

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE UNA NANOESTRUCTURA CONCÉNTRICA 1

Estructura Electrónica de una Nanoestructura Concéntrica Punto-Anillo Bajo Acción de Campos
Eléctrico y Magnético

Carlos Barrera Mendoza

Trabajo de grado para optar al título de Físico

Director

Willian Gutiérrez Niño

Doctor en Ciencias Naturales-Física

Codirector

Jhon Freddy Torres Gómez

Magister en Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Bucaramanga

2023

*“La belleza de un movimiento no se refleja sólo en su
apariencia, sino en el pensamiento detrás de él.”*

Siegbert Tarrasch

Agradecimientos

Alcanzar metas y objetivos, por más personales que sean, requiere de la colaboración, la motivación y la ayuda de quienes nos rodean. En el contexto de mi logro académico, múltiples personas han dejado su huella a lo largo del proceso. Por tanto, quiero expresar un sincero agradecimiento a quienes han contribuido de manera significativa:

En primer lugar, agradezco profundamente a mis padres, Demetrio y Gladys, por su dedicación, esfuerzo y sacrificio para brindarme su apoyo incondicional a lo largo de mi trayectoria académica. Asimismo, deseo reconocer el constante respaldo que mis hermanos, Cristina, César, Julián y Omar, me han brindado, siendo este un pilar fundamental en mi camino hacia el logro de mis metas.

Agradezco especialmente a Diana, quien siempre estuvo ahí para apoyarme, incluso en los momentos más desafiantes, demostrando su confianza en mí, lo cual me impulsó a seguir adelante sin lugar para la duda.

Estoy profundamente agradecido con mi director de tesis, Willian Gutiérrez, por su guía, enseñanza y orientación cruciales para mi trabajo de investigación. Es un gran orgullo haber estado bajo su dirección, no solo por su excelencia como científico, sino también por su calidad humana y su dedicación como maestro. También quiero expresar mi sincero agradecimiento a Jhon Freddy, mi codirector, por su constante tutoría, su amistad y las valiosas enseñanzas que compartió conmigo.

Finalmente, deseo expresar mi reconocimiento al profesor Luis Antonio Figueroa, cuyo aval fue fundamental para la obtención de mi pregrado. Además, agradezco sinceramente a todos mis amigos, amigas, compañeros y compañeras que, con sus constantes aportes, contribuyeron de manera significativa durante este período académico.

Contenido

	Pág.
Introducción	13
1. Construcción de Materiales Nanoestructurados	15
1.1 Puntos Cuánticos	16
1.1.1 Anillos Cuánticos	16
1.2. Oscilaciones Aharanov-Bohm	18
1.3. Aproximación de Masa Efectiva	21
2. Modelo Teórico	22
2.1 Modelo Geométrico	23
2.2. Materiales del Sistema	24
2.3. Ecuación de Schrödinger	25
2.3.1 Hamiltoniano del Sistema	25
2.4. Esquema de Solución	26
3. Análisis de Resultados	27
3.1. Efecto de Parámetros Geométricos y Estructurales	28
3.1.1. Niveles de Energía más Bajos como Función del Ancho del Anillo	28
3.1.2. Espectro Energético como Función del Radio del Punto	33
3.1.3. Espectro Energético como Función de la Separación entre Punto y Anillo	37
3.1.4. Espectro Energético como Función de la Concentración de <i>Al</i>	39
3.2. Espectro Energético en Función Campos Externos	40
3.2.1. Espectro Energético en Función del Campo Magnético	41

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE UNA NANOESTRUCTURA CONCÉNTRICA 5

[3.2.2. Espectro Energético en Función de un Campo Eléctrico](#)..... 42

[3.2.3. Espectro Energético en Función de un Campo Magnético con Campo Eléctrico](#)

[Superpuesto](#)..... 45

[4. Conclusiones](#)..... 48

[Referencias Bibliográficas](#)..... 50

Lista de Figuras

	Pág.
<u>Figura 1. Esquema de los distintos modos de crecimiento de puntos cuánticos y nano estructuras cuánticas.</u>	17
<u>Figura 2. Energía para un electrón confinado en un QR</u>	19
<u>Figura 3. Esquema para un electrón en un QR, que se comporta como guía de onda, expuesto a un campo magnético.</u>	19
<u>Figura 4. Modelo geométrico de una NQDR</u>	24
<u>Figura 5. Niveles de energía más bajos de un electrón en la NQDR como función del ancho del anillo w.</u>	29
<u>Figura 6. Gráficas de densidad de probabilidad en función de w.</u>	31
<u>Figura 7. Densidad de probabilidad electrónica para los primeros 4 niveles energéticos en función del ancho del anillo w.</u>	32
<u>Figura 8. Energía para un electrón confinado en una NQDR como función del radio del punto con ancho de anillo y separación entre punto-anillo constantes.</u>	34
<u>Figura 9. Gráficas de densidad de probabilidad electrónica y valores de energía para los 6 estados más bajos a diferentes valores del radio del punto R_p en la NQDR.</u>	36
<u>Figura 10. Energía para un electrón confinado en una NECPA como función de la separación entre punto-anillo w_b, con tamaño del punto R_p y ancho de anillo w constantes.</u>	38
<u>Figura 11. Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica para los 10 estados de energía más bajos en función de 5 valores diferentes de la separación punto-anillo w_b de la NQDR.</u>	38

Figura 12. Energía para un electrón confinado en una NQDR como función de la concentración de aluminio x , con tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w constantes..... 40

Figura 13. Energía para un electrón confinado en una NECPA expuesta a un campo magnético B normal al plano de la estructura, manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w 42

Figura 14. Energía para un electrón confinado en una NECPA expuesta a un campo eléctrico F en sentido x (según esquema de la Figura 4), manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w 43

Figura 15. Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica para los 6 estados de energía más bajos en función de campo eléctrico. 44

Figura 16. Energía de un electrón en una NQDR, en función de un campo magnético B normal al plano de la estructura y un campo eléctrico constante de 1.2kV/cm en dirección x , manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w 46

Figura 17. Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica de los 10 estados de energía más bajos para 4 valores diferentes de campo magnético B normal al plano de la estructura y un campo eléctrico constante. 47

Lista de Tablas

	Pág.
<u>Tabla 1. <i>Parámetros físicos de los materiales</i></u>	25

Acrónimos y símbolos

AB	-Aharanov-Bohn
MBE	- Epitaxia de Haz Molecular
AFM	- Microscopio de Fuerza Atómica
STM	- Microscopia de Efecto Túnel
CVD	- Deposición Química en Fase de Vapor
QWW	- Hilos Cuánticos
QD	-Punto Cuántico
FvdM	- Crecimiento Capa a Capa o Frank-Van der Merwe
VW	- Crecimiento Tipo Volmer
SK	- Stranski-Krastanov
QR	-Anillo Cuántico
w_c	-Frecuencia Ciclotrónica
m_e^*	-Masa efectiva del electrón
OAB	-Oscilaciones Aharanov-Bohn
AME	-Aproximación de Masa Efectiva
NQDR	-Nano Estructura Cuántica Punto Anillo
R_i, R_e	-Radios internos y externos
w	-Ancho del anillo
R_p	-Radio del punto
w_b	-Ancho de la barrera
B	-Campo Magnético

A -Potencial Vectorial Magnético

ϕ -Potencial Escalar Eléctrico

F -Campo Eléctrico

V_0 -Potencial de confinamiento

Resumen

Título: Estructura Electrónica de una Nanoestructura Concéntrica Punto-Anillo Bajo Acción de Campos Eléctrico y Magnético*

Autor: Carlos Barrera Mendoza**

Palabras Clave: Anillo cuántico, punto cuántico, nanoestructura cuántica, oscilaciones Aharonov-Bohm, acople cuántico.

Descripción:

En este trabajo se estudia el comportamiento energético de un electrón confinado en una nanoestructura compuesta por un punto cuántico circular rodeado concéntricamente por un anillo cuántico también circular. La nanoestructura está diseñada con el material $GaAs$ y se encuentra dispuesta en una matriz de $Al_xGa_{1-x}As$. Se presenta el comportamiento energético del electrón en función del ancho del anillo, radio del punto, separación entre punto y anillo, y concentración de aluminio. Además, se investiga el comportamiento del espectro energético en presencia de un campo eléctrico aplicado en el plano de crecimiento y un campo magnético perpendicular a este plano. Se ha modelado el sistema en dos dimensiones, despreciando la dimensión vertical, a través de la aplicación de la ecuación de Schrödinger estacionaria utilizando la aproximación de masa efectiva. La solución de la ecuación de Schrödinger se obtiene mediante el método de elementos finitos bidimensionales. Los resultados demuestran que existen transiciones, cruces y acoplamientos entre los niveles energéticos ocasionados por modificaciones estructurales. Así mismo, se observan oscilaciones AB debido al campo magnético y desacoples de niveles debido al campo eléctrico. También se evidencia que algunos niveles energéticos y densidades de probabilidad son altamente sensibles a los campos externos y la configuración geométrica de la nanoestructura.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales-Física. Codirector: Jhon Freddy Torres Gómez, Magister en Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia.

Abstract

Title: Electronic Structure of a Concentric Dot-Ring Nanostructure under the Action of Electric and Magnetic Fields*

Author: Carlos Barrera Mendoza**

Keywords: quantum ring, quantum dot, quantum nanostructure, Aharonov-Bohm oscillations, quantum coupling.

Description:

In this work, we study the energy behavior of an electron confined in a nanostructure composed of a circular quantum dot surrounded concentrically by another circular quantum ring. The nanostructure is designed with the GaAs material and is arranged in a matrix of $Al_xGa_{1-x}As$. The energy behavior of the electron is presented as a function of the ring width, dot radius, separation between the dot and the ring, and aluminum concentration. In addition, the behavior of the energy spectrum in the presence of an electric field applied in the growth plane and a magnetic field perpendicular to this plane is investigated. The system has been modeled in two dimensions, neglecting the vertical dimension, through the application of the stationary Schrödinger equation using the effective mass approximation. The solution of the Schrödinger equation is obtained using the two-dimensional finite element method. The results show that there are transitions, crossings, and couplings between the energy levels caused by structural modifications. Similarly, AB oscillations are observed due to the magnetic field and level decouplings due to the electric field. It is also evident that some energy levels and probability densities are highly sensitive to external fields and the geometric configuration of the nanostructure.

* Degree work

** Science Faculty. Physics School. Director: William Gutiérrez Niño, Ph.D in Natural Sciences-Physics. Co-director: Jhon Freddy Torres Gómez, Msc. Science and Technology of Light and Matter.

Introducción

Hay un registro en la historia de la humanidad del uso de materiales nanoestructurados. Desde China imperial donde se fabricaban medicinas nano pulverizadas (M.A. Peiyan et al., 2006), en las pinturas del pueblo Maya (M. José-Yacaman et al., 1996), los vitrales en las catedrales europeas y las pinturas del Renacimiento cuyos vivos colores se obtenían por nanopartículas de cloruro de oro y otros óxidos (G. Padeletti & P. Fermo, 2003); hay certeza de un arte siderúrgico donde nanotubos de carbono y cemento le concedían las propiedades de tenacidad y dureza a los sables de Damasco utilizados en las Cruzadas (Reibold et al., 2006). En este campo es famoso el ejemplo de la copa de Lycurgo que contiene nanopartículas de oro, la cual presenta un típico color verde al ser expuesta a la luz reflejada, pero se vuelve de color rojo a la luz transmitida (Freestone et al., 2007).

Probablemente las primeras referencias de la nanotecnología moderna y sus aplicaciones prácticas las propuso en 1959 Richard Feynman durante la reunión anual de la "Sociedad Física Americana en el Instituto de Tecnología de California donde desarrolló su famosa conferencia "Queda mucho sitio por debajo" (*There's Plenty of Room at the Bottom*) (Feynman, 1959) en la que describió el futuro de la miniaturización y sus posibles implicaciones en el desarrollo de un nuevo campo en la física. Para 1968 se desarrolla una nueva forma de fabricar estructuras de dimensiones nanométricas. Alfred Cho y John Arthur con su equipo de investigación de los Laboratorios Bell inventan la epitaxia de haz molecular (*Molecular Beam Epitaxy*, MBE), esta técnica resulta exitosa para depositar capas atómicas individuales en una superficie determinada (Revista Investigación y Ciencia, 2001).

En la actualidad, se están desarrollando nuevas tecnologías en las áreas de visualización y manipulación de materia, así como en la construcción de sistemas a pequeña escala. La nanociencia explora las propiedades físicas y químicas de los materiales a dimensiones nanométricas, mientras que la nanotecnología nos proporciona la comprensión y el control de la materia en rangos de tamaño entre 1 y 100 nanómetros. Las propiedades únicas que presentan los materiales a esta escala permiten la creación de aplicaciones novedosas que no son factibles cuando se trabaja con materiales a granel o incluso átomos o moléculas individuales (Petersen, 2017).

Los materiales nanoestructurados son aquellos con dimensiones que están dentro de una escala de 1 y 100 nm, cuya estructura sufre cambios de forma espontánea o inducida por procesos naturales o artificiales. El uso de estos materiales abarca grandes áreas de la ciencia y la técnica, siendo de particular interés para este trabajo el desarrollo de nuevas configuraciones de materiales semiconductores, actualmente gracias a diversos estudios conocemos la constitución y caracterización de sus propiedades tanto físicas como electrónicas a niveles nanométricos (National Nanotechnology Initiative, 2011). La clasificación de estas sustancias depende de una serie de parámetros entre los que se encuentran, la clase de impurezas del que se constituyen, el tipo de contenido de compuestos, el parámetro de red de su estructura cristalina, la permitividad relativa, la brecha entre la banda de valencia y la de conducción, entre otros (Kittel y McEuen, 2018). La alteración de alguno de los anteriores parámetros en determinadas regiones los provee de nuevas propiedades físicas con las que se fabrican diferentes materiales para cumplir funciones particulares y deseables que resuelven problemas de interés específico (Kente y Mhlanga, 2016). Esta incursión de la técnica a un nuevo micro mundo fue el origen del desarrollo de la física de estado sólido y la miniaturización de los dispositivos electrónicos.

1. Construcción de Materiales Nanoestructurados

Para la construcción de materiales nanoestructurados, se utilizan dos métodos básicos llamados *top-down* (Lu & Lieber, 2007) y *bottom-up* (Abid et al., 2022), en el primero se utilizan materiales de dimensiones macroscópicas – mayores a 100 nanómetros- y se comienza a esculpir las nanoestructuras y nanomateriales a través de métodos muy avanzados similares a los usados en la fabricación de microcircuitos integrados como lo son la fotolitografía a 20nm (Fan y Qian, 2022), empleo de escritura directa con microscopio de fuerza atómica (*Atomic Force Microscopic* - AFM) o con microscopia de efecto túnel (Scanning Tunneling Microscope - STM), entre otros. En el segundo método, las nanoestructuras se fabrican a partir de bloques elementales, -para nuestro caso átomos, moléculas, proteínas, etc.- a través de un proceso de autoensamble. Este proceso es similar al crecimiento y formación de cristales macroscópicos, uno de los procesos más utilizado es la deposición química en fase de vapor (Chemical Vapor Deposition - CVD) donde los nanomateriales crecen en forma de películas delgadas (Vajtai, 2013).

Los trabajos revolucionarios de los investigadores Leo Esaki y Rau Tsu permitieron que el equipo de investigación de los laboratorios Bell y la IBM fabricara la primera nanoestructura compleja bidimensional, conocida como *Super Lattice* (Súper red) (Esaki y Tsu, 1970) a través de técnicas de crecimiento *top-down* se recreó una serie de capas muy delgadas de semiconductores con dimensiones del grosor de un átomo, esto llevo a la aparición del desarrollo del efecto túnel en diodos a nivel cuántico. A partir de la modificación de geometría y forma de estas nanoestructuras se derivó el desarrollo de toda una serie de elementos que llevaron al avance de la microelectrónica y nanodispositivos que permitían explorar las propiedades físicas y químicas de la materia a nivel cuántico, y su aplicación en diferentes ramas de la técnica y la ciencia. Entre la

variedad de configuraciones están los pozos cuánticos, donde se confinan portadores de carga en una región bidimensional, los hilos cuánticos (*Quantum Well Wire-QWW*) (Gutierrez Niño, 2010) cuyas propiedades eléctricas sobrepasan en expectativa las aplicaciones actuales de los conductores convencionales, y las estructuras cero dimensionales conocidas como puntos cuánticos (*Quantum Dots – QDs*), las cuales nos interesan en el desarrollo de nuestra investigación.

1.1 Puntos Cuánticos

Algunos materiales semiconductores permiten confinar portadores de carga de manera tridimensional, en estructuras con dimensiones del orden de nanómetros, estas estructuras se conocen como puntos cuánticos (QDs). Dependiendo de los materiales utilizados y las técnicas de construcción de nanoestructuras, los QDs pueden tener diferentes geometrías, entre las más utilizadas están los discos, pirámides, lentes, anillos y volcanes (Velasco Villamizar, 2009). Una característica fundamental de los QDs es el espectro de energía discreto que permite estudiar diversas propiedades físicas las cuales son utilizadas en el diseño y construcción de dispositivos como diodos emisores de luz monocromática, donde la longitud de onda emitida es inversamente proporcional al cuadrado de las dimensiones del punto (Grundmann, 2010), ajustando el espectro a partir de sus parámetros estructurales; también son útiles para construir transistores de único electrón, compuertas en computación cuántica, láseres de QDs, nanofármacos, entre otras aplicaciones (Abdullaeva, 2017).

1.1.1 Anillos Cuánticos

Geoméricamente una construcción homeomorfa, formada por dos círculos concéntricos es conocida como corona circular o anillo, esta estructura no es simplemente conexa, por lo que presenta gran interés para el estudio geométrico y físico en especial para sistemas mesoscópicos con esta morfología.

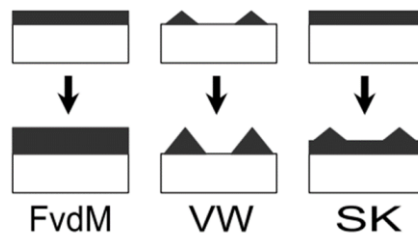
Los QDs con estructura de anillo pueden ser construidos mediante técnicas de crecimiento epitaxial, como son: el crecimiento capa a capa, o Frank-Van der Merwe (FvdM) (Markov & Milchev, 1985), donde el crecimiento es bidimensional, posicionando una capa sobre la anterior y formando una superficie plana; por otra parte, en el crecimiento tipo Volmer-Weber (VW) (Hang & Thompson, 2014), se forman islas tridimensionales, a falta de presentarse crecimiento bidimensional, y el crecimiento Stranski-Krastanov (SK) (Henini, 2011) como una situación intermedia a las dos anteriores. La Figura 1 muestra un esquema de los crecimientos descritos.

Mediante el autoensamblaje, se pueden construir estructuras acopladas de GaAs, donde un QD está rodeado por un QR. Para ello, se deben elegir las condiciones apropiadas, como la temperatura del sustrato, la velocidad de deposición de los materiales y las propiedades de los materiales. El acoplamiento de estas dos estructuras da lugar a una nanoestructura cuántica. (Somaschini et al., 2011)

Así mismo, los portadores de carga muestran comportamiento ondulatorio cuántico, cuando están confinados en sistemas anulares, porque la longitud efectiva de recorrido es del orden de la longitud de onda de De Broglie asociada a la partícula confinada. Bajo la condición anteriormente expuesta el QR se comporta como guía de onda cuántica, exhibiendo corrientes persistentes y oscilaciones de Aharonov-Bohm (Lorke et al., 2000)

Figura 1.

Esquema de los distintos modos de crecimiento de puntos cuánticos y nano estructuras cuánticas.



1.2. Oscilaciones Aharonov-Bohm

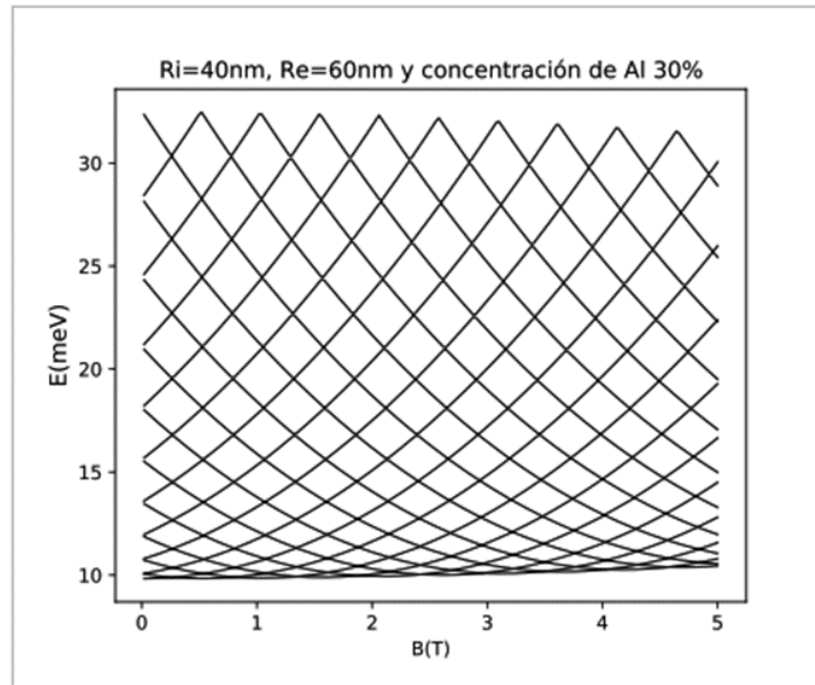
En 1949, W. Ehrenberg y R.E. Siday publicaron un artículo donde proponían la existencia de fenómenos de "onda óptica" debidos a la presencia de un campo magnético, pero no al campo magnético en sí. Es decir, estos fenómenos podrían ocurrir en regiones libres de campo magnético (Ehrenberg & Siday, 1949). Una década después, en 1959, Aharonov y Bohm propusieron un efecto en el que la influencia del vector potencial magnético (potencial vector - A) generaría cambios en la fase de la función de onda de electrones (Aharonov & Bohm, 1959). Este efecto, que fue comprobado experimentalmente por Tonomura y colaboradores en 1986 (Tonomura et al., 1986), se conoce actualmente como el efecto Aharonov-Bohm (AB) en honor a sus descubridores.

Una de las manifestaciones del efecto AB son las oscilaciones periódicas en el espectro energético de portadores de carga confinados en anillos cuánticos (QDs), que se conocen como Oscilaciones Aharonov-Bohm. Estas oscilaciones están relacionadas con las variaciones del campo magnético y tienen un impacto significativo en las propiedades electrónicas del QR, incluyendo la aparición de corrientes persistentes, el efecto de transparencia del anillo ante un campo magnético externo, cambios en el espectro de absorción y la magnetización (Velasco Villamizar, 2009).

A continuación, en la Figura 2 se muestra el espectro energético para un electrón en un QR en función de un campo magnético aplicado en la dirección perpendicular al plano del anillo, como se ilustra en el esquema de la Figura 3. Se pueden evidenciar algunas consecuencias del efecto AB, como los cruces entre los niveles de energía. Es importante destacar que, en este caso, el electrón puede pasar de un nivel de energía a otro sin absorber o emitir un fotón, estos se deben a las variaciones energéticas ocasionadas por el campo magnético.

Figura 2.

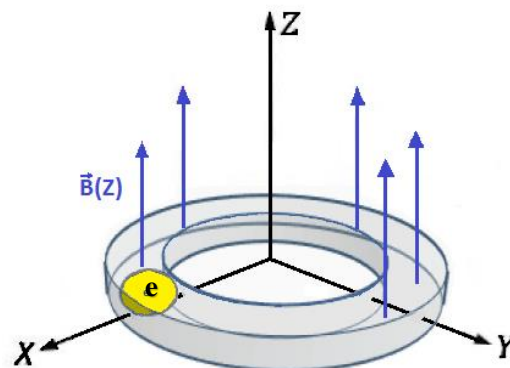
Energía para un electrón confinado en un QR



Nota. El QR está compuesto de $GaAs$, dispuesto en una matriz de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ y expuesto a un campo magnético $B(z)$.

Figura 3.

Esquema para un electrón en un QR, que se comporta como guía de onda, expuesto a un campo magnético.



Dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano que describe el estado de un electrón en un anillo cuántico se expresa como:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_e^*} \left[\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 \quad (1)$$

Considerando que el electrón se encuentra confinado en un sistema unidimensional, su movimiento está restringido a lo largo de una sola dirección. En este sentido, el operador de momento lineal en coordenadas cilíndricas se expresa como:

$$\mathbf{p} = - \left[i\hbar \frac{d}{Rd\varphi} \right] \hat{e}_\varphi \quad (2)$$

Para introducir el campo magnético uniforme en la dirección del eje de simetría, se define el vector potencial magnético como:

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \quad (3)$$

A partir de lo anterior, se puede obtener el Hamiltoniano resultante para el sistema.

$$H = - \left[\frac{1}{R^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + i\gamma \frac{d}{d\varphi} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} \right] \quad (4)$$

La ecuación 4 incluye los términos diamagnético y paramagnético, los cuales se originan por la interacción del electrón con el campo magnético aplicado. Esta formulación hamiltoniana resultante conduce a una ecuación de onda (ecuación 5) que describe el estado m-ésimo del sistema y, además, cuenta con solución analítica (ecuación 6).

$$- \frac{1}{R^2} \frac{d^2 \phi_m(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \phi_m(\varphi) - i\gamma \frac{d\phi_m(\varphi)}{d\varphi} = E_m \phi_m(\varphi) \quad (5)$$

$$E(\gamma)_m = \frac{m^2}{R^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + \gamma m \quad (6)$$

γ representa el campo magnético externo, perpendicular al plano del anillo, expresado en unidades adimensionales $\gamma = \frac{\hbar w_c}{R\gamma}$, donde w_c es la frecuencia ciclotrónica. Los términos dos y tres

de la ecuación (6) corresponden al término diamagnético y paramagnético, respectivamente, y

muestran la contribución del campo magnético a cada nivel energético del electrón en el anillo. El término $\frac{\gamma^2 R^2}{4}$ incrementa la energía cinética porque siempre es positivo y representa la energía diamagnética. Mientras que el término paramagnético puede tomar valores positivos o negativos dependientes de la orientación de giro del electrón, generando oscilaciones en los valores de la energía, llamadas OAB.

1.3. Aproximación de Masa Efectiva

Para los semiconductores nanoestructurados, se utiliza una aproximación en la masa de las partículas que interactúan con campos, la cual parece responder a las fuerzas presentes en el sistema o a la presencia de otras partículas de la misma naturaleza física. Esta aproximación se conoce como aproximación de masa efectiva, cuya nomenclatura es m^* , y se utiliza para simplificar los cálculos que se presentan en el desarrollo del modelado de las estructuras en la teoría de bandas de la física del estado sólido. En estos casos la masa de las partículas en un potencial de interacción periódico, cuyas distancias son mayores que las dimensiones de la red cristalina, es diferente a la masa de la partícula si se desplazara en el vacío) (Bastard, 1990). Uno de los resultados de la teoría de bandas de los sólidos es que el movimiento de partículas en un potencial periódico, a distancias mayores que el espacio de la red, puede ser muy diferente de su movimiento en el vacío.

En el caso de electrones que pueden moverse en estas estructuras bajo la influencia de campos externos, potenciales atómicos o de interacción, el problema se reduce al de una partícula de masa m_e^* cuyo movimiento solo es afectado por campos externos y cuyas variaciones son mínimas respecto al valor de la constante de la red cristalina. Al considerar los primeros niveles de energía, se garantiza que el movimiento del electrón es alrededor del mínimo de la banda de

conducción, donde la relación de dispersión del material es aproximadamente parabólica, conduciendo así a una masa efectiva constante.

La aproximación de masa efectiva (AME) se emplea para simplificar el análisis del comportamiento de una partícula en las bandas de valencia o de conducción de un semiconductor. Esta técnica ha demostrado ser exitosa para predecir las propiedades físicas de materiales semiconductores nanoestructurados. Para efectos de cálculos, esta masa efectiva, no es la misma que la masa de una partícula libre, en el caso de electrones o huecos de electrones, ésta se expresa en unidades de la masa del electrón en el vacío ($m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg) llegando a tener valores de 0.01 a $10 m_e$ y en algunos casos dependiendo de la naturalezas de las sustancias, tal como materia exótica fermiónica, puede tener rangos de 100 a $1000 m_e$, o en algunos casos puede considerarse incluso igual a cero, como es el caso del grafeno (Novoselov et al., 2004).

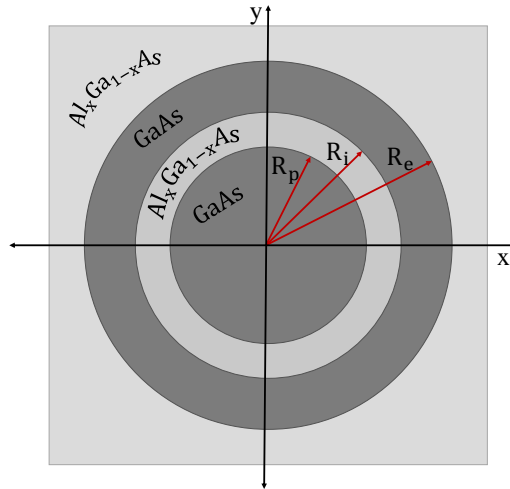
2. Modelo Teórico

El objetivo de este capítulo es presentar el modelo teórico utilizado para analizar la NQDR (Nanoestructura Cuántica Dot Ring) en cuestión. En primer lugar, se identifican los parámetros geométricos que definen la forma y dimensiones de la nanoestructura, así como las propiedades físicas de los materiales que la componen. A continuación, se presenta el Hamiltoniano monoeléctrico que describe la energía total del sistema. A partir del Hamiltoniano aproximado, se presenta el método de solución del problema a través de un proceso numérico basado en elementos finitos bidimensionales. Se describen los métodos teóricos utilizados en el cálculo, las propiedades físicas de la nanoestructura y se aclaran las aproximaciones usadas.

En resumen, este capítulo proporciona una descripción detallada del modelo teórico utilizado para analizar la nanoestructura y los métodos teóricos empleados. Los resultados obtenidos a través del modelo teórico y la propuesta de solución presentada en este capítulo serán la base para el proceso numérico en el cálculo de energías del sistema.

2.1 Modelo Geométrico

Las nanoestructuras formadas por puntos cuánticos pueden presentar diversas variaciones en su estructura, ya sea por el diseño o debido a pequeñas alteraciones de parámetros durante el crecimiento. Por ello es necesario realizar modelos que permitan prever y describir los efectos resultantes. En este estudio se ha modelado una nanoestructura compuesta por un punto cuántico circular rodeado por un anillo cuántico circular de ancho fijo, los cuales se han dispuesto en configuración concéntrica (NQDR). La altura de la estructura no se ha considerado debido a la geometría casi planar que presentan las nanoestructuras autoensambladas, y también con el objeto de reducir considerablemente costos computacionales. Este arreglo se muestra en la Figura 4, con las siguientes consideraciones: el ancho del QR es delimitado por dos circunferencias centradas, la primera de radio R_i y la segunda de radio R_e . Por lo tanto, el ancho del anillo está dado como $w = R_e - R_i$. El QD tiene radio R_p , y se encuentra centrado en el agujero del QR, por lo que la región que separa el punto del anillo tiene un espesor $w_b = R_i - R_p$

Figura 4.*Modelo geométrico de una NQDR*

Nota. El modelo contiene el sistema de referencia adoptado y describe componentes.

2.2. Materiales del Sistema

Las dos estructuras acopladas, esto es el QD y el QR, son de *GaAs*, mientras que la matriz donde se encuentran inmersos es de $Al_xGa_{1-x}As$. El anillo cuántico, ostenta dimensiones mayores que el portador de carga, por este motivo, será tratado como un medio continuo (Ashcroft & Mermin, 2022). También, en nuestros análisis, hemos deliberadamente omitido el desajuste existente en las juntas, tanto en la constante dieléctrica como en la masa efectiva del portador de carga. En esta consideración, hemos optado por emplear los valores específicos asociados a la región interna de los puntos cuánticos, ya que el confinamiento ejerce una influencia significativa, posicionando predominantemente al portador de carga en esta zona. Este enfoque permite una aproximación precisa al modelar las propiedades del sistema, alineando nuestra simulación con las condiciones intrínsecas del entorno de confinamiento.

Es importante mencionar que el compuesto ternario $Al_xGa_{1-x}As$ presenta una brecha energética directa para valores de x inferiores a 0.45. Con esta información, los parámetros físicos de los materiales abordados en este trabajo se relacionan en la Tabla 1.

Tabla 1.

Parámetros físicos de los materiales

Parámetro (Unidad)	GaAs	$Al_xGa_{1-x}As$
Masa efectiva del electrón (m^*)	$0,067 m_e$	$(0,67 + 0,083x)m_e$
Barrera de potencial (meV)	0	$V_0 = 0,6(1360x + 220x^2)$
Expresión		Descripción
m_e		Masa del electrón libre
x		Concentración de aluminio
ϵ_0		Permitividad eléctrica del vacío

Nota. Parámetros tomados de (Levinshtein, 1997) (Duque et al., 2011)

2.3. Ecuación de Schrödinger

2.3.1 Hamiltoniano del Sistema

La dinámica del único electrón de conducción considerado en nuestro problema se ha modelado mediante la ecuación de Schrödinger estacionaria, utilizando la aproximación de masa efectiva y la función envolvente (Kasap, 2006), cuyo Hamiltoniano toma la forma siguiente:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_e^*} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}]^2 + eF\rho \cos\varphi + V_0(\rho, \varphi) \tag{7}$$

Donde V_0 representa el potencial de confinamiento estructural creado por la discontinuidad que existe entre las bandas de conducción y valencia en las heterojunturas de la heterounión tipo I (Purohit & Sharma, 2015). En nuestro caso dicho potencial será considerado de barrera finita y se puede expresar como:

$$V_0 = \left\{ \begin{array}{l} 0 \text{ en la NQDR} \\ 0,6(1360x + 220x^2) \text{ en la matriz} \end{array} \right\} \tag{8}$$

El sistema se expone a un campo magnético exterior homogéneo $\mathbf{B} = B\hat{k}$, determinado por el potencial vectorial $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho})$, y a un campo eléctrico F orientado en el plano de la estructura, cuyos aportes están incluidos en el Hamiltoniano (7) que describe el sistema en coordenadas cilíndricas. Al desarrollar el término $[\mathbf{p} + e\mathbf{A}]^2$, donde $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ y $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\rho$ se obtiene como resultado:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m_e^*}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m_e^*}A^2 + eF\rho\cos\varphi + V_0(\rho, \varphi) \quad (9)$$

de acuerdo con la sustitución en coordenadas polares de: $\nabla = \nabla_\rho\hat{e}_\rho$, el Hamiltoniano del sistema se expresa en forma explícita como:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e B}{m_e^*}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e^*} + eF\rho\cos\varphi + V_0(\rho, \varphi) \quad (10)$$

2.4. Esquema de Solución

La solución de la ecuación de Schrödinger que describe el comportamiento energético de la nanoestructura no permite realizar una separación de variables, razón que hace necesario recurrir a algún método numérico para encontrar su solución. En este trabajo se utilizó la herramienta computacional COMSOL Multiphysics, basada en un esquema de elementos finitos. COMSOL ofrece la posibilidad de definir ecuaciones diferenciales en forma de coeficientes, para lo cual solo es necesario definir el valor de cada uno de los coeficientes que acompaña a cada una de las derivadas.

La ecuación diferencial en forma de coeficientes que usamos fue la siguiente:

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \quad (11)$$

La energía puede ser expresada en electronvoltios (eV) al dividir la ecuación (10) por la unidad fundamental de carga e . Es importante aclarar que todos los parámetros de la ecuación (10)

deben ser ingresados en unidades del Sistema Internacional (S.I.). Ahora se debe identificar cada coeficiente de la ecuación (11) con los correspondientes en la ecuación (10) y se obtiene que:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_a = 0 \\ d_a = 1 \\ c = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \\ \alpha = [0,0] \\ \gamma = [0,0] \\ \beta = \frac{e\hbar B}{2m^*}[-y, x] \\ a = \frac{e^2 B^2}{8m^*}(x^2 + y^2) + eFr(x, y) \\ f = 0 \end{array} \right. \quad (11)$$

Además, para resolver el problema de valores propios, es necesario añadir un estudio de valores propios en COMSOL, que asume por defecto la variable dependiente u . En cuanto a la geometría del problema a estudiar, COMSOL dispone una variedad de componentes, entre los cuales se utilizó un componente 2D en coordenadas cartesianas para este trabajo.

Por otro lado, se diseñó un script en Python para realizar el procesamiento de datos que lee el documento de texto con los datos exportados desde COMSOL y los organiza en una matriz que permite realizar, con otro script, las gráficas.

3. Análisis de Resultados

El presente capítulo tiene como objetivo exponer y analizar los resultados obtenidos de la estructura electrónica correspondiente a una nanoestructura semiconductor compuesta por un punto y un anillo acoplados en una configuración concéntrica bajo la influencia de campos externos. Además, se exploran los efectos de la variación de parámetros geométricos, de la concentración de aluminio en la matriz que aloja la nanoestructura sobre su estructura electrónica y sobre las densidades de probabilidad electrónica.

Los resultados obtenidos permiten una mejor comprensión de las propiedades electrónicas de esta nanoestructura, y pueden ser de utilidad para el diseño y desarrollo de dispositivos semiconductores con propiedades optimizadas.

3.1. Efecto de Parámetros Geométricos y Estructurales

En la presente sección, se examina la dependencia del comportamiento energético de un electrón confinado en una configuración de anillo y punto concéntricos en relación al ancho del anillo, el tamaño del punto, la separación entre el punto y el anillo, y la concentración de aluminio.

3.1.1. Niveles de Energía más Bajos como Función del Ancho del Anillo

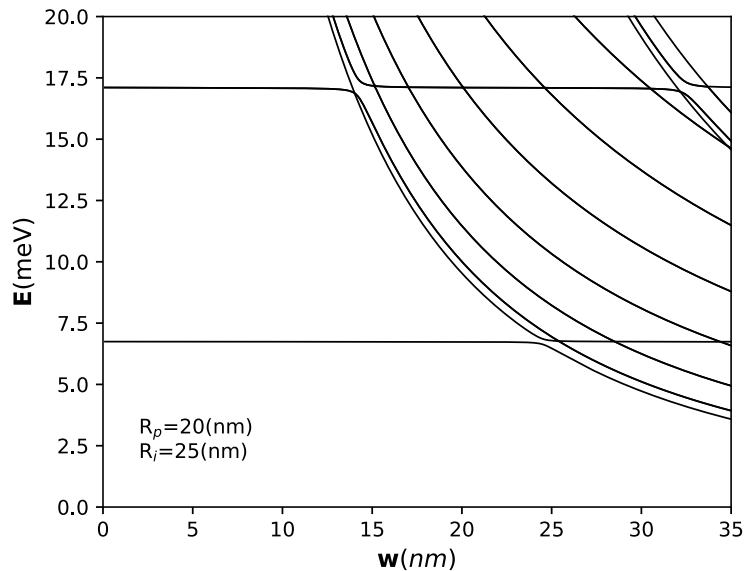
La figura 5 muestra la dependencia de los niveles de energía más bajos del electrón en función del ancho del QR, considerando un barrido de w desde 0 hasta 35 nm, mientras que el radio del QD se considerará fijo $R_p = 20\text{nm}$, al igual que el ancho de la barrera $w_b = 5\text{nm}$. La nanoestructura de $GaAs$ está dispuesta en una matriz de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$. En este gráfico se observa una casi superposición de dos regímenes diferentes, un primer régimen de niveles cuasi-invariantes ante la variación del ancho del QR, los cuales corresponden a estados localizados en el QD, y un segundo régimen de niveles que decrecen rápidamente, los cuales corresponden a estados localizados en el QR, para los cuales la energía disminuirá a medida que el ancho del anillo se incremente. Lo que hace que el espectro energético del sistema no sea una simple superposición de los espectros individuales del QD y del QR es la aparición de unos anticruces y, por lo tanto, la aparición de interrupciones en la continuidad de algunos niveles, lo cual es clara señal de la existencia de un acople cuántico entre las 2 estructuras. La tendencia horizontal de los niveles se debe a la preferencia que tiene el electrón de permanecer en el QD entre tanto el QR no alcance dimensiones considerables para que el electrón tenga mayor libertad y túnele hacia él, produciendo de esta manera un acople electrónico (Chakraborty, 1999). Es interesante anotar como este acople

se consigue cuando el confinamiento radial que impone el QR (aproximadamente 25 nm) sobre pasa ligeramente al confinamiento radial impuesto por el QD (20 nm).

Un rasgo particular que se puede apreciar en la Figura 5 es la presencia de anti cruces entre niveles de energía. Para analizar este rasgo, se amplió una región de la Figura 5 en un intervalo de energía de 5.8meV a 7.6meV (ver Figura 6). La figura 6 muestra gráficas de densidad de probabilidad sobrepuestas en los tres primeros niveles de energía cuando el valor de " w " se acerca a 25nm .

Figura 5.

Niveles de energía más bajos de un electrón en la NQDR como función del ancho del anillo w .

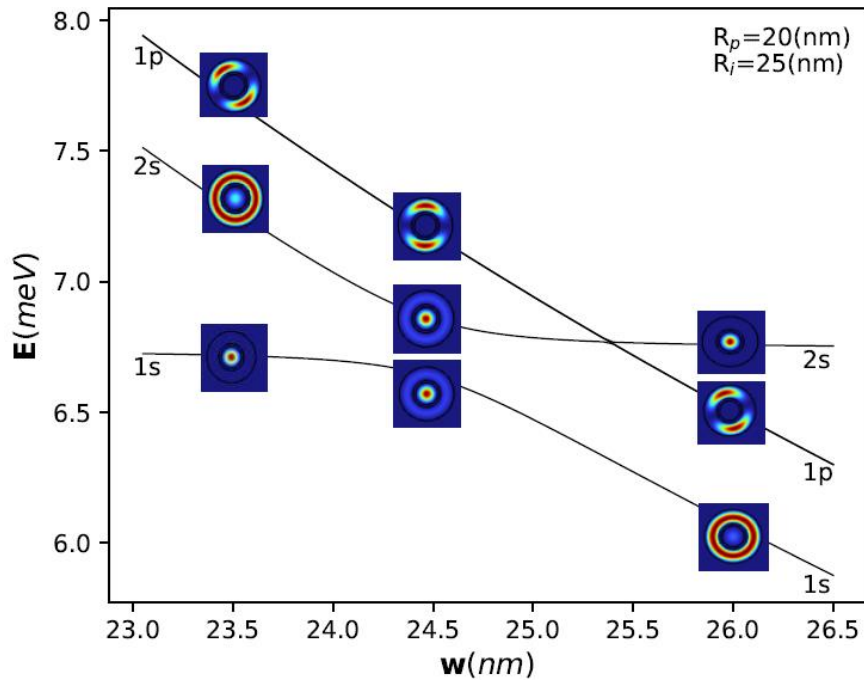


Estos gráficos de densidad electrónica muestran cómo, para QRs delgados ($w < 25\text{nm}$), el electrón en el estado base (1s) permanece en el QD casi imperturbado por la presencia del QR, hasta que el QR adquiere un ancho suficiente para albergar al electrón ($w \approx 25\text{nm}$), estado en el que se evidencia que es posible encontrar el electrón tanto en el QD como en el QR. Es este tunelamiento del electrón hacia el anillo el que permite que se dé el acople cuántico entre el QD y

el QR. Para anchos mayores a 25nm, la densidad electrónica pone al descubierto que el electrón prefiere en estas condiciones estar en el QR, y esto es corroborado por el rápido descenso que se da en la energía con el incremento de w , lo cual a su vez está en perfecto acuerdo con el principio de que todo sistema cuántico siempre tiende a adquirir la configuración de mínima energía. En esta ampliación se observa como el segundo nivel también corresponde a un orbital s , pero en este caso la mayor probabilidad de encontrar el electrón está en el QR debido a que es un estado más energético ($2s$). Sin embargo, cuando $w=23,5nm$, en el gráfico de densidad electrónica se alcanza a observar una pequeña probabilidad de encontrar el electrón en el QD, pero a medida que el ancho del QR se acerca a 25nm, la densidad electrónica adquiere una gran semejanza con la del estado base, lo cual es una señal clara del acople cuántico que aparece entre estos niveles. Otro rasgo que ratifica lo anterior es el comportamiento en las energías, pues se aprecia cómo la energía del segundo nivel decrece rápidamente y tiende a degenerarse con la del estado fundamental, llegando a una energía mínima de separación (energía de tunelamiento) de $0.3meV$ entre ellos, justo cuando $w\approx 24,5nm$. Un último rasgo que vale la pena analizar en este gráfico, es el hecho de que el acople cuántico hace que se presente un intercambio entre los niveles ($1s$) y ($2s$) a pesar de no haber cruce, mientras que entre los estados ($2s$) y ($1p$) si se da un cruce alrededor de $w=25,5nm$. Lo anterior es coherente con el hecho de que estados con diferente simetría pueden cruzarse, mientras que el cruce de estados con igual simetría no es posible y lleva a la aparición de anti-cruces.

Figura 6.

Gráficas de densidad de probabilidad en función de w

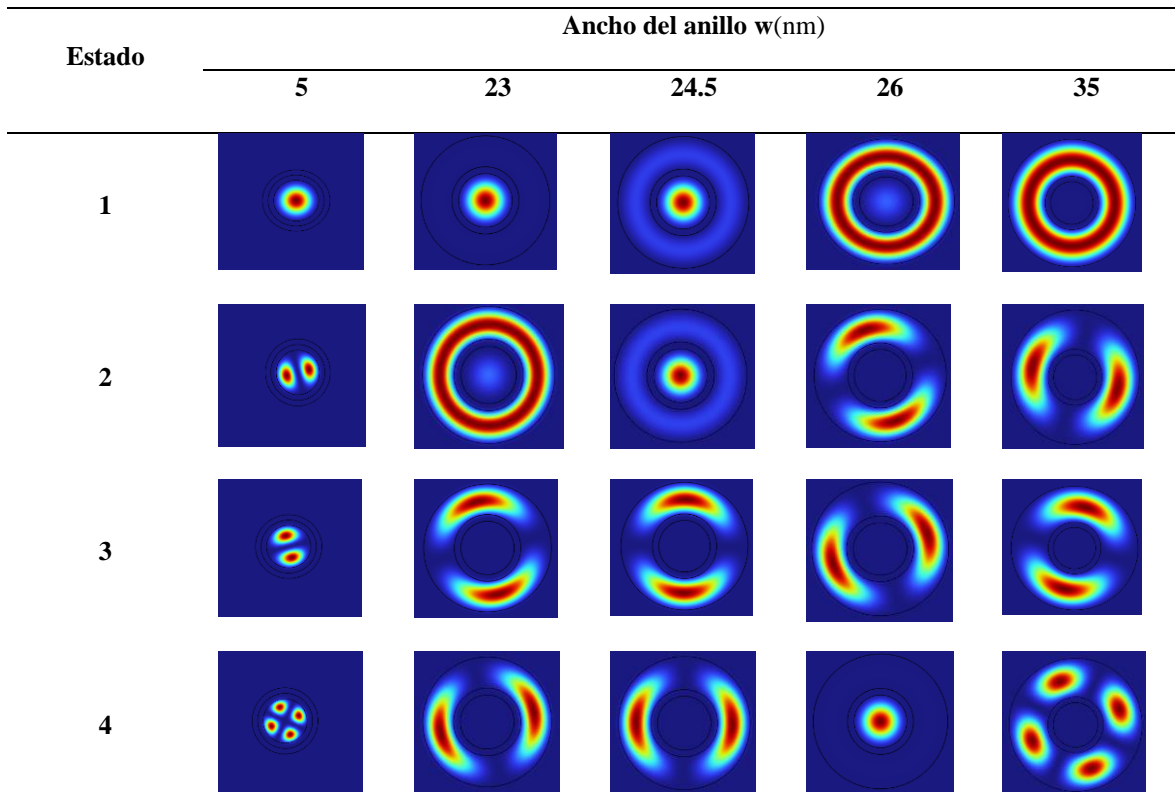


Nota. Las gráficas de densidad de probabilidad están sobrepuestas en los tres primeros niveles de energía para w en un intervalo de $3,5$ nm.

La Figura 7 ha sido diseñada para permitir la observación de transiciones, acoplamientos y cruces entre los primeros niveles energéticos a partir de densidades electrónicas en un amplio rango. En la figura se pueden observar varios fenómenos interesantes. En particular, se puede apreciar que cuando $w = 5$ nm, los niveles 2 y 3 están degenerados y son orbitales tipo p.

Figura 7.

Densidad de probabilidad electrónica para los primeros 4 niveles energéticos en función del ancho del anillo w .



Además, se observa que para valores de $w = 26nm$ y $w = 35nm$, el segundo nivel energético también es doblemente degenerado y tipo p , pero en este caso el orbital pertenece al anillo. Las densidades electrónicas para los cuatro niveles energéticos evidencian transiciones notables entre los diferentes valores de w . Por ejemplo, se observa una transición del segundo estado energético para $w = 23nm$ al primer estado energético para un valor de $w = 26nm$, así como descensos en los estados tercero y cuarto que muestran ser los estados 2 y 3 para un valor de $w = 26 nm$.

3.1.2. Espectro Energético como Función del Radio del Punto

En esta sección se muestran los resultados obtenidos para los valores de energía de los primeros estados del electrón en función del tamaño del QD. En este caso se mantendrá la misma concentración de aluminio para la matriz que en la sección anterior. Con relación a los parámetros geométricos, el ancho de la barrera que separa el QD del QR se mantendrá fijo en 5nm, al igual que el ancho del QR ($w = 15nm$), de esta manera se podrá establecer para qué radio del QD se da el acople cuántico entre los primeros 2 niveles. Los resultados se muestran en la Figura 8. Los valores iniciales de energía corresponden a un anillo de radio interno $R_i = 5nm$ y radio externo $R_e = 20nm$, por lo que los valores de energía del electrón con $R_p = 0$ coinciden con los esperados para un anillo de las dimensiones indicadas.

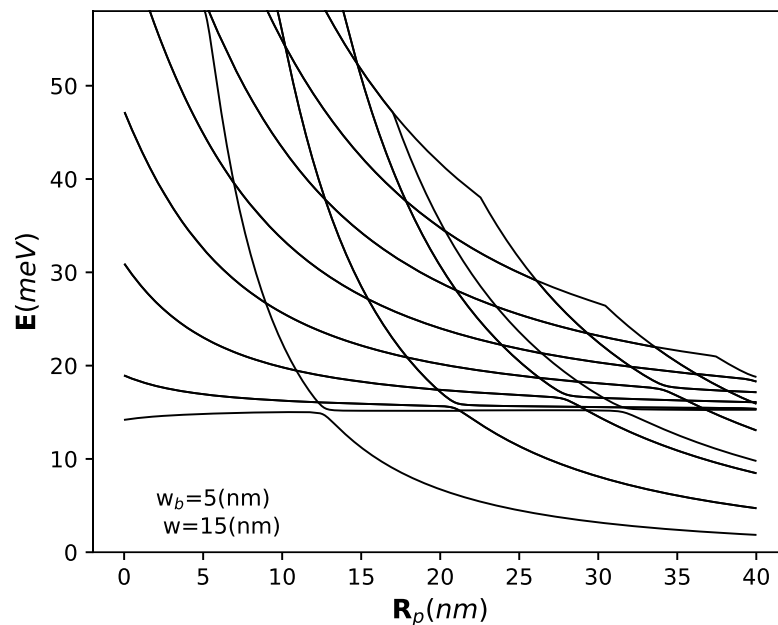
La presencia del disco genera una importante modificación topológica en el sistema y por lo tanto se traduce en importantes cambios en la estructura del espectro energético. Dentro de estos cambios se observa la tendencia de los niveles de energía a decrecer cuando el radio del punto R_p aumenta, lo cual se debe a que al mismo tiempo que el radio del QD crece, los radios interno y externo del QR también crecen, aunque se mantiene fijo w , y por lo tanto el área que cubre el QR se hace mayor reduciéndose el confinamiento estructural sobre el electrón y por consiguiente su energía. Sin embargo, un hecho que resalta y llama la atención es que la energía del estado base aumenta ligeramente a medida que aumenta el radio del punto, lo cual es un rasgo típico en la energía del estado fundamental de QRs.

Este comportamiento para el estado base se presenta hasta un valor crítico donde hay un anticruce con el primer estado excitado. El valor donde se presenta este fenómeno corresponde aproximadamente con el radio de Bohr efectivo para el arseniuro de galio ($12.61nm$) (J. Shah, 1999, p. 38). Este comportamiento se debe a que cuando la dimensión radial del QD se hace

comparable con la dimensión radial del QR, esto es su ancho, entonces el electrón puede tunelar hacia el QD, pues el confinamiento que le impone el QD es similar al que le impone el QR, y es justo aquí donde se da el acople cuántico. Luego se tiene que a medida que el tamaño del punto aumenta, la energía del sistema disminuye rápidamente, pues será más probable encontrar el electrón ahora en el QD.

Figura 8.

Energía para un electrón confinado en una NQDR como función del radio del punto con ancho de anillo y separación entre punto-anillo constantes.



En la Figura 9 se pueden observar algunas densidades electrónicas del primer nivel de energía, en las cuales se aprecia que el estado base es inicialmente un estado 1s del anillo, luego realiza una transición a un estado 2s con densidad de probabilidad en el punto y en el anillo cuando el radio del punto toma valores cercanos al radio de Bohr, y finalmente termina como un estado 1s del punto. Este fenómeno se debe a la simetría circular del estado s, y respalda el incremento de

energía del estado base discutido previamente. Indica que el electrón en el estado 1s del anillo aumenta su energía a un estado 2s de acoplamiento en la nanoestructura, y luego prefiere el estado 1s de menor energía en el punto.

Otra característica notable de los niveles de energía es el doble régimen que aparece, al igual que en los resultados de la sección anterior, donde se diferencian claramente los estados que pertenecen al QD (mayor pendiente de descenso) y los que pertenecen al QR (menor pendiente de descenso), y donde se hacen evidentes las regiones de acoplos entre diferentes niveles (anticruces).

























En la figura 9, se destaca que al hacer el radio del punto cuántico cero, el cuarto estado de energía se asocia con un orbital tipo d. En contraste, cuando el radio del punto alcanza los 12,5 nm, el orbital tipo d pasa a ser el quinto nivel de energía. Este cambio evidencia un cruce entre niveles de energía, específicamente entre un nivel d y uno s, como se visualiza en la figura 8, marcando el primer cruce entre niveles de energía.

La manifestación de estas transiciones se alinea con la simetría circular del sistema. Este fenómeno se debe a que los orbitales d y s tienen formas diferentes: el orbital s tiene una forma circular, mientras que el orbital d tiene una forma más compleja. A medida que el radio del punto cuántico aumenta, el área espacial disponible para los orbitales también se incrementa.

Esto provoca que el orbital s, al ser más eficiente para ocupar un espacio amplio, ocupe un nivel de energía inferior.

Figura 9.

Gráficas de densidad de probabilidad electrónica y valores de energía para los 6 estados más bajos a diferentes valores del radio del punto R_p en la NQDR.

Estado	Radio del punto			
	$R_p = 0\text{nm}$	$R_p = 12.5\text{nm}$	$R_p = 25\text{nm}$	$R_p = 33\text{nm}$
1				
	$E_1 = 14,18\text{meV}$	$E_1 = 14,95\text{meV}$	$E_1 = 4,45\text{meV}$	$E_1 = 2,66\text{meV}$
2				
	$E_2 = 18,95\text{meV}$	$E_2 = 16,07\text{meV}$	$E_2 = 11,28\text{meV}$	$E_2 = 6,74\text{meV}$
3				
	$E_3 = 18,95\text{meV}$	$E_3 = 16,07\text{meV}$	$E_3 = 11,28\text{meV}$	$E_3 = 6,74\text{meV}$
4				
	$E_4 = 30,96\text{meV}$	$E_4 = 16,21\text{meV}$	$E_4 = 5,21\text{meV}$	$E_4 = 12,11\text{meV}$
5				
	$E_5 = 30,96\text{meV}$	$E_5 = 19,02\text{meV}$	$E_5 = 15,65\text{meV}$	$E_5 = 12,11\text{meV}$
6				
	$E_6 = 47,29\text{meV}$	$E_6 = 19,02\text{meV}$	$E_6 = 15,65\text{meV}$	$E_6 = 13,95\text{meV}$

3.1.3. Espectro Energético como Función de la Separación entre Punto y Anillo

Dada la posibilidad que en la obtención de NQDR puedan tenerse diferentes distancias entre punto y anillo, en esta sección se describen los resultados como función de este parámetro. Los materiales usados, las concentraciones y el ancho w son los mismos del apartado 3.1.2. En la Figura 10 se muestran los niveles de energía del sistema en función de la separación radial entre el QD y el QR, es decir, en función del ancho de la barrera de potencial que existe entre las dos estructuras. El gráfico muestra que cuando la separación entre QD y QR se incrementa, la energía del electrón aumenta. Este comportamiento se debe al debilitamiento que sufre el tunelamiento entre el QD y el QR a medida que el ancho de la barrera de potencial w_b se incrementa, lo cual lleva a que la densidad de probabilidad electrónica, que se hallaba extendida sobre toda la nanoestructura para valores pequeños de w_b , se contraiga y se localice solo en el QD o en el QR, incrementándose de esta manera el confinamiento del electrón y llevando a un ascenso en la energía. En la figura 11 se puede apreciar el anterior comportamiento ya que se han graficado las densidades de probabilidad de algunos de los estados más bajos para diferentes valores de w_b . En el gráfico 10 también puede observarse que, para valores de $w_b > 5nm$, los niveles energéticos tienden a hacerse completamente estables debido a que el confinamiento radial tanto en el QD como en el QR no cambian con el ancho de la barrera. Además, el acople cuántico entre QD y QR ha desaparecido para los estados de menor energía. Sin embargo, es interesante notar que para algunos estados excitados superiores (correspondientes a los niveles 4, 5 y 6) se dan algunos cruces, muestra de que aún existe alguna posibilidad de tunelamiento entre el QD y el QR.

Figura 10.

Energía para un electrón confinado en una NECPA como función de la separación entre punto-anillo w_b , con tamaño del punto R_p y ancho de anillo w constantes.

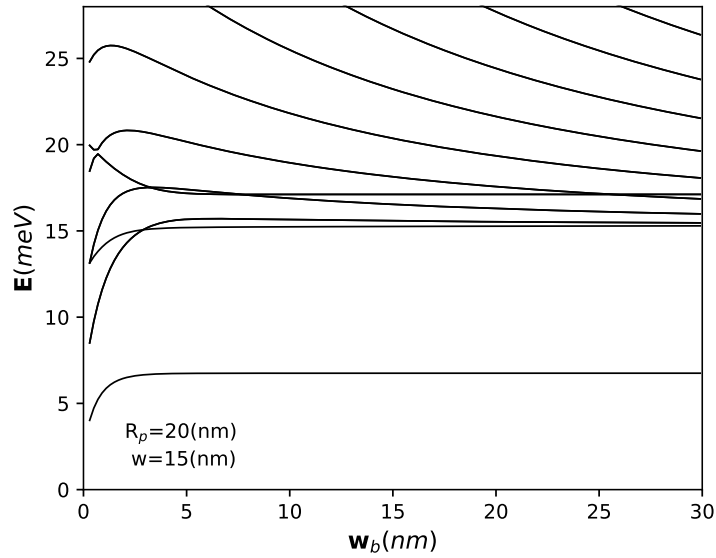
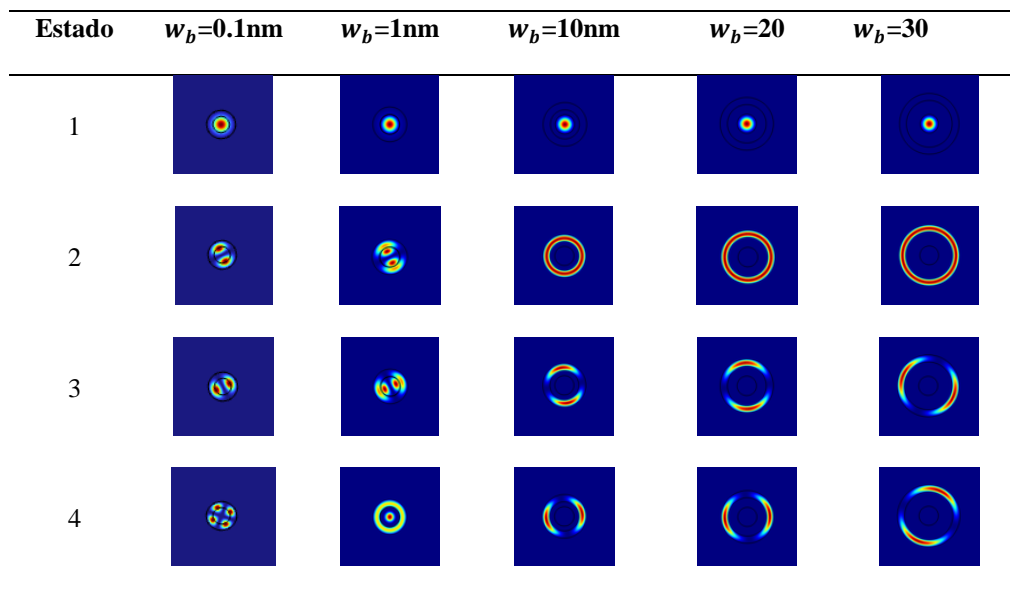
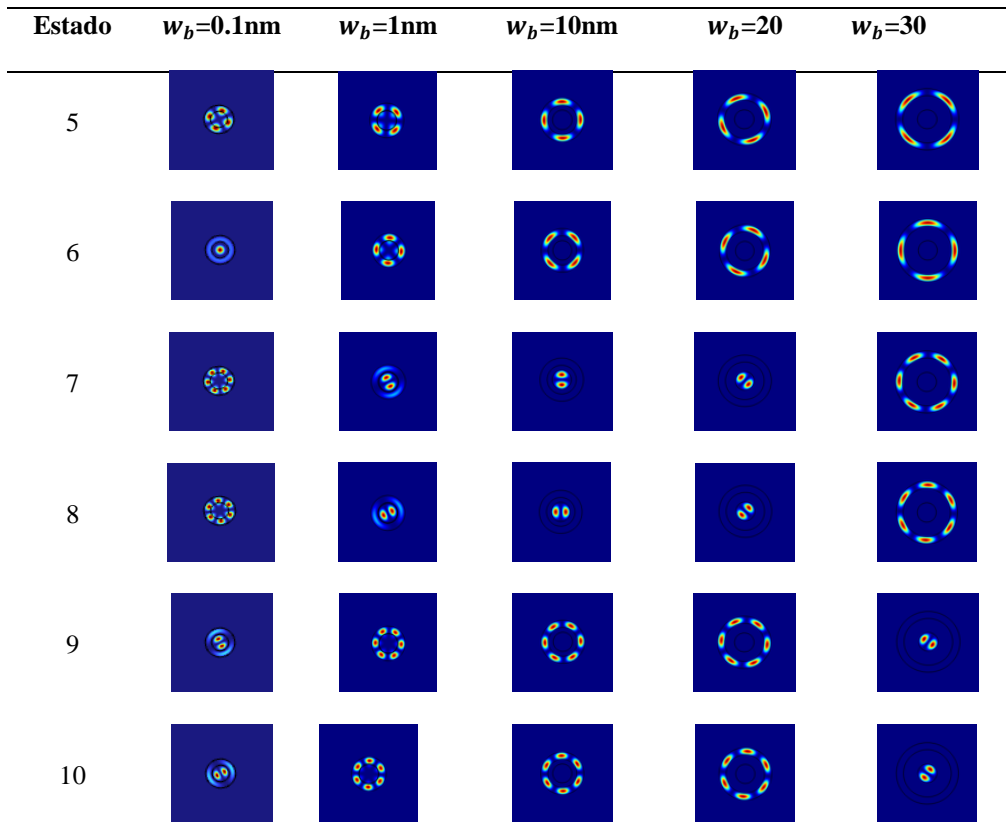


Figura 11.

Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica para los 10 estados de energía más bajos en función de 5 valores diferentes de la separación punto-anillo w_b de la NQDR.





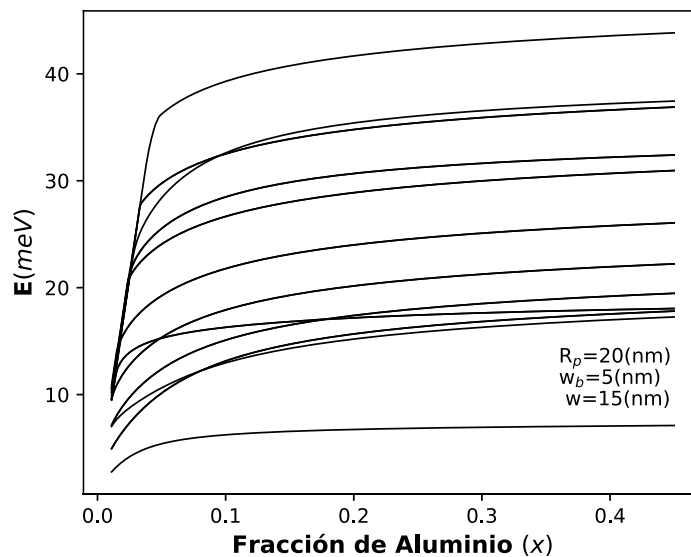
3.1.4. Espectro Energético como Función de la Concentración de Al

Como se muestra en la Figura 12, a medida que aumenta la concentración de aluminio, la barrera de potencial también aumenta, esto conduce a un mayor confinamiento del electrón. Como resultado, todas las energías aumentan. Este aumento en el confinamiento puede lograrse reduciendo el ancho del espacio o aumentando la altura de las barreras. Los cruces que se observan en la figura son el resultado de los cambios en la altura de la barrera, los cuales afectan los niveles de tunelamiento entre el punto y la barrera. Por lo tanto, algunos niveles pueden estar más abajo y otros más arriba debido al cambio en el acoplamiento. En resumen, el aumento de la concentración de aluminio produce un aumento en la barrera de potencial y, por lo tanto, en el confinamiento del electrón, lo que se refleja en el aumento de todas las energías. Sin embargo, se destaca que el aumento en los niveles de energía no es tan fuerte para concentraciones superiores al 5%. No obstante, es importante resaltar que a medida que aumenta la concentración de aluminio, en la

matriz, los niveles más bajos, excepto el primero, tienden a incrementar la separación entre ellos, debido al confinamiento que ejerce el aumento de la barrera de potencial impuesta por la matriz.

Figura 12.

Energía para un electrón confinado en una NQDR como función de la concentración de aluminio x , con tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w constantes.



3.2. Espectro Energético en Función de Campos Externos

En esta sección se presentan los resultados de considerar el efecto que tiene la aplicación de diferentes campos eléctricos y magnéticos al sistema. Se analiza la respuesta de la estructura ante un campo magnético creciente de 0 a 5 (T), seguido por la exposición a un campo eléctrico F de 0 a 2 kV/cm , y finalmente se aplica un campo magnético de 0 a 5(T) con un campo eléctrico constante de 1.2 kV/cm . Para los cálculos inherentes a este análisis, la estructura se modeló con los siguientes parámetros: el radio del punto cuántico (QD) se mantuvo constante en $R_p=20$ nm, al igual que el ancho de la barrera (w_b) que se fijó en 10 nm y el ancho del anillo cuántico (QR)

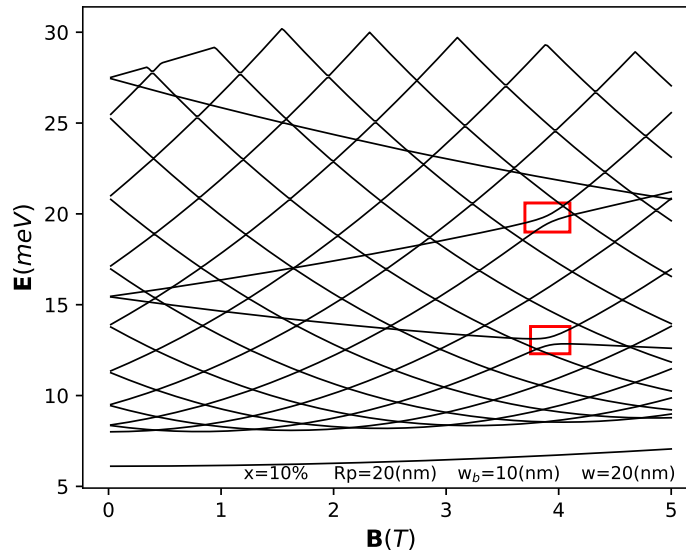
que se estableció en $w=20$ nm. La nanoestructura de GaAs está dispuesta en una matriz de $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$.

3.2.1. Espectro Energético en Función del Campo Magnético

En la Figura 13 se presentan los primeros 20 niveles de energía en función de la intensidad de un campo magnético uniforme aplicado en dirección normal al plano de la nanoestructura. Un primer rasgo que llama la atención en este gráfico es la aparición de dos espectros casi superpuestos, uno correspondiente a estados que están en el QR, para el cual los niveles de energía oscilan y se cruzan al variar la intensidad del campo magnético (Oscilaciones Aharonov-Bohm), y otro espectro que corresponde a los estados localizados en el QD, para el cual los niveles presentan un comportamiento monótono, ya sea creciente o decreciente, respecto al campo magnético aplicado, tal como es el caso del estado base, el cual crece monótonamente. No obstante, estos dos espectros están acoplados, y este acoplamiento se evidencia en los anticruces que se dan entre algunos niveles que corresponden a estados localizados en el QD con niveles que pertenecen al espectro del QR, los cuales se han encerrado por los rectángulos de color rojo. Es interesante destacar cómo este acople se da entre los dos orbitales tipo p del QD con los dos orbitales tipo p del QR, y se presenta para un campo magnético relativamente alto (4 Teslas), el cual favorece el acople entre las dos estructuras, que se hallan bastante separadas $w_b=10nm$, gracias al carácter confinante del término diamagnético. En ausencia de campo magnético (cuando $B=0$), se observan estados doblemente degenerados debido a la simetría rotacional del sistema, pero el campo magnético los separa al provocar variaciones en los valores del término paramagnético y diamagnético, y por lo tanto rompe el degeneramiento.

Figura 13.

Energía para un electrón confinado en una NECPA expuesta a un campo magnético \mathbf{B} normal al plano de la estructura, manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w .



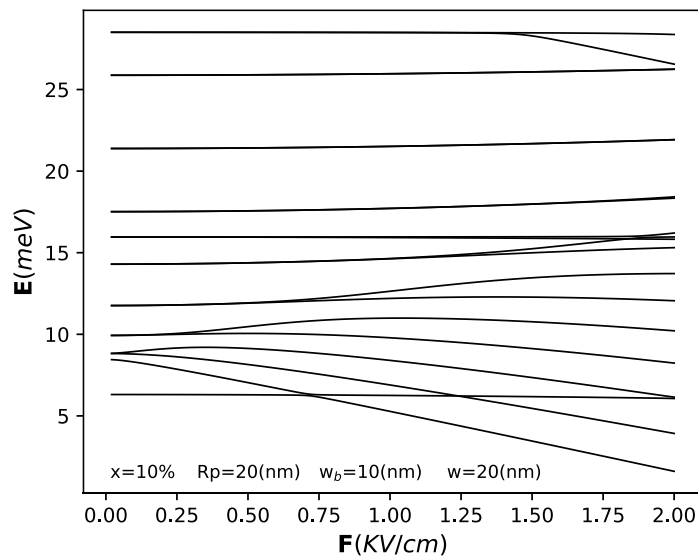
3.2.2. Espectro Energético en Función de un Campo Eléctrico

En esta sección se estudia el efecto de un campo eléctrico uniforme aplicado en la dirección positiva del eje x , según el sistema de referencia de la Figura 4, sobre el espectro energético del sistema. La Figura 14 muestra cómo el conjunto de niveles de energía cambia con el incremento del campo eléctrico, desde 0 hasta 2 KV/cm . Como primera observación, se nota que el aumento en la intensidad del campo provoca un desacople de los niveles de energía en dos, esto significa que se destruye el degeneramiento y se produce el efecto Stark. Además, es destacable el cruce de algunos niveles de energía, un comportamiento característico de estructuras con doble pozo cuántico expuestas a un campo eléctrico, como es el caso de nuestro sistema, ya que si hacemos

un corte radial a nuestra estructura nos encontraremos con un pozo de potencial asociado al QD y otro asociado al QR.

Figura 14.

Energía para un electrón confinado en una NECPA expuesta a un campo eléctrico F en sentido x (según esquema de la Figura 4), manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w .

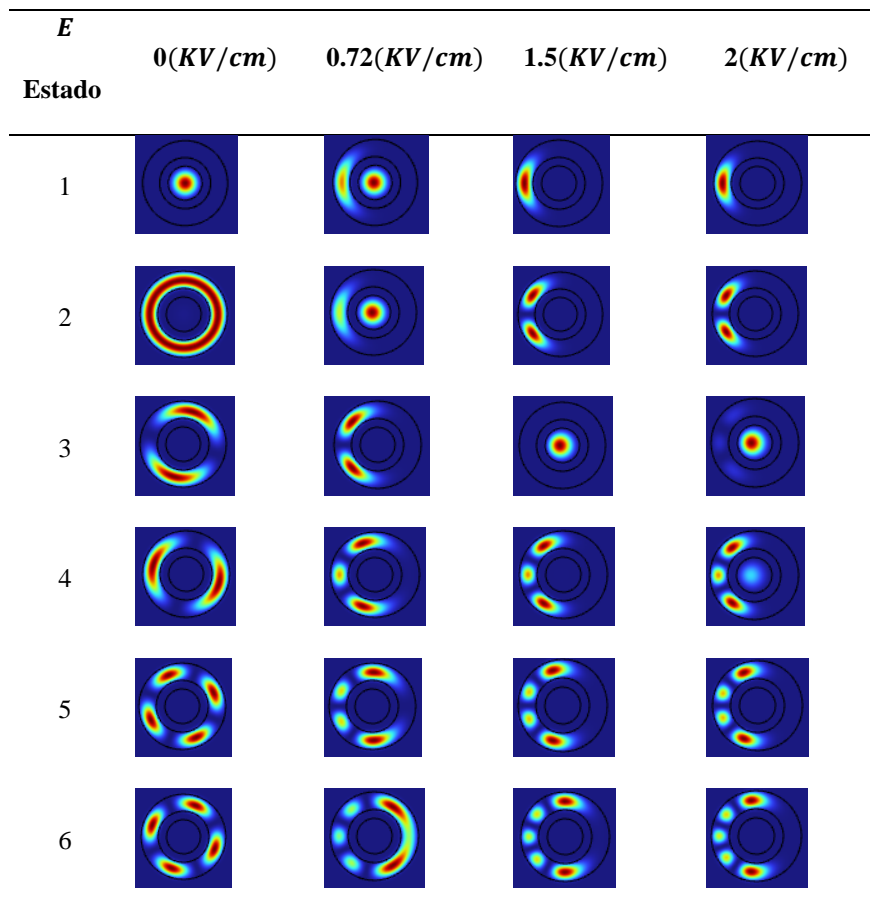


Ahora vamos a considerar la influencia de la intensidad del campo eléctrico y su orientación sobre la densidad de probabilidad electrónica. Teniendo en cuenta que una partícula con carga eléctrica expuesta a un campo eléctrico, experimenta fuerza eléctrica en la dirección de este; la distribución de probabilidad también se desplaza de acuerdo con la intensidad y orientación del campo. El conjunto de imágenes agrupadas en la Figura 15 ilustran la densidad de probabilidad con sus respectivas afectaciones. Con el propósito de observar la distorsión de la densidad de probabilidad mostramos los primeros 6 niveles energéticos de la nanoestructura. Para el caso cuando no se perturba el sistema, es decir campo cero, se observa simetría completa. Cuando se

introduce un campo eléctrico la densidad se distorsiona revelando que el electrón se mueve, según esquema de la Figura 4, en sentido $-x$. El incremento en la intensidad del campo aumenta la distorsión de la densidad.

Figura 15.

Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica para los 6 estados de energía más bajos en función de campo eléctrico.



Nota. La gráfica muestra densidad electrónica para 4 valores diferentes de campo eléctrico F en dirección x (según esquema de la Figura 3), manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w .

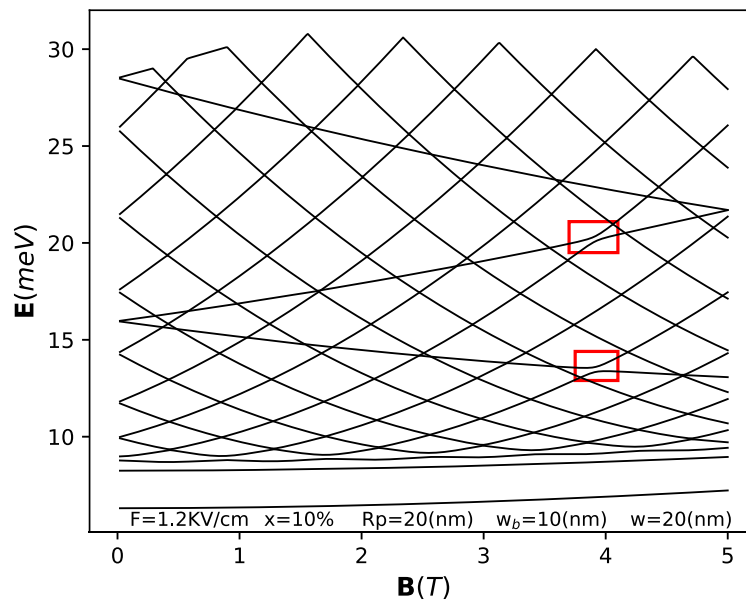
3.2.3. Espectro Energético en Función de un Campo Magnético con Campo Eléctrico Superpuesto.

A continuación, presentamos los resultados de nuestros cálculos para la nanoestructura en cuestión, la cual se encuentra expuesta a un campo eléctrico de $0,12KV/cm$ en la dirección positiva del eje x y simultáneamente se aplicará un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento.

La figura 16 corresponde al gráfico de los primeros 20 niveles de energía en función de la intensidad del campo magnético, en presencia del campo eléctrico fijo descrito en la anterior línea. Al comparar este resultado con el caso sin campo eléctrico, mostrado en la Figura 13, resalta la desaparición de las oscilaciones AB en los niveles 2 y 3, los cuales correspondían a los estados más bajos para cuando el electrón se hallaba localizado en el QR. Lo anterior se explica por el efecto localizador que tiene el campo eléctrico sobre el electrón, el cual se hace especialmente fuerte sobre los estados más bajos por ser menos energéticos, y por lo tanto tiene lugar una ruptura de la simetría rotacional del sistema originándose una transición de los estados rotacionales más bajos a estados vibracionales. Los estados superiores son más energéticos, en consecuencia, presentan mayor oposición al efecto de localización que impone el campo eléctrico. También es de destacar que las regiones donde se presenta acople cuántico se mantienen inalteradas, esto debido a que los niveles involucrados son bastante energéticos y no se ven, prácticamente, afectados por la presencia del campo eléctrico.

Figura 16.

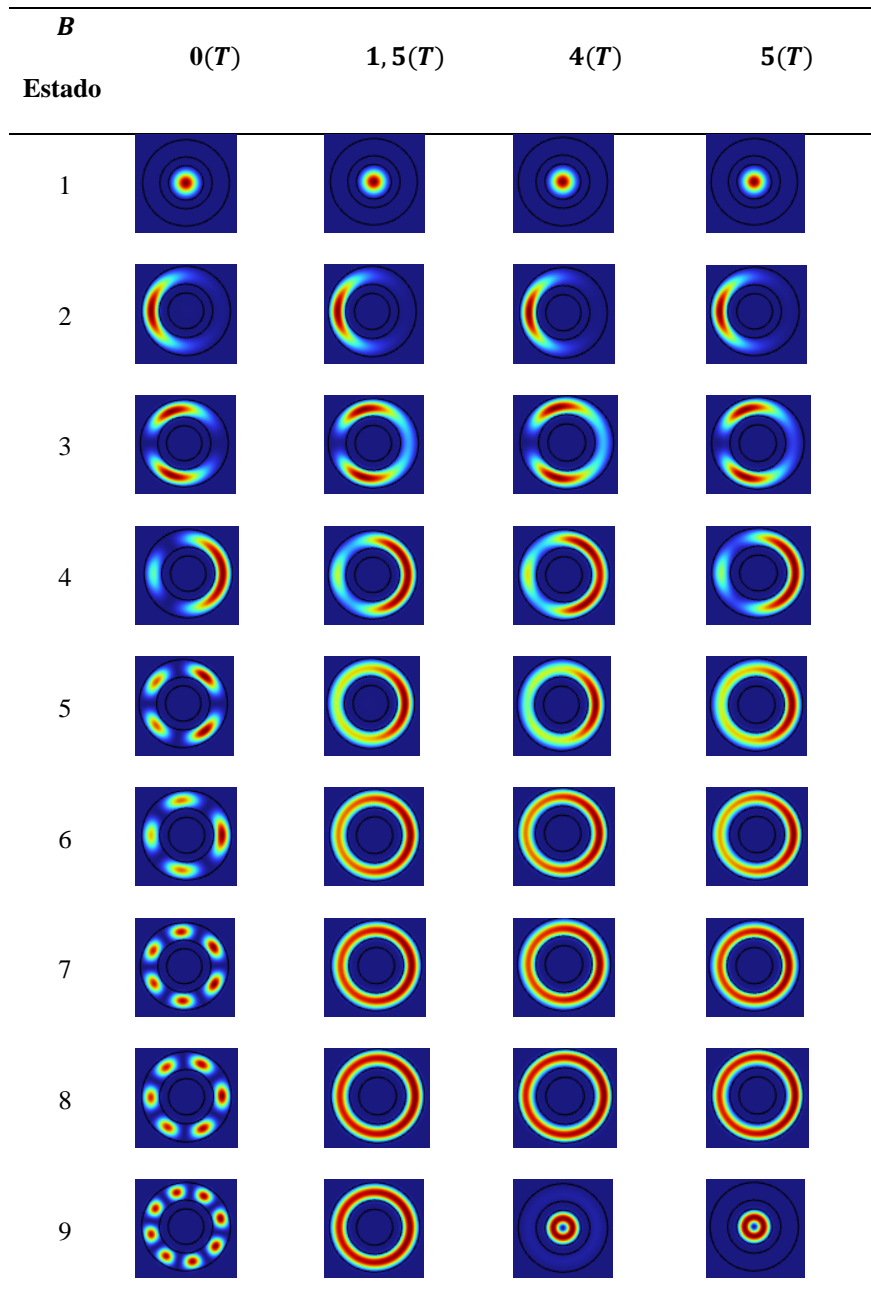
Energía de un electrón en una NQDR, en función de un campo magnético \mathbf{B} normal al plano de la estructura y un campo eléctrico constante de 1.2kV/cm en dirección x , manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w .

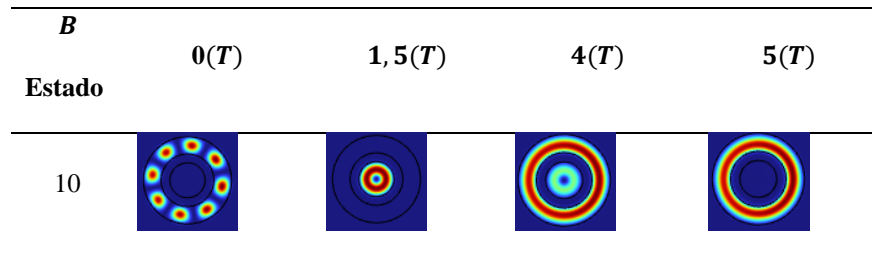


La Figura 17 muestra densidades de probabilidad para los primeros 10 estados energéticos en función del campo magnético y con la presencia del campo eléctrico. Cabe resaltar que la incorporación del campo eléctrico destruye las corrientes persistentes (en el anillo) en los niveles 2 y 3. Otro hecho a resaltar es el acople cuántico entre anillo y punto, como lo muestra el estado 10, para un campo magnético de 4T, este acople corresponde al anti-cruce, enmarcado por el recuadro rojo más bajo, de la Figura 16.

Figura 17.

Gráficas de distribución de densidad de probabilidad electrónica de los 10 estados de energía más bajos para 4 valores diferentes de campo magnético B normal al plano de la estructura y un campo eléctrico constante.





Nota. El valor de F es de $1.2kV/cm$ en dirección x (según esquema de la Figura 4), manteniendo constante: concentración de aluminio x , tamaño del punto R_p , ancho de barrera w_b y ancho de anillo w .

4. Conclusiones

Se ha demostrado que en un sistema conformado por un punto cuántico rodeado de un anillo cuántico de $GaAs$, dispuestos concéntricamente, e inmersos en una matriz de $Al_xGa_{1-x}As$, puede existir acople cuántico entre el QD y el QR, para algunos estados. El grado de este acople dependerá de la relación entre los tamaños del QD y del QR, de la separación radial entre las dos estructuras y de la presencia e intensidad de campos externos (magnético y eléctrico).

Nuestros resultados revelan que el acoplamiento cuántico entre los componentes de la nanoestructura se produce para orbitales del mismo tipo, pero que corresponden a estados localizados en diferentes estructuras (QD o QR), y se manifiestan en el espectro energético como anticruces. Por lo tanto, este estudio proporciona una forma de identificar las características estructurales que debe tener una nanoestructura cuántica punto-anillo para determinar la presencia de acoplamiento cuántico a partir del conocimiento del espectro de energía.

Los cálculos de energía realizados para la nanoestructura en función de la concentración de aluminio en la matriz, han revelado que una mayor concentración produce un mayor confinamiento del electrón, lo que conlleva a un incremento en la energía de los niveles. Sin

embargo, este aumento no es significativo para valores superiores al 5% de aluminio en la matriz, a diferencia de las concentraciones menores al 5%. Por lo tanto, se concluye que pequeñas variaciones en la concentración de aluminio en el intervalo del 5% al 40% no producen cambios considerables en el espectro energético de la nanoestructura.

Nuestros resultados muestran que el espectro de energía y la densidad de distribución de probabilidad electrónica de la nanoestructura son bastante sensibles ante la presencia de campos magnéticos y/o eléctricos. Por ende, es posible modular el comportamiento y la distribución de la función de onda del electrón en la nanoestructura mediante campos externos.

Referencias Bibliográficas

- Abdullaeva, Z. (2017). *Nanomaterials in Daily Life: Compounds, Synthesis, Processing and Commercialization*. Springer International Publishing AG.
- Abid, N., Khan, A. M., Shujait, S., Chaudhary, K., Ikram, M., Imran, M., ... & Maqbool, M. (2022). *Synthesis of nanomaterials using various top-down and bottom-up approaches, influencing factors, advantages, and disadvantages: A review*. *Advances in Colloid and Interface Science*, 300, 102597.
- Aharonov, Y., & Bohm, D. (1959). *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*. *Physical Review*, 115(3), 485-491. doi:10.1103/PhysRev.115.485.
- Bastard, G. (1990). *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*.
- Chakraborty, T. (1999). *Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms*.
- Ding, J., Wang, Z., & Chen, J. (2018). *Advances in nanomaterials for water remediation*. *Nanomaterials*, 8(11), 889.
- Duque, C. A., Kasapoglu, E. S. İ. N., Şakiroglu, S., Sari, H. Ü. S. E. Y. İ. N., & Sökmen, I. (2011). *Intense laser effects on nonlinear optical absorption and optical rectification in single quantum wells under applied electric and magnetic field*. *Applied Surface Science*, 257(6), 2313-2319.
- Ehrenberg, W., & Siday, R. E. (1949). *The Refractive Index in Electron Optics and the Principles of Dynamics*. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 62(1), 8-21.
- Fan, J., & Qian, L. (2022). *Quantum dot patterning by direct photolithography*. *Nature Nanotechnology*, 17(9), 906-907.

Feynman, R. P. (1959). *There's plenty of room at the bottom. Engineering and Science*, 23(5), 22–36.

Freestone, I., Meeks, N., Sax, M., & Higgitt, C. (2007). *The Lycurgus Cup - A Roman Nanotechnology. Gold Bulletin*, 40(4), 270-277.

Gutierrez Niño, W. (2010). *Estados ligados de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras* (Tesis doctoral). Universidad Industrial de Santander, Escuela de física.

Hang, Z. Y., & Thompson, C. V. (2014). *Grain growth and complex stress evolution during Volmer–Weber growth of polycrystalline thin films. Acta Materialia*, 67, 189-198.

Investigación y Ciencia. (2001, noviembre). No. 302.

Kasap, S. O. (2006). *Electronic materials and Devices*. McGraw-Hill New York.

Kente, T., & Mhlanga, S. D. (2016). *Gallium nitride nanostructures: Synthesis, characterization and applications. Journal of Crystal Growth*, 444, 55-72.

Kittel, C., & McEuen, P. (2018). *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons.

Levinshtein, M. S. Y. P. M. (Ed.). (1997). *Handbook series on semiconductor parameters* (Vol. 1). World Scientific.

Lorke, A., Luyken, R. J., Govorov, A. O., Kotthaus, J. P., Garcia, J. M., & Petroff, P. M. (2000). *Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings. Physical Review Letters*, 84(10), 2223-2226.

Lu, W., & Lieber, C. M. (2007). *Nanoelectronics from the bottom up. Nature materials*, 6(11), 841-850.

M. José-Yacamán, L. Rendón, J. Arenas, M.C.S. Puche. (1996). *Maya blue paint: An ancient nanostructured material. Science*, 273(5272), 223-225.

M. Reibold, P. Paufler, A.A. Levin, W. Kochmann, N. Patzke, D.C. Meyer. (2006). *Materials: Carbon nanotubes in an ancient Damascus sabre. Nature*, 444(7117), 286-286.

Markov, I., & Milchev, A. (1985). *Theory of epitaxy in a Frank-van der Merwe model with anharmonic interactions. Thin Solid Films*, 126(1-2), 83-93.

National Nanotechnology Initiative. (2011). *¿Qué es la nanotecnología?* Recuperado de <https://www.nano.gov/nanotech-101/what/definition>

Padeletti, G., & Fermo, P. (2003). *How the masters in Umbria, Italy, generated and used nanoparticles in art fabrication during the Renaissance period. Applied Physics A*, 76(4), 515-525.

Peiyan, M.A., Zhengyi, F.U., Yanli, S.U., & Jingjing, M.A. (2006). *The nano pulverization of traditional Chinese medicine Liuwei Dihuang. Journal of Wuhan University of Technology, Materials Science Edition*, 21(2), 105-108.

Petersen, N. O. (2017). *Foundations for nanoscience and nanotechnology*. Boca Raton, FL: CRC Press, Taylor & Francis Group.

Purohit, R. K., Sharma, B. L. (2015). *Semiconductor Heterojunctions*. Reino Unido: Elsevier Science.

Shah, J. (1999). *Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures*. Springer.

Somaschini, C., Bietti, S., Koguchi, N., & Sanguinetti, S. (2011). *Coupled quantum dot-ring structures by droplet epitaxy. Nanotechnology*, 22(18), 185602. doi:10.1088/0957-4484/22/18/185602.

Tonomura, A., Osakabe, N., Matsuda, T., Kawasaki, T., Endo, J., Yano, S., & Yamada, H. (1986). *Evidence for Aharonov-Bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave. Physical Review Letters*, 56(8), 792-795.

