de la existencia de campos externos. Sin embargo son muy pocos los trabajos que analizan sistemas de pocas partículas (dos electrones o ión D^-) en anillos simples o acoplados y complejos moleculares del tipo D_2^+ confinados en anillos uniformes o con variaciones estructurales. Esto a pesar de que existen resultados experimentales como el reportados por Offermans y colaboradores [27], donde se establece que los perfiles de las secciones transversas de anillos (ver figura 3) o las superficie de las cintas, no son completamente uniformes. En el caso de la imagen mostrada en la figura 3, queda claro que la altura depende tanto de la posición angular y radial.

Este hecho estructural no debe pasarse por alto, ya que estas rugosidades deben producir alguna modificación en el comportamientos de las oscilaciones Aharonov-Bohm y del espectro energético de los sistemas de pocas partículas en general, ya que cuanto mayor sea el tamaño de la alteración estructural menor será el confinamiento que experimente la partícula y mayor será la posibilidad de que la partícula se localice en esa región, dando lugar a la existencia de estados localizados.

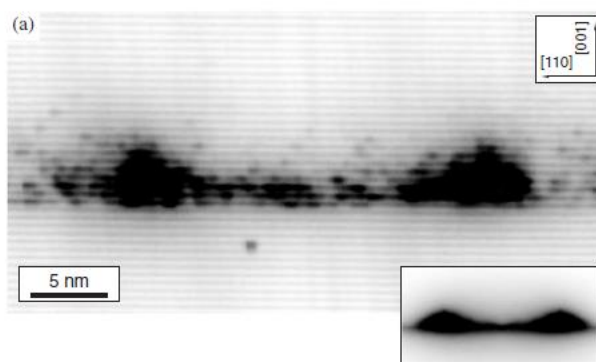


Figura 1.3. Perfil de la sección transversa de un anillo cuántico obtenido por la técnica de Stranski-Krastanov

Con base en la información descrita anteriormente y teniendo presente que el espectro de energía de los diferentes sistemas de pocas partículas resulta ser fuertemente dependiente de la morfología de los anillos, así como de los campos externos, resulta de gran interés estudiar la incidencia de los defectos estructurales, los factores geométricos y parámetros externos como presión y campo magnético sobre el espectro de energía de los sistemas de uno y dos electrones confinados en anillos cuánticos.

Capítulo 1

Marco teórico

1.1 Sistemas de pocas partículas.

Existe un número incontable de ejemplos que demuestran la importancia de los sistemas de pocas partículas en el mundo de la física. Este es el caso de pequeños grupos de quarks en la física sub-atómica o de agregados de pocos nucleones en física nuclear, también es el caso de pequeños grupos de átomos y moléculas en física atómica y molecular o de un número reducido de electrones o huecos en física del estado sólido y en particular en materiales semiconductores. En estos materiales la presencia de portadores de carga es determinante a la hora de establecer su conductividad eléctrica y sobre todo para ejercer control sobre las propiedades ópticas en los regímenes lineal y no lineal, ya que al hacerlo se establece la posibilidad de fabricar dispositivos opto-electrónicos.

En general, los sistemas de pocas partículas presentan características bien complicadas, las cuales son dependientes de las características individuales y del número de partículas constituyentes. Una descripción exacta de estos sistemas, requiere incluir los potenciales a los que se encuentran sometidos cada partícula de modo individual y el potencial de interacción entre ellas, lo cual obliga a tener que implementar métodos aproximados que permitan determinar los rasgos característicos de su espectro energético. Entre los métodos más comúnmente usados se puede mencionar: el método variacional, diagonalización matricial, Monte Carlo cuántico, Hartree-Fock, teoría de funcionales de densidad, etc.

El estudio de los sistemas de pocas partículas, permite establecer la incidencia de la interacción partícula-partícula en la estructura energética del sistema y en las propiedades de transporte.

El desarrollo de sofisticadas técnicas de crecimiento, caracterizadas por un control atómico de la estructura que se fabrica, ha renovado el interés por los sistemas de pocas partículas, apoyados en la posibilidad de confinarlas en estructuras semiconductoras de dimensión reducida, hecho que ha permitido obtener novedosas propiedades mecánico-cuánticas imposibles de obtener en otros sistemas.

La primera persona en estudiar este tipo de sistemas en semiconductores en el volumen fue Murray A. Lampert [28] en el año de 1958. Él estableció las bases teóricas para la formación sistemas de pocas partículas y de complejos moleculares simples en semiconductores en el volumen. En su proceso de análisis Lampert, clasificó estos sistemas en dos grupos de acuerdo a si estaban o no ligados a un centro de carga fija y los etiquetó como inmóviles y móviles.

1.1.1 Sistemas móviles.

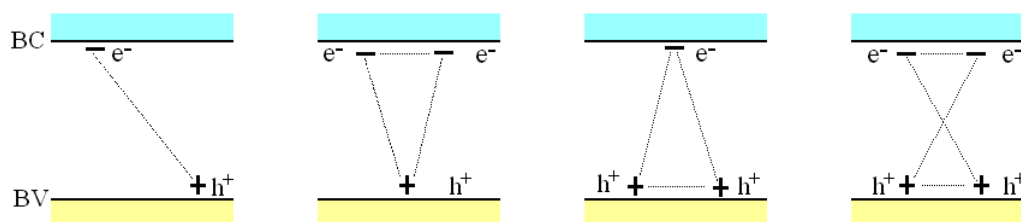
A este grupo pertenecen únicamente los sistemas de pocas partículas compuestos por portadores de carga con movilidades comparables como es el caso de electrones (e) y huecos (h). El más familiar de los sistemas móviles lo constituye el excitón (X) compuesto por un par e - h . Este sistema se obtiene cuando un electrón es promovido desde la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un hueco en la banda de valencia. El par e - h está ligado entre sí por fuerzas eléctricas y se caracterizan por su gran movilidad debido a la pequeñez de sus masas efectivas. Cuando un excitón es capaz de ligar un electrón extra o un hueco, se rompe su neutralidad y se forman excitones cargados negativo o positivamente, denominados como triones X^- y X^+ , respectivamente. El más famoso de los complejos excitónicos se obtiene cuando dos excitones neutros se ligan formando una molécula excitónica XX . En la parte superior de la figura 4 se muestran esquemáticamente algunos de los sistemas inmóviles considerados por Lampert.

1.1.2 Sistemas inmóviles

Estos sistemas se obtienen cuando los portadores de carga que tienen gran movilidad, bien sean electrones o huecos, están ligados a un centro de carga fija. Un ejemplo

representativo de este grupo se obtiene cuando un átomo tetravalente del semiconductor se reemplaza durante su crecimiento por un átomo pentavalente, formándose un sistema similar a un átomo de hidrógeno conocido como donador neutro D^0 . Cuando esta donadora neutra liga un electrón extra, se forma una donadora cargada negativamente D^- . También se pueden formar complejos moleculares a partir de dos donadoras. Si ellas comparten sus dos electrones entonces se forma un complejo molecular del tipo $D^0 + D^0$ o simplemente un D_2^0 , pero si ellas solo comparten un electrón se forma un complejo D_2^+ , el cual es similar al complejo molecular H_2^+ . Si en lugar de reemplazar los átomos tetravalentes del semiconductor por átomos trivalentes se forman aceptoras a, las cuales se le pueden ligar huecos y electrones para formar diferentes sistemas. En la parte inferior de la figura 4 se muestran algunos de los sistemas inmóviles de Lampert.

Sistemas móviles



Sistemas inmóviles

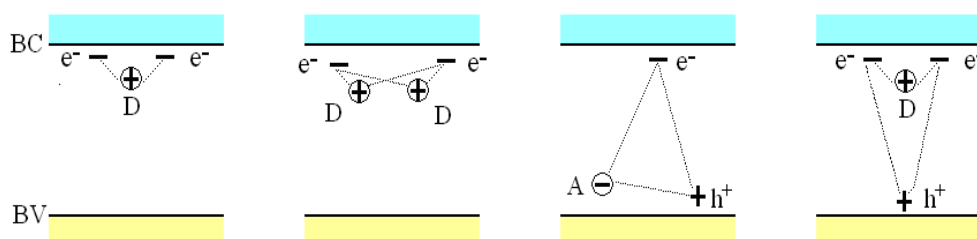


Figura 1.4. Representación esquemática de los sistemas móviles (parte superior) e inmóviles (parte inferior) de acuerdo a la clasificación de Lampert.

Con el desarrollo de las técnicas de crecimiento de materiales semiconductores que permitieron la fabricación de sistemas BD, se pudieron establecer las bases teóricas para la formación de sistemas de Lampert [28] en nano estructuras de baja dimensionalidad. Una

característica generalizada de estos sistemas de Lampert en estructuras BD es que resulta imposible obtener una solución exacta de la ecuación de Schrödinger que permita determinar exactamente su espectro de energía. En consecuencia, su dependencia con la morfología y con los campos externos, sólo es posible determinarla por algún método numérico, bien sea diagonalización matricial, método variacional, Hartree-Fock, etc. Un aspecto generalizado en el estudio del espectro energético de los sistemas de pocas partículas en QDs, es que no tienen en cuenta las dimensiones estructurales de éstos. Por ejemplo, muchos autores a la hora de llevar a cabo los cálculos y asistidos por el hecho de que la altura de los QDs es muy pequeña en comparación con la dimensión lateral, dejan de lado la altura y asumen QDs absolutamente bi-dimensionales. A juicio del autor de esta tesis esto constituye un grave error. La razón de esta afirmación se da sobre la base del principio de incertidumbre, el cual garantiza que la energía cinética del portador de carga es mayor en aquella dirección en la que el punto tiene su menor dimensión espacial, ya que al estar más localizada deberá moverse mucho más rápido para no violar el principio de incertidumbre de Heisenberg. En consecuencia, la solución no está en ignorar esta dimensión espacial del punto, sino más bien desarrollar un modelo teórico que tenga en cuenta este hecho experimental. Esto es posible si nosotros descomponemos el movimiento tri-dimensional de la partícula en tres movimientos unidimensionales, de modo que la partícula al moverse a lo largo de la mayor dimensión del punto lo hará más mucho más lento que al moverse a lo largo de la menor dimensión. En consecuencia, esto lo podríamos visualizar de un modo diferente, y es como si tuviéramos un sistema no formado por una partícula sino por tres partículas hipotéticas moviéndose en direcciones mutuamente perpendiculares, de modo que aquella que se mueve a lo largo de la mayor dimensión del QD puede asumirse inmóvil esto se debe a que ella tiene una masa efectiva mayor que aquella que se mueve más rápido a lo largo de la menor dimensión del punto. Esta interpretación nos permite pensar en la posibilidad de introducir un modelo basado en la aproximación adiabática.

1.2 Aproximación adiabática.

Una característica general de los sistemas de pocas partículas de Lampert, es que la evaluación de su espectro energético, bien sea cuando está en semiconductores en el volumen o confinados en sistemas BD, carece de solución exacta. En consecuencia, en ambos casos, es necesario implementar modelos teóricos aproximados que permitan establecer los rasgos distintivos de cada sistema en concreto, en conexión con el número y tipo de portadores, naturaleza del material y en el caso de los puntos cuánticos y particularmente en anillos o cintas semiconductoras que son el objeto de esta tesis, el modelo que se implemente debe tener en cuenta su tamaño y morfología, ya que ésta determinará la forma y altura del potencial de confinamiento. Un rasgo experimental general de los QDs es que su altura es mucho menor que su dimensión lateral, donde los resultados arrojados por microscopía de fuerza atómica, indica que la altura de estos QDs varía entre 1nm y 8nm, mientras que su máxima dimensión lateral puede oscilar entre 70 y 100nm. Con base en esta información, se ha graficado un QD de forma arbitraria, pero con simetría axial (ver figura 5.)

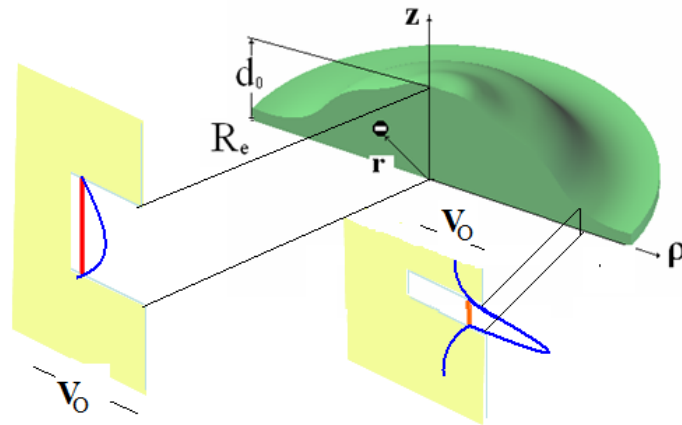


Figura 1.5. Representación esquemática de un punto cuántico con morfología arbitraria pero con simetría axial tal como parecen sugerir las mediciones estructurales y las diferentes imágenes obtenidas por microscopía de fuerza atómica.

Asumiendo que el punto está rodeado de aire, lo que implicaría un potencial infinito, es bien sabido a partir de los principios fundamentales de la mecánica cuántica, que cuanto

más estrecho sea el pozo más confinada estará la partícula, lo cual se evidencia por una función de onda con mayor amplitud y nivel energético más elevado en comparación con la función de onda y nivel de energía que se tendría cuando la altura del punto es mayor. Este resultado es una consecuencia directa del principio de incertidumbre de Heisenberg. Por lo tanto, no podrá obviarse la altura del punto a fin de asumirlo como si fuera completamente plano, a menos que por circunstancias de conveniencia matemática, se hiciera así para determinar el comportamiento asintótico de estructuras BD en casos límites. En consecuencia, la ecuación de Schrödinger deberá escribirse de modo que se consideren sus tres coordenadas espaciales. Para establecer cómo puede escribirse esta ecuación y el método a implementar, consideremos el caso de una donadora neutra confinada en el QD en un punto de coordenadas $\vec{\xi} = (\vec{\xi}_\rho, \vec{\xi}_z)$. La ecuación de Schrödinger adimensional para el D^0 confinado en un QD, en coordenadas cilíndricas puede escribirse como sigue:

$$\hat{H}\Psi(\rho, \varphi, z) = - \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi(\rho, \varphi, z) + \left[-\frac{2}{|\vec{r}-\vec{\xi}|} + V_c(\rho, z) \right] \Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (1.1)$$

Donde \vec{r} es la posición del electrón medida desde el centro del QD y $V_c(\rho, z)$ es potencial de confinamiento al cual se encuentra sometido el electrón dentro del QD, siendo igual a cero dentro del punto e infinito por fuera de éste. Es evidente que esta ecuación no es completamente separable, debido a la presencia del potencial de confinamiento y del término de interacción electrón donador:

$$|\vec{r} - \vec{\xi}| = \sqrt{\rho^2 + \xi_\rho^2 - 2\vec{\rho} \cdot \vec{\xi} + (z - \xi_z)^2} \quad (1.2)$$

Con el propósito de implementar un modelo de solución, deberá sacarse provecho de las mediciones estructurales de los QDs que establecen que $R_e \gg d_0$. Para establecer como es el aporte que hace cada término presente en la ecuación (1), se hará un re-escalamiento de las coordenadas de modo que facilite la comparación. Para ello se hará:

$$z = d_0 \tilde{z} \quad y \quad \rho = R_e \tilde{\rho} \quad (1.3)$$

Esta transformación, permite mapear la región de integración inicial que es de forma rectangular con base R_e y altura d_0 a una región cuadrada de lado unitario, ya que las nuevas coordenadas $\tilde{\rho}$ y \tilde{z} varían entre 0 y 1. Por lo tanto la ecuación (1) puede reescribirse como:

$$\left\{ -\frac{1}{d_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \frac{1}{R_e^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_c(\tilde{\rho}, \tilde{z}) - \frac{2}{|\tilde{r} - \tilde{\xi}|} \right\} \Psi(\tilde{\rho}, \varphi, \tilde{z}) = E \Psi(\tilde{\rho}, \varphi, \tilde{z}) \quad (1.4)$$

Donde es posible mostrar que el término de interacción donador-electrón $|\tilde{r} - \tilde{\xi}|$ es proporcional a R_e . El Hamiltoniano (1.4) puede interpretarse como si se tratara de dos partículas de masas efectivas renormalizadas $\frac{1}{d_0^2}$ y $\frac{1}{R_e^2}$, respectivamente, donde la primera se mueve a lo largo el eje z y la segunda en el plano x-y, y las cuales están ligadas por un potencial de interacción Coulombiano proporcional a $1/R_e$. Al comparar estas masas efectivas renormalizadas, se ve claramente que aquella partícula que se mueve en el plano x-y lo hace mucho más lentamente que aquella que se mueve en dirección z, ya que $R_e^2 \gg d_0^2$. Por lo tanto, resulta evidente que el mayor aporte a la energía lo hará la partícula de masa efectiva renormalizada d_0^2 , sin importar el aporte hecho por el potencial, ya que al ser inversamente proporcional a R_e su contribución a la energía será menor que la energía cinética de la partícula de masa efectiva renormalizada d_0^2 . En consecuencia, para la determinación del espectro energético de diferentes sistemas de partículas en QDs, es posible hacer uso de la aproximación adiabática o aproximación de Born- Oppenheimer para llevar a cabo una separación de variables. Nótese que en este caso se asegura la aproximación a través de una categorización de las dimensiones del punto y no de las masas como ocurre en el caso del átomo de hidrógeno. La metodología en su parte preliminar, consiste en congelar temporalmente el movimiento de la partícula de masa renormalizada mayor, de modo que se analice el movimiento de la partícula de masa renormalizada menor que se mueve a lo largo del eje z, donde la función de onda $\Psi(\tilde{\rho}, \varphi, \tilde{z})$ se hace igual al producto de una función $f_z(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \Theta^{2D}(\tilde{\rho}, \varphi)$, donde $\Theta^{2D}(\tilde{\rho}, \varphi)$ describe el movimiento de la partícula en el plano x-y, mientras $f_z(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ satisface una ecuación unidimensional en la variable \tilde{z} , ya que $\tilde{\rho}$ en esta función se comporta como un

parámetro. Esto quiere decir que a lo largo de la dirección radial se coloca una malla equiespaciada y para cada $\tilde{\rho}$ se resuelve la ecuación uni-dimensional :

$$\left\{ -\frac{1}{d_0^2} \frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + V_c(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \right\} f_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = E_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}) f_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \quad (1.5)$$

Una vez se obtenga el auto-valor de energía $E_{\tilde{z}}(\tilde{\rho})$ y la autofunción $f_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ se reemplaza en la ecuación (1.4), obteniéndose la siguiente expresión:

$$-\frac{1}{R_e^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Theta^{2D}(\tilde{\rho}, \varphi) + \{E_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}) + \tilde{V}(\tilde{\rho}, \varphi)\} \Theta^{2D}(\tilde{\rho}, \varphi) = E \Theta^{2D}(\tilde{\rho}, \varphi) \quad (1.6)$$

donde $\tilde{V}(\tilde{\rho}, \varphi) = \left\langle f_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \left| \sqrt{\rho^2 + \xi_\rho^2 - 2\vec{\rho} \cdot \vec{\xi} + (z - \xi_z)^2} \right| f_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \right\rangle$ es valor promedio de

la energía de interacción Coulombiana. En consecuencia, la ecuación (1.6) corresponde a una partícula que se mueve en el plano x-y bajo la influencia de un potencial bi-dimensional renormalizado. Si el punto cuántico tiene forma de anillo, entonces es posible desacoplar el movimiento en dirección radial del movimiento orbital, asumiendo anillos muy estrechos, es decir, cuando su espesor es menor que el radio medio del anillo. En este caso se implementaría una segunda aproximación adiabática para finalmente, obtener una ecuación uni-dimensional en la variable angular φ para una única partícula que se mueve en un potencial angularmente dependiente. Esta ecuación deberá resolverse usando algún método numérico, ya que la forma del potencial efectivo que depende de φ , no permite resolverse exactamente.

1.3 Metodología aplicada al caso de anillos cuánticos.

Teniendo en mente que en esta tesis se estudiarán sistemas de Lampert con una y dos partículas confinadas en anillos o cintas cuánticas, el estudio teórico que se realice, se deberá hacer teniendo en cuenta las dimensiones estructurales de estas nano-estructuras. Con el fin de que se entienda el modelo a implementar para resolver la ecuación uni-dimensional que resulte en la variable φ , será necesario hacer una jerarquización de las coordenadas. Lo primero es que la altura (L) de los anillos cuánticos es menor que su

espesor (W) y para el caso de anillos muy estrechos, este ancho es a su vez menor que el radio medio del anillo (R), es decir: $L < W < R$. Tomando valores realistas para estas cantidades: $L=1.5\text{nm}$, $W=20\text{nm}$ y $R=60\text{nm}$ es claro, a partir de un cálculo simple usando principio de incertidumbre, que la energía cinética en dirección z es del orden de 180 veces la energía en dirección radial y casi 1600 veces la energía cinética de rotación. En consecuencia, el mayor aporte a la energía cinética en los Hamiltonianos uni y bi-particulares que se definan para calcular el espectro de energía de los diferentes sistemas que se abordarán, puede usarse la aproximación adiabática para separar el movimiento rápido en dirección z del movimiento en el plano. Por lo tanto, resulta apropiado el uso de la aproximación adiabática para escribir la función de onda en la forma siguiente:

$$\Psi(\mathbf{r}) = f_z(\rho, z)\Phi^{2D}(\rho, \varphi) \quad (1.7)$$

donde el estado base $f_z(\rho, z)$ es la solución a la ecuación de Schrödinger uní-dimensional en un pozo de ancho $L(\rho)$, el cual describe el movimiento rápido de cada partícula en la dirección z . A través de esta función, se tendrán en cuenta las variaciones en la altura del anillo. Una vez conocida la función $f_z(\rho, z)$ y su correspondiente autovalor de energía $E_z(\rho)$, se reemplazan en la ecuación de Schrödinger inicial y se procede a la determinación de la ecuación de la función $\Phi^{2D}(\rho, \varphi)$ mediante el método variacional de Schrödinger [29]. Teniendo en cuenta que la energía cinética en dirección radial es más de 10 veces la energía de rotación para el caso de anillos cuánticos muy estrechos, se podrá usar una vez más la aproximación adiabática para separar los movimientos radial y de rotación. En consecuencia la función $\Phi^{2D}(\rho, \varphi)$ se podrá escribir como:

$$\Phi^{2D}(\rho, \varphi) = g(\rho, \varphi)\Psi(\varphi) \quad (1.8)$$

donde $g(\rho, \varphi)$ son las autofunciones de la energía para una partícula en el potencial renormalizado que resultó al obtener los autovalores de la energía en la primera

separación. En esta función la variable φ se comporta como un parámetro, lo que equivale a congelar el movimiento de rotación y a resolver el problema en un pozo de ancho W . Una vez se obtenga la función $g(\rho, \varphi)$ de manera numérica, bien sea usando Runge-Kutta o un método más efectivo como el de barrido trigonométrico [30], se procede a reemplazar el resultado en la ecuación que se obtuvo para $\Phi^{2D}(\rho, \varphi)$ y donde los autovalores de la energía $E(\varphi)$ para la función $g(\rho, \varphi)$ harán las veces de un potencial efectivo en el cual se encontrarán o sentirán los portadores de carga en su movimiento de rotación. Para resolver la ecuación resultante se tendrán en cuenta condiciones de frontera periódica y ésta se solucionará numéricamente usando barrido trigonométrico o diagonalización matricial, para lo cual se podrá proponer una expansión, usando funciones de Fourier, ya que ellas resultan ser la solución del rotador rígido, es decir:

$$\Psi(\varphi) = \sum_{k=-s}^{k=s} C_k e^{ik\varphi} \quad (1.9)$$

Finalmente los autovalores de la energía, se obtendrán a partir de la diagonalización de la correspondiente ecuación secular que resulte de reemplazar la ecuación (1.9) en la ecuación diferencial que se obtuvo para $\Psi(\varphi)$.

Una vez obtenida la energía se evalúa la incidencia de los factores geométricos y de los campos externos sobre el espectro de energía de los diferentes sistemas propuestos.

Por último es necesario manifestar que los diferentes algoritmos que se utilicen se han codificado en lenguaje FORTRAN, donde fue necesario adecuar algunas subrutinas existentes a los problemas particulares que son motivo de estudio en esta tesis. Una vez obtenidos los resultados, éstos deberán ser cotejados con resultados disponibles en la literatura científica y con casos límites, para las cuales se conocen soluciones exactas.

Capítulo 2

Sistemas bi-particulares en anillos cuánticos delgados.

Uno de los sistemas más interesantes de estudiar es el compuesto por dos electrones, ya que puede usarse como punto de partida para evaluar la calidad de diferentes métodos de solución que se implementen. Adicionalmente, permite establecer el papel que juega la interacción electrón-electrón sobre la estructura de energía de sistemas más complicados compuestos por un número mayor de portadores de carga. Los sistemas bi-electrónicos han sido de gran interés desde el advenimiento de la mecánica cuántica y están presentes en sistemas como el ión de hidrógeno cargado negativamente H^- , H_e^- , L_i^+ , etc, excitones neutros X^0 y moléculas hidrogenoides del tipo H_2^0 . En los últimos años el interés por estos sistemas bi-electrónicos ha surgido una vez más, en conexión con el estudio de los electrones bajo fuertes condiciones de confinamiento en QDs.

Entre la gran variedad de sistemas bi-electrónicos susceptibles de ser estudiados, en este trabajo de tesis, se ha escogido un sistema de dos electrones sometidos a su mutua interacción, dos electrones ligados a un centro de carga fija, es decir ión D^- y el complejo molecular D_2^0 , el cual corresponde a un sistema formado por dos electrones que están ligados a dos centros de carga fijos. Para estos sistemas se conocen sus propiedades esenciales en el volumen, es decir se parte del conocimiento de la energía de disociación del H^- , así como de la longitud de equilibrio y energía de disociación H_2^0 .

El objetivo al considerar estos sistemas, con electrones en un solo anillo, o espacialmente separados en anillos concéntricos o acoplados verticalmente, es el de establecer la incidencia de la interacción electrón-electrón y la interacción donador-electrón sobre el espectro de energía, además de mostrar que la separación entre anillos, (para el caso de acople vertical) y la razón entre los radios medios de los mismos, (en el caso de anillos

concéntricos), introduce un nuevo grado de libertad, a partir del cual también se puede controlar el espectro energético mencionado.

2.1 Sistema de dos electrones espacialmente separados en anillos acoplados verticalmente.

En la figura 2.1 se muestra el primer sistema bi-particular que se estudiará. Este consiste de dos electrones espacialmente separados y obligados a moverse en dos anillos de tamaños diferentes y de sección transversa cuadrada, los cuales están verticalmente acoplados.

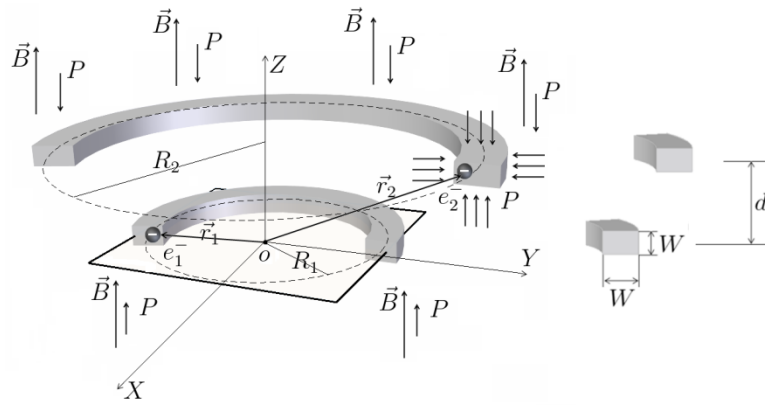


Figura 2.1 Representación gráfica de dos anillos acoplados verticalmente cada uno albergando un único electrón.

La geometría de esta configuración está caracterizada por los radios medios R_1 y R_2 de los anillos inferior y superior, respectivamente, el espesor W de cada anillo y la separación vertical d entre anillos. El sistema completo se encuentra bajo la influencia de un campo magnético uniforme $\vec{B} = B\hat{u}_z$ y de un campo de presión hidrostática P . El Hamiltoniano del sistema en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) puede escribirse como:

$$H = \sum_{j=1}^2 H_0(\vec{r}_j) + \frac{e^2}{\varepsilon(P)|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (2.1)$$

Donde el Hamiltoniano uni-particular $H_0(\vec{r}_j)$ y la separación electrón-electrón están dadas por las expresiones siguientes:

$$H_0(\vec{r}_j) = \frac{-\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial}{\partial \rho_j} \left(\rho_j \frac{\partial}{\partial \rho_j} \right) + \frac{1}{\rho_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right] + \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{e^2 B^2 \rho_j^2}{8m^*(P)} + V_j(\rho_j, z_j) \quad (2.2a)$$

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + (z_2 - z_1)^2} \quad (2.2b)$$

Donde \vec{r}_j representan la posición del j-ésimo electrón, el cual está en un potencial de confinamiento $V_j(\rho_j, z_j)$ que es cero dentro del anillo e infinito por fuera de éste. Las mediciones espaciales se hacen respecto del origen de coordenadas O que está ubicado en el centro del anillo inferior.

Los efectos asociados con la presión hidrostática aplicada sobre los QRs, se manifiestan a través de la dependencia que exhiben los factores geométricos (ancho $W(P)$ y radios medios $R_{1,2}(P)$) de los QRs con este parámetro, así como la masa efectiva y la permitividad del material. Las dependencias explícitas con la presión hidrostática están dadas por las siguientes expresiones [31]:

$$W(P) = W(0)[1 - (S_{11} + 2S_{12})P]^{1/2} \quad (2.3)$$

$$R_j(P) = R_j(0)[1 - (S_{11} + 2S_{12})P]^{1/2} \quad (2.4)$$

Donde $W(0)$ y $R_j(0)$ son el ancho y el radio medio de los anillos en ausencia de presión. S_{11} y S_{12} son las constantes de forma para el GaAs que se obtuvieron en la referencia [31].

Los efectos de la presión sobre la masa efectiva y la permitividad están dados por:

$$m^*(P) = m_0 \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{2}{E_g^\Gamma(P)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(P) + \Delta_0} \right) + \delta_m \right]^{-1} \quad (2.5)$$

$$\mathcal{E}(P) = 12.74 \exp[-16.7 * 10^{-4}P - 6.7 * 10^{-3}] \quad (2.6)$$

Donde m_0 es la masa del electrón libre y $E_g^\Gamma(P)$ es la dependencia de la presión con la brecha de energía del GaAs en meV, cuya dependencia con P es la siguiente [31]:

$$E_g^\Gamma(P) = 1519.4 + 10.7P \quad (2.7)$$

En esta tesis, en lo que respecta a la presión, se usarán unidades de kbar para determinar su incidencia en el espectro de energía. Los parámetros restantes que aparecen en la ecuación (2.5) están de acuerdo con los resultados reportados en la referencia [31].

La interacción repulsiva electrón-electrón en el Hamiltoniano hace imposible encontrar soluciones exactas para nuestro sistema, por tal razón nos vemos en la necesidad de implementar un método aproximado de solución basado en la AA. Los resultados experimentales y teóricos usados en la literatura para anillos concéntricos [32] muestran que los radios medios de los anillos interior y exterior son respectivamente $83nm$ y $97nm$ con una altura de $2nm$. A partir de estos resultados y sobre la base del principio de incertidumbre, es posible categorizar los diferentes aportes energéticos al Hamiltoniano. la energía cinética (K) en dirección radial ρ o z varía de la forma $K_{\rho,z} = 1/4R_{12}^2 = 1/16$ mientras que la energía rotacional K_φ oscila entre $K_\varphi = 1/(83)^2$ para el anillo inferior y $K_\varphi = 1/(97)^2$ para el anillo superior. Con base en estos valores se puede mostrar que la razón $K_{\rho,z}/K_\varphi$ para los anillos superior e inferior varía entre 430 y 590, respectivamente. Estos valores permiten el uso de la AA que se describió en el capítulo 1. Siguiendo el mismo procedimiento definido en la referencia [33], $\rho_j = R_j + \tilde{\rho}_j$ donde la coordenada renormalizada $\tilde{\rho}_j$ toma valores entre $-W/2$ y $W/2$, es posible reducir el Hamiltoniano dado por la ecuación (2.1) en el siguiente:

$$H = \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} + \frac{ieB}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{e^2 B^2 \langle \rho_j^2 \rangle}{4\hbar^2 m^*(P)} \right] + V_j \right\} + \tilde{U}_{ee}(\varphi_2 - \varphi_1) + E_0 \quad (2.8)$$

donde los términos $\langle \rho_j^2 \rangle$ y $\tilde{U}_{ee}(\varphi_2 - \varphi_1)$ están definidos en las ecuaciones (2.9a) y (2.9b), respectivamente.

$$\tilde{U}_{ee}(\varphi_2 - \varphi_1) = \frac{e^2}{\varepsilon(P)} \left\langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} \left| \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \right| f_0^{(1)} f_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.9a)$$

$$\langle \rho_j^2 \rangle = \left\langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} \left| \rho_j^2 \right| f_0^{(1)} f_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.9b)$$

Estas cantidades corresponden a los valores promedio del potencial de interacción electrón-electrón y del cuadrado de la distancia radial de cada electrón al origen. En estas ecuaciones $f_0^{(j)} = f_0^{(j)}(\rho_j, z_j)$ y E_0 son la función de onda exacta y el correspondiente auto valor de energía de un electrón moviéndose en un pozo cuántico rectangular bidimensional infinito de ancho W , es decir para una partícula que se mueve en la sección transversa del anillo.

Los auto-valores de la energía E para el sistema bi-electrónico descrito por el Hamiltoniano unidimensional (2.8), se pueden resolver usando coordenadas relativas $\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ y de centro de masa $\Theta = (R_1^2 \varphi_1 + R_2^2 \varphi_2) / (R_1^2 + R_2^2)$. Estas sustituciones permiten descomponer el Hamiltoniano bi-particular (2.8) en dos ecuaciones uni-particulares y uni-dimensionales:

$$H = H_c + H_r \quad (2.10)$$

siendo H_c y H_r los términos de centro de masa y relativo, respectivamente. Los auto-valores exactos para el Hamiltoniano de centro de masa están dados por:

$$E_c(M) = \frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{M^2}{R_1^2 + R_2^2} + MB + \frac{1}{4} B^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle \right] + E_0 \quad (2.11)$$

donde $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Los auto-valores del operador H_r denotados por $E_r(m, s)$ se obtienen resolviendo la ecuación de Schrödinger uni-dimensional:

$$H_r \psi_{m,s} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m(P)} \left(\frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{R_2^2} \right) \frac{d^2}{d\varphi^2} + \tilde{U}_{ee}(\varphi) \right] \psi_{m,s} = E_r(m, s) \psi_{m,s} \quad (2.12)$$

de manera numérica. En esta tesis se ha hecho uso del método de barrido trigonométrico [30].

En la ecuación (2.12), $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$. Los números cuánticos M y $m = 0, \pm 1, \pm 2$ definen el momentum angular del centro de masa y relativo, mientras que $s = 0$ denota soluciones pares o estados singlete, en tanto que $s = 1$ describe soluciones impares correspondientes a estados tripletes.

Para llevar a cabo una discusión sobre los resultados obtenidos, se denotarán los diferentes estados de energía renormalizados $R^2 E(M, m, s)$ por medio de una notación simplificada a, b, c, \dots del mismo modo que se hizo en la referencia [34]. Para chequear la calidad del método empleado, se analizan los casos límites ($R_1 = R_2 = R, d \rightarrow 0$ y $W \rightarrow 0$), el cual corresponde al caso de dos electrones confinados en un solo anillo y cuyos resultados se han reportado en la referencia [34], donde se han usado unidades de longitud y energía dadas por el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo respectivamente. En esta comparación se han empleado dos radios diferentes: $1a_0^*$ para los niveles (a) a (h) y $4a_0^*$ para los niveles (i) a (p) y los resultados obtenidos en esta tesis y en la referencia [34] se encuentran listados en la tabla 1.

Tabla 1. Niveles de energía renormalizada para un sistema bi-electrónico en un anillo.

Notación energía		$R=1a_0^*$		Notación energía		$R=4a_0^*$	
Notación abreviada	Notación Completa	Datos Tesis	Ref.[34]	Notación abreviada	Notación Completa	Datos tesis	Ref.[34]
A	$R^2 E(0,0,0)$	1.72	1.73	I	$R^2 E(\pm 1,3,1)$	11.90	11.90
B	$R^2 E(\pm 1,1,1)$	2.23	2.23	J	$R^2 E(\pm 3,1,0)$	12.41	12.41
C	$R^2 E(0,2,1)$	3.61	3.62	K	$R^2 E(\pm 2,2,0)$	13.40	13.40
D	$R^2 E(\pm 2,0,0)$	3.72	3.73	L	$R^2 E(0,4,1)$	15.71	15.71
E	$R^2 E(\pm 1,1,0)$	4.06	4.12	M	$R^2 E(\pm 4,0,0)$	13.18	13.18
F	$R^2 E(\pm 2,2,1)$	5.62	5.62	N	$R^2 E(\pm 1,3,0)$	16.19	16.21
G	$R^2 E(\pm 0,2,0)$	6.22	6.23	O	$R^2 E(\pm 3,3,1)$	15.90	15.90
H	$R^2 E(\pm 3,1,1)$	6.33	6.38	P	$R^2 E(\pm 4,2,1)$	15.92	15.92

Un vistazo rápido sobre los datos listados en la tabla 1, permiten concluir que existe un excelente acuerdo entre los resultados exactos de la referencia [34] y los obtenidos en esta tesis usados para anillos muy estrechos. Es posible notar que cuánto mayores sean los radios del anillo, mejores son los resultados obtenidos. Esto se debe a que en estos casos las condiciones

requeridas por la aproximación adiabática se verifican mejor, ya que a mayor radio, menor energía cinética de rotación. Una vez verificado que el método implementado funciona bien, entonces es posible estudiar el efecto de los campos externos y de los factores geométricos.

En la figura 2.2 se muestra la evolución de la energía $E(M, m, s)$ con el campo magnético. Las gráficas se han hecho asumiendo que los dos anillos están en el mismo plano, pero con radios medios diferentes. En la realización de estas curvas se han considerado dos valores diferentes para el radio medio del anillo interior: $R_1 = 375 \text{ \AA}$ y $R_1 = 300 \text{ \AA}$ y para un único valor del radio del anillo exterior $R_2 = 400 \text{ \AA}$. Las curvas se han obtenido para dos valores diferentes de la presión hidrostática $P = 0$ (paneles superiores) y $P = 30 \text{ kbar}$ (paneles inferiores).

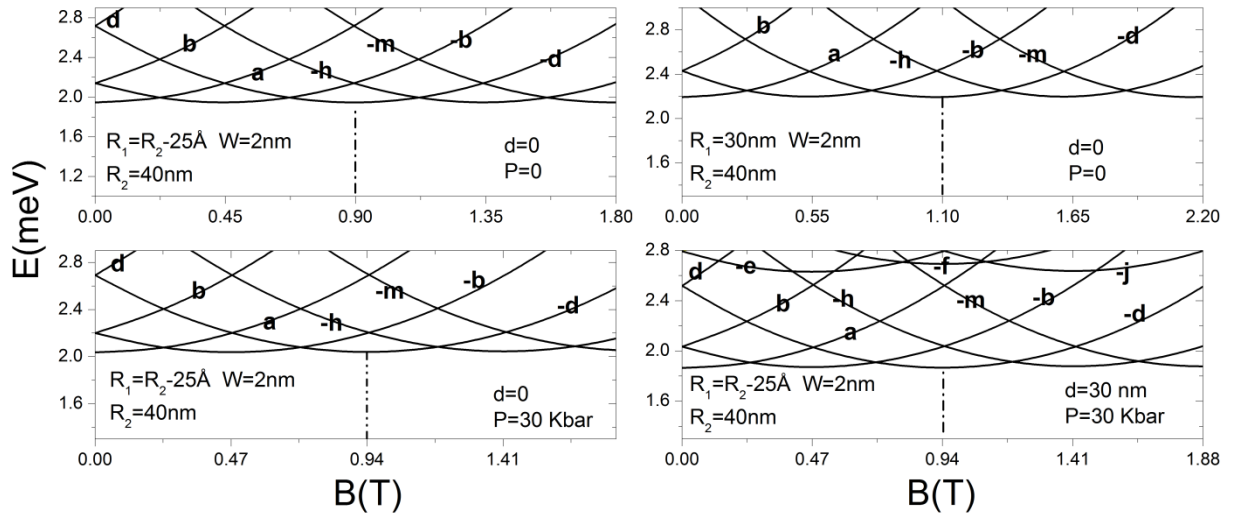


Figura 2.2. Niveles de energía $E(M, m, s)$ para dos electrones en anillos concéntricos.

En todos los paneles de la figura 2.2 puede observarse patrones oscilatorios de la energía con el campo magnético llamadas oscilaciones Aharonov-Bohm. Este comportamiento oscilatorio surge como consecuencia de la mezcla de estados con diferente momentum angular del centro de masa M . Una explicación a este importante efecto se puede dar comparando las contribuciones del término paramagnético ($\sim B$) y el término diamagnético ($\sim B^2$). En consecuencia, para pequeños valores de campo magnético, se garantiza un predominio del término paramagnético sobre el diamagnético, pero este comportamiento se invierte para

grandes valores del campo magnético, lo cual da lugar a un comportamiento parabólico de la energía, teniendo pendiente positiva cuando $M \geq 0$ y pendiente negativa cuando $M < 0$. Este singular comportamiento se observa, tanto experimental como teóricamente, solo en anillos y resulta ser una consecuencia de la existencia del cráter central.

Para entender el efecto de la presión hidrostática sobre el sistema bi-electrónico en anillos, es posible observar como la presión diferente de cero, produce una reducción global del tamaño del anillo y en particular reduce los radios medios de los mismos y la separación entre ellos. Este hecho hace que la distancia electrón-electrón tienda a disminuir de modo que la repulsión Coulombiana entre ellos tienda a incrementar, por lo que se puede notar una pequeña diferencia entre la energía del estado base a presión cero (panel superior izquierdo) y presión $P = 30 \text{ kbar}$ (panel inferior izquierdo). Otro hecho importante que se observa entre las curvas con y sin presión, está relacionada con el periodo de las oscilaciones AB, el cual aumenta con el incremento de la presión hidrostática. Esto se debe a que el periodo crece aproximadamente como $1/(R_1^2(P) + R_2^2(P))$ y como la diferencia entre los radios con y sin presión es menor que uno ($[R_j(P \neq 0) - R_j(P = 0)] < 1$), entonces es evidente que al aumentar P ocurrirá lo mismo con el periodo.

Los efectos geométricos sobre las oscilaciones AB debidos a la separación entre anillos, se pueden inferir comparando los resultados de los paneles derechos, mientras que los efectos asociados con las separaciones radiales entre anillos se pueden determinar comparando los paneles superiores, los cuales se obtienen para anillos concéntricos con radios medios diferentes. Uno puede observar que cuanto más grande son las diferencias los radios medios de los anillos, más grande es el periodo de la oscilación AB. Este hecho se puede entender calculando la función espacial de correlación electrónica [35], la cual nos permite demostrar que la distancia promedio entre electrones es mayor para la situación descrita en el panel superior izquierdo que en el panel superior derecho, haciendo que la energía de repulsión electrónica sea menor, lo que explicaría la diferencia entre los estados base descritos en ambos paneles. El mismo argumento puede usarse para explicar la diferencia entre los paneles derechos, donde los cambios se deben principalmente a la mayor separación entre anillos, ya que la presión hidrostática produce cambios más ligeros en comparación con los que resultan como consecuencia de la interacción repulsiva entre electrones. En consecuencia, cuanto

mayor es la separación entre anillos, menor es la interacción repulsiva entre electrones y por ende menor será la energía total del sistema bi-electrónico.

La evolución del estado base para el sistema bi-electrónico confinado en anillos coplanares como función del radio medio del anillo más externo $R_2=R$, se muestra en la figura 3.3, para la cual se garantiza que la diferencia entre los radios medios de los anillos se mantiene constante e igual $25 \text{ \AA} = 2.5 \text{ nm}$. En la confección de esta gráfica se han considerado dos valores diferentes del campo 0.067 T y 1.34 T (Figura 3.3a) y valores diferentes de la separación entre anillos $d = 0$ y $d = 30 \text{ nm}$ (Figura 3.3b). Ambos conjuntos de curvas se hacen para dos valores diferentes de la presión hidrostática, 0 (curvas continuas) y 30 kbar (curvas a trazos)

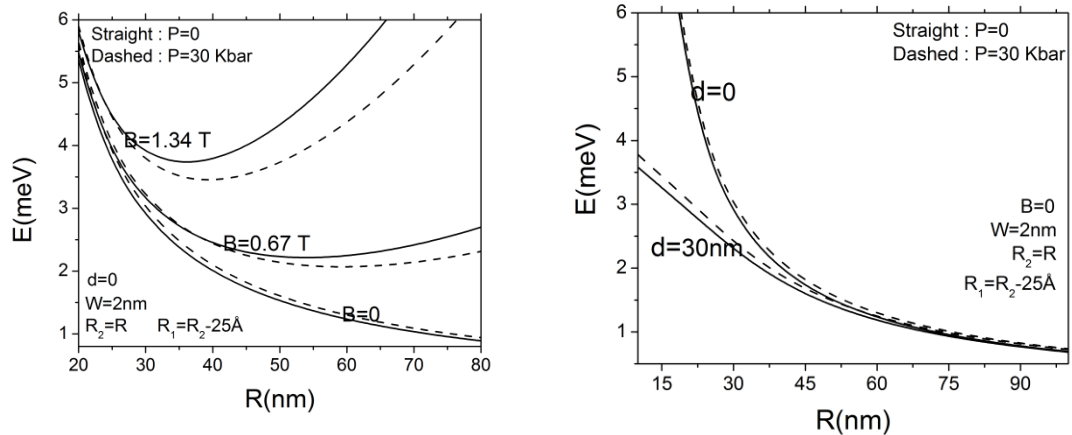


Figura 2.3 Energía del estado base de un sistema bi-electrónico como una función el radio más externo y con distancia entre anillos constante.

Con relación a la Figura 2.3(a), el comportamiento de esta curva puede entenderse a partir de la forma como se ve alterada la interacción Coulombiana entre electrones. Por ejemplo, para pequeños valores del radio R , la interacción electrón-electrón es muy fuerte, de allí que un aumento de en el radio externo, se traduce en una mayor separación entre los electrones y por ende una disminución en la energía. Este comportamiento es general para valores de R entre 20 nm y 30 nm , sin importar la intensidad del campo magnético. Sin embargo, para valores de R por encima de 30 nm , este comportamiento tiende a desaparecer, ya que la energía cinética que adquieren los electrones debido al campo magnético comienza a competir con la potencial

y termina por imponerse, hasta adquirir una configuración equivalente a dos rotadores rígidos independientes. Esto se evidencia en el cambio de pendiente que sufren las curvas, ocurriendo primero cuando los electrones están al campo $B = 1.34 T$ y luego cuando este toma el valor de $0.67 T$. Esto significa que al aumentar el radio, el sistema pasa de tener una configuración con electrones fuertemente correlacionados similar a un cristal, ya que se da un predominio de la energía potencial por encima de la cinética, hecho que se rompe al aumentar el campo, el cual desordena el sistema y se transforma a otro, similar a un gas con predominio de la energía cinética.

Para hacer evidente que este cambio de pendiente en las curvas se debe al campo magnético, y particularmente al aporte hecho por el término diamagnético, obsérvese la curva para campo cero, donde la energía decrece monótonamente al aumentar el radio externo entre 20 y $80 nm$. Nótese que los comportamientos descritos son independientes de la intensidad de la presión hidrostática. Sin embargo, se observa un efecto destacable que está asociado con el cruce entre líneas continuas y a trazos cuando el campo es diferente de cero. Esto es una consecuencia de la presencia del término diamagnético en el Hamiltoniano de centro de masa ($\frac{1}{4}B^2\langle\rho_1^2 + \rho_2^2\rangle$) el cual tiende a disminuir con el incremento de la presión hidrostática, ya que el sistema global se contrae y como consecuencia decrece la energía total.

Para entender el efecto de la separación entre los anillos sobre el espectro bi-electrónico, obsérvese ahora la figura 2.3b. Nótese que al aumentar la separación, se debilita aún más la interacción electrón-electrón. Esto conlleva a que a grandes valores de R y sin importar la intensidad de la presión, todas las curvas converjan asintóticamente al mismo valor, el cual no es otro que el correspondiente a rotadores rígidos independientes. No obstante, a pequeños valores de R , son fácilmente distinguibles unas curvas de las otras, especialmente cuando está más separadas, ya que los efectos de presión tienden a competir un poco más con la energía de repulsión Coulombiana.

Con el propósito de hacer más evidente las transiciones orden-desorden en sistemas con tan solo dos electrones, en la figura 2.4 se muestra la evolución de la energía renormalizada (R^2E) con el radio medio del anillo más externo.

Para entender esta figura, es necesario comprender que las curvas son el resultado de la fuerte competencia entre la energía cinética renormalizada ($R^2K \propto R^2/R^2 = 1$) y la energía potencial renormalizada ($R^2U \propto R^2/R = R$).

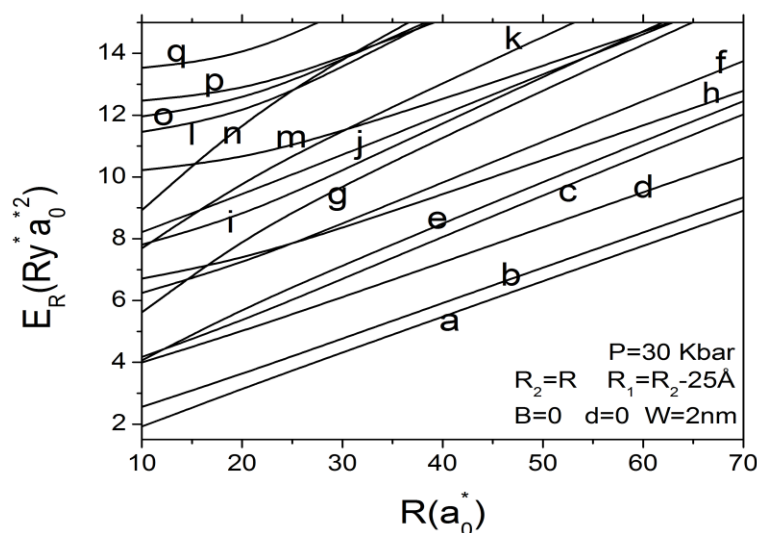


Figura 2.4 Energía bi-electrónica total renormalizada como una función del radio más externo para la configuración de anillo doble.

A partir de la figura 2.4 se puede observar que para pequeños valores de R se presenta un cambio constante en la pendiente de la curva, hecho que evidencia el predominio de la energía cinética sobre la potencial. Esto significa que los electrones no se reconocen mutuamente y que la presencia del uno no afecta significativamente al otro, del mismo modo que ocurre con las moléculas en un gas ideal. En consecuencia puede manifestarse que para valores pequeños de R el sistema presenta una configuración carente de orden. Sin embargo, este comportamiento se modifica a partir de un valor crítico del radio, donde se evidencia el predominio del término Coulombiano a través de la existencia de curvas con pendiente constante, siendo este efecto más significativo en los estados más bajos. El tener curvas con comportamiento casi-lineal, es un indicativo de que la interacción Coulombiana se impone sobre la cinética y el sistema ha comenzado a tener un orden similar al que presentan las estructuras cristalinas, donde los electrones tienden a adquirir una configuración similar a la de un rotador rígido. Esta

configuración ordenada que adquiere el sistema bi-electrónico se denomina cristalización de Wigner.

2.2 Ión D^- con electrones confinados en un anillo.

El ión de hidrógeno H^- puede considerarse como el sistema más simple de pocas partículas que haya sido analizado por primera vez con las leyes de la mecánica cuántica. La formación de este tipo de iones es muy común en el campo de la astro-física, ya que grandes concentraciones de este ión se encuentran en las regiones de transición entre nebulosas planetarias. Además, se ha establecido que la principal fuente de opacidad en la atmósfera solar a las longitudes de onda en el rojo e infrarrojos se debe fundamentalmente a la absorción que hacen los iones H^- . Estos iones también aparecen en diferentes áreas de la física y la química cuando se tienen gases débilmente ionizados y plasmas. En biología, este ión se usa como un anti-oxidante muy efectivo en el cuerpo humano. En física de estado sólido y particularmente en materiales semi-conductores se tienen sistemas similares llamados D^- los cuales aparecen cuando un átomo tetravalente del material semiconductor base es remplazado por un átomo pentavalente el cual tiene la capacidad de ligar un electrón extra formando impurezas negativas del tipo D^- . El mecanismo de generación de la impureza cargada negativamente, puede explicarse a partir de la siguiente reacción: $D^0 + D^0 \rightarrow D^- + D^+$. Los niveles energéticos de un ión D^- en un campo magnético, así formado, en buena aproximación podría obedecer al mismo Hamiltoniano del ión H^- , excepto que para un campo magnético dado, las energías y la frecuencia ciclotrónica, dependen de la masa efectiva del portador. La modificación es todavía mucho más notoria cuando estos sistemas están confinados en sistemas de baja dimensionalidad, ya que el potencial de confinamiento aumenta sustancialmente su energía de enlace, permitiendo su observación experimental incluso a temperatura ambiente, hecho imposible de realizar en un semiconductor en el volumen. Esta es una de las múltiples razones por las cuales se estudia este sistema confinado en anillos cuánticos

En la figura (2.5) se presenta una imagen tri-dimensional para un ión D^- con sus dos electrones localizados dentro de un único anillo y ligados eléctricamente a un centro de

carga positiva ubicado sobre el eje z. El sistema completo se encuentra sometido a presión hidrostática y a la acción de un campo magnético uniforme en dirección z.

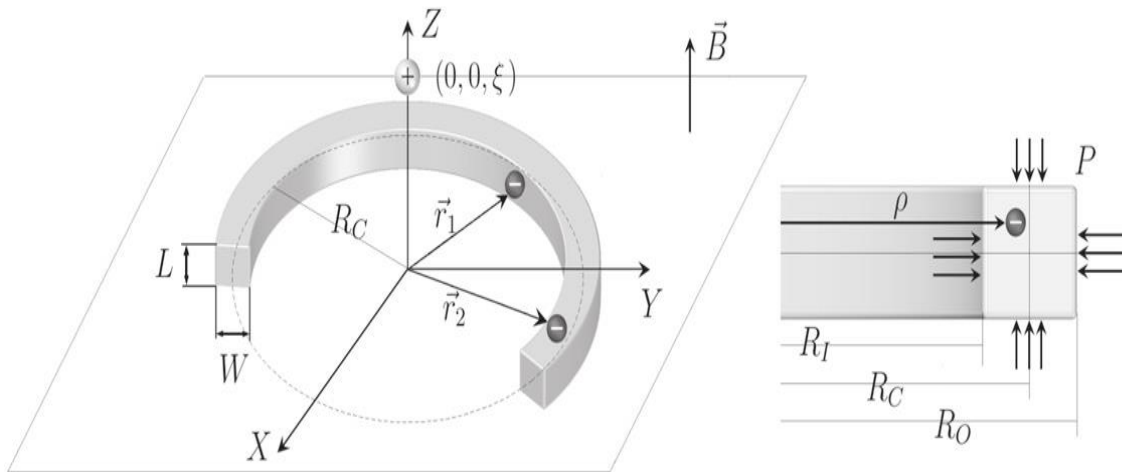


Figura 2.5 Ión D^- en un anillo cuántico toroidal bajo la presencia de un campo magnético y presión hidrostática.

El QR está limitado por dos superficies cilíndricas, con radio interior R_I y radio exterior R_O , respectivamente. El centro de carga positivo está ubicado en el punto $(0,0,\xi)$, mientras los electrones localizados dentro del anillo, tienen vectores de posición \vec{r}_1 y \vec{r}_2 , respectivamente. El anillo se considera de sección transversa rectangular, así como se aprecia en la parte derecha de la figura 2.5. Un factor geométrico importante de estos anillos es el radio medio, el cual se define como $(R_C = (R_O + R_I)/2)$. La variable ρ denota la coordenada cilíndrica del electrón mientras que las flechas verticales y horizontales, representan la existencia de presión hidrostática.

El Hamiltoniano para un ion D^- en aproximación de masa efectiva, bajo los efectos de la presión hidrostática P y campo magnético \vec{B} aplicado en dirección z puede ser escrito en coordenadas cilíndricas de la siguiente manera:

$$H = \sum_{j=1}^2 H_0(\vec{r}_j) + \frac{e^2}{\epsilon(P)|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (2.13)$$

donde el Hamiltoniano uni-particular y la distancia electrón-electrón están dadas por las expresiones siguientes:

$$H_0(\vec{r}_j) = \frac{-\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial}{\partial \rho_j} \left(\rho_j \frac{\partial}{\partial \rho_j} \right) + \frac{1}{\rho_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right] + \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{e^2 B^2 \rho_j^2}{8m^*(P)} - \frac{e^2}{\varepsilon(P) |\vec{r}_j - \vec{\xi}|} + V_j(\rho_j, z_j) \quad (2.14)$$

y

$$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + (z_2 - z_1)^2} \quad (2.15)$$

En la expresión superior, $V_j(\rho_j, z_j)$ representa el potencial de confinamiento del j-electrón, el cual se ha tomado igual a cero dentro del QR e infinito por fuera. El origen del sistema de coordenadas ha sido localizado en el centro del QR. Los efectos de la aplicación de la presión hidrostática sobre los parámetros geométricos del QR son los mismos que ya han sido reportados en la sección anterior, a través de las ecuaciones (2.3) a (2.7).

La correspondiente ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (2.13), no puede ser resuelta exactamente, debido a la presencia de las interacciones Coulombianas de repulsión electrón-electrón y atracción entre los electrones y la donadora. Por esta razón se implementará la misma metodología basada en la AA que se usó en la sección anterior, de tal modo que el Hamiltoniano bi-particular y unidimensional resultante que describe el movimiento rotacional de las dos partículas está dado por:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*(P)} \sum_{j=1}^2 \left[\frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{ieB}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} + \frac{e^2 B^2 \langle \rho_j^2 \rangle}{4\hbar^2 m^*(P)} + \frac{e^2}{\varepsilon(P) |\vec{r}_j - \vec{\xi}|} + V_j \right] + \bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1) + \bar{U}_{De} + E_0 \quad (2.16)$$

Dónde:

$\bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1)$ es el potencial de interacción electrón-electrón re-normalizado dado por,

$$\bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1) = \frac{e^2}{\varepsilon(P)} \left\langle g_0^{(1)} g_0^{(2)} \left| \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \right| g_0^{(1)} g_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.17a)$$

\bar{U}_{De} el potencial electron-donador total que es descrito por:

$$\bar{U}_{De} = -\frac{e^2}{\varepsilon(P)} \left\langle g_0^{(1)} g_0^{(2)} \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{\xi}|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{\xi}|} \right| g_0^{(1)} g_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.17b)$$

Y las distancias radiales promedio de los electrones dadas por:

$$\langle \rho_j^2 \rangle = \left\langle g_0^{(1)} g_0^{(2)} \left| \rho_j^2 \right| g_0^{(1)} g_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.17c)$$

Dónde: $g_0^{(j)} = g_0^{(j)}(\rho_j, z_j)$ y E_0 son la función de onda exacta y sus correspondientes autovalores de energías en un pozo cuántico rectangular bidimensional infinito, las cuales describen movimiento de los electrones a través de la sección transversal. Los autovalores E de la ecuación de Schrödinger unidimensional resultante para las dos partículas con Hamiltoniano (2.16), se pueden resolver usando coordenadas relativas $\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ y de centro de masa $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$, las cuales nos permiten descomponer el Hamiltoniano así:

$$H = H_c + H_r \quad (2.18)$$

siendo H_c y H_r los Hamiltonianos de centro de masa y relativo, respectivamente. Los autovalores de los términos de centro de masa son exactos:

$$E_c(M) = \frac{\hbar^2}{2m(P)} \left[\frac{M^2}{2R_c^2} + MB + \frac{1}{4} B^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle \right] + E_0 \quad (2.19)$$

Donde $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ mientras tanto los autovalores del operador H_r denotados por $E_r(m, s)$ se obtienen numéricamente solucionando la siguiente ecuación de Schrödinger unidimensional:

$$H_r \psi_{m,s} = \left[-\frac{\hbar^2}{m^*(P)R_c^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \bar{V}(\varphi) \right] \psi_{m,s} = E_r(m, s) \psi_{m,s} \quad (2.20)$$

Siendo $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$. Los números cuánticos M y m definen, momento angular de centro de masa y relativo, mientras $s=0$ denota las soluciones pares o singletes $s=1$ denota las soluciones impares o tripletes.

Los resultados de cálculo del espectro de energía para el ión D^- se expresan a través de la dependencia de la energía con la posición de la impureza (figura 2.6), con el campo magnético (figura 2.8) y con el tamaño del anillo, definido a través del radio medio (figura 2.9).

La dependencia de la energía $E(M, m, s)$ del ión D^- con la posición de la impureza (figura 2.6), se ha hecho para dos diferentes valores de la presión hidrostática aplicada, $P = 0$ (línea sólida) y $P = 30 \text{ kbar}$ (línea punteada) y tres diferentes estados $a[(E(0,0,0))]$, $d[(E(\pm 2,0,0))]$ y $f[(E(\pm 2,2,1))]$ para un anillo con espesor $L = W = 2 \text{ nm}$ y radio central $R_c = 30 \text{ nm}$.

La notación usada en éste capítulo es la misma definida en la sección anterior. Los resultados muestran para pequeños valores de ξ , la interacción electrón-donador-electrón es realmente predominante.

Sin embargo, cuando la donadora comienza a alejarse del centro del anillo a lo largo del eje z , independientemente del valor de la presión, la energía total empieza a incrementar. Esto debido a que la interacción electrón-electrón empieza a jugar un papel predominante en comparación con la interacción atractiva electrón-donador, ya que ésta tiende a disminuir con el alejamiento del donador. Nótese como para pequeños valores de la posición de la donadora, las variaciones en las pendientes de la curva son realmente notables, pero este comportamiento tiende a desaparecer para valores de ξ superiores a un radio efectivo de Bohr. Las tres curvas de presión cero están en excelente acuerdo con los resultados previamente reportados en la referencia [36]. Lo cual muestra la eficacia del modelo utilizado en este trabajo para analizar los efectos de la presión hidrostática y de campo magnético en el espectro de energía de un D^- .

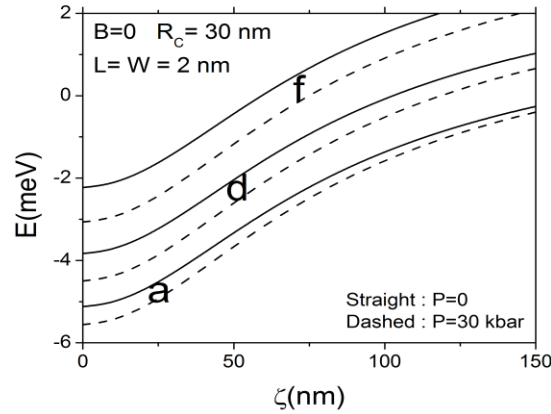


Figura 2.6. Energía total $E(M, m, s)$ de un D^- Vs. Posición del donador ξ para dos valores diferentes de presión hidrostática aplicada $P = 0$ (línea sólida) y $P = 30$ kbar (línea punteada).

Con el propósito de entender los efectos que tiene la aplicación de la presión hidrostática sobre el espectro de energía del ión D^- confinado en un anillo cuántico toroidal, es necesario tener en cuenta que el aumento de P , produce una reducción del tamaño total de la nano-estructura. Por lo tanto, la interacción atractiva electrón-donador-electrón tiende a incrementar, lo cual se traduce en un desplazamiento hacia abajo en las curvas de energía total del ión D^- con el aumento de la presión. Se puede observar que la presión produce una variación diferente sobre cada nivel de energía del D^- , ya que para los estados excitados, se evidencia una mayor separación entre las curvas con el aumento de la presión hidrostática.

Con el fin de incluir otra de las razones por las cuales la presión hidrostática produce un desplazamiento hacia debajo de las curvas de la energía total del D^- , mostramos en la figura (2.7) la variación del potencial promedio de interacción $\bar{V}_{total} = \bar{U}_{De} + \bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1)$ con la posición angular relativa entre los dos electrones, considerando tres valores diferentes de presión.

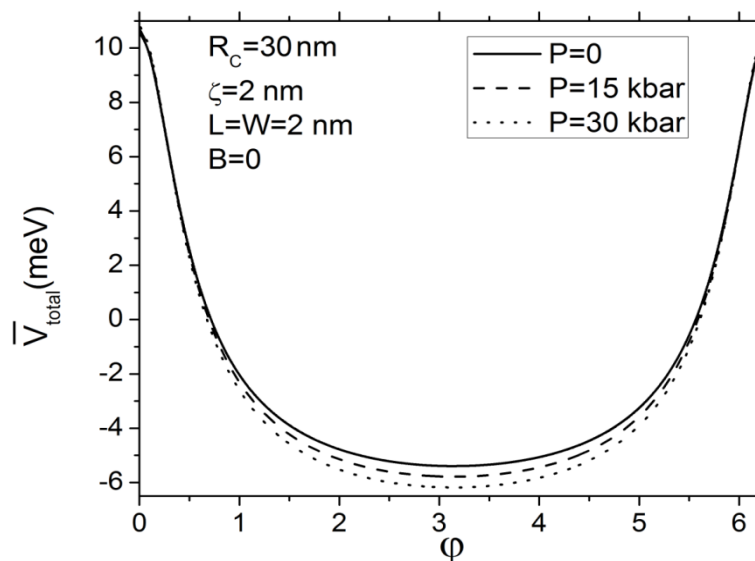


Figura 2.7 Potencial promedio total como función de la posición angular relativa entre los dos electrones.

A partir de esta gráfica podemos apreciar que el potencial efectivo de confinamiento sentido por los electrones en el movimiento rotacional alrededor del eje z , presenta un valor mínimo, cuya profundidad es mayor cuanto mayor es la presión hidrostática aplicada sobre el QR. Este hecho es de gran importancia, ya que sería posible modificar en tiempo real el espectro de energía del D^- cambiando sólo la presión hidrostática aplicada. Es de advertir que el aumento de la profundidad, trae como consecuencia una mayor estabilidad del sistema respecto a la disociación térmica.

En la figura (2.8) se muestra la variación de la energía total con la intensidad de campo magnético para un QR con altura $W=L=2$ nm y $R_c = 30$ nm y dos valores diferentes de presión, $P = 0$ (gráfica superior) y $P = 30$ kbar (gráfica inferior). Las curvas presentadas en esta figura, describen las oscilaciones AB que fueron descritas en la sección anterior y las cuales son el resultado de la competencia entre los términos diamagnético y paramagnético.

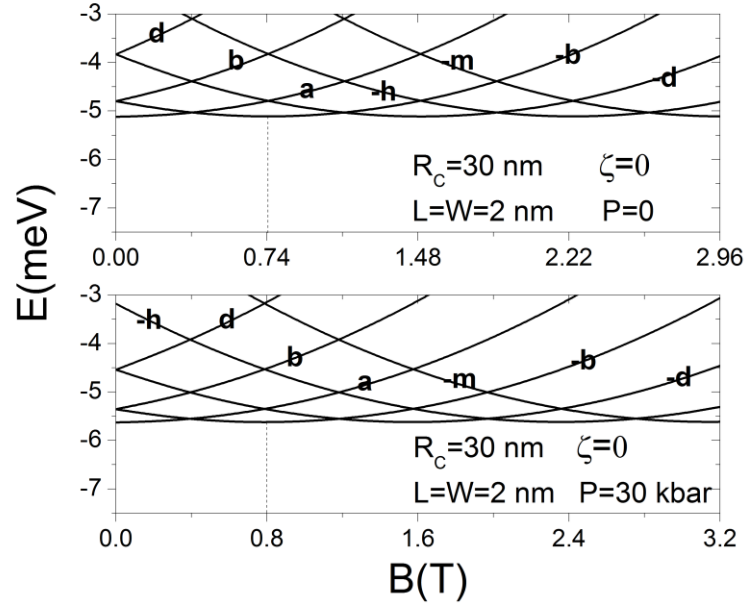


Figura 2.8. Algunos niveles de energía $E(M, m, s)$ del D^- en función del campo magnético aplicado.

De las curvas presentadas hasta ahora podemos observar que la aplicación de la presión hidrostática produce un descenso de los niveles de energía, por ejemplo en el caso de la energía del estado base vemos un diferencia de alrededor de 8% cuando se aplican valores de presión entre cero y 30 *kbar*, siendo este un hecho importante a la hora de preservar la estabilidad del sistema y de favorecer su observación a temperatura ambiente. Podemos observar más efectos de la presión hidrostática cuando analizamos el periodo de las oscilaciones Aharonov-Bohm a una presión de cero y 30 *kbar*. Cuando la presión es de 0 el periodo tiene un valor de 0.74 T, mientras que a una presión de 30 *kbar* es del orden de 0.8T, siendo esta diferencia nuevamente de alrededor de un 8%. En este caso la diferencia es una consecuencia de la reducción global en la geometría del anillo, cuando es sometido a una presión hidrostática. En este sentido la línea del radio central tiene una reducción y por ende el periodo de las oscilaciones Aharonov-Bohm, que es inversamente proporcional al cuadrado de dicho término, experimenta un incremento.

Al comparar las energías obtenidas para este sistema bi-electrónico ligado a una impureza con los obtenidos para el sistema de dos electrones en anillos acoplados, es posible evidenciar la influencia de la interacción atractiva entre los electrones y la donadora, la cual predomina sobre la interacción repulsiva. Cuando uno observa el valor de la energía

del estado base para anillos concéntrico a 30 *kbar* y se compara con el obtenido para un anillo, se encuentra que los valores de 2.2 *meV* y -5.5 *meV*, los cuales son realmente diferentes y donde en signo menos en el último, es una consecuencia de la presencia de la impureza.

Finalmente, en la figura (2.9) se muestra la evolución de tres diferentes estados de energía del ión D^- con radio medio del anillo. A partir de dichas curvas se evidencia, en primera instancia, el desplazamiento hacia abajo de los estados de energía. Esta situación era esperarse dado que al haber una reducción general de la geometría del anillo como se describió anteriormente, aumenta la interacción atractiva electrón-donador-electrón. Por otra parte, se puede ver un notable efecto en la energía de los estados excitados cuando el radio central del anillo es pequeño, debido a que hay una disminución en la distancia electrón-electrón, el cual favorece un incremento en la energía cinética.

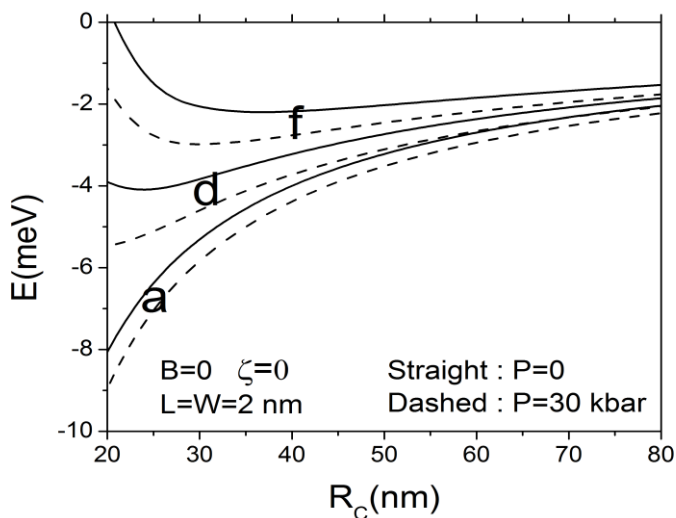


Figura 2.9 Evolución de tres diferentes estados de energía $E(M, m, s)$ del D^- con el radio central del anillo.

Al aumentar el radio medio de la estructura, las energías correspondientes a estados excitados, disminuyen hasta un valor mínimo. A partir de este punto, los valores de la energía tienden a tener un comportamiento casi lineal que podría ser pensado como un punto de inflexión donde la interacción electrón-electrón tiene más influencia que la energía cinética, lo cual da lugar a un proceso de cristalización de Wigner.

2.3 Complejo molecular D_2^0 .

La mayoría del hidrógeno en el medio interestelar se encuentra en forma de moléculas de hidrógeno del tipo H_2 . Este sistema es sin lugar a dudas el complejo molecular más simple que puede estudiarse. En el área de los semiconductores, tal como lo demostró Lampert se obtiene cuando dos átomos pentavalentes sustituyen a dos átomos tetravalentes contiguos. El sistema de donadoras dobles que se obtiene: $D^0 + D^0 \rightarrow D_2^0$ está compuesto por dos centros de carga fijos los cuales comparten sus dos electrones. Un aspecto interesante, es el estudio del comportamiento de este sistema bi-hidrogenoide bajo fuertes condiciones de confinamiento y en presencia de campos externos, con el propósito de establecer si se producen modificaciones en el espectro energético de donador doble debido a la reducción del espacio y presencia de campos externos.

En la figura (2.10) se muestra el complejo molecular D_2^0 con el cual se finaliza el trabajo en este capítulo. Los centros de carga fijos se encuentran sobre el eje z en los puntos $(0,0,\xi_1)$ y $(0,0,-\xi_2)$, respectivamente, mientras los electrones están espacialmente separados y obligados a moverse en anillos concéntricos de sección transversa de forma circular de radio R_t . Los radios medios de los anillos interior y exterior son R_1 y R_2 respectivamente.

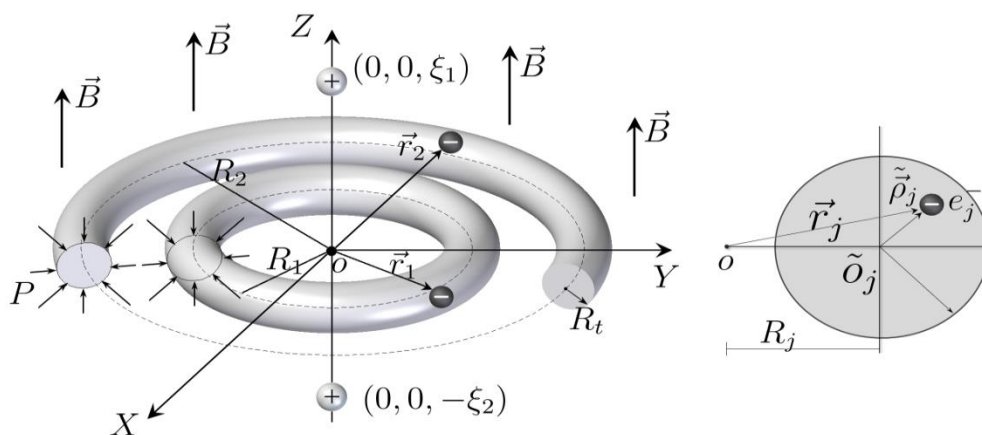


Figura 2.10 Representación tri-dimensional para una molécula bi-hidrogenoide D_2^0 bajo presión hidrostática y campo magnético uniforme.

El Hamiltoniano del sistema en aproximación de masa efectiva, incluyendo los efectos de la presión hidrostática (P) y el campo magnético (\vec{B}) en dirección del eje z , puede ser escrito en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) de la siguiente manera:

$$H = \sum_{j=1}^2 H_0(\vec{r}_j) + \frac{e^2}{\varepsilon(P)|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + \frac{\eta_1 \eta_2 e^2}{\varepsilon(P)|\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1|} \quad (2.21)$$

donde el Hamiltoniano uni-particular:

$$H_0(\vec{r}_j) = -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left[\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial}{\partial \rho_j} \left(\rho_j \frac{\partial}{\partial \rho_j} \right) + \frac{1}{\rho_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} \right] + \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{e^2 B^2 \rho_j^2}{8m^*(P)} - \sum_{k=1}^2 \frac{\eta_k e^2}{\varepsilon(P)|\vec{r}_j - \vec{\xi}_k|} + V_j(\rho_j, z_j, \varphi_j) \quad (2.22a)$$

las separaciones electrón-electrón y electrón-donador están dados por las siguientes expresiones:

$$|\vec{r}_2(\rho_2, \varphi_2, z_2) - \vec{r}_1(\rho_1, \varphi_1, z_1)| = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_2\rho_1 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + (z_2^2 - z_1^2)} \quad (2.22b)$$

$$|\vec{r}_j(\rho_j, \varphi_j, z_j) - \vec{\xi}_k| = \sqrt{\rho_j^2 + (\xi_k - z_j)^2} \quad (2.22c)$$

$V_j(\rho_j, z_j, \varphi_j)$ es el potencial de confinamiento, el cual es cero dentro de cada anillo e infinito por fuera de éstos. Hemos incluido los parámetros artificiales η_k con el propósito de analizar los diferentes casos límites, específicamente si $\eta_1 = 1$, $\eta_2 = 0$ (y los valores correspondientes de R_1 y R_2 son finitos), el sistema D_2^0 se transforma en un donador ionizado D^- . Una configuración de un donador neutro puede lograrse haciendo $\eta_1 = 1$, $\eta_2 = 0$, y $R_2 \rightarrow \infty$, mientras que un sistema de dos electrones corresponde a $\eta_1 = 0$ y $\eta_2 = 0$.

Los efectos de la presión hidrostática se han introducido en el problema a través de los parámetros geométricos del QR (radio de la sección transversal del QR, $R_t(P)$, radios interior y exterior $R_{1,2}(P)$ y distancia de las donadoras $\xi_{1,2}(P)$). Con el mismo procedimiento descrito en la sección 2.1 (ecuaciones (2.3) a (2.7)) En estas ecuaciones se ha incluido el hecho de que la presión hidrostática aplicada afecta las propiedades estructurales y electrónicas del material, específicamente las dependencias de la masa efectiva y la permitividad del material.

Los términos de la interacción Coulombiana que aparecen en la ecuación (2.21) nos impiden obtener expresiones analíticas para los estados propios, por lo que tenemos que implementar un método de solución aproximado, el cual se basa en la AA, ya que este modelo, no deja de lado las características reales de la nano-estructura que se desea estudiar. Después de desacoplar los movimientos rápido en la sección transversal del anillo del orbital lento alrededor de cada anillo, es posible obtener la siguiente ecuación bi-particular en la variable angular φ :

$$H = \sum_{j=1}^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(P)R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_j^2} + \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{e^2 B^2 R_j^2}{8m^*(P)} \right] + \bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1) + \sum_{j=1}^2 \bar{V}_j + \frac{\eta_1 \eta_2 e^2}{\varepsilon_2(P) |\vec{\xi}_2 - \vec{\xi}_1|} + 2E_0 \quad (2.23)$$

Siendo:

$$\bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1) = \left\langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} \left| \frac{e^2}{\varepsilon(P) |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \right| f_0^{(1)} f_0^{(2)} \right\rangle \quad (2.24a)$$

$$\bar{V}_j = - \left\langle f_0^{(j)} \left| \frac{\eta_1 e^2}{\varepsilon(P) |\vec{r}_j - \vec{\xi}_1|} + \frac{\eta_2 e^2}{\varepsilon(P) |\vec{r}_j - \vec{\xi}_2|} \right| f_0^{(j)} \right\rangle, \quad j = 1, 2 \quad (2.24b)$$

donde $f_0^{(j)} = f_0^{(j)}(\vec{\rho}_j)$ y E_0 son la auto-función exacta del estado base y sus correspondientes auto-valores de energías para un electrón confinado a moverse en un

pozo cuántico circular. Las funciones propias $f_0^{(j)}$ son expresadas en términos de funciones de Bessel. Los términos en las ecuaciones (2.24a) y (2.24b) denotan el potencial efectivo de la interacción electrón-electrón y electrón-impureza, respectivamente. Nótese que la ecuación (2.23) es equivalente a la ecuación (2.16) de la sección anterior, sólo que ellas difieren esencialmente en el potencial efectivo que gobierna el movimiento de rotación de los electrones. El movimiento unidimensional rotacional del sistema de los dos electrones bajo el potencial efectivo $\bar{V}(\varphi_2 - \varphi_1)$, con presión hidrostática aplicada y campo magnético, puede ser fácilmente analizado usando coordenadas relativas y de centro de masa: $\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ y $\Theta = \frac{R_1^2 \varphi_1 + R_2^2 \varphi_2}{R_1^2 + R_2^2}$. En este caso. El Hamiltoniano (2.23)

puede ser escrito como $H = H_\Theta + H_\Phi$, donde los términos relativos y de centro de masa satisfacen las ecuaciones:

$$H_\Phi \Phi_{m,s}(\varphi) = E_\Phi(m,s) \Phi_{m,s}(\varphi) \text{ y}$$

$$H_\Theta \Psi_M(\Theta) = E_\Theta(M) \Psi_M(\Theta) \text{ respectivamente.}$$

La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano H_Θ , puede ser resuelta exactamente. Mientras que la primera ecuación debe ser resuelta numéricamente con condiciones periódicas en la región $[-2\pi, 2\pi]$ definida por la expresión $\Phi_{m,s}(0) = (-1)^m \Phi_{m,s}(2\pi)$. Los números cuánticos $M=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ definen el momento angular de centro de masa y el momento angular relativo de los dos electrones, respectivamente. $s = +$ denota los estados pares o singletes mientras que $s = -$ denota los estados impares o triplete. La energía total del D_2^0 en términos de los números cuánticos puede ser escrita como $E(M, m, s) = E_\Theta(M) + E_\Phi(m, s)$.

Desde nuestro conocimiento, la configuración energética de un sistema D_2^0 confinado en un DQR concéntrico bajo presión hidrostática y un campo magnético no está disponible en la literatura. En consecuencia, para establecer la precisión y confiabilidad del procedimiento implementado en este trabajo, hemos calculado la energía para impurezas donadoras negativas (D^-) y neutras (D^0) confinadas en un “horn torus” (QHT), ya que estos sistemas en ciertos casos límites, tienden a ser equivalentes a puntos cuánticos esféricos (SQDs) [37-39] para los cuales se tienen datos con los cuales comparar. El QHT

puede ser obtenido de un torus cuántico cuando el radio medio y el radio circular de la sección transversa llegan a ser iguales (ver recuadro de la figura 2.11). La comparación mencionada anteriormente, se realiza sobre-estimando el alcance de AA, pero nos permite visualizar las tendencias de la energía del ión D^- y del D^0 para grandes valores del radio de la nano-estructura, aunque no exactamente igual, debido a la diferencia entre los volúmenes de QHT y SQD ($QHT \text{ volumen}/SQD \text{ volumen} = 2\pi^2 R^3 / \frac{32}{3}\pi R^3 \approx 0.59$). La tabla 2 resume las energías de enlace de un ion D^- como función del radio cuando los dos electrones están confinados en: un SQD (los resultados fueron tomados de la Ref. [40]) y en un QHT (resultados de este trabajo), respectivamente. Para obtener los valores de energía en un QHT del modelo D_2^0 , hemos hecho $\xi_1 = 0$ y $R_1 \cong R_t$ cuando, la posición de la segunda donador (ξ_2) tienda a infinito (o equivalentemente $\eta_2 = 0$) y el radio exterior e interior QRs se unen entre sí para volverse uno.

Tabla 2. Comparación entre las energías de enlace de un ion D^- en SQD [40] con los de un ion D^- en QHT. Con radios entre $2.8 a_0^*$ y $10 a_0^*$.

Radio (a_0^*)	$E_B(D^-)(R_y^*)$		
	S Q Dot (copiados de pantalla) Zhu et. al.[40]	Punto cuántico tipo Horn Torus Resultados tesis	$\Delta E_b^{D^-}$
2.8	0.563	0.240	0.323
4.0	0.400	0.180	0.220
5.2	0.317	0.146	0.171
6.4	0.258	0.122	0.136
7.6	0.215	0.106	0.109
8.8	0.180	0.092	0.088
10.0	0.148	0.086	0.062

De acuerdo a los valores listados en la tabla 2, podemos concluir que ambos conjuntos de resultados dependen fuertemente del tamaño de la nano-estructura. Entre más grande sea el radio medio de la nano-estructura más pequeña es la energía de enlace ($E_b^{D^-}$) del D^- .

Los resultados de un ion D^- confinado en SQD y QHT disminuyen monótonamente a medida que el radio cambia de $2.8a_0^*$ a $10.0a_0^*$. Sin embargo, hay una diferencia de energías ($\Delta E_b^{D^-}$) entre el $E_b^{D^-}$ en QHT y SQD. Este hecho puede ser relacionado con la diferencia entre los volúmenes de QHT y SQD; ya que entre más pequeño es volumen de la nano-estructura, más fuerte es la interacción de la función de onda con la pared del punto, lo cual desplaza hacia arriba los niveles de energía y, por tanto, disminuyen las correspondientes energías de enlace. Adicionalmente, se puede establecer a partir de los datos de la última columna de la tabla 2, correspondiente a $\Delta E_b^{D^-} = E_b^{D^-}|_{QHT} - E_b^{D^-}|_{SQD}$, que entre más grande sea el radio más pequeño es $\Delta E_b^{D^-}$, siendo esta diferencia de tan sólo centésimas de Rydberg efectivo cuando $R=10a_0^*$. Este hecho prueba que $E_b^{D^-}|_{QHT}$ tiene un comportamiento asintótico correcto para grandes valores del radio de QHT porque estos valores tienden a ser muy cercanos a los valores $E_b^{D^-}|_{SQD}$. Esta afirmación fue comprobada calculando $E_b^{D^-}|_{QHT}$ en un gran radio del QHT. Por ejemplo, cuando radio medio es igual a $18a_0^*$, la $E_b^{D^-}|_{QHT}$ es $0.0520R_y^*$, siendo este el mismo valor obtenido en Ref. [40] a $15a_0^*$. Este valor está tan sólo $0.002R_y^*$ por encima de la energía de enlace del D^- cuando está en semiconductores en el volumen, cuyo valor exacto es de $0.0518R_y^*$. Para complementar la calidad del modelo implementado, se ha calculado la estructura de energía para un D^0 confinada en in un QHT, y los resultados obtenidos se comparan con los previamente reportados en Ref. [41-42] para el mismo sistema en SQD.

En la figura 2.11 se muestra la variación de la energía de enlace del D^0 en un SQD ($E_b^{(SQD)}$ símbolo cuadrado vacío) y un QHT ($E_b^{(QHT)}$ símbolo cuadrado negro) como una función del radio de SQD ($2R$). La energía de enlace del D^0 es definida como la diferencia de energía del estado base del electrón sin impureza ($E_{10}^{(SQD)}$ símbolo de triángulo vacío para el caso SQD o $E_{10}^{(QHT)}$ símbolo de triángulo negro para el caso de QHT) y la energía del estado base con impureza incluida ($E_0^{(SQD)}$ línea puenteada sin símbolos para el caso SQD o $E_0^{(QHT)}$ la línea sólida sin símbolos para el caso QHT); es decir, $E_b^{(QD)} = E_{10}^{(QD)} - E_0^{(QD)}$.

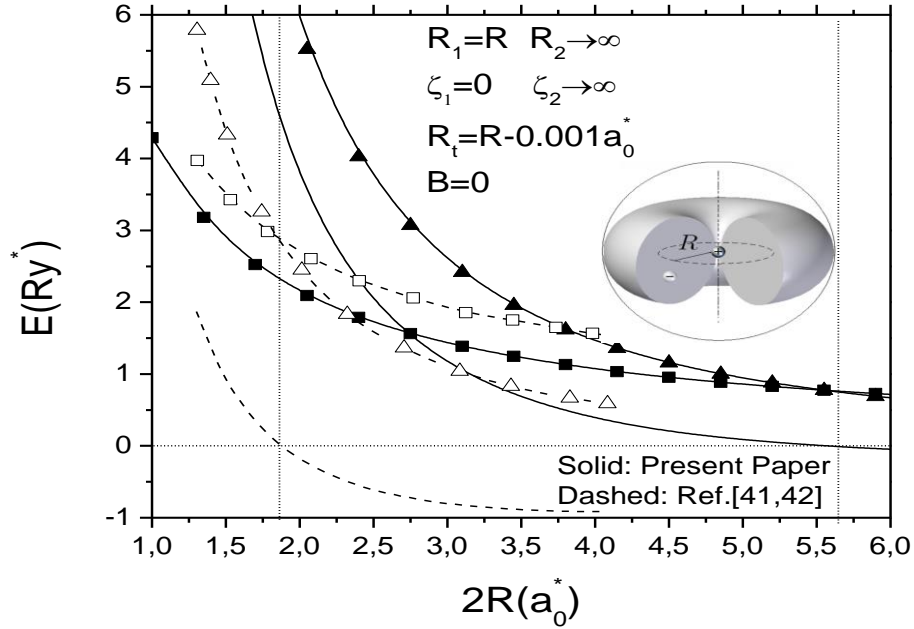


Figura 2.11. Comparación entre las energías de los estados $1s$, $2p$, y $2s$ de un donador neutro localizado en el centro de un SQD y el estado $1s$ de un donador neutro localizado en el centro de un QHT. Las curvas se han realizado como función del radio del SQD.

De acuerdo a la figura (2.11), es posible concluir que ambos conjuntos de resultados muestran cualidades muy similares dado que las curvas para un D^0 en un QHT son aproximadamente auto-paralelas a las correspondientes curvas del D^0 en un SQD. Independientemente de la morfología de la nano-estructura, la evolución de $E_0^{(QD)}$ con el radio del punto cuántico, es el resultado de una fuerte competencia entre la energía cinética del electrón y la atracción Coulombiana impureza-electrón. Ambas energías pueden llegar a ser numéricamente iguales para un valor crítico del radio del QD llamado punto de retorno en un punto cuántico de GaAs/AlAs ($R_{TP}^{(QD)}$). En este punto de retorno, la energía $E_0^{(QD)}$ se hace igual a cero. La figura (2.11) muestra que el punto de retorno para QHT es $R_{TP}^{(QHT)} = 5.650a_0^*$ mientras que este valor para un SQD es $R_{TP}^{(SQD)} = 1.852a_0^*$. A pesar de la similitud en las curvas de evolución de la energía $E_0^{(QD)}$ en QHT y SQD era de esperarse que los valores del punto de retorno no fuesen los mismos, debido a la siguiente razón: cuando confinamos una impureza hidrogenoide en un SQD, el electrón puede

acercarse al núcleo y por lo tanto, para el estado base, la nube electrónica se distribuye esféricamente alrededor del centro de carga positiva. Así, la distancia media del electrón-núcleo para un D^0 confinado en un SQD es muy pequeña, en comparación con el mismo sistema confinado dentro de un QHT. En consecuencia cuando el radio del QHT es incrementado, el cambio en el confinamiento espacial del electrón, produce un fortalecimiento de la interacción Coulombiana entre el electrón y el núcleo, dado que en virtud del principio de incertidumbre, la energía cinética del electrón decrece. Consecuentemente, el núcleo tira al electrón hacia el borde interior de la QHT. Sin embargo, la interacción de la función de onda del electrón con la barrera de potencial interna evita la ubicación de electrones en la vecindad del centro de carga Coulombiano, en contraste con lo que si sucede en el caso SQD. En consecuencia, la simetría esférica del estado base de la nube electrónica en QHT puede ser destruida. Esto llevaría a un incremento, tanto entre la distancia electrón-núcleo como en el valor del punto de retorno del estado base del D^0 en un QHT de GaAs/AlAs en comparación con el obtenido para un D^0 en SQD.

La ruptura de la simetría mencionada anteriormente, permite sugerir que el estado base del D^0 en el QHT tiende a comportarse como un estado 2p (sin simetría esférica) de un D^0 confinado en un SQD. Con respecto a este hecho en la figura (2.12) se muestra el estado base del D^0 en un QHT y los estados 1s, 2s, y 2p.

Los correspondientes puntos de retorno para los estados 1s, 2s y 2p de una impureza hidrogenoide localizada en el centro de un SQD son $1.833a_0^*$, $6.125a_0^*$, y $5.088a_0^*$, respectivamente, mientras que la energía del estado base en un QHT (línea punteada) se vuelve negativa cuando el radio es mayor que $5.172a_0^*$.

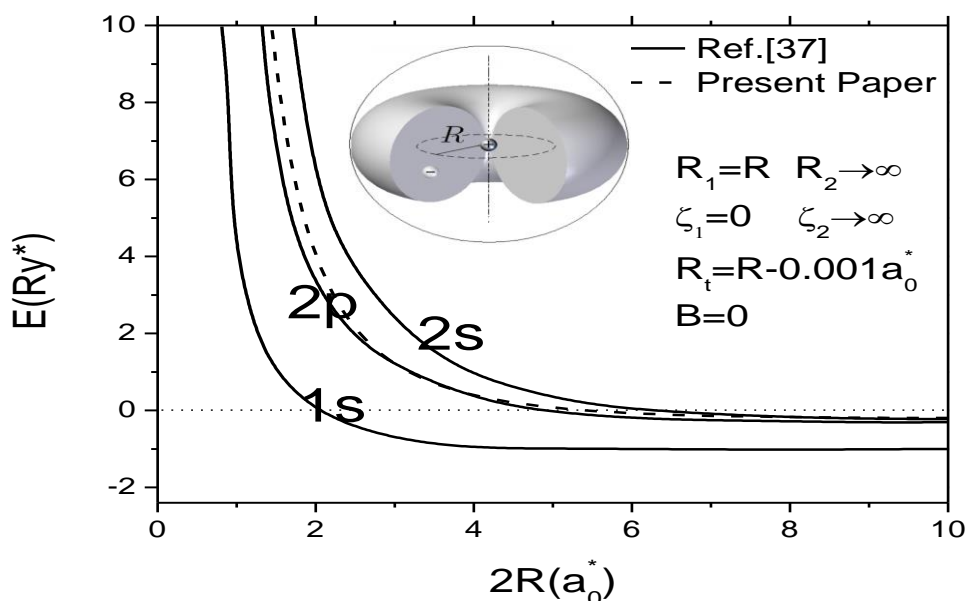


Figura 2.12. Comparación entre los estados de energía $1s$ -, $2p$ -y $2s$ de una impureza donadora neutra, localizada en el centro de una esfera confinada (línea sólida) y el estado $1s$ de una impureza donadora neutra localizada en el centro de un horn torus cuántico (línea a trazos). Las curvas de energía han sido realizadas en función del radio del punto cuántico esférico.

El valor del punto de retorno del estado base de un D^0 en un QHT es muy cercano al valor obtenido para el estado $2p$ en un SQD. Nosotros podemos ver que para valores del radio menores que $2.5a_0^*$ hay una ligera diferencia entre las dos curvas de los correspondientes estados $2p$. Sin embargo, para valores del radio superiores a $4.0 a_0^*$ las curvas tienden a fusionarse y se acercan monótonamente al valor correcto de la energía de estado $2p$ en el espacio libre que es igual a $0.25 R_y^*$ [37]. Estos resultados confirman la hipótesis anterior de que la pared interior de la QHT destruye la simetría esférica de la nube de estado fundamental electrónico, en comparación con el mismo sistema en un SQD. En consecuencia, la A.A. realmente nos permite obtener resultados comparables con otros métodos para grandes valores de sección transversal de un QR, lo cual ya se había postulado cuando comparamos los resultados listados en la tabla 2 para el ión D^- confinado en un SQD y en QHT. La tendencia correcta de nuestros resultados pueden ser

considerados como una prueba indirecta de la exactitud y la viabilidad de nuestro procedimiento numérico.

En la figura 2.13. Se muestra la energía del estado base de un D_2^0 como función del radio medio del anillo exterior, para tres valores diferentes de presión hidrostática, 0, 15, 30 kbar.

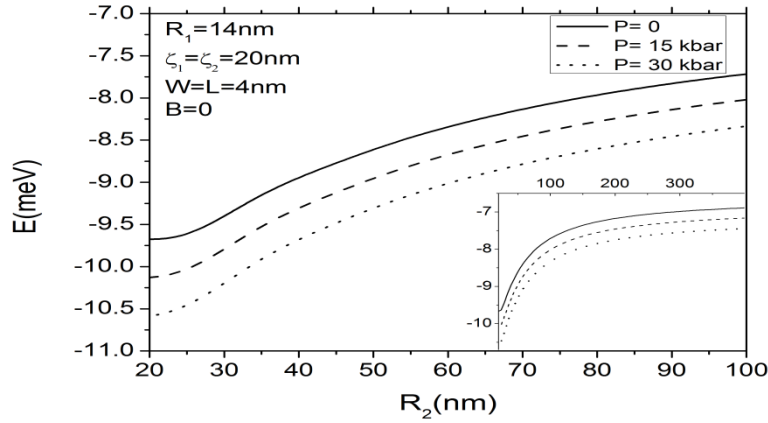


Figura 2.13. Energía del estado base de un D_2^0 como función del radio medio del anillo externo para diferentes valores de la presión hidrostática: 0, 15 y 30 kbar. El recuadro muestra la curva para grandes valores del radio medio exterior

Independientemente del valor de la presión aplicada cuando el radio medio del anillo más externo está entre 20 y 100 nm, se puede observar un incremento en la energía total del D_2^0 . Dos factores importantes influyen en este comportamiento. Por un lado, el debilitamiento de la interacción atractiva entre el centro de carga fijo y el electrón en el anillo exterior y por el otro, la disminución de la repulsión electrostática entre los dos electrones. Sin embargo, el comportamiento anterior tiende a cambiar cuando el radio central exterior es muy grande ($R_2 > 350\text{nm}$). En el recuadro de la figura 2.13. Se puede notar que las pendientes de las tres curvas tienden a cero para valores suficientemente grandes de R_2 . En esta situación particular, el QR exterior estará lejos del QR interior, de modo que la energía del D_2^0 tenderá asintóticamente a la energía del estado base del D_2^+ bajo presión hidrostática aplicada. En consecuencia, incrementando el radio medio exterior, se produce el siguiente proceso de disociación $D_2^0 \rightarrow D_2^+ + e^-$.

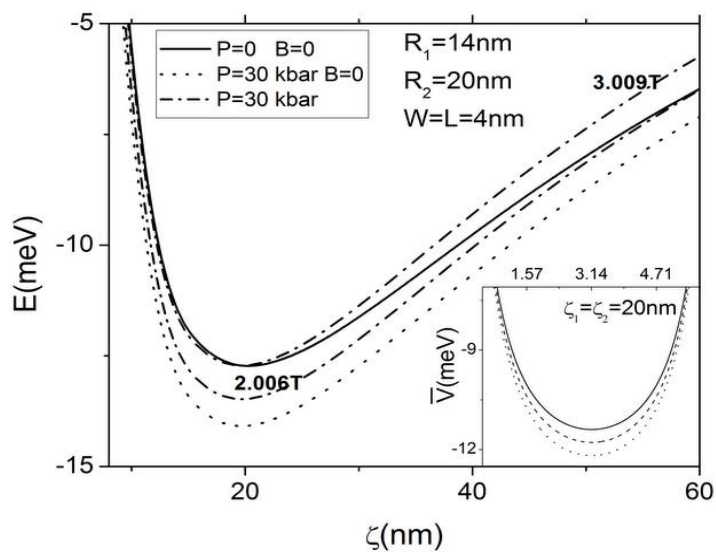


Figura 2.14. Energía total de un D_2^0 como función de la separación impureza-impureza para dos valores diferentes de presión hidrostática: 0 y 30kbar y tres valores diferentes de campo magnético: 0, 2.006, y 3.009T. El recuadro muestra el potencial efectivo correspondiente para D_2^0 a un campo magnético 0 y tres valores diferentes para la presión hidrostática: 0, 15, y 30 kbar (línea sólida, línea a trazos, y línea punteada respectivamente), y una distancia donador-donador igual a 40nm.

En la figura 2.14 se muestra el resultado del cálculo de la energía del estado base en función de la separación entre los dos centros de carga fijos que están simétricamente ubicados respecto del origen. Las curvas se realizan para dos valores diferentes de la presión hidrostática aplicada ($P = 0$ and 30 kbar) y tres valores diferentes de campo magnético ($B = 0, 2.006,$ and 3.009 T).

Sin importar la intensidad del campo magnético aplicado sobre el anillo cuantico doblemente acoplado (DCQR), los resultados muestran que todas las curvas de energía tienden a un mínimo muy bien definido cuando la separación entre impurezas es igual a 20nm. En este sentido, las curvas mostradas en la figura 2.14 muestran el comportamiento real de una molécula tipo H_2 libre. Sin embargo, las características fundamentales del H_2 están predeterminadas por la naturaleza, pero las características del D_2^0 pueden ser modificadas aplicando campos externos sobre el DCQR o cambiando los parámetros geométricos de QRs. Por ejemplo, el incremento de presión hidrostática aplicada hará que aumente la energía de disociación de las moléculas D_2^0 artificiales, por lo que serán más

estables en contra de la disociación térmica, cuando se compara con la molécula de hidrógeno libre. Esto se debe al hecho de que la profundidad del pozo de potencial efectivo $\bar{V}(\varphi)$, el cual gobierna los efectos de rotación de los electrones, incrementa al aumentar la presión hidrostática aplicada (ver el recuadro de la figura 2.14). Sin embargo, un incremento en la intensidad del campo magnético tiende a producir el efecto opuesto, porque entre más grande sea el campo magnético, más pequeña será la energía de disociación del D_2^0 , reduciéndose así la estabilidad del complejo molecular. Esto es una consecuencia directa del hecho de que el magneto-electrón tiende a moverse más rápido alrededor del eje z, y esto incrementa la energía cinética de los electrones, lo que conlleva a la identidad molecular, debido a la gran competencia entre la energía potencial atractiva y la energía cinética positiva del electrón. En general, los resultados mostrados en esta figura ilustran el amplio rango de posibilidades para sintonizar la energía de disociación del D_2^0 en tiempo real cambiando la intensidad de los campos externos.

En la figura 2.15 se muestra la energía de enlace del D_2^0 como una función del radio medio del anillo más externo para tres valores diferentes de la presión hidrostática 0, 15, y 30 kbar.

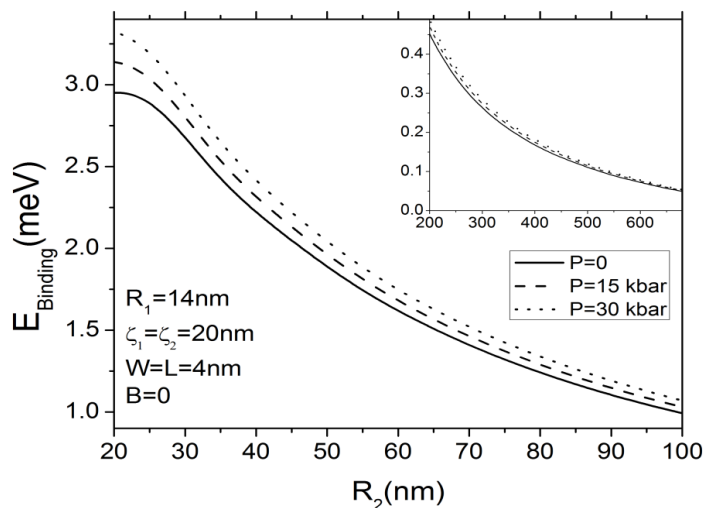


Figura 2.15. Energía de enlace como función del radio medio exterior.

Como era de esperarse, la energía de enlace del D_2^0 disminuye a medida que aumenta el valor del radio medio del anillo exterior. Esto ocurre porque el electrón más externo, progresivamente se ubica más lejos de los centros de carga perturbados, y como

consecuencia se vuelva más independiente, con un comportamiento regido sólo por el efecto de su confinamiento del QR externo. Adicionalmente, la energía de enlace del D_2^0 incrementa con el aumento de la presión hidrostática por la razón previamente discutida en la figura 2.14. Aunque todas las curvas en la figura 2.15 se ven casi paralelas cuando los valores de radio medio externo oscilan entre 20 a 100 nm, en el correspondiente recuadro se ve que este aparente comportamiento desaparece cuando el radio medio aumenta considerablemente, dado que todas las curvas esencialmente se solapan en 600 nm.

Finalmente, en la figura 2.16 se muestra la evolución de los niveles de energía total del D_2^0 como funciones de la intensidad del campo magnético. Los estados de energía $E(M, m, s)$ graficados en esta figura, se han etiquetado así: $a(0,0,0)$, $\pm b(\pm 1,1,1)$, $\pm d(\pm 2,0,0)$, $\pm h(\pm 3,1,1)$, $\pm m(\pm 4,0,0)$.

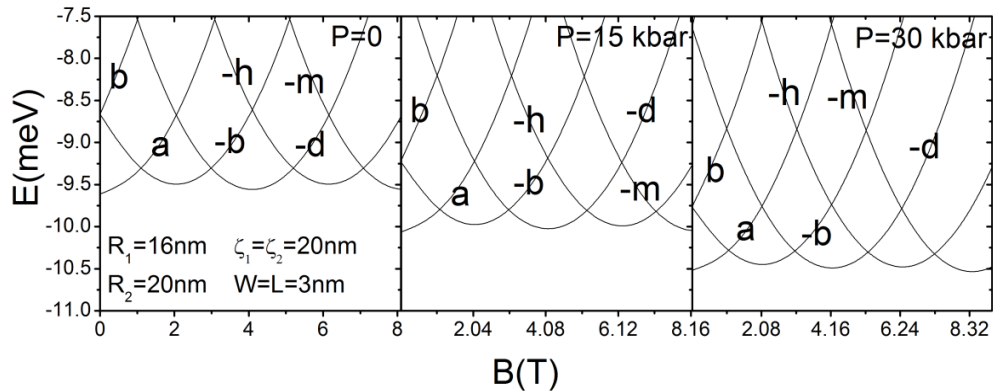


Figura 2.16. Niveles de energía del D_2^0 como función del campo magnético para tres valores de presión hidrostática.

Las oscilaciones AB que se muestran en esta gráfica, se ve que son moderadamente sensibles al incremento de la presión hidrostática, ya que su aumento conduce a un pequeño incremento en el período de oscilación. Esto pasa porque el período es fuertemente dependiente del tamaño del anillo cuántico y la aplicación de presión hidrostática modifica las dimensiones del QR. Además, la presión hidrostática desplaza

hacia abajo los estados base del nivel de energía. Por ejemplo, una presión $P = 15$ kbar, disminuye la energía del estado base en comparación con el caso de la presión cero en aproximadamente un 4%, mientras que la presión $P = 30$ kbar disminuye en casi 8% la energía del estado base. Este resultado sugiere que el estado base del D_2^0 de los DCQRs disminuye linealmente con la presión aplicada, siendo este comportamiento similar al previamente observado en pozos cuánticos [37-39, 41-44].

Capítulo 3

Sistema de una partícula en una cinta cuántica de altura variable.

Durante los últimos años las estructuras semiconductoras de tamaño nanométrico con diferentes topologías, han sido motivo de gran interés, tanto teórico como experimental, debido a sus potenciales aplicaciones en opto-electrónica y en la generación de sistemas nano-electro-mecánico. Sin embargo, estas nano-estructuras deben adecuarse a las tecnologías planares que buscan posicionar un número mayor de elementos de alto rendimiento que provean diversas funciones y las cuales se localicen en superficies planas muy pequeñas. Intentando buscar dar solución a las dificultades referidas anteriormente, recientemente un grupo de investigadores encabezado por Y. Prinz [45-46], ha propuesto y obtenido en el laboratorio un método para fabricar nanotubos de InGaAs-GaAs. El método se basa en el uso de unas pocas monocapas de GaAs, las cuales se enrollan sobre sí mismas cuando se depositan sobre InGaAs, debido al desacople existente entre sus parámetros de red. Como resultado del enrollamiento se obtienen nanotubos cuyo diámetro puede llegar a ser del orden de unos 4nm y sus alturas son variables. Estos nanotubos o cintas cuánticas semiconductoras pueden usarse para examinar fenómenos de interferencia, la cual es un paradigma de la coherencia de fase de la mecánica cuántica. Entre los fenómenos que son una consecuencia directa de la coherencia de fase se puede mencionar el efecto Aharanoov-Bohm y la existencia de corrientes persistentes sin disipación de ningún tipo.

Las cintas cuánticas obtenidas por Y. Prinz pueden visualizarse como sistemas superficiales capaces de albergar diferentes tipos de portadores de carga y por esta razón, se refieren a estas cintas como un gas bidimensional de electrones. Recientemente estas cintas han recibido un gran impulso a raíz del descubrimiento de los nanotubos de carbón.

En la mayoría de estudios teóricos realizados sobre estos nano-tubos, se parte de que son superficies completamente lisas y de altura constante. Sin embargo, resulta evidente que estas superficies pueden, con un alto grado de probabilidad, ser de naturaleza corrugada, ya que durante el proceso de formación, el material que se deposita sobre el sustrato, es literalmente desprendido o arrancado de él y por ello no se pueden garantizar superficies completamente lisas. Esta observación parece estar en concordancia con los resultados experimentales realizados sobre anillos cuánticos semiconductores por Granados [47] y Degani [48] quienes han demostrado que estas nanoestructuras presentan superficies rugosas en lugar de ser de forma perfectamente circular y de altura constante.

El objetivo de este capítulo es estudiar la influencia de una altura variable o irregular sobre el espectro de energía de una partícula que está obligada a moverse dentro de una cinta cuántica de GaAs de altura variable, tal como la que se muestra en la figura 3.1. El sistema completo se encuentra bajo la influencia de un campo magnético paralelo al eje de la cinta.

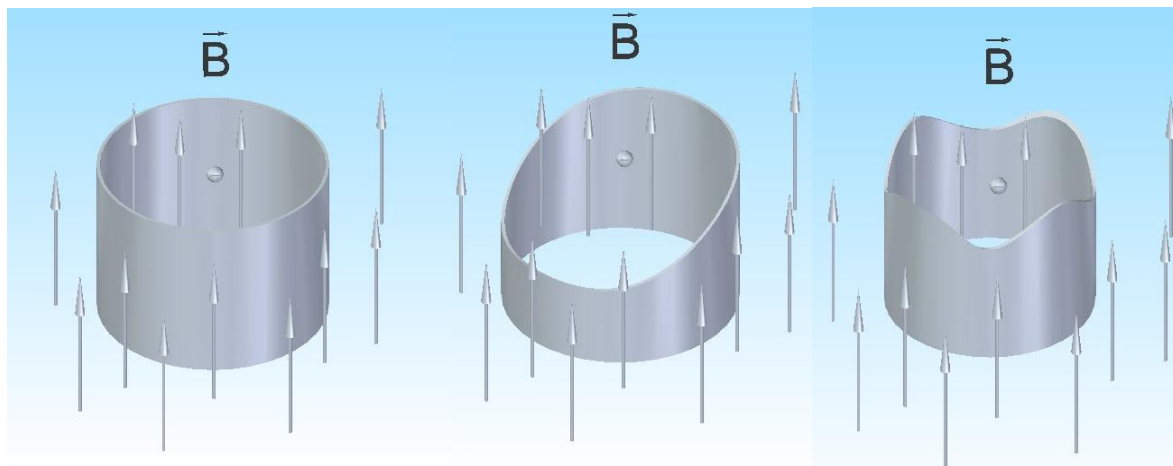


Figura 3.1 Representación esquemática de varias cintas cuánticas $n=0,1, 4$ en presencia de campo magnético

Con el propósito de modelar la variabilidad de la altura, en esta tesis se tomará una función armónica de la forma:

$$h = h_o \{ (1 - \alpha(1 - \cos(n\varphi))) \}^{1/2} \quad (3.1)$$

En esta expresión h_o representa la altura de la cinta cuántica en el caso en que ésta estuviera exenta de cualquier defecto y fuera de altura constante. El parámetro n el cual tomaremos igual a un número entero positivo 1, 2,3,... sirve para definir el número de protuberancias que tiene la cinta, mientras que con el parámetro α es posible controlar la altura o profundidad de la deformación estructural que presenta la cinta, la cual también podríamos llamar protuberancia.

Como puede observarse, cuanto mayor es α , sin importar el número de protuberancias, se tiene que la profundidad del valle o la altura de la protuberancia es mayor. Este hecho tendrá un efecto en la distribución de los niveles, ya que como se sabe de los resultados básicos de la mecánica cuántica, se tiene que la energía y el número de niveles es fuertemente dependiente de la altura y el ancho del pozo.

Por razones de simplicidad matemática, se usará el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$, el Rydberg efectivo $R_y^* = \hbar^2 / 2m^* a_0^{*2}$ y el primer nivel de Landau expresado en Rydberg, $\gamma = eB\hbar / 2 m^* c R_y^*$ como unidades adimensionales de longitud, energía e intensidad del campo magnético.

El Hamiltoniano adimensional para el electrón en la cinta cuántica puede expresarse como:

$$H = -\frac{1}{R_c^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R_c^2}{4} + V_{con}(z) \quad (3.2)$$

Donde $V_{con}(z)$ es el potencial de confinamiento, el cual es cero cuando $0 < z < h(\varphi)$ e infinito por fuera de la cinta y R_c radio de la cinta. El hecho de que la altura dependa de la variable angular, impide obtener los autovalores exactos de la energía con Hamiltoniano (3.2) y en consecuencia se debe implementar un método aproximado de cálculo.

Teniendo presente que en general es posible obtener cintas y anillos cuánticos de diferente altura y que ésta es mucho menor que su radio R_c . Esta condición facilita la separación de

variables sobre la base de la aproximación adiabática descrita en los capítulos anteriores, lo que permite obtener una ecuación de Schrödinger en la variable angular φ dada por:

$$\left\{ -\frac{1}{R_c^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R_c^2}{4} + \frac{\pi^2}{h^2(\varphi)} - E \right\} \Psi(\varphi) = 0 \quad (3.3)$$

Donde el término $\frac{\pi^2}{h^2(\varphi)}$ corresponde a los autovalores de la energía que surgen al resolver el movimiento rápido del electrón en dirección z, pero a la vez definen el potencial efectivo $V_{ef}(\varphi)$ de confinamiento al cual se encuentra sometido el electrón en su movimiento de rotación. En la figura (3.2) se muestran estos perfiles de potencial para diferentes profundidades y número de protuberancias.

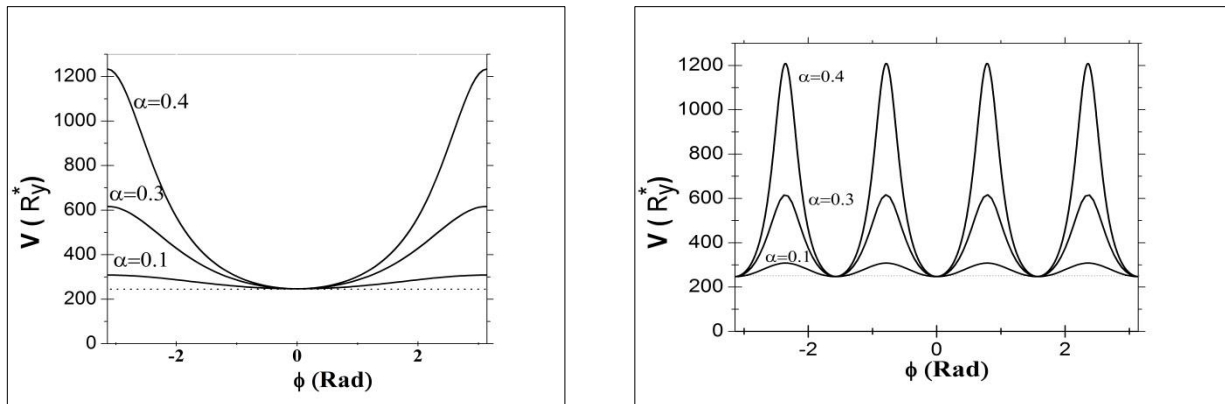


Figura 3.2 Perfiles del potencial de confinamiento para un número de protuberancias $n=1$ (imagen izquierda) y $n= 4$ (imagen derecha) con diferentes valores del parámetro $\alpha = 0.1 , 0.3$ y 0.4

Se puede ver que el número de protuberancias no modifica la altura del potencial pero si cambia su ancho, este hecho implica que al aumentar el número de éstas, también debe modificarse el ancho del pozo, lo que conlleva a un incremento en el valor mínimo de energía que puede tener la partícula dentro de la cinta cuántica

La presencia del término $\pi^2/h^2(\varphi)$ en la ecuación (3.3), en general, impide la obtención de una solución exacta y por ello debe implementarse un método de solución aproximado que en el caso de la presente tesis se hará mediante el uso de la diagonalización matricial.

Dado que el electrón en su movimiento de rotación tiene funciones de onda de tipo exponencial, es lógico proponer como función de onda en el caso de cintas con deformaciones estructurales una expansión en series de Fourier :

$$\Phi(\varphi) = \sum_{m=-N}^N C_m e^{im\varphi} \quad (3.4)$$

Aplicando principio variacional de Schrödinger [29]

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m',m} C_m^* e^{-im'\varphi} | \hat{H} | C_m e^{im\varphi} d\varphi \quad (3.5)$$

Se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\sum_{m=-N}^N \sum_{m'=-N}^N C_m C_m^* (E \delta_{mm'} - A_{mm'}) = 0 \quad (3.6)$$

Donde

$$\int_{-\pi}^{\pi} E_0(\varphi) e^{-im'\varphi} e^{im\varphi} d\varphi = V_{m'-m}(2\pi) \quad (3.7)$$

$$A_{m'm} = m^2 \delta_{mm'} - i\gamma m \delta_{mm'} + V_{m'-m} \quad (3.8)$$

En consecuencia, la ecuación secular de orden N que garantiza soluciones diferentes a la trivial es:

$$\det | E \delta_{mm'} - A_{mm'} | = 0, m, m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N \quad (3.9)$$

Una vez solucionada esta ecuación se pueden obtener los autovalores de la energía del sistema electrónico confinado en una cinta cuántica con deformaciones estructurales o protuberancias de diferente ancho y profundidad.

Con el propósito de comprender cuál es la influencia que tienen las variaciones estructurales sobre el espectro de energía, es necesario, como punto de comparación, calcular el espectro de energía para el electrón en una cinta cuántica ideal; es decir, de altura constante. En la figura 3.3 se muestra la evolución de la energía con el campo magnético γ en el caso en que $\alpha = n = 0$.

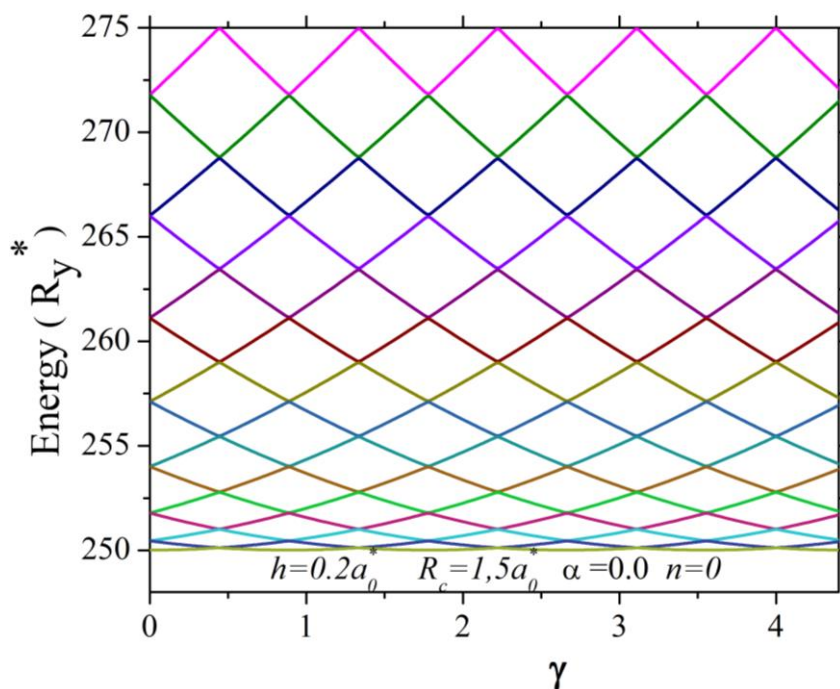


Figura 3.3 Evolución del espectro de energía para un electrón en una cinta cuántica.

Como es bien sabido y ya se ha mostrado en las secciones anteriores, la existencia del campo magnético produce una división de los niveles de energía cuyo momento angular m tiene signos diferentes, de un modo tal que cuanto mayor es la intensidad del campo más significativa es la división producida por el término paramagnético (término proporcional a la primera potencia de γ en el Hamiltoniano (3.2)). Como ya sabemos el comportamiento de estas curvas está gobernado por la competencia entre los términos diamagnético ($\sim\gamma^2$) y

paramagnético ($\sim\gamma$). Es evidente que para pequeños valores del campo se da una primacía del término paramagnético, pero cuando el campo crece se impone el diamagnético. Esta es la razón por la cual al principio todas las curvas son cuasi-lineales, pero luego se tornan parabólicas. Puede notarse que el estado de mínima energía $E_{min} = \frac{\pi^2}{h_0^2} = 250 R_y^*$, el cual corresponde al estado de mínima energía para una partícula en pozo de potencial de altura infinita y de ancho $h_0 = 0.2a_0^*$. Se puede demostrar que los mínimos de energía se presentan para aquellos puntos donde el campo magnético es $\gamma = 2m/R_c^2$. Para el caso presente en que $R_c = 1.5 a_0^*$, $\gamma = \frac{2m}{2.25} = 0.88 m$ y por ello se ve que los mínimos están en los puntos $\gamma = 0.88, 1.76, 2.64, \dots$. Esta regularidad con la que aparecen los mínimos permite demostrar que el periodo de oscilación de ellos es $\tau = 2/R_c^2$. Para el caso presente este valor es $\tau = 0.88$.

Ahora que ya se conoce la estructura del espectro energético para el electrón en una cinta de altura uniforme, se puede ver el efecto que sufre el patrón de diamantes mostrado en la figura 3.3 al cambiar el parámetro α . Para ello se han realizado dos grupos de curvas que se muestran en la figura 3.4 y las cuales se han hecho para una protuberancia y dos valores diferentes del parámetro α : 0.1 y 0.2, respectivamente.

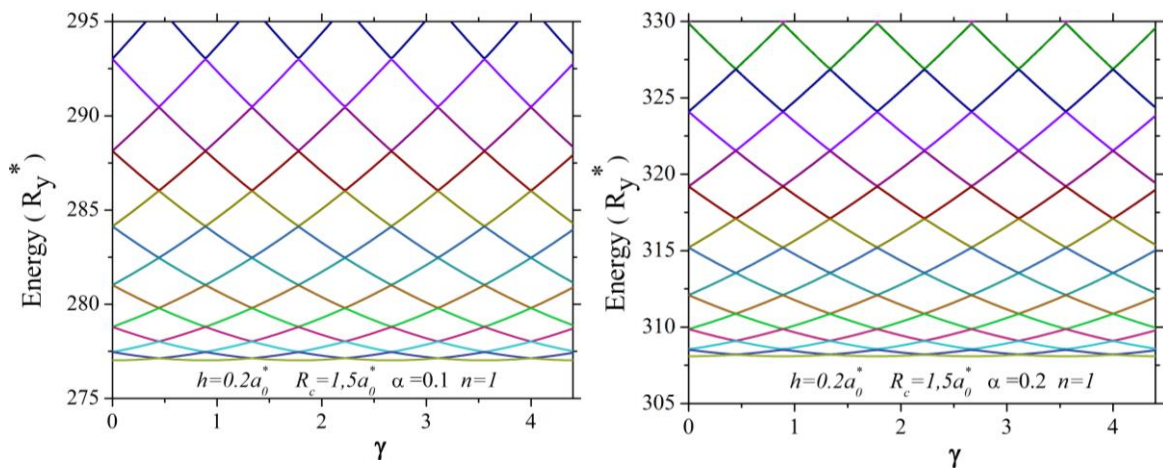


Figura 3.4 Evolución del espectro de energía para un electrón en una cinta cuántica con una protuberancia y dos valores diferentes de α : 0.1 (figura izquierda) y 0.2 (figura derecha)

Se puede observar que el patrón de diamantes no sufre un cambio apreciable en comparación con el mostrado en la figura 3.3. Este hecho era de esperarse ya que al observar la profundidad de la protuberancia en la figura 3.2, se puede inferir que éstas deben ser muy pequeñas y que en consecuencia no puede confinar significativamente la partícula. Sin embargo, vale la pena destacar que la presencia de la rugosidad en la altura conlleva a un desplazamiento hacia arriba del nivel de mínima energía. Esto se debe esencialmente a que al aumentar el valor de α , el electrón se siente más confinado ya que la altura promedio de la cinta, en comparación con el caso constante, se ha reducido y por ende el término energético $\pi^2/h^2(\varphi)$ debe crecer.

Para ver el efecto de la profundidad de la protuberancia sobre el espectro de energía, se incrementa el valor de α y se consideran otros dos valores 0.3 y 0.4. Los resultados de cálculo con estos dos nuevos valores se muestran en las figuras 3.5 y 3.6, respectivamente, las cuales se han hecho para tres valores diferentes de protuberancias $n = 1, 2$ y 4.

En el caso mostrado en la figura 3.5 a medida que se aumenta el número de protuberancias la energía del estado fundamental asciende. Podría pensarse que este aumento es insignificante, pero no lo es. Debe tenerse en cuenta que a esta energía se le ha sumado la correspondiente energía del electrón al moverse en dirección radial, la cual es bastante grande ya que la dimensión de la cinta en dirección z es realmente pequeña. Los valores obtenidos para la energía del estado base en los tres casos de la figura son los siguientes: $289.2 R_y^*$ ($n = 1$), $290.7 R_y^*$ ($n = 2$) y $293.2 R_y^*$ ($n = 4$). Para hacer evidente que la diferencia entre estas energías es considerable, se listarán sus valores en meV, así: $\Delta_{21} = 8,75 meV$, $\Delta_{32} = 14,25 meV$ y $\Delta_{31} = 23,40 meV$. Estas energías son mucho mayores que las necesarias para ionizar un átomo de hidrógeno confinado en un anillo toroidal.

Quizá el aspecto más interesante de estas curvas proviene de la alteración que sufre el patrón de curvas con relación a los casos anteriores debido al incremento en la profundidad de las protuberancias. En este caso se observa que la amplitud de la oscilación en el estado de mínima energía se disminuye dando lugar a estados más aplanados. Un aspecto relevante de estas curvas es como el aumento del número de protuberancias se ve reflejado en la formación de estados trenzados, donde el número de trenzas depende del número de

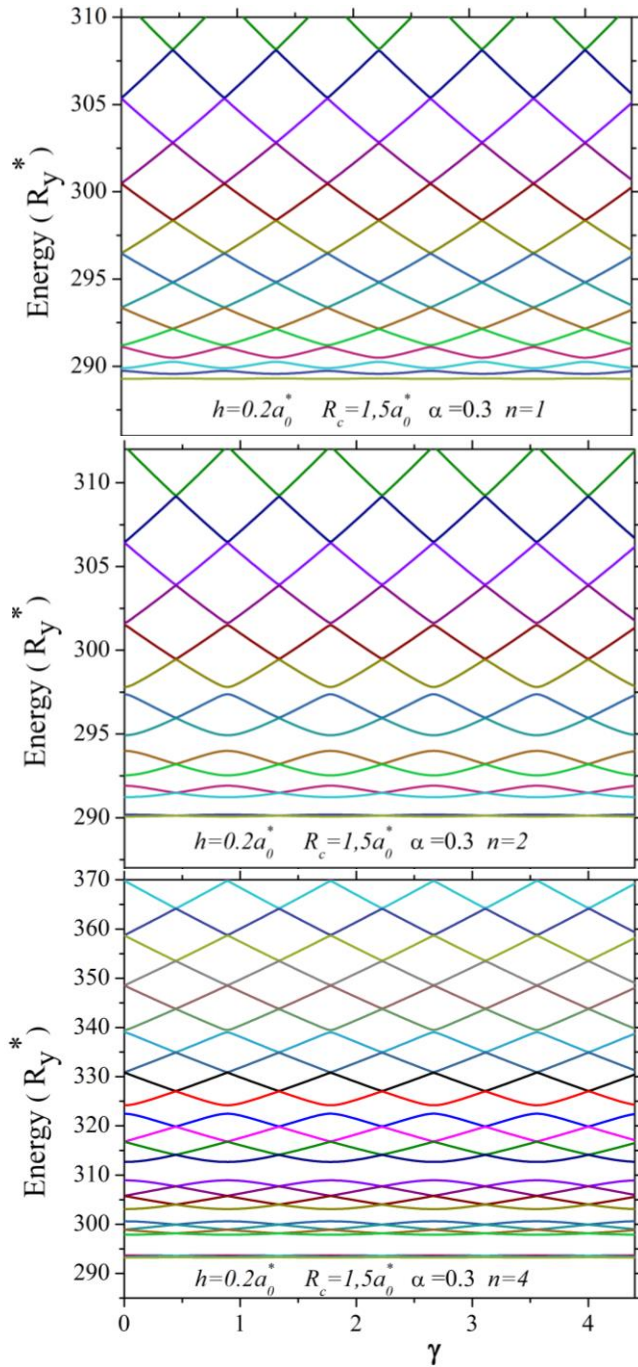


Figura 3.5 Evolución del espectro energético de un electrón en una cinta con parámetro de rugosidad $\alpha = 0.3$ y tres protuberancias $n = 1, 2, 4$

protuberancias, es decir, cuando $n = 1$ se tiene un único nivel de energía, el cual está asociado con la mayor probabilidad de localización electrónica en aquel punto donde la protuberancia tiene su máxima altura, ya que el electrón se siente menos confinado en la vecindad de la protuberancia. Es evidente que la distorsión de la altura de la cinta conlleva a una alteración de las oscilaciones Aharonov-Bohm similar a las presentadas por Pershin y Piermarochi [49] en anillos unidimensionales que presenta una distorsión en su radio. No obstante, los resultados de esta tesis difieren a los de Pershin y Piermarochi ya que la distorsión de la oscilación Aharonov-Bohm está asociada con la existencia de protuberancias debidas a variaciones en la altura. En este sentido, la variación en el patrón de oscilaciones es cualitativamente similar a los efectos de desorden descritos por H. F. Cheung [50] en su estudio de las corrientes persistentes en anillos pequeños metálicos unidimensionales.

Es interesante notar que al aumentar el número de protuberancias a 2 y 4, la densidad de probabilidad debe ser la misma en la vecindad de cada protuberancia, hecho que se manifiesta con la aparición de trenzas de dos estados

para el caso de dos protuberancias (panel intermedio) y de cuatro trenzas para el caso de cuatro protuberancias (panel inferior). Este entrecruzamiento de los niveles más profundos conlleva al surgimiento de estados altamente degenerados muy aplanados. No obstante aún presentan una pequeña amplitud, lo cual significa que todavía son ligeramente sensibles al campo magnético y por ende deben contribuir muy débilmente a la generación de corrientes persistentes. Sin embargo, debe suceder, por el comportamiento observado en las curvas anteriores, que al aumentar la profundidad de la protuberancia, debe presentarse una mayor localización de los estados más profundos del electrón en la cinta cuántica, y esta es la razón de haber realizado el grupo de curvas que se muestran en la figura 3.6.

La estructura del espectro de energía para el electrón en la cinta que se muestra en la figura 3.6, sin importar la profundidad y el número de protuberancias, se caracteriza por ser absolutamente diferente a los espectros mostrados hasta ahora..

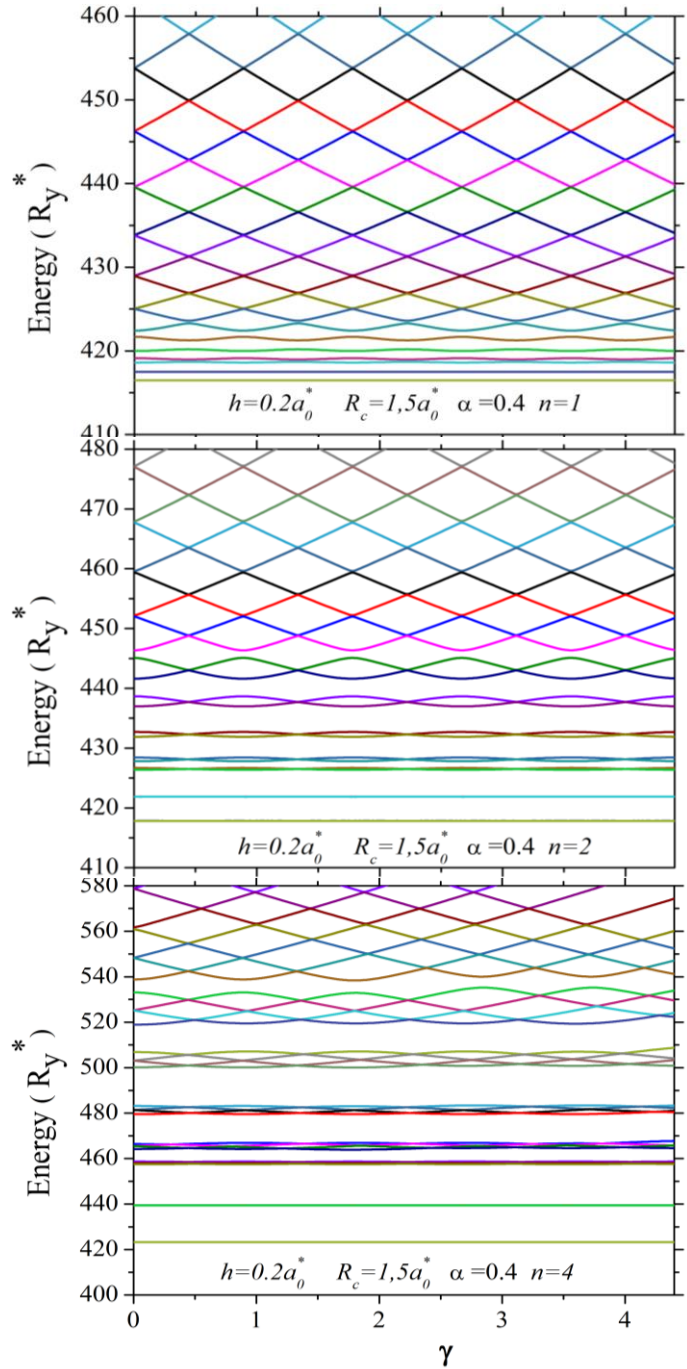


Figura 3.6 Evolución del espectro energético de un electrón en una cinta con parámetro de rugosidad $\alpha = 0.4$ y tres protuberancias $n = 1, 2, 4$

En el caso particular de una cinta uniforme, el espectro de energía correspondiente es el que mostró en la figura 3.3, los niveles presentaban una serie de intersecciones de curvas de naturaleza parabólica caracterizadas por valores positivos y negativos del número cuántico que caracteriza al momentum angular orbital del electrón. En los diferentes paneles de la figura 3.6 se puede apreciar un distanciamiento de los patrones de la figura 3.3 debido a la existencia de estados altamente localizados, los cuales se caracterizan por ser invariables ante cambios en la intensidad del campo magnético. A pesar de que en los tres paneles se aprecia solo dos líneas horizontales, es necesario manifestar que en el caso de dos protuberancias (panel intermedio), lo que aparenta ser una línea horizontal en realidad son la superposición de dos estados, mientras que en el caso de cuatro protuberancias son la superposición de cuatro estados. En consecuencia el número de protuberancias define a su vez el número de estados que se superponen y por ende el grado de degeneración, es decir, la cinta con dos y cuatro protuberancias es doble y cuádruplemente degeneradas. Nótese que la estructura de los estados superiores es diferente, ya que en ellos se observa un entrecruzamiento, formándose en grupos trenzados de acuerdo al número de protuberancias, es decir, que para el caso de dos y cuatro protuberancias, se observan varios grupos de trenzas formados por dos o cuatro estados. Nótese que la transición de aquellos estados localizados a los estados trenzados, es más lenta, energéticamente hablando, cuanto mayor sea la profundidad de la protuberancia, ya que entre más profunda es la protuberancia mayor es la separación entre estados contiguos. En consecuencia, a partir de una cierta profundidad crítica de la protuberancia, ésta determina la existencia de dos estados completamente diferentes para la partícula en la cinta. Los primeros caracterizados por ser independientes del campo magnético y los segundos por agruparse en trenzas, pero siendo sensibles a las variaciones del campo magnético. El hecho de que los primeros no dependan del campo magnético indica, de acuerdo a la forma de calcularse las corrientes persistentes en anillos [49], que ellos no hacen ningún aporte a la corriente. En consecuencia estos estados estacionarios son de naturaleza vibracional, y se ubican dentro del potencial efectivo, razón por la cual, de acuerdo a la mecánica clásica, deben presentar dos puntos de retorno en aquellos puntos donde chocan con las paredes del potencial de confinamiento y se reflejan. No obstante, los estados trenzados que se encuentran inmediatamente por encima de los estados localizados, experimentan una ligera oscilación

y por esta razón son ligeramente sensibles al campo, lo que implica que deben contribuir muy débilmente a la formación de corrientes persistentes, quizá asociadas con el tunelamiento entre protuberancias. Nótese que cuánto mayor es el número de protuberancias, mayor es el número de estados localizados, pero también más alta es la energía. Por ejemplo, para $n = 1$ la energía del estado base es de $416.5R_y^*$, para $n = 2$ la energía es de $417.8R_y^*$ y para el caso $n = 4$ la correspondiente energía del estado base es de $423.2 R_y^*$.

El segundo grupo está compuesto por aquellos estados que están por encima de los grupos de estados trenzados y por ende por fuera del potencial de confinamiento, lo que posibilita su rotación normal dando lugar a patrones de oscilaciones Aharonov-Bohm similares a los obtenidos para cintas sin deformaciones y contribuyendo por supuesto a la generación de corrientes persistentes. Este grupo ilimitado de estados tiene su mínimo de energía por encima del potencial efectivo de confinamiento angularmente dependiente que afecta el estado rotacional del electrón. Estos estados se caracterizan por un valor diferente del número cuántico de momentum angular y en consecuencia deben definir estados puramente rotacionales.

Finalmente, es preciso notar que el aumento de la profundidad originó la aparición de estados localizados, uno por cada protuberancia. En consecuencia, cada una de estas deformaciones puede entenderse como un átomo virtual que aporta un estado localizado o un estado trenzado, cuando la amplitud de oscilación es muy pequeña para estos estados trenzados, al estar muy aplanados tienden a formar una banda de energía permitida. En consecuencia, al tener un número muy grande de protuberancias es posible simular un cristal de naturaleza uni-dimensional.

Conclusiones.

- Al comparar los resultados obtenidos en esta tesis con los datos reportados en la bibliografía, es posible establecer que los métodos implementados para calcular el espectro de energía de diferentes sistemas de una y dos partículas sobre la base de la aproximación adiabática (A.A), la diagonalización matricial y el barrido trigonométrico, resultan ser acertados y precisos ya que se ha establecido la correcta convergencia en los casos límites. En consecuencia, estos métodos permiten dar soluciones a un bajo costo computacional y matemático y pueden ser susceptibles de implementar para estudiar otro tipo de sistemas siempre y cuando estén confinados en anillos muy estrechos.
- En los sistemas estudiados se evidenció que la aplicación de la presión hidrostática favorece en gran medida la estabilidad de las moléculas, ya que permite aumentar las interacciones atractivas entre electrón y donador, lo que se traduce en un aumento sustancial de la energía de disociación.
- El estudio realizado sobre anillos con deformaciones morfológicas en cintas cuánticas, permite establecer que el espectro energético tiene una fuerte dependencia con la cantidad de rugosidades y la profundidad de las protuberancias, dando lugar al surgimiento de estados localizados que destruyen el patrón de oscilaciones Aharanov-Bohm y a la vez no contribuyen a la generación de corrientes persistentes igual que ocurre en sistemas desordenados.
- Se estableció que es posible modificar o alterar las propiedades esenciales de las moléculas naturales cuando ellas están fuertemente confinadas en anillos cuánticos muy estrechos variando los parámetros geométricos característicos de los anillos o cintas cuánticas
- El establecimiento de diferentes configuraciones como anillos, anillos acoplados verticalmente y anillos concéntricos nos permiten demostrar que la razón entre los radios medios de los anillos y la separación entre estos, constituyen un grado de libertad adicional en el propósito de predeterminedar las propiedades electrónicas de los sistemas de una y dos partículas de acuerdo a sus potenciales aplicaciones tecnológicas.

- La posición de las impurezas dentro de las nano-estructuras estudiadas, constituye un parámetro fundamental a la hora de determinar las energías de disociación y longitudes de equilibrio de los sistemas moleculares, debido a la fuerte competencia entre las interacciones atractivas y repulsivas, permitiendo obtener sistemas artificiales más estables que los sistemas moleculares naturales

Eventos.

- **Título ponencia:** Hydrostatic pressure and temperature effects on the ground state coupled donors in GaAs- $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum well.
Autores Y.A Suaza, M. R. Fulla, - J. H. Marín, W.Gutiérrez-
Evento: High Pressure in Semiconductor Physics (HPSP 16), Ciudad de México 6 – 8 de Agosto de 2014.

- **Título ponencia:** Combined effects of hydrostatic pressure, temperature and concentration in vertically stacked GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum magnetic-rings
Autores: Y.A Suaza, M. R. Fulla, - J. H. Marín, W.Gutiérrez.
Evento: Congreso nacional de ingeniería física, Popayán Colombia 22-26 Septiembre de 2014.

Publicaciones.

1. Yoder Alberto Suaza, Marlon Rincón Fulla, Jairo Humberto Marín. Hydrostatic pressure and magnetic field effects on the energy structure of D- ion confined in a toroidal quantum ring. *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia N. °71 pp. 213-220, junio, 2014*
2. Y.A.Suaza, M.R-Fulla, J.H.Marín, C.A.Duque, M.E.Mora-Ramos. States of an on-axis two-hydrogenic-impurity complex in concentric double quantum rings. *Physics Letters A. Junio 2014, Pag. 2297-230.*
3. Yoder Alberto Suaza, Marlon Rincón Fulla, Jairo Humberto Marín. Two-electron energy levels in coupled nano-rings: the hydrostatic pressure and magnetic field effects. *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia N. °73 pp. 166-175, December, 2014.*

Bibliografía.

1. P. YU AND M. CARDONA, Fundamentals of Semiconductors, Berlin, Springer-Verlag, 1996; J. Singh, Physics of Semiconductors and their Heterostructures, Singapore, 1993; V. Shchukin, N. N. Ledentsov, and D. Bimberg, Epitaxy of Nanostructures, Springer, Berlin/Heidelberg, 2003.
2. PETER MICHLER, Single Semiconductor Quantum, Springer-Verlag, Berlin, 2009
3. MOHAMED HENINI, Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for novel Devices in Photonics and electronics, Elsevier, Amsterdam, 2008
4. HILMI UNLU, AND NORMAN J. M. HORING, Low Dimensional Semiconductor Structures, Characterization, Modeling and applications, Springer-Verlag, Berlin, 2013.
5. L. JACAK, P. HAWRYLAK, AND A. WÓJS, Quantum Dots, Springer, Berlin, 1998.
6. P. HARRISON, Quantum Wells, wires and Dots, Wiley-Interscience, 2005.
7. D. R. BOWLER. J. Phys Condens Matter. 16, 721(2004).
8. L. JACK, P. HAWRYLAK, A. WÓJS, Springer-Verlag, New York (1997)
9. V. YA. PRINZ. Phys. stat. sol. (b) 243, 3333(2006).
10. V. YA. PRINZ, AND V. A. SELEZNEV. Phys. stat. sol. (b) 244, 4193(2007).
11. J. H. ZHU, K. BRUNNER, AND G. ABSTREITER. Appl. Phys. Lett. 72, 424(1998).
12. W. WU, J. R. TUCKER, G. S. SOLOMON, AND J. S. HARRIS. Appl. Phys. Lett. 68, 523(1996).
13. Y. NABETANI, T. ISHIKAWA, S. NODA, AND A. SASAKI, J. Appl. Phys, 76, 347 (1994).
14. J. ZOU, X. Z. LIAO, D. J. H. COCKAYNE, AND R. LEON, Phys. Rev. B, 59, 12279 (1990).
15. M. GRUNDMAN, O. STIER, AND D. BIMBERG, Phys. Rev. B, 52, 11969 (1995).
16. A. LORKE, R. LUYKEN, A. GOVOROV, J. KOTTHAUS, J. M. GARCÍA, AND P. M. PETROFF. Phys. Rev. Lett. 84, 2223 (2000).
17. W. EHRENBERG AND R. E. SIDAY, Proc. Phys. Soc. B, 8, 62(1949); Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115, 485 (1959); N. Byers and C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. 7, 46 (1961).
18. M. BUTTIKER, Y. IMRY, AND R. LANDAUER, Phys. Lett. A, 96, 365(1983).
19. D. MAILLY, C. CHAPELIER, AND A. BENOIT, Phys. Rev. Lett, 39, 78(1984).
20. A. LORKE, R. J. L., ALEXANDER O. GOVOROV, AND JÖRG P. KOTTHAUS. Phys. Rev. Lett, 84, 2223(2000).

21. T. MANO, T. KURODA, S. SANGUINETTI, T. OCHIAI, T. TATENNO, J. KIM, T. NODA, M. KAWABE, K. SAKODA, G. KIDO, AND N. KOGUCHI, *Nano Lett*, 5, 425(2005).
22. D. A. OSPINA, M. R. FULLA, AND J. H. MARÍN. *Superlatt. Microstruct.* 55, 64(2013).
23. F. J. BETANCUR, W. GUTIÉRREZ, AND J.C. PIÑA. *Physica B*, 12, 396(2007).
24. V. M. FOMIN, V. N. GLADILIN, S. N. KLIMIN, J. T. DEVREESE, N. A. J. M. KLEEMANS AND P. M. KOENRAAD, *Phys. Rev. B* 76, 235320 (2007);
25. G. WANG, AND P. ZHANG. *J. Appl. Phys.* 30, 103 (2008) ; . I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, and L. F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* 224, 757(2001)
26. LI HAI-TAO, LIU LI-ZHE, LIU JIAN-JUN, *Chin. Phys. Lett.* 25, 4101(2008).
27. V. M. FOMIN, V. N. GLADILIN, J. T. DEVREESE, N. A. J. M. KLEEMANS, M. BOZKURT AND P. M. KOENRAAD, *PHYS. STAT. SOLIDI (B)*, 245 (2657)2008 ; P. OFFERMANS, P. M. KOENRAAD, J. H. WOLTER, D. GRANADOS AND J. M. GARCÍA, V. M. FOMIN, V. N. GLADILIN, AND J. T. DEVREESE, *Appl. Phys. Lett.* 87, 131902 (2005)
28. M. A. LAMPERT. *Phys. Lett.* 1, 450(1958).
29. L. LANDAU, E. LIFSHITZ, *Curso abreviado de física teórica*, Mir, Moscú, 1974.
30. F. J. BETANCUR, I. D. MIKHAILOV, AND L.E OLIVEIRA, *J. Appl. Phys. D*, 31, 3391(1998).
31. E. REYES, N. RAIGOZA, L. E. OLIVEIRA. *Phys. Rev. B*, 77, 115308(2008).
32. T. MANO, T. KURODA, S. SANGUINETTI, T. OCHIAI, T. TATENNO, *Nano Lett*, 5, 425(2005).
33. F. J. BETANCUR, W. GUTIÉRREZ, AND J.C. PIÑA, *Physica B*, 12, 396(2007).
34. J. L. Zhu, Z. Dai, and X. Hu. *Phys. Rev. B*, 68, 45324(2003).
35. J. H. MARÍN, F. GARCÍA, AND I. D. MIKHAILOV. *Jour. Of Phys*, 36, 940(2006).
36. W. XIE. *JOUR. OF PHYSICS*, 20, 365213(2008).
37. D. S. CHUU, C. M. HSIAO, AND W. N. MEI. *Phys. Rev. B*, 46, 3898 (1992).
38. H. AKBAS, C. DANE, A. GULEROGLU , AND S. MINEZ. *Physica E*, 41, 605(2009).
39. C. DANE, H. AKBAS, S. MINEZ, AND A. GULEROGLU. *Physica E* 41, 278(2009).
40. J. L. ZHU, J. H. ZHAO, W. H. DUAN, B. L. GU. *Phys. Rev. B* 46, 7546(1992).
41. H. F. CHEUNG, Y. GEFEN, E.K. RIEDEL, W.H. SHIH, *Phys. Rev. B* 37, 6050(1988).
42. S. T. MERCHANCANO, R. FRANCO, AND J.S. VALENCIA. *Microelectron. J.* 39, 383(2008).
43. A. J. PETER. *Superlattices Microstruct.* 44, 106(2008).
44. D. LOSS, AND D.P. DIVINCENZO, *Phys. Rev. A* 57, 120(2008).
45. V. YA. PRINZ. *Phys. Stat. Sol. B*, 243, 3333(2006).

46. V. YA. PRINZ AND V. A. SELEZNEV, Phys. Stat. Sol. B, 244, 4193(2007).
47. D. GRANADOS, AND J. M. GARCÍA. Appl. Phys. Lett. 82, 2401(2003).
48. M. H. DEGANI. Phys. Rev. B 66, 23306(2002).
49. Y. V. PERSHIN AND C. PIERMAROCCHI. Phys. Rev. B, 72, 125348(2005).
50. H. F. CHEUNG, Y. GEFEN, E. K. RIEDEL, AND W. H. SHIH. Phys. Rev. B, 37, 6050(1988).