

COMPLEJOS MOLECULARES EN ANILLOS CUÁNTICOS

CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2009**

COMPLEJOS MOLECULARES EN ANILLOS CUÁNTICOS

**Trabajo de grado para optar al título de
Magíster en Física**

**Presentado por:
CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA**

DIRECTORES

FRANCISCO GARCÍA RUSSI

JAIRO HUMBERTO MARÍN

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2009**

Dedico este logro, a mi familia, y a Janeth el amor de mi vida, quienes me han brindado la fuerza necesaria para llevarlo a cabo y en especial para el nuevo integrante de la familia, Juan Manuel, que espero le sirva de motivación.

AGRADECIMIENTOS

El Autor expresa sus agradecimientos:

A los Doctores Francisco García Russi y Jairo Humberto Marín que aceptaron dirigir este trabajo de grado y mis estudios en la maestría.

A los integrantes del grupo FICOMACO:

El Dr. Harold Paredes y Dr. Carlos Leonardo Beltrán, por ser partícipes de los primeros trabajos de investigación.

Al Dr. Ilia Mikhailov, por el significativo aporte a la realización de este trabajo.

Al compañero William Gutiérrez, por toda su colaboración y su conocimiento.

A mis compañeros Jesús Galván, Fredy Rodríguez, David Velasco, William Amado, Javier del Cristo, Elber (Azcod).

A todos los integrantes del FFC, por los buenos momentos vividos durante este tiempo.

A Oscar Vera, por su amistad incondicional.

PRÓLOGO

Este libro es el resultado del trabajo realizado durante el curso de maestría en física, cursado en la Universidad Industrial de

Santander, bajo la supervisión incansable de mis orientadores y la experiencia del grupo de investigación en física computacional FICOMACO.

El libro, se desarrollo apoyado en algunos trabajos realizados por profesores y compañeros del grupo en materiales semiconductores, trabajos que durante algún tiempo han ubicado al grupo FICOMACO, como uno de los grupos con más reconocimiento del país, así como de un gran número de trabajos internacionales que estudian este tipo de sistemas. Motivado con el interés de realizar un aporte al estudio de complejos moleculares artificiales, se realiza un análisis de los sistemas más sencillos que se pueden confinar en un anillo cuántico.

CONTENIDO

	Pág.
CAPÍTULO 1	1
GENERALIDADES Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	1
1.1 COMPLEJOS MOLECULARES	2
1.2. PROPIEDADES DE LOS ANILLOS	5
1.3 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA:	7
1.4 BARRIDO TRIGONOMÉTRICO:	11
CAPÍTULO 2	14
SISTEMAS MONO-ELECTRÓNICOS	14
2.1 IMPUREZA DONADORA NEUTRA D^0 EN ANILLO TOROIDAL	15
2.1.1 Impureza Donadora Neutra D^0 Descentrada	16
2.1.2 Impureza Donadora Neutra D^0 Sobre El Eje Z.	24
2.2 MOLÉCULA D_2^+ EN ANILLO TOROIDAL	26
2.2.1. Molécula D_2^+ En El Plano Del Anillo	29
2.2.2. Molécula D_2^+ En El Eje Z	36
CAPÍTULO 3	41
SISTEMAS BI-ELECTRÓNICOS	41
3.1 SISTEMA DE DOS ELECTRONES	42
3.2 MOLECULA D^- EN ANILO TOROIDAL	46
3.3 MOLECULA D_2^0 EN ANILO TOROIDAL	52
CONCLUSIONES	57
BIBLIOGRAFIA	58

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1.2 Puntos Cuánticos con forma de anillo de dos diferentes secciones transversales, circular (1.2a) y cuadrada (1.2b).	5
Figura 1.3, Impureza donadora D^0 en puntos cuánticos de diferente sección transversal, circular (1.3a) y cuadrada (1.3b).	7
Figura 1.4 Nuevo sistemas de coordenadas para el electrón confinado en un anillo cuántico de sección transversal cuadrada.	8
Figura 2.1 Esquema del sistema D^0 en anillos cuánticos con diferente sección transversal 2.1a) cuadrada; 2.1b) circular.	16
<i>Figura 2.2 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$, del sistema D^0, para las dos diferentes secciones transversales a) cuadrada y b) circular.</i>	17
Figura 2.3 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ para diferentes posiciones de la impureza ξ en el plano, para las dos diferentes secciones transversales (a) cuadrada y (b) circular.	18
Figura 2.4, Estados energéticos más bajos del sistema D^0 en función del parámetro adimensional β , para un anillo de diferente sección transversal a) cuadrada y b) circular, con radio medio $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 2.0a_0^*$.	19
Figura 2.5 Niveles energéticos más bajos en función del parámetro β para dos diferentes anillos de radio medio $Ra = 5a_0^*$ (a) y $Ra = 10a_0^*$ (b), ambos con sección transversal cuadrada $Rt = 1.0a_0^*$.	20
Figura 2.6 Estado base para diferentes valores de sección transversal y un valor de radio medio $Ra = 10.0a_0^*$.	21
Figura 2.7 Curvas de energía en función del campo para la impureza D^0 en anillos cuánticos de sección transversal $Rt = 0.1a_0^*$ y una posición de la	

impureza $\xi = 500a_0^*$, para dos diferentes valores de radio medio $Ra = 4a_0^*$ (a) y $Ra = 5a_0^*$ (b).	22
Figura 2.8 Curvas de energía en función del campo magnético de la impureza D^0 , para un anillo de $Ra = 5a_0^*$ y de $Rt = 1.0a_0^*$, para dos diferentes posiciones de la impureza $\xi = 0.0$ (a) y $\xi = 1.0$ (b)	23
Figura 2.9 Esquema del sistema D^0 sobre el eje z en anillos cuánticos con diferente sección transversal 2.9a) cuadrada; 2.9b) circular.	24
Figura 2.10 Niveles energéticos más bajos para la impureza D^0 en función de la posición de la impureza z_i , para un anillo de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$ en ausencia de campo $\gamma = 0.0$.	24
Figura 2.11 Curvas de energía en función del campo magnético para un anillo con $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$, para diferentes posiciones de la impureza $\xi = 0.0$ (a) y $\xi = 4.0a_0^*$ (b).	25
Figura 2.12 Posibles mecanismos de formación y ionización para el complejo molecular D_2^+ .	27
Figura 2.13 Sistema D_2^+ en anillos cuánticos de dos diferentes secciones transversales	28
Figura 2.14 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ para las dos diferentes secciones transversales en el punto más profundo.	29
Figura 2.15 Potencial efectivo de confinamiento para diferentes separaciones de las impurezas R .	30
Figura 2.16 Nivel base de la energía para la molécula H_2^+ en un anillo cuántico de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$, para dos diferentes secciones transversales	31
Figura 2.17 Energía del estado base para diferentes valores de la sección transversal en un radio medio constante.	32

Figura 2.18 Potencial Efectivo $\tilde{V}(\varphi)$ para diferentes valores de sección transversal R_t y un radio medio del anillo de $R_a = 5.0a_0^*$	33
Figura 2.19 Energía del estado base para diferentes valores de la sección transversal en un $R_a = 5.0a_0^*$ y dos diferentes secciones transversales.	34
Figura 2.20 Espectro energético para un anillo de $R_a = 5.0a_0^*$ y $R_t = 1.0a_0^*$.	35
Figura 2.21 Energía en función del campo magnético de la molécula D_2^+ para diferentes distancias entre iones, a) $\xi = \pm 0.5$, b) $\xi = \pm 1.0$, c) $\xi = \pm 2.0$	35
Figura 2.22 Niveles energéticos más bajos en función del radio medio R_a para los casos límites, (a) electrón libre y (b) molécula D_2^+ .	36
Figura 2.23 Rango de confiabilidad	37
Figura 2.24 Estado base del sistema D_2^+ , para diferentes posiciones ξ en función del radio medio R_a de un anillo de sección transversal $R_t = 2.0$.	38
Figura 2.25 Estado base del sistema D_2^+ , para diferentes valores de la sección transversal R_t y una posición $\xi = 2.0a_0^*$.	39
Figura 2.26 Energía en función del campo magnético de la molécula D_2^+ con los iones localizados en el eje z en, a) $\xi = \pm 1.0$, b) $\xi = \pm 2.0$	39
Figura 3.1. Comparación de los Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ renormalizados en función del radio medio R_a , de dos electrones en un anillo cuántico con diferente sección transversal.	44
Figura 3.2. Energía renormalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del campo magnético γ , en un anillo de radio medio $4a_0^*$ y dos diferentes secciones transversales.	45
Figura 3.3 Esquema del sistema D^-	48
Figura 3.4. Niveles energéticos más bajos de la impureza D^- en un QR en función del radio medio R_a y en ausencia de campo, para dos diferentes formas de sección transversal: cuadrada 3.21a) y circular 3.21b).	49

Figura 3.5. Niveles energéticos más bajos de una D^- , con el centro de carga positivo descentrado en un anillo cuántico con sección transversal cuadrada, en función de la distancia entre la carga positiva y el centro del anillo	51
Figure 3.6. Niveles energético en función del campo magnético en un QR con radio medio $R = 4a_0^*$ y de sección transversal $R_t = 1a_0^*$.	51
Figura 3.7 Esquema del sistema D_2^0	53
Figura 3.8. Nivel base de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula artificial D_2^0 (líneas continuas), para anillos con radio medio $R_a = 0.7a_0^* - 1.0a_0^* - 1.5a_0^*$, sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural	54
Figura 3.9. Primeros niveles de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula artificial D_2^0 (líneas continuas), para anillos con radio medio $R_a = 1.5a_0^*$, sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural	55
Figura 3.10. Energía renormalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ de la molécula D_2^0 en función del campo magnético γ , en un anillo de radio medio $Ra = 4a_0^*$, radio de sección transversal $Rt = 1.0a_0^*$ y para dos diferentes posiciones de las impurezas.	56

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla N° 1 Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en un anillo cuántico con $R_t \rightarrow 0$ (nuestros resultados) y en un anillo 1D (Ref. 16) para radio medio $Ra = 4a_0^*$ (valores de la izquierda) y $20a_0^*$ (valores de la derecha)	44
<i>Tabla N° 2 Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ de la molécula D^- con $\xi \rightarrow \infty$ y $R_t \rightarrow 0$</i>	49

RESUMEN

TITULO: COMPLEJOS MOLECULARES EN ANILLOS CUÁNTICOS[†]

AUTOR: CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA[‡]

PALABRAS CLAVES: Anillos cuánticos, Complejos moleculares, Aproximación Adiabática.

Se analiza el espectro energético de los principales sistemas de impurezas mono-electrónicas y bi-electrónicas en anillos cuánticos de pequeña y diferente sección transversal, circular y cuadrada. El análisis se realiza asumiendo que el electrón está obligado a moverse dentro del anillo, mientras que los centros de carga positiva se localizan tanto en el plano del anillo, como sobre el eje perpendicular a él.

En el desarrollo matemático de este trabajo se hizo uso de la aproximación adiabática, obteniendo una ecuación de onda unidimensional con condiciones periódicas que describe los niveles energéticos más bajos del movimiento lento de los sistemas, movimiento relacionado a la rotación del portador de carga alrededor del eje de simetría del anillo. La solución de esta ecuación se realiza por medio del método numérico de barrido trigonométrico. Se ha estudiado la dependencia de los primeros niveles energéticos de cada uno de los sistemas estudiados en función de diferentes parámetros tales como la posición de la impureza, del radio medio del anillo y el radio de la sección transversal del anillo, así como del campo magnético aplicado.

Se presenta como resultado más relevante el efecto de la geometría de la sección transversal del anillo sobre el espectro energético de las moléculas artificiales, enfocando el análisis en encontrar sistemas con mayor estabilidad que la correspondiente molécula natural.

[†] Proyecto de Investigación de Maestría

[‡] Facultad de Ciencia, Escuela de Física; PhD. Francisco García y Jairo Marín

ABSTRACT

TITLE: MOLECULAR COMPLEXES IN QUANTUM RINGS[†]

AUTHOR: CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA[‡]

KEYWORDS:

In this work had analyzed the spectrum of the main impurity systems mono-electronic and bi-electronic at the case of quantum rings with small variations in itself transversal section, circular and square shape. The analysis to this work was made assuming that the electron has the obligation to move inside the ring; meantime the centres of positive charge are located in the ring's plane either over the perpendicular axis to this.

At the mathematic develop of this work, we used the Adiabatic Approximation with periodical conditions that describe the main lowest energy levels associate to the systems' slow movement, related to rotation of charge carriers around the ring's symmetry axis. The solution of this equation was made through Trigonometric Sweep. We were analyzed the relation of dependence of firsts energy levels associated to everyone system studied here, as function of different parameters like the impurity's position, ring's average radius and transversal section's width, moreover the magnetic field applied. We show that the most important result is the ring's geometry effect of the transversal section as a consequence over the energy spectrum of some artificial molecules. We had focused to analyze and find other systems with more stability than respective natural molecule.

[†] Proyecto de Investigación de Maestría

[‡] Facultad de Ciencia, Escuela de Física; PhD. Francisco García y Jairo Marín

CAPÍTULO 1

GENERALIDADES Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Con el propósito de garantizar la comprensión de las ideas desarrolladas en esta tesis y el alcance de los resultados obtenidos, se describirán varios conceptos, entre los cuales vale la pena mencionar el modelo de Aproximación Adiabática y el cálculo de autovalores, mediante el uso de la técnica de Barrido Trigonométrico.

1.1 COMPLEJOS MOLECULARES

El estudio de los complejos multiparticulares, del tipo iónico o molecular, en materiales semiconductores en el volumen, se remonta al año de 1958 cuando M. A. Lampert [1] estableció las bases teóricas para su formación. Los resultados mostraron que estos sistemas debían ser muy inestables y con tiempos de vida muy cortos, lo que sólo permitiría su observación a temperaturas por debajo de los 10°K, ya que a temperaturas mayores, la energía térmica $\kappa_B T$ era suficiente para disociar al sistema. Estos sistemas de Lampert se clasificaron en dos grandes grupos:

A. COMPLEJOS EXCITÓNICOS O MÓVILES: Estos sistemas están compuestos por electrones y huecos, lo que hace que posean una gran movilidad debido a la pequeñez de su masa efectiva. Generalmente se forman cuando un par electrón-hueco (e-h) es capaz de ligar un electrón o un hueco extra, formándose excitones cargados [2-5] conocidos como triones X^- y X^+ , respectivamente. En caso de que la densidad de excitones sea muy grande, se puede aumentar interacción Coulombiana entre ellos, llegándose a formar una molécula bi-excitónica [6]. En la figura 1.1a se ha hecho una representación esquemática de esta molécula bi-excitónica.

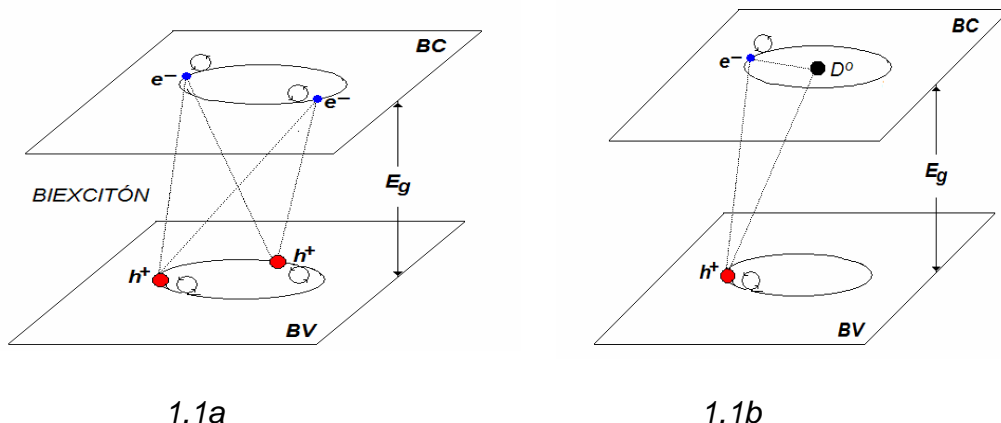


Figura 1.1 Ilustración de un biexcitón (1.1a) y de un hueco ligado a un donador neutro D^0 en materiales semiconductores en el bloque. (1.1b).

B. COMPLEJOS INMÓVILES: Estos complejos están formados por centros localizados, los cuales surgen debido a la existencia de defectos o impurezas donadoras aceptoras. Como resultado de la interacción Coulombiana, estos centros localizados pueden llegar a atrapar electrones, huecos o excitones. Algunos ejemplos de estos sistemas son: El D^- [7-8], el cual está compuesto de una donadora neutra D^0 [9] que ha atrapado un electrón adicional. Si la densidad de donadoras neutras es muy grande, se pueden formar moléculas Bi-electrónicas

del tipo D_2^0 [10], el cual es un sistema que se forma a partir de dos donadoras neutras. Cuando el D_2^0 es excitado y a causa de ello se libera un electrón, se forma el complejo molecular D_2^+ [10]. Este tipo de complejos moleculares formados a partir de donadoras neutras serán el objeto de estudio de esta tesis, cuando ellas se encuentran en espacios de dimensión reducida. En la figura 1.1b se ha hecho una representación esquemática de un hueco ligado a un D^0

En la década de los 60, Haynes [11] realizando mediciones de recombinación en materiales de silicio dopado con elementos del grupo III y V de la tabla periódica, logró establecer la existencia experimental de algunos complejos excitónicos. Posteriormente se logró comprobar la existencia de complejos móviles e inmóviles en pozos cuánticos de GaAs-GaAlAs [12], lo cual fue más fácil, gracias a que el confinamiento se puede llegar a aumentar la energía de enlace en un orden de magnitud [2], garantizando de esta manera una mayor estabilidad.

Mucho más reciente ha sido la observación experimental de estos complejos en QDs [13], donde el confinamiento espacial en todas las direcciones, conlleva a una competencia entre las energías cinética y potencial eléctrica, haciendo que esta última aumente considerablemente en virtud del decrecimiento de la distancia entre las partículas cargadas, lo que conlleva a tener sistemas más estables, permitiendo su observación a temperatura ambiente [14].

Dentro de la amplia gama de morfologías de puntos cuánticos que se han fabricado, los crecidos por primera vez por Lorke y colaboradores [15] en forma de anillo, han generado grandes expectativas, debido a que en estas nanoestructuras, los complejos multiparticulares pueden tener una mayor estabilidad a frente a la disociación térmica, y además porque estas estructuras permiten analizar diversas variaciones topológicas que van desde sistemas cuasi bi-dimensionales, como es el caso del disco cuántico que se obtiene cuando el radio interior del anillo es cero, hasta situaciones unidimensionales que surgen cuando el espesor del anillo es muy pequeño en comparación con su radio medio.

A partir de las mediciones estructurales realizadas sobre anillos cuánticos, se ha encontrado que estos sistemas se caracterizan por poseer un radio interior del orden de 10 nm, radio exterior variando entre 30 y 70 nm y altura entre 2 y 6 nm [15]. El hecho experimental asociado con significativa pequeñez de la altura de los anillos cuánticos, en comparación con las demás dimensiones características del anillo, ha conllevado a que muchos autores consideren modelos estrictamente bidimensionales a la hora de calcular el espectro energético de un sistemas compuestos por uno y dos electrones [16], excitones [17] e impurezas donadoras [18]. No obstante y aun cuando los modelos bi-dimensionales permiten una reducción substancial de los cálculos involucrados en la obtención del espectro energético de los sistemas de pocas partículas, es necesario advertir que a nuestro juicio, estos modelos no tienen mucho sentido físico, pues en este caso no

podríamos tener niveles discretos de energía ya que las condiciones de desbordamiento prevalecen, dando lugar a un espectro continuo. Adicionalmente, al considerar modelos estrictamente bidimensionales, se dejan de lado algunos efectos, como por ejemplo, el potencial de confinamiento y la morfología de la sección transversa del anillo, los cuales tienen real incidencia sobre el espectro de energía, tal como se mostrará en los capítulos siguientes

Con el propósito de tener en cuenta estos efectos sobre el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos y motivados por la posibilidad de encontrar nuevos efectos físicos a escala nanométrica, muchos investigadores han centrado su atención en los anillos cuánticos en forma toroidal, pues en estos sistemas es posible analizar la incidencia de estos efectos sobre las oscilaciones Aharonov-Bohm [19,20] y las corrientes persistentes [21]. Además, porque con este tipo de anillos que son mucho más reales que los de tipo bidimensional, se pretende diseñar y construir una nueva generación de diferentes dispositivos para la industria opto-electrónica [22,23]. Es por esta razón que se han venido estudiando el espectro energético de diferentes sistemas en QRs, donde el más simple de analizar es el correspondiente a un electrón en uno [24] o en dos anillos con forma toroidal [25]. Situaciones un poco más complejas están asociadas con sistemas de dos electrones en anillos concéntricos y acoplados verticalmente [26] y de impurezas hidrogenoides del tipo D^0 [25,27]. Estos sistemas se han analizado bajo la acción de un campo magnético uniforme orientado en la dirección de crecimiento del anillo. Para la determinación del espectro energético de los diferentes sistemas se han usado diversos métodos tales como el de diagonalización matricial [25], método variacional [27], entre otros. En general, la realización de los cálculos por estos métodos requiere de un gran esfuerzo computacional y matemático. Dada la posibilidad de realizar aplicaciones tecnológicas con estos sistemas, sería recomendable disponer de modelos más simples y efectivos, que permitan determinar los rasgos generales del espectro energético para diferentes sistemas en QRs, pero sin que esto implique dejar de lado la incidencia de los diferentes factores geométricos. En este sentido, recientemente se han reportado las características del espectro de energía para una donadora neutra en un anillo toroidal de sección transversa circular [28], lo cual se ha logrado mediante la implementación de un método basado en el uso de la aproximación adiabática (A.A) [28,29].

Motivados por el hecho de que los efectos de correlación en conexión con la forma de los anillos es actualmente materia de intensa investigación y teniendo presente que en los trabajos mencionados anteriormente sobre anillos, se caracterizan por haber dejado de lado la incidencia que tienen sobre el espectro de energía, tanto la morfología como el tamaño de la sección transversal del anillo, en esta tesis se busca hacer aportes en este campo de investigación. Para ello se consideran diferentes complejos moleculares tales como los de tipo mono-electrónico: D^0 y D_2^+ y los del tipo bi-electrónico: D^- y D_2^0 . En cada uno de los sistemas señalados

anteriormente, se va a asumir que los electrones están confinados y obligados a moverse en el interior de los anillos toroidales. Para tener en cuenta el efecto de la morfología sobre el espectro de energía se considerarán dos tipos de formas diferentes para las secciones transversales, una circular y otra cuadrada. Una representación esquemáticamente de los tipos de anillos se muestra en la figura 1.2.

El estudio de estos complejos tiene un atractivo adicional, y está asociada con la posibilidad de modificar la distancia inter-iónica, lo cual es absolutamente diferente a la situación que presentan las moléculas en el bloque, ya que este parámetro es impuesto por la naturaleza y es el resultado de la fuerte competencia entre la repulsión iónica, la repulsión electrón-electrón y la atracción ión-electrón. Estos nuevos regímenes moleculares con diferentes distancias de equilibrio, se pueden llevar a cabo con moléculas creadas a partir de anillos cuánticos mediante la variación de los parámetros geométricos que caracterizan la nanoestructura.

1.2. PROPIEDADES DE LOS ANILLOS

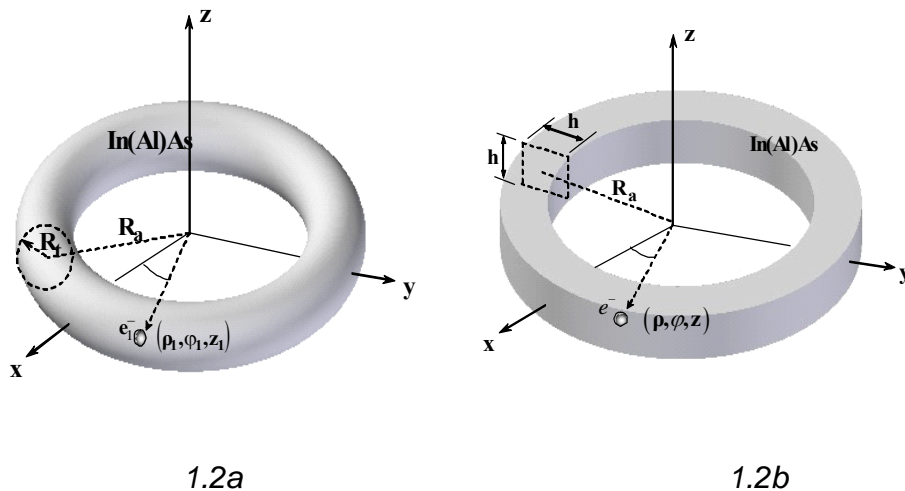


Figura 1.2 Puntos Cuánticos con forma de anillo de dos diferentes secciones transversales, circular (1.2a) y cuadrada (1.2b).

En este trabajo se consideran anillos toroidales cuya sección transversal de área A posee diferentes morfologías: circular ($A = \pi R_t^2$) o cuadrada ($A = h^2$), siendo R_t el radio de la sección circular y h el lado de sección cuadrada. Con el propósito de simplificar los cálculos y centrarnos en los efectos que tienen el tamaño y forma de los anillos sobre el espectro de energía, se asumirá que cada una de estas secciones transversales tiene la misma área, es decir: $h = \sqrt{\pi R_t^2}$.

Otro factor geométrico característico de estas estructuras, es el radio medio R_a , el cual corresponde a la línea central definida como el círculo que pasa a través del centro de simetría de la sección transversal del toroide. De acuerdo a los resultados experimentales reportados por Lorke y colaboradores [15], se asumirá que el radio medio R_a , es mucho mayor que las dimensiones de la sección transversal, es decir $(R_a \gg R_t)$ o $(R_a \gg h)$.

A pesar de que en este modelo se toman secciones transversales muy pequeñas, en ningún momento se desprecia el carácter finito de la altura, lo cual nos permitirá tener en cuenta su incidencia sobre el espectro energético, situación imposible de alcanzar en los anillos bi-dimensionales.

Adicionalmente este modelo simple tiene la particularidad de tener como casos particulares el anillo Bi-dimensional, el cual se obtiene haciendo tender a cero la altura de los anillos, también abarca el caso unidimensional, el cual corresponde al caso límite en que tanto R_t como h tiendan a cero. Esta última situación de anillos unidimensionales, nos será de gran utilidad para establecer la efectividad de nuestros cálculos, ya que recientemente Zhu y colaboradores [16], han obtenido una solución exacta para el caso de dos electrones en un anillo muy estrecho.

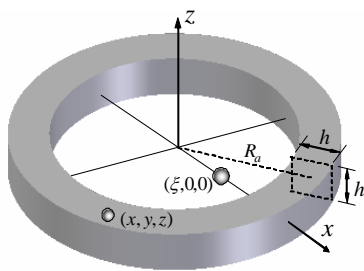
Los diferentes cálculos que se realizarán a partir de este momento, corresponden al caso del anillo toroidal hecho de $In_{0.55}Ga_{0.45}As$, para este material la masa efectiva es $m^* = 0.076m_e$, y el parámetro de red es cercano a $0.6nm$. Con el propósito de simplificar los cálculos computacionales, se utilizan unidades adimensionales como los son el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo cuya definición esta indicada en la ecuación 1.21, para el campo magnético se considera $\gamma = 1 \leftrightarrow B = 8.4T$. [30,31].

$$\vec{r} = a_0^* \vec{\tilde{r}}; \quad E = Ry^* \tilde{E}; \quad (1.21).$$

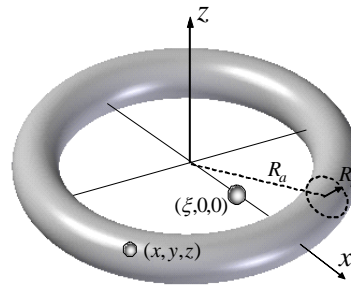
$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} \approx 8.86nm; \quad Ry^* = \frac{m^* e^2}{2\epsilon^2 \hbar^2} \approx 6.40Mev$$

1.3 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA:

Luego de la descripción geométrica del los QR, consideramos una impureza D^0 en un anillo de sección transversal cuadrada, como se muestra en la figura 1.3b, con el fin de hacer más evidente la descripción del método que se va implementar en el calculo del espectro (Aproximación Adiabática), resultado que se puede extender de manera inmediata al anillo de sección transversal circular (figura 1.3a).



1.3a



1.3b

Figura 1.3, Impureza donadora D^0 en puntos cuánticos de diferente sección transversal, circular (1.3a) y cuadrada (1.3b).

En la figura 1.3, se presenta el esquema correspondiente a una impureza neutra D^0 , la cual se compone de un centro de carga fijo localizado en el punto $(\xi, 0, 0)$ y un electrón cuyo movimiento está restringido a la región interior del anillo. Todo el sistema se asume que está en presencia de un campo magnético uniforme orientado a lo largo del eje de simetría (eje z).

Para calcular la estructura energética del sistema, es necesaria la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.31).$$

Mediante el uso de las unidades definidas en la ecuación 1.21, el Hamiltoniano adimensional efectivo en coordenadas cilíndricas para esta impureza hidrogenoide está dado por:

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} + V(\rho, z) = \frac{-1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} + V(\rho, z) \quad (1.32).$$

Donde podemos apreciar que el primer término corresponde a la energía cinética de la partícula, el segundo término es el potencial de interacción Coulombiano y por último el potencial de confinamiento del electrón.

La ecuación de autovalores mostrada en 1.31, no se puede resolver analíticamente debido a la presencia del término de interacción Coulombiano, por lo que se hace necesario utilizar un método aproximado para resolverla, como lo es el método de Aproximación Adiabática.

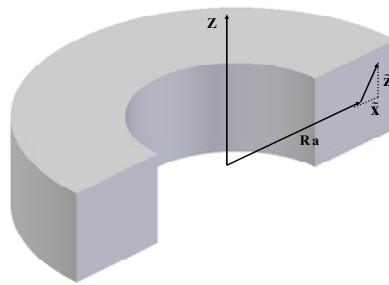


Figura 1.4 Nuevo sistemas de coordenadas para el electrón confinado en un anillo cuántico de sección transversal cuadrada.

Para una mejor comprensión de este método debemos analizar el aporte realizado por cada uno de los términos de energía cinética del Hamiltoniano 1.32. Para ello vamos a hacer la siguiente sustitución geométrica $\rho = R_a + \tilde{x}$, para cualquier posición radial del portador de carga, como se aprecia en la figura 1.4.

Al realizar la sustitución en el término de energía cinética, es posible expresar las derivadas que aparecen en términos de ρ como derivadas que dependen de \tilde{x} , ya que el radio medio R_a es constante. Así, tendremos entonces que:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \quad (1.33a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \quad (1.33b)$$

Por lo que el Hamiltoniano en dirección radial queda dado de la siguiente forma:

$$\Delta_\rho = \Delta_{\tilde{x}} = \frac{1}{(R_a + \tilde{x})} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \quad (1.34a).$$

Tomando en cuenta que $0 < \tilde{x} < R_i$ y $R_a \gg \tilde{x}$, el término se puede aproximar como:

$$\Delta_\rho \approx \Delta_{\tilde{x}} = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \quad (1.34b).$$

Bajo esta aproximación se reescribe el Hamiltoniano 1.32 como:

$$\tilde{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\sqrt{(Ra + \tilde{x})^2 + \tilde{z}^2 + \xi^2 - 2(Ra + \tilde{x})\xi \cos \varphi}} + V(\tilde{x}, \tilde{z}) \quad (1.35).$$

Con el propósito de facilitar una comparación de las contribuciones hechas de cada uno de los términos de la ecuación 1.35, se hará la siguiente transformación de coordenadas $\tilde{x} = R_t x$ y $\tilde{z} = R_t z$, lo que permite reescribir 1.35 así:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{R_t^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right) - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - V_{eff}(\tilde{x}, \tilde{z}, \varphi) + V(\tilde{x}, \tilde{z}) \quad (1.36).$$

Este Hamiltoniano lo podemos interpretar como si se tratara de dos partículas que interactúan a través del potencial $V_{eff}(\tilde{x}, \tilde{z}, \varphi)$, donde una de las partículas tiene una masa hipotética R_t^2 , la cual esta obligada a moverse en el plano $(\tilde{x} - \tilde{z})$, mientras que la segunda partícula de masa hipotética R_a^2 esta obligada a rotar alrededor del eje z, como $R_a^2 \gg R_t^2$, entonces es obvio que el aporte hecho a la energía cinética total por la partícula liviana R_t^2 es mucho mayor que el de la partícula masiva.

En este sentido el sistema que estamos tratando es equivalente a un átomo de hidrogeno, donde la partícula que haría las veces de protón es la de masa R_a^2 y de electrón R_t^2 . Para este tipo de situaciones en la mecánica cuántica se establece un modelo basado en la Aproximación Adiabática para el cálculo del espectro energético. La gran ventaja de esta aproximación es que permite llevar a cabo una separación del movimiento lento (correspondiente a la partícula masiva) del movimiento rápido (partícula liviana), con lo cual el Hamiltoniano 1.35 se puede escribir como:

$$\tilde{H} = H_L + H_R \quad (1.37)$$

donde:

$$H_L = -\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\sqrt{(Ra + \tilde{x})^2 + \tilde{z}^2 + \xi^2 - 2(Ra + \tilde{x})\xi \cos \varphi}} \quad (1.38a).$$

$$H_R = -\frac{1}{R_t^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right] + V(\tilde{x}, \tilde{z}) \quad (1.38b).$$

Teniendo completamente separado el Hamiltoniano 1.36, en un Hamiltoniano lento 1.38a y un Hamiltoniano rápido 1.38b, se propone una función de onda ψ que describe el sistema como el producto de dos funciones de onda, una para el movimiento lento ψ_L y otra para el movimiento rápido ψ_R ; obteniendo así una función total $\psi = \psi_L \psi_R$.

Primero analizamos la ecuación de Schrödinger del movimiento rápido, para el cual es posible encontrar fácilmente las funciones que describen este movimiento.

$$H_R \psi(\tilde{x}, \tilde{z}) = E_R \psi(\tilde{x}, \tilde{z}) \quad (1.39).$$

La ecuación 1.39, puede fácilmente ser separada en las direcciones \tilde{x} y \tilde{z} ; las ecuaciones resultantes en cada una de las variables luego de la separación representa dos problemas muy conocidos en la academia, reduciéndose a resolver dos pozos cuánticos, los cuales tienen funciones de onda bien definidas. Las ecuaciones a resolver son similares por lo cual es suficiente conocer solo una solución.

$$\left[-\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}(\tilde{x}) \right] \psi_{\tilde{x}}(\tilde{x}) = E_{\tilde{x}} \psi_{\tilde{x}}(\tilde{x}) \quad (1.310)$$

Las funciones de onda que describen el movimiento rápido del sistema están dadas por la forma:

$$\psi_R(\tilde{x}) = \left(\frac{2}{R_t} \right) \text{Cos} \left(\frac{m\pi}{R_t} \tilde{x} \right) \quad (1.311)$$

Con valores de energía $E_R = K^2 = \left(\frac{m\pi}{R_t} \right)^2$.

Conocido ya por completo el movimiento rápido del sistema, retomamos el análisis del movimiento lento del sistema, descrito por la ecuación:

$$\left[-\frac{1}{R_a^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} - \frac{2}{\sqrt{(Ra + \tilde{x})^2 + z^2 + \xi^2 - 2(Ra + \tilde{x})\xi \cos \varphi}} \right] \psi_L(\varphi) = E_L \psi_L(\varphi) \quad (1.312)$$

Como se puede ver en la ecuación anterior, el término coulombiano no permite encontrar una solución exacta debido a que es un término que originalmente depende de la posición de la impureza ξ y del electrón, por lo que no es posible plantear la ecuación unidimensional del movimiento lento que solo dependa de la

coordenada φ . Por este motivo se hace uso de una aproximación numérica que permita llevar la ecuación multidimensional 1.312, a una ecuación unidimensional que dependa de φ .

El procedimiento numérico que se realiza, es calcular un valor promedio del potencial en las variables \tilde{x} y \tilde{z} , para cada valor de φ , con el fin de obtener una función potencial $\tilde{V}(\varphi)$, el cual está dado por la siguiente expresión.

$$\tilde{V}(\varphi) = \langle \psi_R(\tilde{x}, \tilde{z}) | V(\tilde{x}, \varphi, \tilde{z}) | \psi_R(\tilde{x}, \tilde{z}) \rangle \quad (1.313)$$

Este término, al reemplazarlo en la ecuación 1.312, nos permite obtener una ecuación unidimensional de Schrödinger del movimiento lento, así:

$$\left(-\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \tilde{V}(\varphi) \right) \psi_L(\varphi) = E_L \psi_L(\varphi) \quad (1.314)$$

En la ecuación diferencial unidimensional 1.314, se resolverá por el método barrido trigonométrico [32], cuya efectividad ya ha sido demostrada ampliamente en el grupo FICOMACO, mediante este método es posible reducir una ecuación diferencial de segundo orden a una de primer orden, la manera de lograrlo se describe más a delante.

1.4 BARRIDO TRIGONOMÉTRICO:

La ecuación diferencial que debemos resolver para encontrar los autovalores de la energía está dada por:

$$\left(-\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \tilde{V}(\varphi) \right) \psi_L(\varphi) = E_L \psi_L(\varphi) \quad (1.41)$$

Para la solución de esta ecuación, como se dijo antes, es necesario realizar una sustitución de la función $\psi_L(\varphi)$ mediante el uso de las coordenadas de Poincaré, así:

$$\psi(\varphi) = A(\varphi) \cos \theta(\varphi) \quad \psi'(\varphi) = A(\varphi) \text{sen} \theta(\varphi) \quad (1.42)$$

donde $A(\varphi)$ y $\theta(\varphi)$, son la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré, respectivamente.

Derivando la primera relación de la ecuación 1.42, y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada $\psi'(\varphi)$ en la segunda relación de la misma ecuación, se obtiene:

$$A'(\varphi) = A(\varphi) \frac{\text{sen}\theta(\varphi)}{\cos\theta(\varphi)} [1 + \theta'(\varphi)] \quad (1.43)$$

Derivando la segunda expresión de 1.42, y reemplazando $A'(\varphi)$, obtenemos:

$$\psi''(\varphi) = A(\varphi) \frac{\text{sen}^2(\varphi)}{\cos(\varphi)} [1 + \theta'(\varphi)] + A(\varphi) \cos\theta(\varphi) \theta'(\varphi) \quad (1.44)$$

Reemplazando en 1.41, obtenemos la expresión para la fase:

$$\theta'(\varphi) = -[\text{sen}^2\theta(\varphi) + \alpha(\varphi)\cos^2\theta(\varphi)] \quad (1.45)$$

Para encontrar la función $A(\varphi)$, se reemplaza 1.45 en la ecuación 1.43, y se realiza la integración:

$$A(\varphi) = \exp \left[\int_0^\varphi [1 - \alpha(\varphi)] \text{sen}\theta(\varphi) \cos\theta(\varphi) - \text{sen}^2\theta(\varphi) \right] d\varphi \quad (1.46)$$

Cabe resaltar que el término $\alpha(\varphi) = R_a^2[E_L - \tilde{V}(\varphi)]$, debido a que el potencial $\tilde{V}(\varphi)$ es par, la solución presentará soluciones pares e impares. La función de onda par debe cumplir las siguientes condiciones; $\psi'_L(0) = 0$ y $\psi'_L(\pi) = 0$, condiciones de paridad y periodicidad respectivamente. Condiciones que al sustituirlas en 1.42, obtenemos:

$$\theta(0) = 0 \quad \theta(\pi) = -m\pi; \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (1.47)$$

donde m es el nivel. La ecuación diferencial junto con la primera condición $\theta(0) = 0$, constituyen un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden, el cual puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro E_m (Energía del nivel m -ésimo) dado. En sistemas, su solución puede considerarse como una función de dos variables $\theta = \theta(\varphi, E_m)$, la cual junto con la segunda condición de frontera $\theta(\pi) = -m\pi$, lleva a la ecuación trascendente para los niveles de energía de los estados pares:

$$\theta(\varphi, E_m) = -\pi(m+1) \quad (1.48)$$

De manera análoga, y partiendo de las condiciones de paridad y continuidad para los estados impares

$$\psi_L(0) = 0 \quad \psi_L(\pi) = 0 \quad (1.49)$$

Se derivan condiciones que deben cumplir la ecuación 1.42, para estos impares:

$$\theta(0) = \frac{\pi}{2} \quad \theta(\pi) = -\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{m}{2} \right); \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (1.410)$$

Las funciones de onda que describen la rotación azimutal del electrón, $\psi_L(\varphi)$, se obtienen como una solución de los problemas de Cauchy para estados pares (1.45, 1.47) y para estados impares (1.45, 1.410), además de la integral (1.46). La energía de los diferentes estados, se encuentran como una solución de las respectivas ecuaciones trascendentes (1.48 y 1.410).

CAPÍTULO 2

SISTEMAS MONO-ELECTRÓNICOS

En este capítulo se analizarán los sistemas uniparticulares D^0 y D_2^+ , donde el electrón está sometido a una interacción Coulombiana con uno y dos centros de carga fija. En ambos casos se asume que el movimiento del portador de carga está restringido al interior de un toroide de sección transversal circular o cuadrada. Mediante el uso de la aproximación adiabática, es posible separar los movimientos rápido y lento en dos Hamiltonianos, donde el que describe el movimiento rápido se puede resolver analíticamente, mientras que el lento se resuelve usando Barrido Trigonométrico.

2.1 IMPUREZA DONADORA NEUTRA D^0 EN ANILLO TOROIDAL

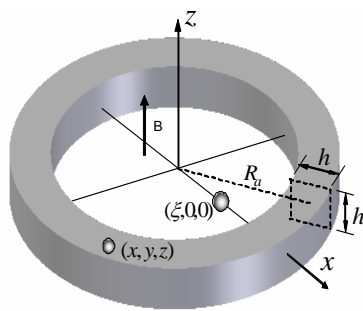
El espectro energético de una impureza donadora neutra en un semiconductor de GaAs, tiene una estructura energética similar a la que presenta un átomo de hidrógeno, sin embargo, la energía de ionización de una D^0 en GaAs, es mucho menor que la del átomo de hidrógeno libre, ya que la interacción Coulombiana, ion-electrón, es apantallada, debido a que la constante dieléctrica del material es muy grande, este hecho sumado al pequeño valor de la masa efectiva del electrón, hace que el radio medio del Bohr efectivo en materiales semiconductores el bloque, sea casi 2000 veces más grande que el radio atómico.

Cuando una impureza se introduce dentro de una heteroestructura, la situación se hace considerablemente más compleja e interesante que en el bloque, debido principalmente a la presencia de un potencial de confinamiento. Este potencial trae consigo algunos efectos interesantes sobre el espectro de energía, y es en la actualidad una línea de investigación muy activa en el área de materiales semiconductores. Una de las primeras investigaciones realizadas en pozos cuánticos con impurezas donadoras fue la de G. Bastard [33] en 1981. En este trabajo se calculó, mediante el método variacional, la energía de enlace de una impureza descentrada en un pozo infinito, encontrándose que la energía es fuertemente dependiente del ancho del pozo y de la posición de la impureza. Los resultados obtenidos en esta investigación motivaron una gran cantidad de trabajos posteriores tanto teóricos como experimentales, lo que condujo a explorar el comportamiento de impurezas donadoras en espacios uni-dimensionales [34,35] y más recientemente en espacios cero dimensionales conocidos como puntos cuánticos [36]. En este sentido, Alfonso y Latgé [37] así como Piña, Gutiérrez y Betancurt [28], recientemente reportaron características del espectro energético de impurezas donadoras en anillo cuánticos muy estrechos, en tanto que Tsonchev [38], analizó impurezas descentradas en hilos cilíndricos. Al Jia-Lin Zhu [39], en puntos cuánticos esféricos se concluye que el espectro energético es fuertemente dependiente de la dimensionalidad del espacio, de la morfología y tamaño del sistema de baja dimensionalidad así como de comparar los resultados obtenidos por estos autores con los reportados por la posición de la impureza. Estos resultados nos han motivado a analizar el caso de impurezas donadoras neutras

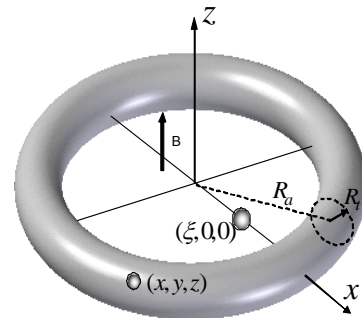
D^0 en anillos cuánticos muy estrechos, con el propósito de establecer el efecto de la morfología y tamaño de la sección transversal sobre el espectro de energía y a la vez establecer que influencia tiene sobre las oscilaciones Aharanov-Bohm la posición de la impureza, cuando ésta se localiza en el plano del anillo o a lo largo del eje de simetría (eje z).

2.1.1 Impureza Donadora Neutra D^0 Descentrada

El sistema que se va a estudiar está compuesto por un centro carga positiva fijo que se localiza sobre eje x del anillo, en el punto $(\xi, 0, 0)$ que se mantiene unido por fuerza eléctrica a un electrón que está obligado a moverse dentro del anillo toroidal, cuyos parámetros geométricos ya fueron descritos en la sección anterior. Tal como se anunció al principio de este capítulo, se considerará un anillo con dos secciones transversales diferentes, pero por simplicidad se analiza con el anillo de sección cuadrada.



2.1a



2.1b

Figura 2.1 Esquema del sistema D^0 en anillos cuánticos con diferente sección transversal 2.1a) cuadrada; 2.1b) circular.

El Hamiltoniano adimensional del sistema D^0 con la impureza sobre el eje (x), en un anillo toroidal de sección circular o cuadrada, y en presencia de un campo magnético uniforme, de acuerdo con 1.35 puede escribirse como

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V(\tilde{x}, \tilde{z}) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|} \quad (2.11).$$

El cálculo de los autovalores de energía en el Hamiltoniano 2.11, permitirá calcular el espectro energético del sistema para diferentes posiciones ξ de la impureza, para ello se utiliza la Aproximación Adiabática que se describió en el capítulo anterior.

Una vez realizada la separación de los movimientos rápido y lento, se obtiene la siguiente ecuación diferencial de segundo orden para la variable angular:

$$\left(-\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(V(\varphi) + \frac{\gamma^2 R_a^2}{4} \right) \right) \psi_L(\varphi) = E_\varphi \psi_L(\varphi) \quad (2.12).$$

El potencial efectivo $\tilde{V}(\varphi)$, corresponde al valor promedio del potencial Coulombiano, con funciones de onda unidimensionales correspondientes al movimiento rápido del electrón, cuya forma matemática esta dada por 1.311 para el anillo de sección transversal cuadrada.

$$\tilde{V}(\varphi) = -2 \iint f_0^2(\tilde{x}, \tilde{z}) \left[\frac{1}{\sqrt{(Ra + \tilde{x})^2 + \xi^2 - 2(Ra + \tilde{x})\xi \cos(\varphi) + z^2}} \right] \partial\tilde{x} \partial\tilde{z} \quad (2.13).$$

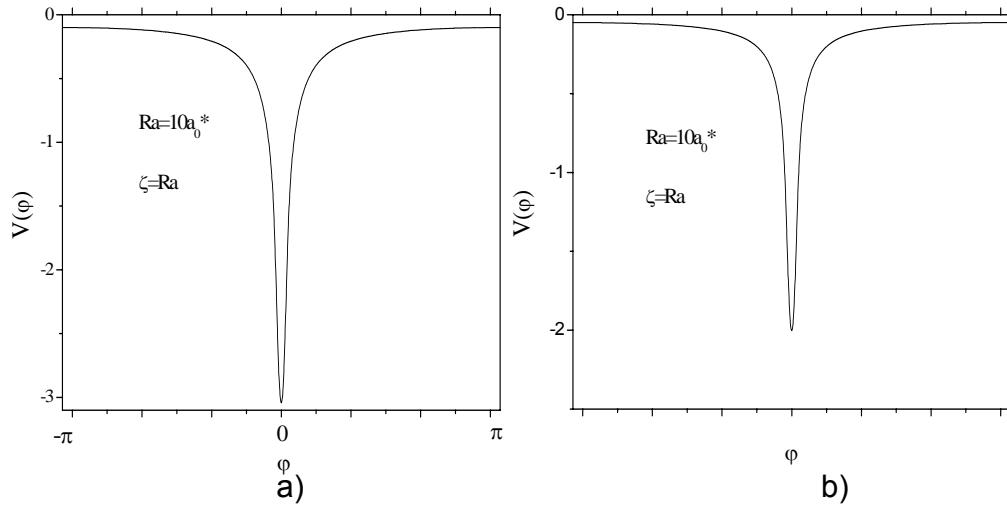


Figura 2.2 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$, del sistema D^0 , para las dos diferentes secciones transversales a) cuadrada y b) circular.

En la figura 2.2 se muestra la variación del potencial efectivo promedio del confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ con el ángulo φ , es evidente de esta gráfica, que en $\varphi = 0$, las curvas tienen un mínimo bien pronunciado, el cual resulta de la gran atracción Colombiana entre el electrón y el centro de carga fija cuando este último se localiza sobre el radio medio $(\xi, 0, 0) = (Ra, 0, 0)$.

Al comparar la forma de $\tilde{V}(\varphi)$ para los casos circular y cuadrado se puede evidenciar que el pozo es más profundo en este último. Este hecho pone en manifiesto que la morfología de la sección transversal condicionará la estructura energética del sistema D^0 , haciendo que se tengan niveles más profundos y estables en anillos toroidales de sección transversal cuadrada.

RESULTADOS

En la figura 2.3, se muestra la función del valor esperado del potencial $\tilde{V}(\varphi)$ para el anillo de sección transversal circular (a), y de sección transversal cuadrada (b), para cada valor del ángulo φ y para diferentes valores del parámetro $\beta = \xi / R_a$ que me relaciona la posición de la impureza en nuestro sistema. Los valores de β van desde cero (para cuando la impureza se encuentra centrada) hasta uno (cuando la impureza está exactamente sobre el radio medio).

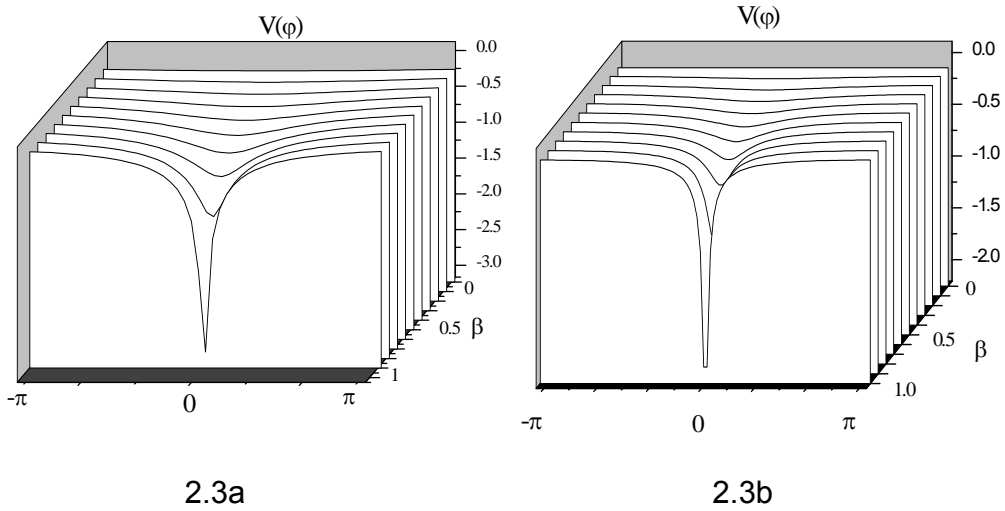
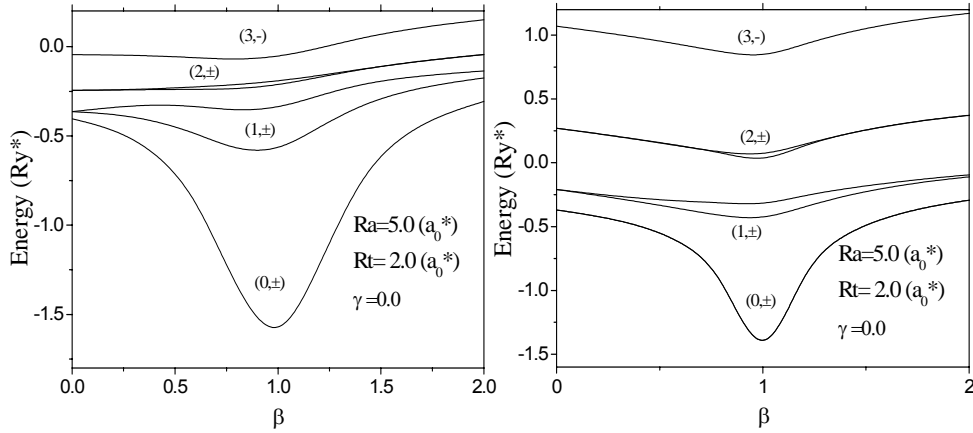


Figura 2.3 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ para diferentes posiciones de la impureza ξ en el plano, para las dos diferentes secciones transversales (a) cuadrada y (b) circular.

De esta figura se puede ver que el movimiento de la impureza al posicionar la impureza en $\beta = 0$, el potencial no varía con φ , pues para todos los valores angulares se tiene el mismo valor $\tilde{V}(\varphi)$. En realidad estás situación corresponde al caso mecánico cuántico del rotor rígido.

Nótese como al variar la posición de la impureza, la forma del potencial comienza a variar, ya que inicialmente presenta un mínimo muy incipiente, pero cuando la impureza se acerca al radio medio del anillo el pico se hace más profundo debido al mayor incremento de la interacción ion-electrón.

Los resultados del cálculo de la energía para una donadora neutra en función del parámetro $\beta = \xi / R_a$ en un toroidal de GaAs de radio medio $Ra = 10.0a_0^*$ y radio de sección transversal $Rt = 2.0a_0^*$, en ausencia de campo magnético, se muestra en la gráfica 2.4.



2.4a

2.4b

Figura 2.4, Estados energéticos más bajos del sistema D^0 en función del parámetro adimensional β , para un anillo de diferente sección transversal a) cuadrada y b) circular, con radio medio $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 2.0a_0^*$.

En esta figura se muestra que la energía $E(m,s)$ depende de dos números cuánticos donde m es el nivel energético y s corresponde a la paridad de la función, ya que el potencial de confinamiento es par, donde el signo (+) es reservado para la función par y el (-) para la impar.

Nótese como se obtienen niveles energéticos más profundos en toroides de sección transversal cuadrada, lo cual es consecuencia de las variaciones en la profundidad que exhibe el potencial de confinamiento efectivo $\tilde{V}(\varphi)$ que se muestran en las figuras 2.2 y 2.3.

De la grafica 2.4 observamos que la posición de la impureza tiene una fuerte influencia sobre la energía del sistema y en especial sobre el estado base, la cual decrece notoriamente a medida que la impureza se desplaza hacia el centro del anillo, alcanzando un valor mínimo cuando $\beta = \xi/R_a = 1$. A medida que el parámetro β comienza a tomar valores mayores de 1, la energía empieza aumentar y tiende a los valores correspondientes al rotor rígido, pues en el caso limite $\beta \rightarrow \infty$ el electrón ya no siente la interacción Coulombiana con el centro de carga positivo.

El desplazamiento de la impureza hacia el centro del anillo, conlleva a que la energía decrezca fuertemente. Este resultado concuerda con lo esperado, según lo visto anteriormente en las gráficas del potencial 2.2 y 2.3, lo cual es una consecuencia del fuerte confinamiento realizado por la impureza sobre el portador

de carga, transformando el movimiento de rotación alrededor del eje z del electrón, en un movimiento de oscilación alrededor de la impureza.

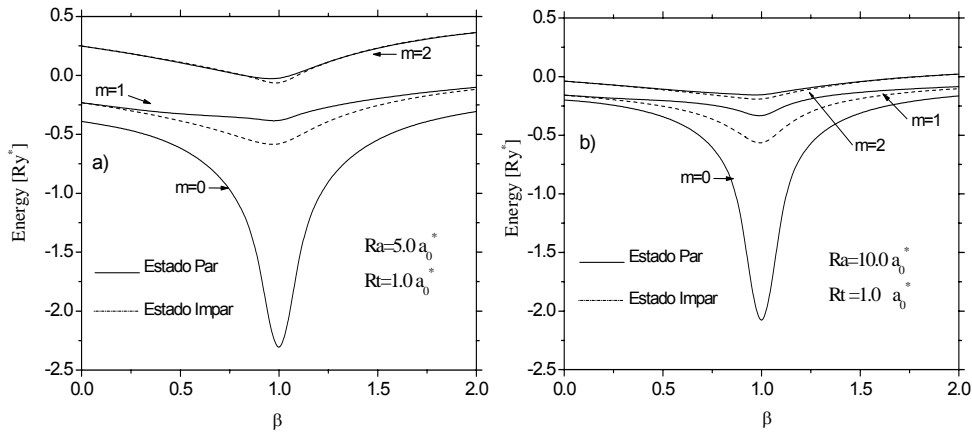


Figura 2.5 Niveles energéticos más bajos en función del parámetro β para dos diferentes anillos de radio medio $R_a = 5a_0^*$ (a) y $R_a = 10a_0^*$ (b), ambos con sección transversal cuadrada $R_t = 1.0a_0^*$.

En la figura 2.5, se muestran los niveles energéticos más bajos para dos anillos cuánticos de radio medio $R_a = 5.0a_0^*$ (a) y $R_a = 10.0a_0^*$ (b), en función del parámetro β , donde se puede apreciar que para valores pequeños de R_a , el espectro energético tiene un aporte mayoritario de naturaleza rotacional, debido a que el Hamiltoniano es dominado por el término cinético. Una situación opuesta sucede en el anillo con radio medio grande en el cual el potencial predomina sobre el término cinético, teniendo así más niveles energéticos con valores negativos, similares a átomos hidrogenoides confinados en heteroestructuras unidimensionales.

En otras palabras la impureza afecta menos a los niveles energéticos más altos en anillos con radio medio menor, ya que estos poseen suficiente energía cinética evitando así ser localizadas por la impureza

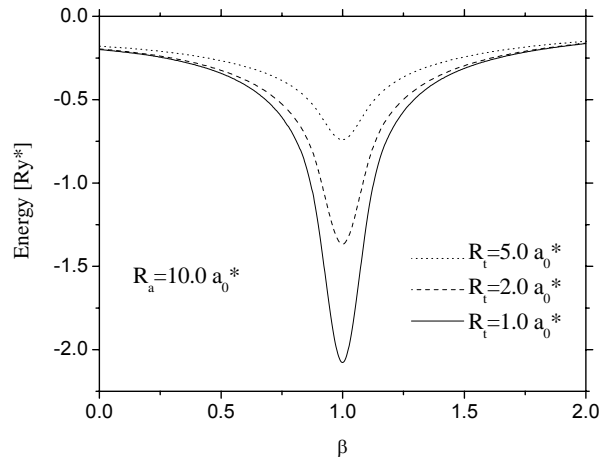


Figura 2.6 Estado base para diferentes valores de sección transversal y un valor de radio medio $R_a = 10.0a_0^*$.

A partir de la figura 2.6, que muestra como la energía es afectada por la variación del radio de la sección transversal cuando esta toma los valores $R_t = 1.0, 2.0$ y $5.0a_0^*$, Se puede ver que el estado base es el más sensible a las variaciones de la sección transversal del anillo, debido a la interacción ion-electrón. En esta figura se puede observar que a medida que R_t aumenta los pozos de potencial son más amplios, lo que conlleva a una reducción en los niveles de energía y por ende una mayor estabilidad del sistema, no obstante es claro que cuando $\beta = 0$ toda la energía se hacen coincidentes, independientemente de la paridad de la función de onda, pues en todos los casos deben tender a los valores correspondientes al átomo de hidrogeno libre en una dimensión.

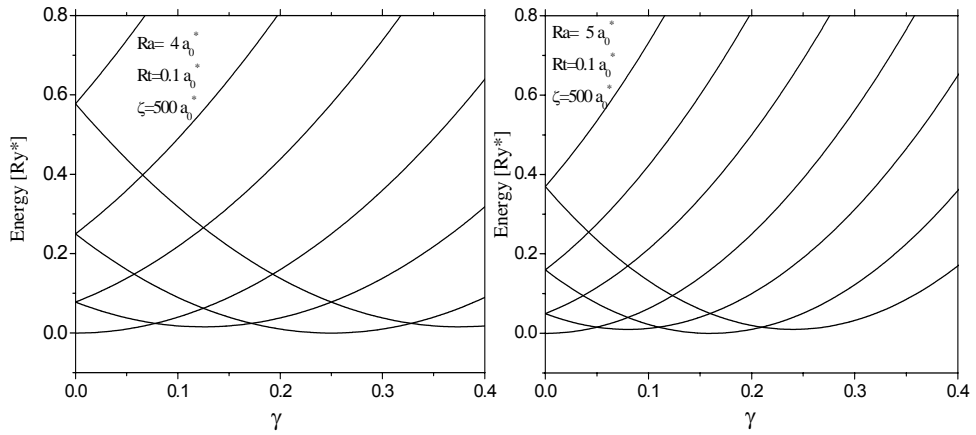
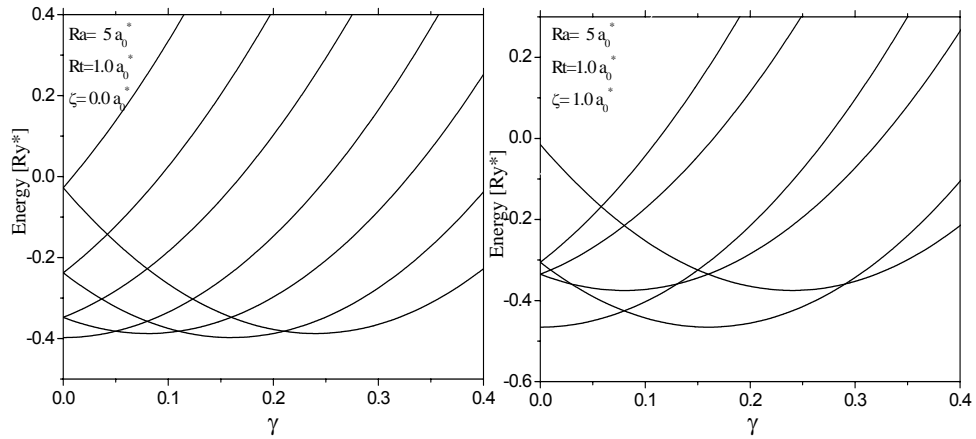


Figura 2.7 Curvas de energía en función del campo para la impureza D^0 en anillos cuánticos de sección transversal $Rt = 0.1a_0^*$ y una posición de la impureza $\xi = 500a_0^*$, para dos diferentes valores de radio medio $Ra = 4a_0^*$ **(a)** y $Ra = 5a_0^*$ **(b)**.

Con el fin de analizar la influencia del campo magnético sobre el espectro de energía del D^0 , se han construido las curvas 2.7 para un toroide de radio medio $Ra = 4a_0^*$ y $5a_0^*$, con sección transversal $Rt = 0.1a_0^*$ y considerando la posición de la impureza suficientemente lejana $\xi = 500a_0^*$. Esta situación permite comparar los resultados obtenidos con un solo electrón, los cuales se pueden encontrar en la literatura [40]. De la misma figura se puede apreciar el comportamiento oscilatorio del espectro energético en función del campo magnético, encontrándose que para campos magnéticos pequeños, el término lineal o paramagnético prima sobre el término cuadrático o diamagnético, mientras que para campos magnéticos un poco mayores el término que prima es el diamagnético sobre el paramagnético. Por esta razón cuando el campo aplicado es pequeño, las líneas son constantes positivas empezando para $m > 0$ y negativas para $m < 0$, y luego toma forma parabólica, para valores mayores del campo. Finalmente se puede observar las oscilaciones del estado base, con una periodicidad m/R_a^2 lo cual es conocido como oscilaciones de Aharanov-Bohm.



2.8a

2.8b

Figura 2.8 Curvas de energía en función del campo magnético de la impureza D^0 , para un anillo de $Ra = 5a_0^*$ y de $Rt = 1.0a_0^*$, para dos diferentes posiciones de la impureza $\xi = 0.0$ (a) y $\xi = 1.0$ (b)

El efecto de la posición de la impureza sobre la energía del sistema D^0 en presencia de campo magnético, se muestra en la figura 2.8 para un radio medio $Ra = 5.0a_0^*$ con radio de sección transversal $Rt = 1.0a_0^*$ y centro de carga fijo localizado en el centro 2.8a y a una distancia de $1.0a_0^*$ del centro del anillo 2.8b.

A simple vista podemos darnos cuenta que todos los mínimos de energía están siempre por debajo del nivel $E = 0$. Esto es un efecto directo de la fuerte atracción de la impureza y el electrón. Para el caso de la impureza centrada, se puede ver que las oscilaciones Aharonov Bohm se mantienen inalteradas, debido a que la impureza no puede producir cambios en la simetría rotacional del electrón. Una situación bien diferente ocurre cuando la impureza es descentrada $\xi = 1.0a_0^*$, en este caso el electrón siente una atracción por parte de la impureza localizada hacia una parte del anillo, afectando así la simetría y periodicidad de las oscilaciones del nivel base del sistema, siendo esto la razón del desplazamiento vertical del punto de mínimo de energía.

2.1.2 Impureza Donadora Neutra D^0 Sobre El Eje Z.

Ahora el sistema que se va a estudiar está compuesto por un centro carga positiva fijo que se localiza sobre eje z , en el punto $(0,0,\xi)$ que se mantiene unido por fuerza eléctrica a un electrón que está obligado a moverse dentro del anillo toroidal.

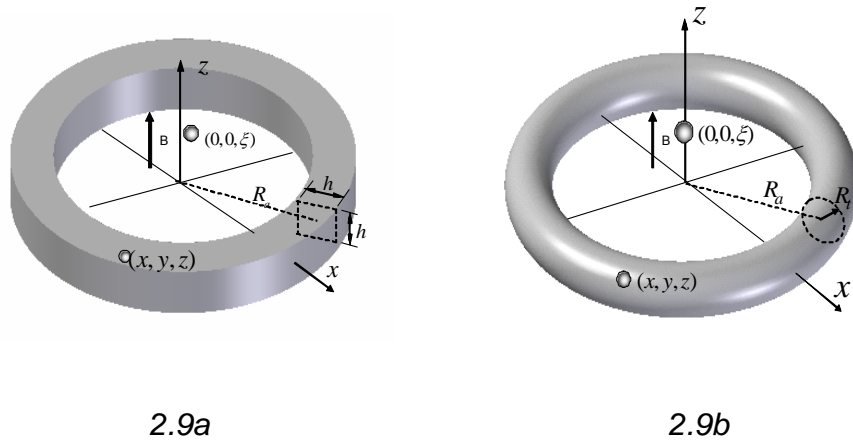


Figura 2.9 Esquema del sistema D^0 sobre el eje z en anillos cuánticos con diferente sección transversal 2.9a) cuadrada; 2.9b) circular.

Se puede evidenciar rápidamente que la posición de la impureza, altera el término del potencial Coulombiano, siendo esto la principal diferencia con respecto al modelo anterior.

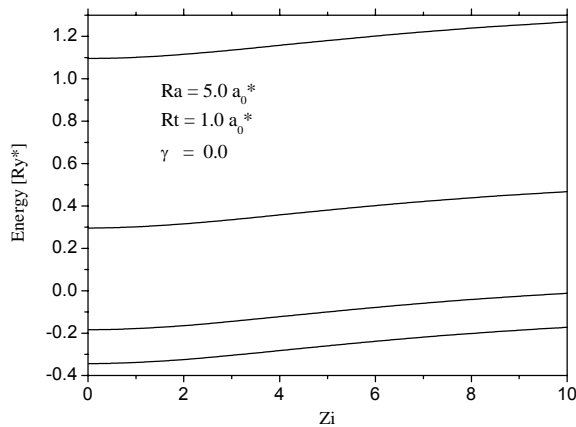


Figura 2.10 Niveles energéticos más bajos para la impureza D^0 en función de la posición de la impureza z_i , para un anillo de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$ en ausencia de campo $\gamma = 0.0$.

En la figura 2.10, se muestran los primeros niveles de energía del sistema D^0 , para las diferentes posiciones z_i de la impureza sobre el eje z y en ausencia del campo magnético, observándose claramente que la principal variación es el aumento de la energía como efecto directo de la disminución del potencial de interacción Coulombiano. Nótese como a medida que la impureza se aleja del plano del anillo la energía crece. Este resultado está de acuerdo a lo esperado, ya que la posición de la impureza desplazándose sobre el eje z, no afecta fuertemente el movimiento lento azimutal en φ , pues el término Coulombiano toma valores constantes para todo valor de φ , pero cada vez más pequeño cuando z_i crece.

En la grafica 2.11, se presenta el efecto del campo magnético sobre el espectro energético. Se ve que el comportamiento es similar al obtenido con la impureza sobre el plano del anillo, pero con valores energéticos diferentes, resultado de la posición de la impureza sobre el eje z.

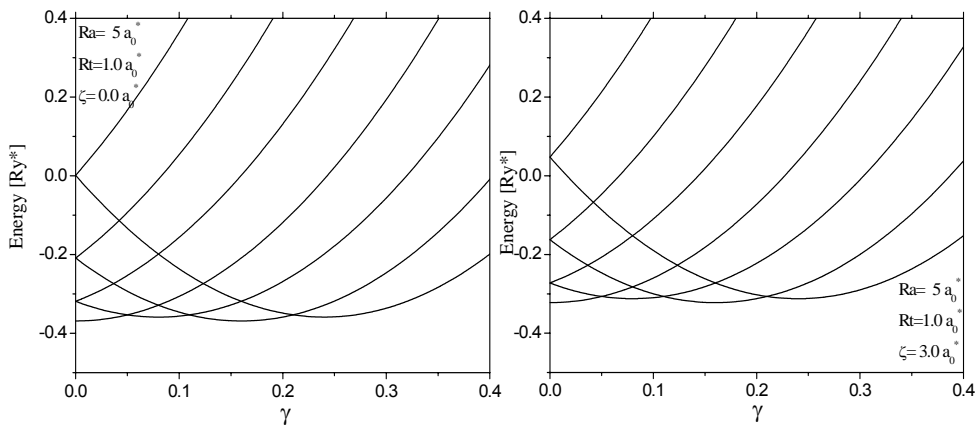


Figura 2.11 Curvas de energía en función del campo magnético para un anillo con $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$, para diferentes posiciones de la impureza $\xi = 0.0$ **(a)** y $\xi = 4.0a_0^*$ **(b)**.

Para finalizar este capítulo podemos concluir que el espectro energético del D^0 es fuertemente dependiente de la posición de la impureza, encontrándose efectos más sensibles cuando el centro de carga positiva está en el mismo plano del anillo, ya que los estados son más profundos en relación con el caso de la impurezas centrada y localizada sobre el eje z.

Es necesario manifestar que la Aproximación Adiabática, además de ser muy simple en su aplicación, permite obtener resultados que están en buen acuerdo con los casos límites $\xi \rightarrow \infty$.

Por último y no menos importante, es el hecho de obtener valores de energía y un potencial efectivo $\tilde{V}(\varphi)$, más profundos para el sistema en el anillo de sección cuadrada comparados con los del anillo de sección circular, mostrando que es posible obtener sistemas más estables en QR cuadrados, ya que es necesaria más energía para desacoplar un electrón en el sistema con esta geometría.

2.2 MOLÉCULA D_2^+ EN ANILLO TOROIDAL

En los últimos años ha comenzado a darse un gran interés por analizar las modificaciones que sufre el espectro de energía de diferentes complejos moleculares cuando la dimensión del espacio es reducida, ya que las distancias de equilibrio podrían predeterminarse, lo cual implica una ampliación de las opciones otorgadas por la naturaleza para los diferentes sistemas moleculares. En este sentido, Mikhailov y colaboradores [10] han analizado el comportamiento de complejos bi-hidrogenoides en pozos cuánticos, mientras que Pandey [41] ha hecho un estudio sobre átomos helionoides en puntos cuánticos. A su vez, W.F. Xie [42] reportó los resultados correspondientes al espectro de energía (niveles de energía más bajos) de la molécula de positronio, tanto en espacios bi y tridimensionales. Adicionalmente, existe una serie de resultados teóricos sobre átomos de dos y tres electrones en presencia de un centro de carga fijo, bajo la suposición que todo el sistema se encuentra confinado en puntos cuánticos. En general, todos los resultados, independiente de la morfología del sistema de baja dimensionalidad y del espacio en el cual se confina a los sistemas moleculares, ponen de manifiesto una fuerte dependencia de la configuración energética con las formas y tamaños de las nanoestructuras.

A pesar de que son muchos los trabajos que reportan las peculiaridades esenciales del espectro energético de diversos complejos moleculares, en realidad son muy escasos los trabajos que analizan las propiedades espectrales del complejo molecular D_2^+ en espacios de dimensión reducida. En este sentido sólo tenemos información de los resultados teóricos que reportan Mikhailov [10] en pozos cuánticos y S. Kang [43] en un punto cuántico esférico. Los resultados muestran que la energía es fuertemente dependiente de la forma geométrica del sistema de baja dimensionalidad en que se encuentra confinado este complejo molecular. Dado que el ión molecular D_2^+ ya ha sido estudiado en espacios de dos dimensiones (pozos cuánticos) [10], y en espacios cero dimensionales (puntos cuánticos) [43], consideramos pertinente llevar a cabo un estudio del comportamiento de este sistema molecular en espacios cuasi-unidimensionales y más concretamente en anillos toroidales.

Este complejo molecular tiene su análogo en la química cuántica y corresponde a una molécula de hidrógeno ionizada, es decir a la molécula H_2^+ ; la cual consiste

de dos cargas positivas que se mantienen ligados por medio de su único electrón, razón por la cual puede considerarse como el sistema molecular más simple. Esta molécula, es desde el punto de vista de los enlaces químicos, tan fundamental como lo es el átomo de hidrógeno para el estudio o formación de enlaces químicos.

Las razones que nos asisten para estudiar este complejo molecular D_2^+ en anillos cuánticos son de diversa índole, y entre ellas se pueden enumerar las siguientes

1. A partir de su estudio podría ser posible inferir algunas características generales de sistemas moleculares multielectrónicos cuya naturaleza intrínseca sea más complicada, como es el caso de la molécula de hidrógeno H_2 , o átomos de tipo helionide como el. He^- , etc.
2. Al estar el electrón obligado a moverse en un espacio cuasi-unidimensional se podrían establecer las condiciones bajo las cuales se obtienen complejos moleculares más estables, es decir con niveles energéticos más profundos que los que presentan las moléculas naturales.
3. Este estudio permitiría demostrar las condiciones de concentración de donadoras neutras del tipo D^0 , bajo las cuales se alcanza una condición crítica asociada con la distancia promedio entre impurezas para la cual una donadora pierda uno de sus electrones.
4. Determinar cómo varía la longitud de equilibrio conforme se modifica la morfología de la sección transversa del anillo y las dimensiones de esta sección transversa.

El complejo molecular D_2^+ se puede determinar físicamente a partir de donadoras neutras mediante los procesos de ionización que se ilustran en la figura 2.12.

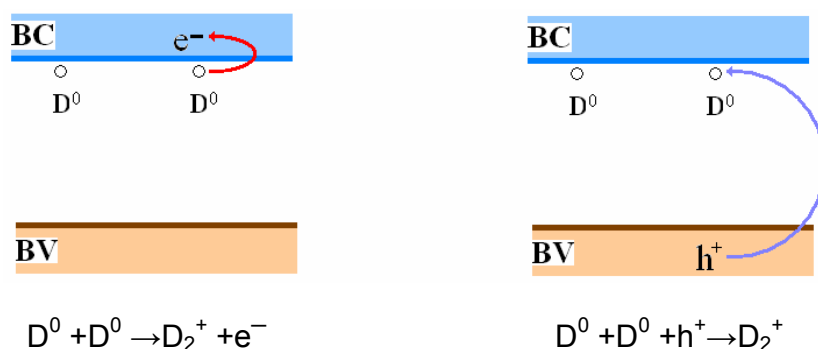


Figura 2.12 Posibles mecanismos de formación y ionización para el complejo molecular D_2^+ .

En el primero de los procesos, un electrón es excitado a la banda de conducción mientras que en el segundo, un electrón perteneciente a una de las donadoras se recombina con un hueco de la banda de valencia.

Los sistemas D_2^+ que se va a estudiar están compuestos por dos cargas positivas que se pueden localizar tanto en el eje x del anillo como en el eje perpendicular z y un portador de carga que esta restringido a moverse dentro del anillo con dos diferentes geometrías y parámetros geométricos descritos en el capítulo anterior, según lo muestra la figura 2.13.

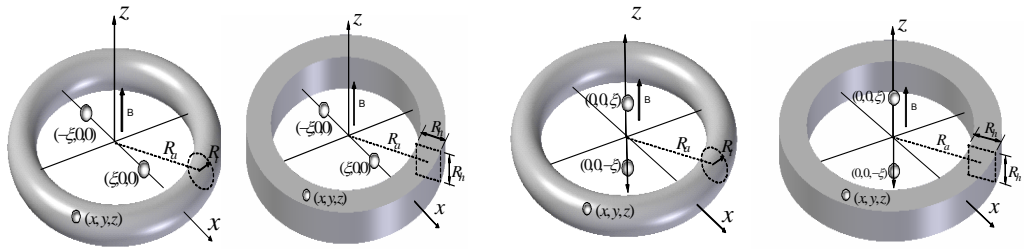


Figura 2.13 Sistema D_2^+ en anillos cuánticos de dos diferentes secciones transversales

El Hamiltoniano adimensional del sistema D_2^+ en un anillo cuántico de sección transversal cuadrada mostrado en la figura 2.13 está dada por:

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V(\tilde{x}, \tilde{z}) - \frac{2}{|\tilde{r} - \tilde{\xi}|} - \frac{2}{|\tilde{r} + \tilde{\xi}|} + \frac{1}{\xi} \quad (2.21).$$

Para determinar las características más importantes del complejo D_2^+ , es necesario resolver la ecuación de Schrödinger con la ayuda del Hamiltoniano 2.21, la idea de estudiar las variaciones en el espectro energético del sistema, debido a la separación entre los iones. Esta situación no es posible de analizar en una molécula natural H_2^+ , ya que la fuerte interacción atómica conlleva a que las distancias interatómicas sea fija debido a que la fuerza de interacción entre iones-electrón sólo permite una distancia con estados estables, Sin embargo un nuevo conjunto de estados con diferentes distancias de equilibrio pueden ser obtenidos con moléculas artificiales creadas de QRs, mediante una variación de los parámetros geométricos de la estructura.

2.2.1. Molécula D_2^+ En El Plano Del Anillo

De manera similar al proceso realizado en la sección anterior, es necesario calcular previamente el valor medio del potencial Coulombiano o potencial efectivo $\tilde{V}(\varphi)$, para el sistema D_2^+ con las impurezas localizadas sobre el plano del anillo en los puntos $(\pm\xi, 0, 0)$.dado por:

$$\tilde{V}(\varphi) = -2 \iint f_0^2(\tilde{x}, \tilde{z}) \left[\frac{1}{\sqrt{(Ra + \tilde{x})^2 + \xi^2 \pm 2(Ra + \tilde{x})\xi \cos(\varphi) + z^2}} \right] \partial\tilde{x} \partial\tilde{z} \quad (2.22).$$

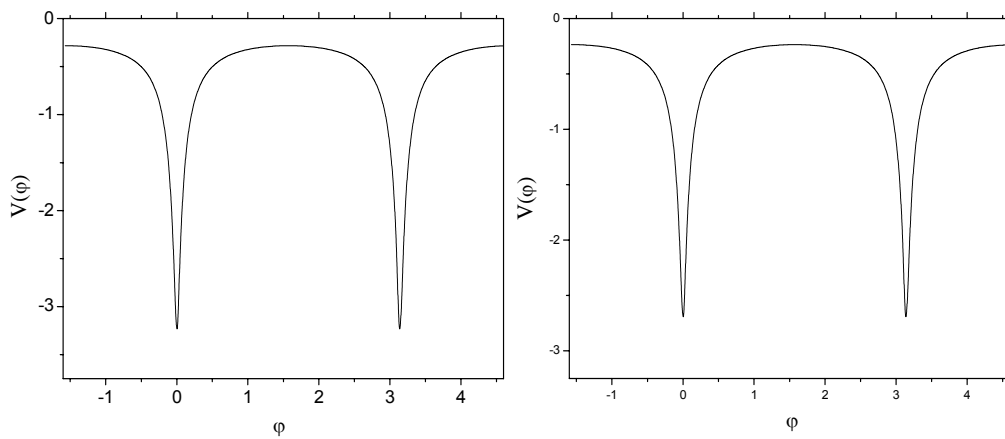


Figura 2.14 Potencial efectivo de confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ para las dos diferentes secciones transversales en el punto más profundo.

En la figura 2.14, se muestra el potencial efectivo promedio del confinamiento $\tilde{V}(\varphi)$ del sistema D_2^+ con las impurezas separadas una distancia $2Ra$, donde la atracción Coulombiana entre el electrón y el centro de carga es mas fuerte, atracción que se observa con más intensidad en el anillo de sección transversal cuadrada al presentar pozos de potencial más profundos que en el anillo circular según lo muestra la figura.

RESULTADOS

Para tener una mejor comprensión acerca de las características del potencial $\tilde{V}(\varphi)$, se ha realizado una gráfica que muestra la dependencia con del potencial con la coordenada φ y la separación entre las impureza $R = 2\xi$.

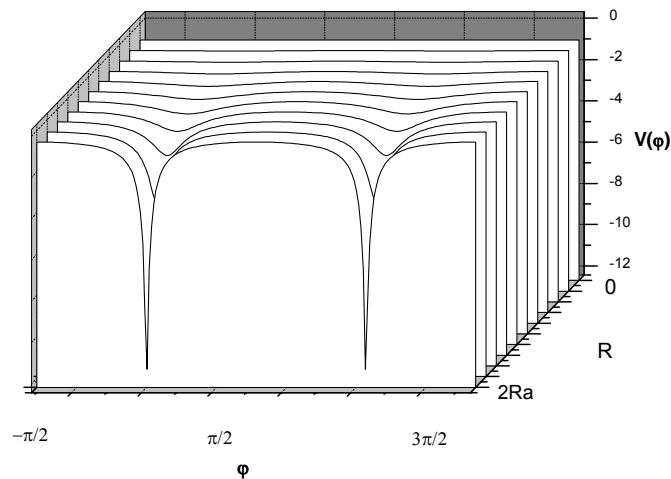


Figura 2.15 Potencial efectivo de confinamiento para diferentes separaciones de las impurezas R .

En la figura 2.15, se muestra el valor promedio $\tilde{V}(\varphi)$, para cada valor del ángulo φ y diferentes valores de separación entre los centros de carga R del el sistema D_2^+ , a diferencia de la figura 2.3, mostrada anteriormente R toma valores desde cero hasta $2Ra$, para cuando las impurezas se encuentran muy cerca la una de la otra hasta cuando se localizan exactamente sobre el radio medio del anillo.

Nótese como el potencial es constante en todas las posiciones φ del anillo cuando el valor $R \rightarrow 0$. Una situación bien diferente se presenta para valores cercanos a $2Ra$, en este caso aprecian dos picos muy agudos del potencial, cuando φ , toma los valores de 0 y π respectivamente o para múltiplos enteros de estos valores ya que el potencial es periódico.

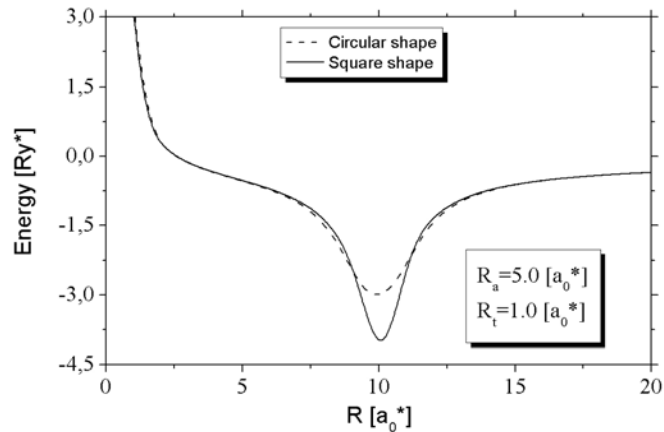


Figura 2.16 Nivel base de la energía para la molécula H_2^+ en un anillo cuántico de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$, para dos diferentes secciones transversales

Guiado por los resultados obtenidos en la sección anterior donde se mostró que el estado base es quien siente de manera más intensa las variaciones energéticas con la posición de las impurezas, en la figura 2.16 se muestra la dependencia de la energía del estado base con la separación ión-ión. La curva se ha hecho tomando un valor de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$.

En cada curva se observa que el estado base presenta un comportamiento asintótico a medida que la separación entre las impurezas tiende a cero, esto es debido al dominio de la fuerza repulsiva entre los iones, pero a medida que las impurezas se alejan, el nivel energético disminuye buscando un mínimo energético, el cual se alcanza cuando las impurezas se acercan al radio medio del anillo; es decir, cuando la separación iónica corresponde a dos veces el radio medio Ra . En este caso la energía presenta un mínimo y la función de onda se encontrará fuertemente localizada alrededor de los iones, los cuales permanente intercambiarán el electrón, haciendo que la probabilidad de encontrar el electrón en la vecindad de cada impureza sea la misma.

Cuando la separación inter-iónica es máxima la energía presenta un comportamiento asintótico correcto, con los valores energéticos cercanos a cero.

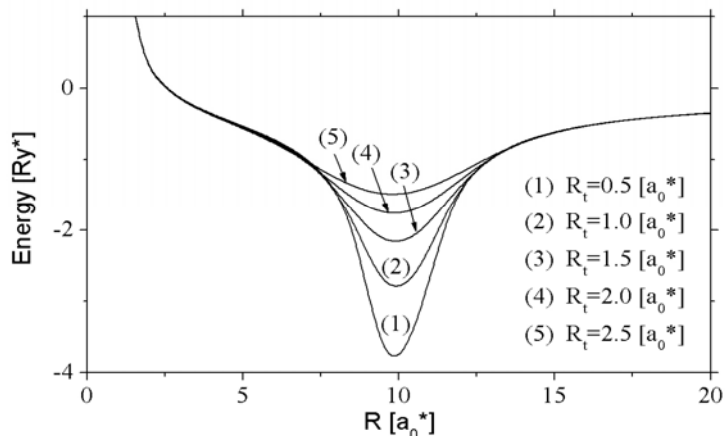


Figura 2.17 Energía del estado base para diferentes valores de la sección transversal en un radio medio constante.

Con el propósito de mostrar que el tamaño de la sección transversal tiene una marcada influencia sobre el espectro de energía, se ha graficado en la figura 2.17, la energía del estado base para anillos de sección transversal de diferente tamaño. A partir de esta gráfica se puede observar que el nivel energético es altamente sensible a la variación en el tamaño de la sección transversal del anillo, encontrándose que cuando más estrecho sea la sección transversal del anillo, más profundo es el valor máximo de la energía del estado base.

Esto es una consecuencia directa del mayor confinamiento electrónico y por ende de un mayor acercamiento electrón-ión.

Para que tener una idea de cuan sensible es la energía con las variaciones en el tamaño de la sección transversal, nótese que la diferencia entre los mínimos de energía para los anillos con $Rt = 0.5a_0^*$ y un $1.0a_0^*$ es del orden del 20%, mientras que para los anillos con $Rt = 0.5a_0^*$ y $2.5a_0^*$ es del orden del 45%. Estas diferencias tan marcadas son una consecuencia de las variaciones que experimenta el potencial efectivo de confinamiento a medida que el radio de la sección transversal aumenta, tal como se muestra en la figura 2.18.

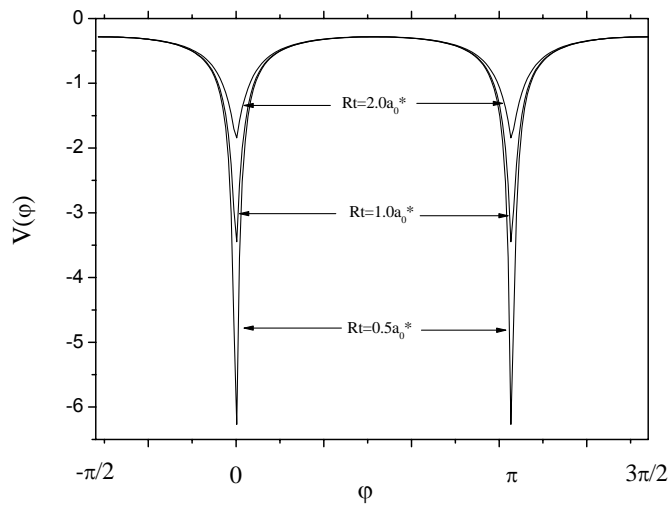


Figura 2.18 Potencial Efectivo $\tilde{V}(\varphi)$ para diferentes valores de sección transversal ,y un radio medio del anillo de $Ra = 5.0a_0^*$

Esta figura nos permite demostrar que cuanto más estrecha es la sección transversal del anillo más profundo se hacen los mínimos y por ende más bajos son los niveles de energía y más estables llega a ser el complejo D_2^+ , debido a que es necesario suministrar más energía para liberar el electrón que está ligado a los centros de carga fijos

No solamente el tamaño del anillo de la sección transversal del anillo tiene incidencia sobre el espectro de energía, si no que la morfología del anillo también, tal como se aprecia en la figura 2.19.

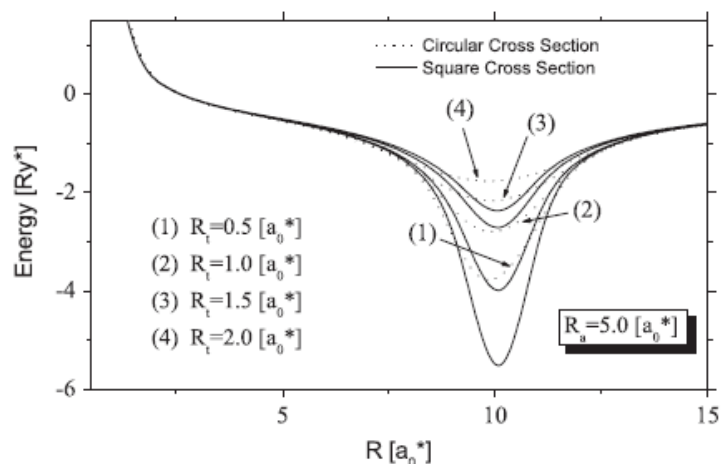


Figura 2.19 Energía del estado base para diferentes valores de la sección transversal en un $Ra = 5.0a_0^*$ y dos diferentes secciones transversales.

En esta gráfica se hace un análisis comparativo de la energía del estado base pero con sección transversal diferentes cuadrada y circular y con diferentes tamaño. Las líneas continuas corresponden al anillo de sección cuadrada y las punteadas al anillo de sección circular. Nótese que los estados más profundos se alcanzan con anillos de sección cuadrada, evidenciando que con estas estructuras se pueden tener moléculas D_2^+ más estables. Independientemente de la morfología de las secciones transversales del anillo, el comportamiento de las curvas es similar, pero el mínimo valor en la energía es notoriamente diferente para las dos morfologías en consideración. Por ejemplo, nótese que el valor correspondiente al anillo de radio $R_t = 0.5a_0^*$ con sección cuadrada es de $5.5 Ry^*$, mientras que para el anillo de sección circular la energía es del orden de $3.6 Ry^*$, es decir que la diferencia es sustancial ya que alcanza a ser de casi del 35%, pero esta diferencia se reduce a medida que la sección transversal aumenta, ya que en ambos casos los sistemas tienden a adquirir un comportamiento más tri-dimensional donde el electrón estará menos confinado.

Una situación similar ocurre con los estados excitados, tales como se muestra en la figura 2.20, en el cual se muestra el resultado del cálculo de la energía en función de la separación R para los estados $m = 0, 1, 2, 3$ y 4 .

A partir de este espectro rotacional se puede ver que el nivel energético más profundo en el estado base debido a la mayor atracción electrón-ión, pero los estados excitados más altos sienten menos los efectos de interacción Colombiana.

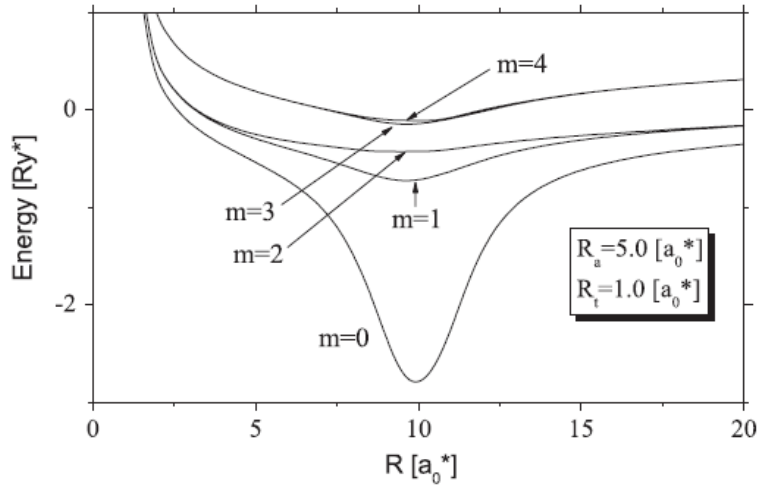


Figura 2.20 Espectro energético para un anillo de $Ra = 5.0a_0^*$ y $Rt = 1.0a_0^*$.

Para finalizar el estudio del espectro de energía del D_2^+ con impurezas localizadas a lo largo del eje (x), analizamos el efecto del campo magnético cuando éste es homogéneo y orientado a lo largo del eje (z). En la figura 2.21 se muestra la evolución de la energía con el campo magnético γ para los valores diferentes de la posición de las impurezas $\xi = \pm 0.5, \pm 1.0$ y $\pm 2.0a_0^*$, en un anillo de radio medio $Ra = 5.0a_0^*$ y sección transversal $Rt = 1.0a_0^*$.

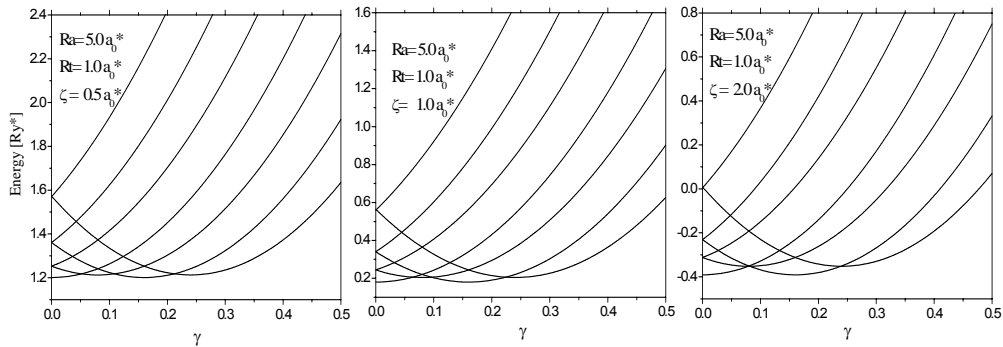


Figura 2.21 Energía en función del campo magnético de la molécula D_2^+ para diferentes distancias entre iones, a) $\xi = \pm 0.5$, b) $\xi = \pm 1.0$, c) $\xi = \pm 2.0$

Se puede observar como en este sistema también se presentan las oscilaciones en el estado base, similar a los ya mencionados para el sistema D^0 , no obstante entre el D^0 y el D_2^+ existen diferencias, no sólo en los valores correspondientes a la energía si no también en la estructura de los mínimos de energía, ya que al aumentar ξ se puede ver que el nivel con $m = -1$ (segundo nivel) comienza a

subir y el mínimo se va desvaneciendo al punto tal que en la figura 2.21c no alcanza ser nunca el valor base de energía.

2.2.2. Molécula D_2^+ En El Eje Z

Ahora analizamos las variaciones que sufre la estructura energética del sistema D_2^+ cuando las impurezas se localizan a lo largo del eje z.

Como este sistema no ha sido estudiado en anillos cuánticos, bajo esta configuración se hace necesario tener certeza de que los resultados que presentamos tienen el comportamiento correcto.

Para ello, se respaldan los resultados en los siguientes casos límites:

- si $R \rightarrow \infty$, obteniendo un electrón libre
- si $R \rightarrow 0$, Donde predomine el término de repulsión entre iones.

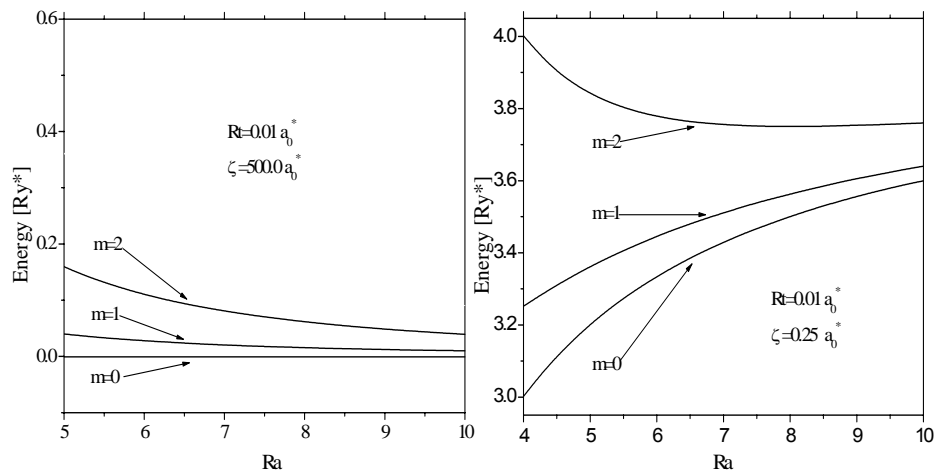


Figura 2.22 Niveles energéticos más bajos en función del radio medio Ra para los casos límites, (a) electrón libre y (b) molécula D_2^+ .

En la figura 2.22, se muestran los resultados del cálculo para estas cosas límites $\xi = 500a_0^*$ y $\xi = 0.25a_0^*$. El primero de los casos corresponde a un electrón libre y cuyo espectro de energía coincide con el obtenido en la sección anterior para un rotor rígido.

Nótese como en el caso donde las impurezas están muy cercanas entre si, la energía se incrementa notoriamente debido a la mayor interacción electrón-ión. Un aspecto relevante de estas curvas, es que definen un rango de confiabilidad para el estado mínimo de energía para situaciones intermedias a las definidas en los casos límites señalados anteriormente, rango que se muestra gráficamente en la figura 2.23.

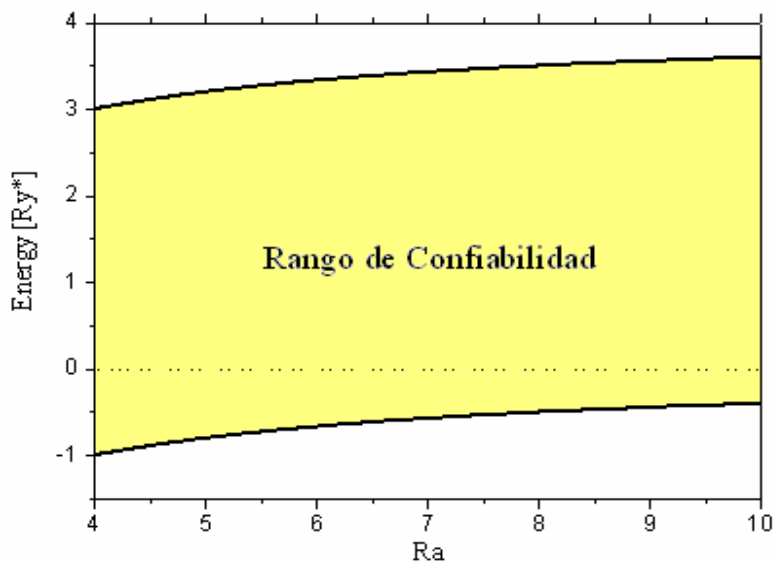


Figura 2.23 Rango de confiabilidad

En la figura 2.23, la línea inferior $\xi \rightarrow 0$ corresponde a la energía base de un átomo Helionioide, del tipo H_e^+ , este tipo de energía es fácil de calcular, a partir de los resultados obtenidos en la sección anterior, ya que corresponde a una impureza donadora D^0 con centro de carga fija igual a $2e$ en lugar de e , este rango de confiabilidad nos ayuda a comprobar los nuestros resultados, ya que el comportamiento energético de la molécula H_2^+ obtenida, tiene un comportamiento similar pero no igual, la diferencia esta en la contribución del término repulsivo Coulombiano de los iones, nótese que con las impurezas $\xi \rightarrow \infty$ la interacción entre los iones es insignificante, pero cuando es muy pequeña se hace relevante, que en este caso con $\xi = 0.25$, hace que la energía en función de Ra el valor de la energía aumenta el valor $1/\xi$ que es exactamente $4Ry^*$.

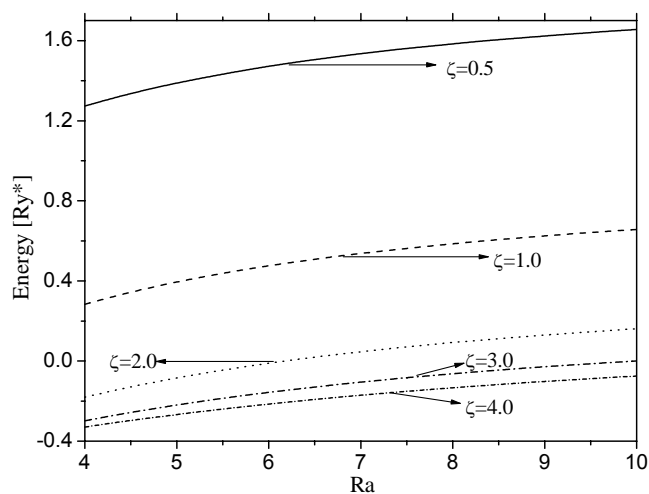


Figura 2.24 Estado base del sistema D_2^+ , para diferentes posiciones ξ en función del radio medio R_a de un anillo de sección transversal $R_t = 2.0$.

En la figura 2.24, se presenta el nivel energético base para diferentes posiciones de los iones ξ sobre el eje z, donde como era de esperarse se encuentran dentro del rango de confiabilidad mostrado en la figura 2.22, de la figura 2.24, también se puede observar la disminución de la energía a medida que se alejan las impurezas del centro del anillo, disminuyendo así la contribución del término repulsivo entre los iones.

En la figura 2.25, se presenta el estado base en función del radio medio R_a para diferentes valores de la sección transversal R_t , con una separación fija entre los iones.

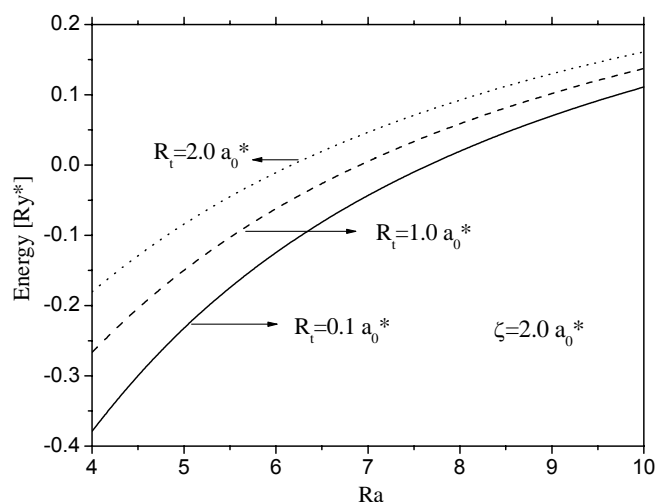


Figura 2.25 Estado base del sistema D_2^+ , para diferentes valores de la sección transversal R_t y una posición $\xi = 2.0a_0^*$.

La grafica 2.25, demuestra el efecto de la sección transversal del anillo, sobre el espectro energético del sistema, efecto que se aprecia más notablemente en el nivel energético base, ya que a medida que la sección transversal disminuye el potencial coulombiano se hace más profundo y por ende el nivel base se hace más negativo.

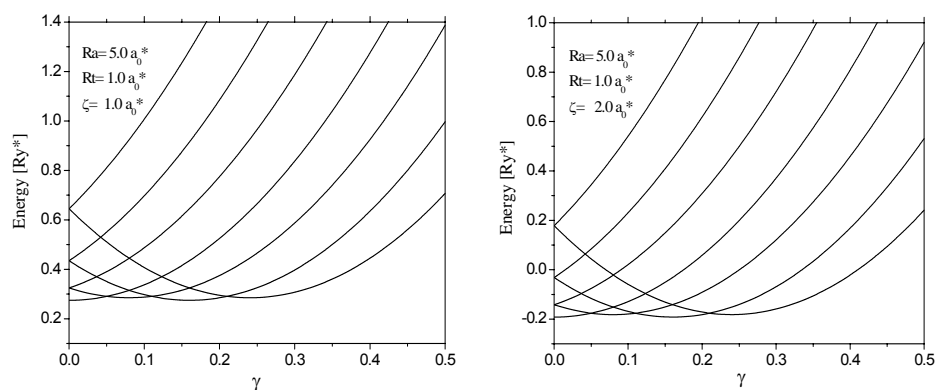


Figura 2.26 Energía en función del campo magnético de la molécula D_2^+ con los iones localizados en el eje z en, a) $\xi = \pm 1.0$, b) $\xi = \pm 2.0$

En la figura 2.26, se observa el efecto del campo magnético sobre el espectro energético, en la figura se observa la oscilación del nivel base de energía a

medida que aumenta el campo (Aharonov Bohm), de manera similar a los resultados presentados anteriormente para el sistema D^0 ó el sistema D_2^+ , con la diferencia del término coulombiano repulsivo de los electrones, efecto que se puede apreciar en las dos diferentes posiciones ξ , los iones se encuentran separados una distancia $R = 2\xi$, en la grafica 2.26a, la separación es menor que en la figura 2.26b, por lo que la contribución del termino coulombiano es mayor, haciendo que los niveles energéticos sean menos profundos para $\xi = 1.0a_0^*$, que para $\xi = 2.0a_0^*$.

CAPÍTULO 3

SISTEMAS BI-ELECTRÓNICOS

En este capítulo se analizarán los sistemas D^- y D_2^0 , en los que se presentan dos electrones sometidos a una interacción Coulombiana con uno y dos centros de carga fija. En ambos casos se asume que el movimiento del portador de carga está restringido al interior de un toroide de sección transversal circular o cuadrada. Mediante el uso de la aproximación adiabática y las coordenadas relativas y de centro de masa, es posible separar los movimientos rápido y lento en dos Hamiltonianos, donde el que describe el movimiento rápido se puede resolver analíticamente, mientras que el lento se resuelve usando Barrido Trigonométrico.

3.1 SISTEMA DE DOS ELECTRONES

Los sistemas Bi-electrónicos en heteroestructura semiconductoras es, en la actualidad, un tema de fuerte investigación teórica, ya que representa el caso más sencillo de sistemas de pocas partículas bajo la interacción Coulombiana. La característica principal de estos sistemas es la interacción electrón-electrón, aunque, recientemente, se ha demostrado no sólo la importancia de esta interacción, si no de los efectos del tamaño y de la forma sobre el espectro energético del sistema y en especial los que se encuentran confinados en puntos cuánticos [44], estos resultados han impulsado el estudio de sistemas Bi-electrónicos en puntos cuánticos con forma de anillo, estudios que se realizaron por diferentes métodos tales como diagonalización [45] y solución por series [46]. Recientemente J-L Zhu reportó una solución exacta al problema de dos electrones en anillos 1D bajo la Aproximación Adiabática [16], logrando analizar el efecto del tamaño del anillo sobre el espectro de energía, algunos trabajos complementarios bajo esta aproximación han logrado ampliar el estudio al tener en cuenta los efectos de la forma del anillo sobre el espectro energético [47]. Con la motivación de profundizar en el estudio de sistemas Bi-electrónicos se analiza el sistema de dos electrones confinados en anillos de diferente sección transversal.

Este sistema de dos electrones confinados en un anillo cuántico, se considera, en este trabajo, como punto de referencia para comparar la efectividad de los resultados obtenidos, ya que se pueden encontrar trabajos teóricos con los cuales realizar una comparación, a la vez que sirve de caso limite en los sistemas D^- y D_2^0 , al localizar las impurezas suficientemente lejanas.

El Hamiltoniano adimensional del sistema Bi-electrónico en un anillo cuántico de sección transversal cuadrada está dada por:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^2 \left(-\Delta_j - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho_j^2 \right) + V(\mathbf{r}_j) + \tilde{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (3.11).$$

$$\tilde{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) R_a^2 = 2R_a^2 / \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1 \rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + (z_2 - z_1)^2}$$

Donde $V(r_i)$, es el potencial de confinamiento igual a cero dentro del anillo e infinito fuera de este, y $\tilde{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, es el potencial renormalizado de la interacción electrón-electrón.

Siguiendo con el orden necesario para resolver este sistema nuevamente hacemos uso de la Aproximación Adiabática, con la cual podemos separar el

movimiento rápido en la sección transversal, del movimiento lento en dirección radial del anillo como se demostró en secciones anteriores, esta separación permite resolver de una manera exacta y sencilla el movimiento rápido de los dos electrones en la sección transversal, obteniendo sus valores de energía y su correspondiente función de onda $f_0(\mathbf{p})$.

Luego pasamos a resolver el Hamiltoniano de la ecuación 3.12, con la cual es posible obtener los niveles energéticos más bajos que describen las rotaciones de los electrones en el anillo cuántico de radio medio R_a :

$$\tilde{H}_\varphi = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + i\gamma R_a^2 \frac{\partial}{\partial \varphi_i} + \frac{1}{4} \gamma^2 R_a^2 \langle \rho_i^2 \rangle \right] + \tilde{U}(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (3.12).$$

Donde $\tilde{U}(\varphi_1 - \varphi_2)$, esta dado por la expresión $\tilde{U}(\varphi_1 - \varphi_2) = \langle f_0(\rho_1) f_0(\rho_2) | \tilde{U}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | f_0(\rho_1) f_0(\rho_2) \rangle$, y el termino $\langle \rho_i^2 \rangle = \langle f_0(\rho_1) f_0(\rho_2) | \rho_i^2 | f_0(\rho_1) f_0(\rho_2) \rangle$, los cuales representan los valores promedios tanto del potencial de interacción como de la posición radial de cada uno de los electrones al cuadrado, de tal forma que la ecuación 3.12, depende únicamente de la posición angular de los electrones.

El Hamiltoniano 3.12, puede ser separado haciendo uso de las coordenadas relativas $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ y de centro de masa $\phi = 1/2(\varphi_1 + \varphi_2)$, el uso de estas coordenadas nos permitirá obtener los valores energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$, para los números cuánticos (M, m, s) , los cuales vienen definidos para las coordenadas relativas, centro de masa, y de spin, respectivamente.

Una vez realizada la sustitución y bajo un sencillo proceso algebraico es posible reducir la ecuación 3.12, en las ecuaciones 3.13 y 3.14:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\phi^2} \psi_C + i\gamma R_a^2 \frac{d}{d\phi} \psi_C = E_M \psi_C; \quad \psi_C = e^{iM\theta} \quad (3.13).$$

La ecuación 3.13, corresponde al movimiento del centro de masa, ecuación para la cual se propone la función de onda ψ_c .

$$-2 \frac{d^2}{d\varphi^2} \psi_R + \left[\frac{1}{2} \frac{M^2}{R_a^2} + M\gamma + \frac{1}{4} \gamma^2 \langle \rho_i^2 \rangle + \tilde{U}(\varphi) \right] R_a^2 \psi_R = -R_a^2 \tilde{E}(M, m, s) \psi_R \quad (3.14).$$

La ecuación 3.14, corresponde a la ecuación de onda resultante para el movimiento relativo en φ , ecuación diferencial de segundo orden que es resuelta por el método numérico de Barrido Trigonométrico.

Resultados

Con la intención realizar una comparación de los resultados obtenidos en este trabajo con los resultados presentados por J-L Zhu en la referencia [16], se realiza la tabla N° 1, donde se muestran los niveles más bajos de energía en un anillo cuántico con sección transversal tendiendo a cero con un radio medio $R_a = 4a_0^* - 20a_0^*$ y campo magnético $\gamma = 0$.

$\tilde{E}(M, m, s)$	$\tilde{E}(0, 0, 0)$		$\tilde{E}(\pm 1, 1, 1)$		$\tilde{E}(\pm 2, 0, 0)$		$\tilde{E}(0, 2, 1)$		$\tilde{E}(\pm 1, 1, 0)$	
	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$
Resultados	5.18	22.40	5.68	22.90	7.91	27.54	7.18	24.40	8.42	29.54
Reference 16	5.18	22.40	5.68	22.90	7.91	26.90	7.18	24.40	8.41	27.54

Tabla N° 1 Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en un anillo cuántico con $R_t \rightarrow 0$ (nuestros resultados) y en un anillo 1D (Ref. 16) para radio medio $R_a = 4a_0^*$ (valores de la izquierda) y $20a_0^*$ (valores de la derecha)

Los resultados obtenidos establecen una excelente concordancia con los resultados presentados en la referencia [16], los cuales se pueden considerar como exactos. Luego de comprobada la eficiencia del método aplicado en este trabajo, se procede a calcular la energía $\tilde{E}(M, m, s)$ renormalizada en función del radio medio R_a , mostrada en la figura 3.11

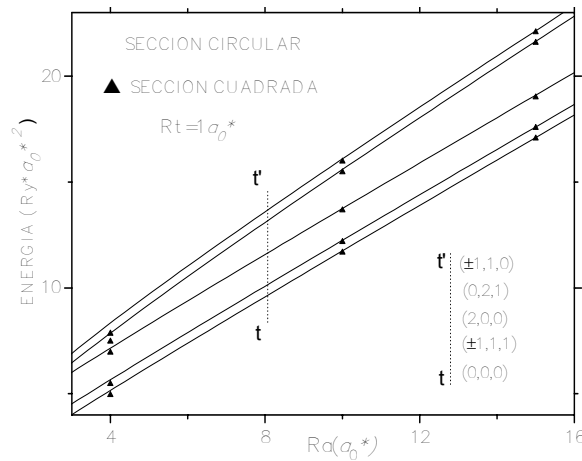


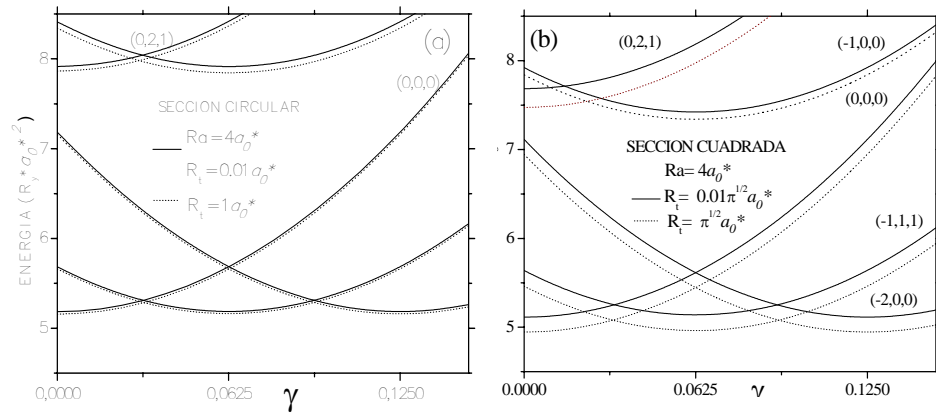
Figura 3.1. Comparación de los Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ renormalizados en función del radio medio R_a , de dos electrones en un anillo cuántico con diferente sección transversal.

En la figura 3.1, la línea sólida corresponde al anillo cuántico de sección transversal circular, mientras que los triángulos corresponden al de sección

transversal cuadrada, demostrando nuevamente que la energía es sensible a la sección transversal del anillo. Esto significa que es más probable la observación experimental de los dos electrones en anillos con sección cuadrada que circular, ya que tienen valores energéticos más profundos, esto se traduce en mayor estabilidad.

Con el fin de dar una explicación a la evolución de las energías en función del radio medio R_a , es necesario tener en cuenta que el termino cinético del Hamiltoniano del cual se obtiene el espectro energético 3.14, no depende del valor de R_a , mientras que el potencial renormalizado \tilde{U} es proporcional al radio medio, por esta razón, cuando el valor de R_a es pequeño el valor de la pendiente de la curva están cambiando, lo cual indica que en el sistema hay fuertes variaciones, pero a medida que R_a aumenta la pendiente de la curva se convierte en constante, lo cual se indica que dichas variaciones están disminuyendo, en otras palabras que el sistema está fuertemente correlacionado.

Para finalizar el estudio del espectro de energía del sistema de dos electrones, analizamos el efecto del campo magnético cuando éste es homogéneo y orientado a lo largo del eje (z). En la figura 3.2 se muestra la evolución de la energía con el campo magnético γ , para dos diferentes valores muy pequeños de la sección transversal.



3.2a

3.2b

Figura 3.2. Energía renormalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del campo magnético γ , en un anillo de radio medio $4a_0^*$ y dos diferentes secciones transversales.

En la figura 3.2, se muestra la energía renormalizada en función del campo magnético aplicado, para anillos de diferente sección transversal y diferente radio de sección transversal R_t , con un radio medio $R_a = 4a_0^*$.

Las curvaturas de estas graficas se deben al igual que en los sistemas mono-electrónicos, a la fuerte competencia de los términos paramagnético y

diamagnético en el Hamiltoniano resultante 3.14, según se explico en el capítulo anterior.

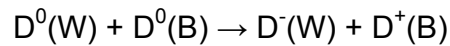
En las curvas de la figura 3.2, se observa nuevamente la dependencia de la energía con la morfología de la sección transversal del anillo, efecto que se hace evidente al observar que la energía en el anillo de sección transversal cuadrada, es más profundo en comparación con los niveles energéticos del anillo con sección transversal circular, esta diferencia se hace más notoria a medida que la sección se disminuye la sección transversal, como lo muestra la figura 3.2b.

3.2 MOLECULA D^- EN ANILO TOROIDAL

Cuando se tiene un ensamble de impurezas donadoras neutras poco profundas en un material semiconductor, alguno de los electrones perteneciente a una determinada donadora que se ha sido radiada, puede ser excitado a la banda de conducción por foto-ionización de un donador y recombinarse con otra donadora neutra para producir un centro D^- o simplemente un ión D^- . Este ión es análogo a un ión H^- y desde los inicios de la mecánica cuántica, se ha dado gran importancia a su estudio, ya que los efectos de correlación electrónica tiene gran incidencia sobre el espectro de energía del sistema y además porque constituye el punto de partida para la determinación de la eficiencia y la exactitud de los diferentes métodos usados en el estudio de los sistemas de pocas partículas.

El ión D^- fue descubierto por Dean, Haynes y Flood [48] en semiconductores de Si y Ge en condiciones de temperaturas muy bajas, ya que este sistema se caracteriza por ser muy inestable térmicamente y por poseer tiempos de vida muy pequeños, razón por la cual, su existencia se considero por mucho tiempo de importancia primaria, al menos en el rango superior a los nanosegundos, tanto en materiales semiconductores de Si y Ge, como en plasmas de laboratorio y en el interior de las estrellas, donde también se pueden encontrar. No obstante las dificultades asociadas con su observación, esta situación se ha podido superar, gracias a los avances tecnológicos alcanzados en el crecimiento de materiales semiconductores para la industria opto-electrónica, la cual ha permitido confinar diferentes tipos de impurezas en espacios de dimensión reducida: pozos, hilos y puntos cuánticos. Cuando una impureza se coloca dentro de una heteroestructura de baja dimensionalidad, el número de grados de libertad electrónico disminuyen, haciendo que la energía de enlace se vuelva fuertemente dependiente del potencial de confinamiento y de la posición de la impureza, lo cual ha conllevado a un aumento significativo en la estabilidad de esta impureza, permitiendo su observación a temperatura ambiente gracias a que la energía de enlace aumenta en orden de magnitud en comparación con sus similares en el bloque.

En un estudio realizado sobre impurezas neutras [49] en el pozo, D^0 (W) y en la barrera, D^0 (B), se ha encontrado que los electrones en el pozo están más fuertemente ligados que los electrones de la barrera. Esto significa que mediante un dopaje selectivo es posible transferir el electrón de la barrera al pozo y éste podrá ser atrapado por la D^0 (W) para formar un ión D^- (W) mucho más estable que en el volumen. Este proceso de ionización fue descrito por Larsen en pozos cuánticos [50] y por Marín, Betancur y Mikhailov [51] en puntos cuánticos de diferente morfología, se puede describir mediante la siguiente reacción:



A simple vista, el estudio del ión D^- en heteroestructuras de baja dimensionalidad y en el bloque no parecería ser muy diferente, no obstante, existen marcadas diferencias que están asociadas con el potencial de confinamiento que es fuertemente dependiente de la morfología de la heteroestructura tal como se demostró en la referencia [51]. Una de las diferencias más importantes está asociada con el hecho de que el D^- a cero campo magnético tiene exactamente un solo estado ligado que es el estado singlete S, el cual ha sido estudiado teóricamente, encontrándose que la energía de enlace para este sistema es de -0.0555 Ry, lo cual contrasta con el ión D^- , ya que al estar fuertemente confinado surgen diferentes tipos de estados ligados, para los cuales los electrones están en estados tripletes [52]. Otro aspecto importante es que en sistemas de baja dimensionalidad los portadores de carga no pueden considerarse como sistemas débilmente correlacionados, ya que el confinamiento hace que la distancia entre partículas disminuya y en consecuencia aumente la interacción Coulombiana.

Para el estudio del espectro energético del ión D^- se han implementado diferentes métodos; es así como mediante el uso de la diagonalización matricial [50] se ha podido establecer que el espectro es muy sensible a variaciones de la posición de la impureza y del tamaño del punto y en particular del radio si éste es esférico. Estudios variacionales sobre el D^- centrado en un punto cuántico esférico, muestran que los niveles de energía para el estado base y para los estados excitados, tanto con espín singlete como triplete, dependen de la profundidad del potencial de confinamiento y del radio del punto [52].

Los efectos del tamaño del QD y de la altura del potencial sobre el espectro energético del ión D^- confinados en un anillo toroidal muy estrecho han sido reportados recientemente por miembros de nuestro grupo [28] de Física Computacional en Materia Condensada. En este trabajo los autores asumen que las impurezas se localizan en el mismo plano en que está localizado el radio medio del anillo, el cual a su vez se asume que tiene un espesor muy estrecho, lo que permite reducir significativamente los cálculos mediante el uso de la aproximación adiabática. En este capítulo, se hará una extensión de este trabajo, donde se ubicarán las impurezas a lo largo del eje de simetría del anillo que es

perpendicular al radio medio del mismo. Esta situación tiene una doble finalidad, por un lado nos permitirá simplificar aún más los cálculos y complementar los resultados reportados en la referencia [52], pero también nos va a permitir analizar una situación más compleja como es la del complejo molecular D_2^0 que se estudiará más adelante. Los resultados obtenidos en esta sección han sido presentados en el congreso XIX Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES XIX), y publicados en la revista Journal of Physics: Conferences Series [28]

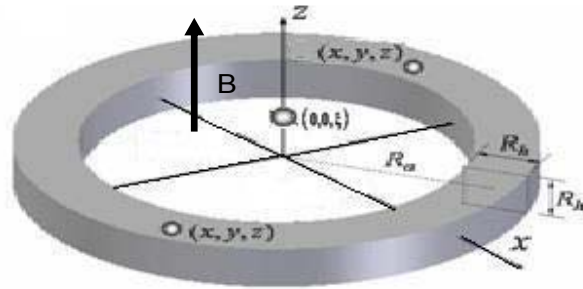


Figura 3.3 Esquema del sistema D^-

Con el interés de analizar el efecto, de la posición de la carga positiva sobre el espectro electrónico y las oscilaciones del efecto Aharonov-Bohm, sumadas al efecto del tamaño y forma del anillo, se plantea el siguiente hamiltoniano ya adimensional y en las coordenadas apropiadas del sistema.

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^2 \left(-\Delta_j - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho_j^2 - \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \xi|} - \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \xi|} + V(\mathbf{r}_j) \right) + \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (3.15)$$

Donde $V(\mathbf{r}_j)$, es el potencial de confinamiento del anillo el cual es cero dentro del anillo e infinito fuera de este y se identifican los términos de atracción entre la carga positiva y cada uno de los electrones así como el término de repulsión electrón-electrón.

Resultados

Como punto de referencia o comparación, es posible reproducir los valores de energía renormalizada $\tilde{E}(M, m, s) = R_a^2 (E_c(M) + E_r(m, s))$ de la tabla N° 1 obtenida para los dos electrones, solo con ubicar la posición de la impureza suficientemente lejos y reducir la sección transversal del anillo.

$\tilde{E}(M, m, s)$	$\tilde{E}(0,0,0)$		$\tilde{E}(\pm 1,1,1)$		$\tilde{E}(\pm 2,0,0)$		$\tilde{E}(0,2,1)$		$\tilde{E}(\pm 1,1,0)$	
	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$	$4 a_0^*$	$20 a_0^*$
$\xi \rightarrow \infty$	5.18	22.40	5.68	22.90	7.91	27.54	7.18	24.40	8.42	29.54
Dos electrones	5.18	22.40	5.68	22.90	7.91	27.54	7.18	24.40	8.42	27.54

Tabla N° 2 Niveles energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$ de la molécula D^- con $\xi \rightarrow \infty$ y $R_t \rightarrow 0$

Los resultado de la tabla N° 2, nos demuestra que es posible reproducir tanto los valores de energía obtenidos previamente para el sistema de dos electrones, como los valores presentados en la referencia 16, y que nos permiten mostrar la gran versatilidad del modelo presentado para el sistema D^- .

Basados en la efectividad de estos resultados se procede a presentar la energía en función del radio medio R_a , para el QR de dos diferentes formas de sección Transversal.

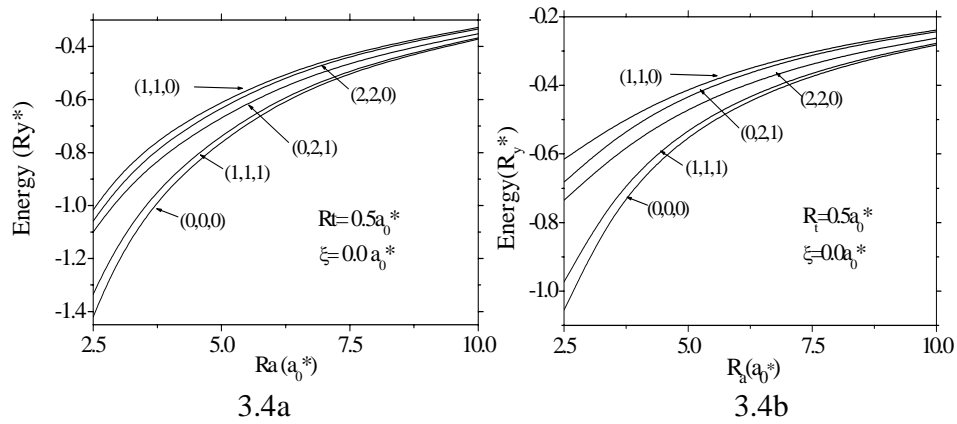


Figura 3.4. Niveles energéticos más bajos de la impureza D^- en un QR en función del radio medio Ra y en ausencia de campo, para dos diferentes formas de sección transversal: cuadrada 3.21a) y circular 3.21b).

En la figura 3.4, se muestran los niveles energéticos más bajos para el sistema D^- en función del radio medio del QR, con un radio de sección transversal

$Rt = 0.5a_0^*$, y la carga positiva centrada $\xi = 0.0a_0^*$, grafica que nos permite apreciar nuevamente el efecto de la morfología del anillo, mostrando los niveles energéticos del QR de sección transversal cuadrada siempre por debajo de los niveles del QR de sección transversal circular, resultados en total correspondencia a los obtenidos en secciones anteriores y que corresponden a un potencial efectivo mas profundo para el QR de sección transversal cuadrada.

También se puede observar en la figura 3.4, independientemente de la sección transversal del QR, que los niveles energéticos a medida que el radio medio del anillo aumenta la separación entre estos niveles disminuyen, esto se debe a que la energía con números cuánticos M y m , son inversamente proporcional al cuadrado del radio medio (M/R_a^2 o m/R_a^2). Por otra parte los valores de energía decrecen a medida que disminuye el radio medio, a un valor bien conocido de $1.055R_y^*$, correspondiente al valor de energía de la donadora D^- en el bloque, esto es debido a que el término de atracción columbiana entre el ion y los electrones es fuertemente dominante.

En la figura 3.5, se muestra la variación de la energía a medida que se desplaza la posición de la impureza sobre el eje (z), la energía aumenta a medida que se aleja el ion del plano del anillo, esto es debido a la fuerte competencia entre los términos de interacción de repulsión entre los electrones y de atracción ion-electrones.

De la figura se observa que a medida que la carga positiva se aleja del centro o plano del anillo el termino de atracción disminuye, por lo que predomina el término repulsivo entre los electrones, hasta llegar al punto donde el aporte de este termino se puede despreciar en comparación al termino de repulsión, desde este punto la energía continua con un aumento lento de la energía, buscando un valor constante de energía correspondiente al del sistema de dos electrones en un anillo con un radio medio fijo ($R_a = 3.0a_0^*$).

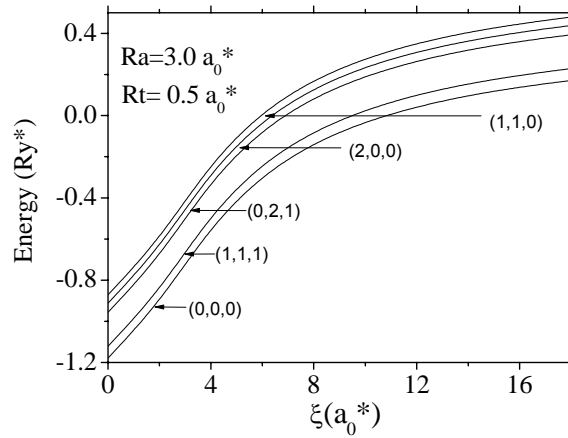


Figura 3.5. Niveles energéticos más bajos de una D^- , con el centro de carga positivo descentrado en un anillo cuántico con sección transversal cuadrada, en función de la distancia entre la carga positiva y el centro del anillo.

La dependencia de los niveles energéticos con el campo magnético homogéneo aplicado en dirección perpendicular al anillo de radio medio $R_a = 4.0a_0^*$, y de sección transversal cuadrada de lado $R_t = 1.0a_0^*$, se muestra en la figura 3.6.

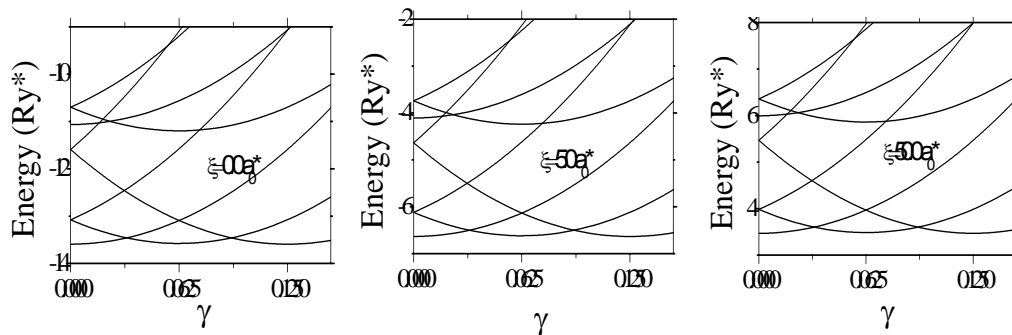


Figure 3.6. Niveles energético en función del campo magnético en un QR con radio medio $R = 4a_0^*$ y de sección transversal $R_t = 1a_0^*$.

En la figura 3.6, se puede observar de nuevo el efecto de Aharonov Bhom, a medida que el campo magnético aumenta para 3 diferentes posiciones de la carga, $\xi = 0.0$ (izquierda), $\xi = 5.0$ (centro) y $\xi = 50.0$ (derecha), de las graficas se observa que a medida que el campo aumenta se separan los niveles energéticos con momento angular M de diferente signo, como se describe en secciones anteriores. Las oscilaciones de estas curvas toman un valor mínimo para valores

del campo $\gamma = M / R_a^2$, con un periodo dado por $1/R^2$. En el presente caso donde el radio medio $R_a = 4a_0^*$, este periodo es igual a $0.0625a_0^*$.

En este caso la ubicación de la impureza no altera las oscilaciones, su presencia hace que las oscilaciones se presenten con valores energéticos cada vez mayores a medida que se desplaza la impureza sobre el eje (z) hasta ubicarla en un punto suficientemente lejano para hacer despreciable su efecto.

3.3 MOLECULA D_2^0 EN ANILO TOROIDAL

El estudio de moléculas Hidrogenoides, en sistemas de baja dimensionalidad, se ha venido realizando desde hace ya algunos años, y en especial en sistemas 0D (cero dimensionales) o puntos cuánticos, donde es posible simular de manera artificial, el comportamiento de diferentes tipos de moléculas tales como, H_2^+ , H^- , H_2^0 entre otras. De estas moléculas artificiales la molécula H_2^0 , presenta el ejemplo más sencillo de competencia de interacción electrostática que, químicamente se conoce como enlace covalente, enlace que mantiene unida la molécula, esta competencia determina una única distancia de equilibrio de manera natural.

En los últimos años estos estudios se han venido concentrando en analizar las modificaciones que sufre el espectro de energía de los diferentes complejos moleculares al modificar algunos parámetros geométricos en los QDs, con el fin de poder predeterminar dicha distancia de equilibrio, o volver mas estable los sistemas, dentro de estos trabajos cabe resaltar algunos realizados por el grupo de investigación FICOMACO, de la Universidad Industrial de Santander, donde estudian complejos bi-hidrogenoides en pozos cuánticos [10], y en dos puntos cuánticos idénticos unidimensionales dispuestos uno encima del otro [54], en estos trabajos, y en especial en el ultimo muestran la fuerte dependencia del espectro energético de la molécula a los cambios geométricos de la nanoestructura donde se encuentre confinada.

Con la motivación de encontrar algunas condiciones generales en las cuales la molécula artificial presente niveles energéticos más profundos, es decir se obtenga una mayor estabilidad en comparación a la presentada por la molécula natural, o poder determinar cómo modificar la distancia de equilibrio de la molécula a medida que se varíen algunos parámetros geométricos del anillo, se realiza el análisis al sistema D_2^0 compuesto por dos electrones obligados a moverse en el QR, en presencia de su correspondiente impureza o carga positiva, las que se localizan sobre el eje perpendicular al plano del anillo, todo bajo la influencia de un campo magnético aplicado sobre el mismo eje (z), como lo muestra la figura 3.7.

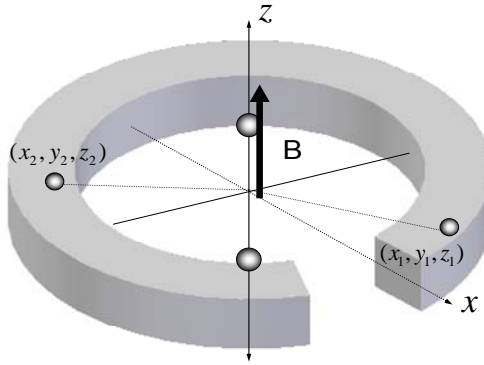


Figura 3.7 Esquema del sistema D_2^0

El hamiltoniano adimensional que describe este sistema D_2^0 en un anillo cuántico como se muestra en la figura 3.7, está dado por:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^2 \left(-\Delta_j - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_j} + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho_j^2 - \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \boldsymbol{\xi}|} - \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\xi}|} + V(\mathbf{r}_j) \right) + \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{1}{\xi} \quad (3.31)$$

Para determinar las características más importantes del complejo D_2^0 , es necesario resolver la ecuación de Schrödinger con la ayuda del Hamiltoniano 3.31, y así poder analizar el espectro energético del sistema en función de la distancia de separación de las impurezas o en función del campo magnético aplicado, así como de parámetros geométricos del QR, como lo es el grosor del anillo R_t o el radio medio R_a .

Resultados

Apoyados en los resultados obtenidos en las secciones anteriores de este capítulo, donde se demostró la eficiencia del método aplicado y la concordancia de los resultados para el caso límite, se muestran aquellos resultados que presenten nueva información, bajo la deducción que es posible reproducir cada uno de los efectos y graficas presentadas anteriormente, realizando pequeñas variaciones al modelo utilizado.

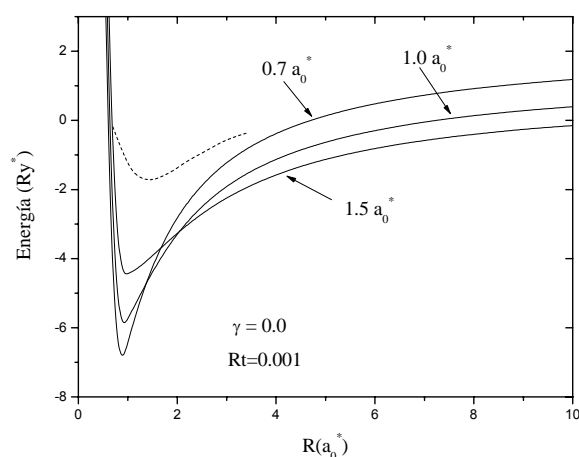


Figura 3.8. Nivel base de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula artificial D_2^0 (líneas continuas), para anillos con radio medio $R_a = 0.7a_0^* - 1.0a_0^* - 1.5a_0^*$, sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural

En la figura 3.8, se presenta el nivel base de energía para anillos cuánticos de diferente radio medio Ra , con un valor de radio de la sección transversal Rt , suficientemente pequeña como para considerarlos anillos unidimensionales en ausencia de campo magnético. De la grafica se puede observar que al variar la distancia de separación entre los iones R , el comportamiento de la energía es muy similar entre la molécula de hidrogeno artificial (líneas continuas) y la molécula natural (línea punteada), con un valor mínimo de energía alrededor de una separación iónica de $R = 1.0a_0^*$, sin embargo el mínimo en la energía es más profundo en la molécula artificial debido al fuerte confinamiento ejercido por el anillo cuántico sobre el movimiento de los electrones.

También se observa que a medida que el radio medio del anillo Ra es menor, el pozo creado para valores pequeños de separación iónica R , es más profundo, situación que se cambia a medida que se aumenta la distancia entre los iones, ya que para valores grandes de R , los valores energéticos de anillos con radio medio mayor son más profundos.

Esto se debe a la fuerte competencia entre las fuerzas de atracción y repulsión de las partículas, para una pequeña separación iónica la contribución de energía repulsiva entre los iones domina los valores energéticos, y a medida que se alejan hacia una separación estable de la molécula $R = 1.0a_0^*$, los iones se localizan mas cerca al anillo con radio medio Ra menor, por lo tanto el pozo se hace mas profundo, la situación cambia a medida que se aumenta la separación iónica, ya que las impurezas se localizan cada vez mas lejos de los electrones disminuyendo la fuerza de atracción ion-electrón, por lo que domina la fuerza de repulsión electrón-electrón, fuerza que disminuye a medida que el radio medio Ra aumenta.

En la grafica 3.9, se presentan los primeros niveles de energía del sistema D_2^0 , en función de la separación entre las impurezas R , niveles de la grafica se observa que estos niveles presentan el mismo comportamiento del estado base descrito en la figura anterior.

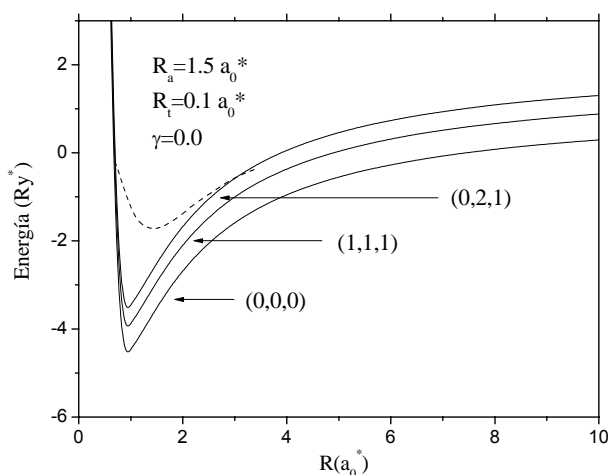
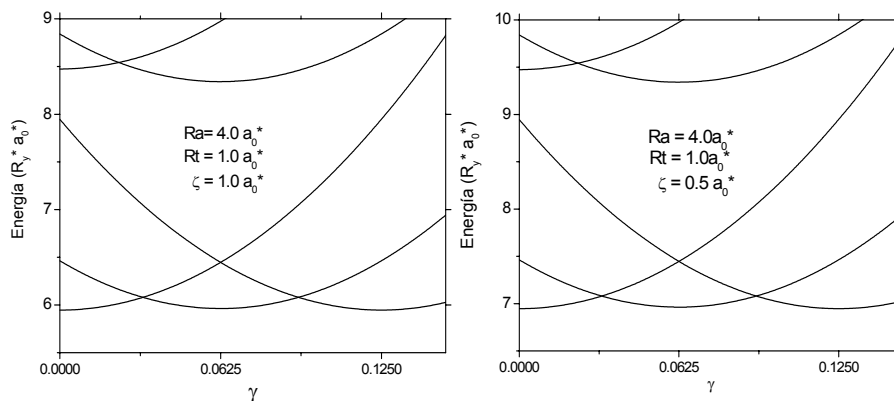


Figura 3.9. Primeros niveles de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula artificial D_2^0 (líneas continuas), para anillos con radio medio $R_a = 1.5a_0^*$, sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural

La energía renormalizada en función del campo magnético aplicado, para dos diferentes posiciones de las impurezas ξ , es mostrada en la figura 3.10. Las curvaturas u oscilaciones de estas graficas se deben al efecto del incremento del campo magnético aplicado, sobre los términos paramagnético y diamagnético en el Hamiltoniano del sistema según se explico en el capítulo anterior.



3.9a

3.9b

Figura 3.10. Energía renormalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ de la molécula D_2^0 en función del campo magnético γ , en un anillo de radio medio $Ra = 4a_0^*$, radio de sección transversal $Rt = 1.0a_0^*$ y para dos diferentes posiciones de las impurezas.

De la figura 3.10, se puede observar que a medida que las impurezas se alejan del centro del anillo los valores energéticos de las oscilaciones Aharonov Bhom, van disminuyendo al comparar el rango de las energías presentadas en los graficas 3.10a y 3.10b, esta disminución se debe, a que a medida que se alejan las impurezas la fuerza de repulsión ion-ion va disminuyendo.

Cabe resaltar que algunos efectos estudiados en secciones anteriores tales como, el efecto de la geometría de la sección transversal del anillo y el efecto del radio de sección transversal, sobre el espectro energético no se incluyeron, ya que presentaron el mismo comportamiento tal como era de esperarse.

CONCLUSIONES

En este trabajo se implemento un método sencillo que permite calcular el espectro energético de moléculas artificiales en puntos cuánticos con forma de anillo, basado en la aproximación adiabática.

Se calcularon los primeros niveles energéticos de cada uno de los sistemas analizados, en función de los diferentes parámetros geométricos del anillo cuántico así como del campo magnético aplicado, determinando los efectos más relevantes sobre el espectro energético.

Se presento el efecto de la geometría de la sección transversal del anillo sobre el espectro energético de las moléculas artificiales, encontrando una mayor estabilidad de los sistemas confinados en anillos de sección transversal cuadrada.

Los resultados obtenidos en este trabajo, presentan una excelente concordancia con soluciones exactas, resultados presentados en la literatura y el comportamiento de su correspondiente molécula natural.

Algunos resultados de este trabajo, se publicaron en: *Microelectronic Journal* **39**, 1279-1280 (2008), *Journal of Physics: Conference Series* **167**, 012032(2009), y socializados en eventos nacionales e internacionales como lo son el Latin American Congress on Surface Science and its Applications (XII CLACSA) realizado en Santamarta, al igual que en el Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES XIX) realizado en Puerto Iguazú-Argentina, y en la VII Escuela Nacional de Materia Condensada, realizado en Pereira.

BIBLIOGRAFIA

1. M. A. Lampert, Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1958)
2. B. Stébéa and A Ainame, Superlattices Microstructure **5**, 545 (1989)
3. I. Da Cunha Lima, A. Ghazali, and D. D. Emmel, Phys. Rev. B **54**, 13996(1996)
4. B. Stébé, G. Munschy, D. Fristot, L. Stauffer, in D. J. Lockwood (Ed) Proceedings of the conference on 22nd International Conference on Physics Semiconductors, Vol. 2 World Scientific Singapore, 1995, page 1408.
5. G. Finkelstein, H. Shtrikman, and I. Bar-Joseph, Phys. Rev. B **53**, 7841 (1996)
6. J. Singh et al. Phys. Rev. B **53**, 15909 (1996)
7. D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Rev. B **27**, 4883 (1983)
8. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, Phys. Stat. Sol. (b) **220**, 171 (2000) ;
I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, Phys. Stat. Sol. (b) **210**, 605 (1998)
9. A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Phys:Rev. B. **61**, 15887 (2000)
10. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, J. Phys.: Condens. Matter, **10**, 7283 (1998)
11. J. R. Haynes, Phys. Rev. Lett. **17**, 866 (1966)
12. A. J. Shields et al. Phys. Rev. B **52**, 5523 (1995) ; H. Buhmann, et al. Phys. Rev. B **51**, 7969 (1995)
13. R. J. Warburton, C. S. Durr, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Madeiros-Ribeiro, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **79**, 5282 (1997)
14. A. J. Shields et al. Phys. Rev. B **52**, 5523 (1995) ; H. Buhmann, et al. Phys. Rev. B **51**, 7969 (1995)
15. A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. García and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000)
16. J. L. Zhu, Z. Dai and X. Hu Phys. Rev. B **68** 045324 (2003)
17. J. Planelles, W. Jaskolsky and J. I. Aliaga, Phys Rev. B. **65**, 33306 (2001)

18. H. Pan and J. L. Zhu, J. Phys.: Condens Matter **15**, 7287 (2003)
19. Aharonov Y and Bohm D 1959 Phys. Rev. **115** 485
20. Viefers S, Koskinen P, Singha Deo P and Manninen M 2004 *Physica E* **21** 1
21. Ihna T; Fuhrera A, Heinzela T, Ensslina K, Wegscheiderb W; and Bichlerc M
2003 *Physica E*
22. Lorke A , Bohm S and Wegscheider W 2003 *Superlattices Microstruct.* **33** 347
23. Mendach S, Schumacher O, Heyn C, Schnull S, Welsch H and Hansen W
2004 *Physica E* **23** 274
24. Encinosa M 2005 *Physica E* **28** 209
25. Chen G-Y, Chen Y-N and Chuu D-S 2007 *Solid. State Commun.* **143** 515
26. Energy Estrucuture of two-electron in torous-shape quantum ring; VIII
EscuelaNacional de Física de Materia Condensada (Física de
Nanoestructuras)
27. García F, Marín J H, Paredes H and Mikhailov I D 2005 *Phys. Stat. Sol.(c)* **2**
3630
28. F. J. Betancur, W. Gutiérrez, and J. C. Pina, *Physica B* **396**, 12 (2007)
29. M. Korkusinski and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B.* 63, 195311 (2001)
30. D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, New Jersey,
1995
31. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InAs/basic.html>
32. I. D. Mikhailov, J. H. Marín and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, No 8, 1636
(2005)
33. G. Bastard, *Phys. Rev B* **24**, 4714 (1981)
34. Bryant. G.W., *Phys. Rew.B* **29**, 6632 (1984)
35. Bryant. G. W., *Phys. Rew. B* **31**, 7812 (1985)
36. J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong, *Phys.Rev. B* **50**, 1832 (1994)
37. A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, *Phys. Rev. B* **71**, 125312 (2005)

38. Tsonchev S. I, Goodfriend P. L, Journal of Physics. B. Atomic, Molecular and Optical Physics. 1992, Vol **25**, n 22, pp 4685-4691
39. Jia-Lin-Zhu and Xi Chen, Phys. Rev. B **50**, 4497-4502 (1994)
40. Gutiérrez, Espectro energético de D^0 y D^- en sistemas Casi-Unidimensionales, Tesis de Maestría, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga-Colombia 2007
41. R. K. Pandey, Manoj K. Harbola and Vijay A. Sing, J. Phys.: Condens. Matter. **16** 1769-1776 (2004)
42. Weng-Feng Xie, J. Phys. B: At.: Mol. Opt. Phys. **36** 367-371 (2003)
43. S. Kang, Y.M. Liu and T. Y. Shi, Eur. Phys. J. B **63** 37-42(2008)
44. J. L. Zhu, Z. Q. Li, J. Z. Yu, K. Ohno and Y. Kawazone. Phys. Rev. B **55** 15819v (1997)
45. J. J. S. de Groote, J. E. M. Hornos and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **26**, 12773 (1992)
46. H. Hu, J-L Zhu, and J-J Xiong, Phys. Rev. B **62**, 16777 (2000)
47. Marín J H, García F and Mikhailov I D, Braz. Jour. of Phys. **36**(3B) 940(2006)
48. P. J. Dean, J. R. Haynes and W. F. Flood: Pys. Rev. **161** 711 (1967)
49. D. M. Larsen and S. Y. McCann, Phys. Rev. B **45**, 385(1992)
50. D. M. Larsen, Phys. Rev. B **47**, 16333(1992)
51. J. H. Marín, F. J. Betancur, and I. D. Mikhailov, J. Phys. : Condens. Matter **18**, 1005 (2005)
52. B. Szafran, J. Adamowski, and B. Stébé, . Phys. : Condens. Matter **10**, 7575 (1998)
53. Piña, Espectro Energético de dos D^0 Confinados en dos Anillos Cuánticos Acoplados Verticalmente, Tesis de Maestría, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga-Colombia 2007