

EFFECTO AHARONOV-BOHM EN ANILLOS CASI-CIRCULARES

DAVID VELASCO VILLAMIZAR

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2009

EFFECTO AHARONOV-BOHM EN ANILLOS CASI-CIRCULARES

TRABAJO DE GRADO
Para optar al título de físico

DAVID VELASCO VILLAMIZAR
2042914

DIRECTOR:
Ph.D ILIA DAVIDOVICH. MIKHAILOV



UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2009

Resumen

TITULO: Efecto Aharonov-Bohm en anillos cuánticos cuasi-circulares*

AUTOR: David Velasco Villamizar**

Palabras Claves: Anillo Cuántico, Efecto Aharonov-Bohm, Función de Onda.

Descripción

Entre varios tipos de puntos cuánticos, los anillos cuánticos auto ensamblados son sujeto de extensos estudios debido a sus posibles aplicaciones en dispositivos ópticos. Los anillos circulares uniformes de anchura estrecha con uno o dos electrones, en un campo magnético, muestran una amplia variedad de fenómenos físicos interesantes: Por ejemplo, ellos pueden llevar un corriente de equilibrio (la llamada corriente persistente) la cual es periódica en periodo del flujo de Aharonov-Bohm hc/e , flujo cuántico. Sin embargo, los anillos cuánticos experimentalmente fabricados no son perfectamente circulares, ni absolutamente uniformes. Por lo tanto, recientemente los estados de un electrón de anillos cuánticos de anchura estrecha con línea central de forma arbitraria y anchura no uniforme en un campo magnético de externo, han sido analizados por una separación variational de variables en coordenadas curvilíneas. Los resultados numéricos muestran que la variación lisa y diminuta en la anchura puede afectar fuertemente las oscilaciones Aharonov-Bohm.

En este trabajo proponemos un modelo de anillo no uniforme diferente, en el cual el potencial de confinamiento es igual al cero dentro de la región entre las fronteras interiores y exteriores de la estructura, que dan en las coordenadas polares dos funciones arbitrarias y , y al infinidad fuera de ello. Presentamos un método simple, general que basa en la técnica derivada funcional para calcular las energías y las funciones de onda del electrón encajonado en tal estructura en coordenadas polares. Nuestros resultados se comparan favorablemente con aquellos obtenidos en un tratamiento en coordenadas curvilíneas. Nuestro método debería ser aplicable a una variedad de problemas más complicados (por ejemplo, las pocas partículas encajonadas en un anillo, el modelo de barrera finita, etc.) para que los acercamientos más rigurosos requieren cálculos numéricos extensos.

* Proyecto de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Francisco García
Codirector: Jader Guerrero

Abstract

TITLE: Aharonov-Bohm effect oscillations in quasi-circular quantum rings

AUTHOR: David Velasco Villamizar

Key Words: Quantum Ring, Aharonov-Bohm Effect, Wave Function.

Description

Among various types of quantum dots, the self-assembled quantum rings are the subject of an extensive study because of their possible applications in optical devices. The one- and two-electron narrow-width uniform circular quantum rings in a threading magnetic field is shown to exhibit a wide variety of interesting physical phenomena: For example, they can carry an equilibrium current (the so-called persistent current) which is periodic in the Aharonov-Bohm flux Φ with a period hc/e , the flux quantum. Nevertheless, experimentally fabricated quantum rings are neither perfectly circular nor perfectly uniform. Therefore, recently the one-electron states of narrow-width quantum rings with centrelines of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field has been analyzed by a variational separation of variables in curvilinear coordinates. Numerical results show that smooth and tiny variation in the width brings strongly affects the Aharonov-Bohm oscillations.

In this work we propose a different non-uniform ring model, in which the confinement potential is equal to zero inside of the region between the interior and exterior boundaries of the structure, which are given in the polar coordinates by two arbitrary functions $\rho = R_{int}(\vartheta)$ and $\rho = R_{ext}(\vartheta)$, and to infinity outside it. We present a simple, general method based on the functional derivative technique for calculating the energies and wave functions of the electron confined in such structure in polar coordinates. Our results compare favourably with those obtained in a treatment in curvilinear coordinates. Our method should be applicable to a variety of more complicated problems (for example, the few particles confined in a ring, the finite-barrier model, etc.) for which more rigorous approaches require extensive numerical calculations.

* Proyecto de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Francisco García
Codirector: Jader Guerrero

TABLA DE CONTENIDO

1. Introducción	1
2. Marco Teórico	5
2.1. Análisis radial del anillo en campo magnético	8
2.2. Análisis angular del anillo en campo magnético mediante el principio variacional de Schrödinger	9
2.3. Método de Fourier para solucionar la ecuación diferencial angular del anillo cuántico	11
3. Modelos de Trabajo	13
4. Resultados y discusiones	15
5. Conclusiones	32
6. Bibliografía	34

LISTA DE FIGURAS

MODELOS DE TRABAJO

Figura 1 13

Figura 2 14

RESULTADOS PRIMER MODELO

Figura 3 16

Figura 4 19

Figura 5 22

Figura 6 24

RESULTADOS SEGUNDO MODELO

Figura 7 26

Figura 8 28

Figura 9 30

1. Introducción

Durante las últimas décadas del siglo XX nació una nueva rama con una gran trascendencia tecnológica e industrial llamada la Nanofísica; la cual se dedica a estudiar las propiedades cuánticas que emergen en un régimen intermedio entre la física atómica y la física macroscópica. Particularmente, este régimen se realiza en los materiales heterogéneos cuyas características físicas se varían bruscamente en las juntas separadas una a otra a escala nanométrica.

Debido a que las dimensiones de regiones homogéneas en estas estructuras, estas son de tamaños comparables o menores que la longitud de onda de De Broglie de los portadores de carga; así el comportamiento de ellos en estos materiales es explicado a través de la mecánica cuántica. Los cambios en los parámetros de los materiales en las juntas de las heteroestructuras semiconductoras conducen al confinamiento cuántico de los portadores de carga y restricciones parciales o completas para el movimiento en diferentes direcciones, dependiendo de la geometría de la heteroestructura. Por esta razón, estas estructuras se pueden clasificar según sus simetrías como superredes, pozos, hilos o puntos cuánticos.

Las superredes consisten en un arreglo secuencial alternado de capas de dos o más tipos diferentes de semiconductores, con espesores en la escala de los nanómetros dentro del rango de longitud característica de ondas de Broglie de los portadores de

carga, ocasionando así que los niveles energéticos se desdoblén y dan lugar a la aparición de minibandas. Entonces, se dice que un nivel energético no pertenece a un solo elemento de la estructura sino a todo el conjunto. En este sentido, la superred se comporta como un sólido artificial, pero con una periodicidad mucho mayor que la de cualquier sólido en bloque. Estas heteroestructuras exhiben comportamientos nuevos e interesantes en sus propiedades eléctricas, magnéticas y de transporte. También tienen aplicaciones como sensores de campo magnético y en la fabricación de láseres.

Los Pozos Cuánticos son estructuras que confinan el movimiento de las partículas en una sola dirección, forzándolas a ocupar una región restringida cuyo tamaño es del orden de la longitud de onda y generando así los estados estacionarios con los niveles energéticos discretos. Actualmente, estas estructuras se utilizan para la fabricación de diodos láseres, transistores de movilidad de altos electrones y en fotodetectores infrarrojos.

Los Hilos Cuánticos, son aquellas estructuras, en donde su dimensión del grosor es muy pequeña comparado con su dimensión de longitud. Espectros energéticos de este tipo de estructuras son típicos para sistemas casi-unidimensionales que conlleva a diferentes efectos cuánticos, particularmente la resistencia que varía con el aumento de voltaje en una forma discreta.

En los Puntos Cuánticos, son aquellas estructuras los portadores de carga y los complejos móviles que ellos pueden formar (excitones, triones, biexcitones, etc.) están confinados en todas las tres direcciones. Los puntos pueden tener diferentes aspectos, similares a una pastilla plana, una pirámide, un lente, una montaña o un volcán. Son aplicados en diodos emisores de luz o LED. Sus espectros de emisión son casi monocromáticos con la longitud de onda inversamente proporcional al cuadrado de las dimensiones del punto y con la distribución gaussiana.

En la fabricación actual de heteroestructuras, ya existe la posibilidad de depositar elementos químicos con extrema precisión tales como el arseniuro de galio (GaAs) o arseniuro de aluminio (AlAs) para la construcción de bandas prohibidas mediante técnicas especiales llamadas, Crecimiento Epitaxial. Este procedimiento consta de técnicas en las cuales se produce el sustrato de un semiconductor a otro; son técnicas tales como la MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) o la MOCVD (*Metalorganic Chemical Vapor Deposition*). Tales técnicas permitirían depositar los materiales con tal precisión para aprovechar la posibilidad de desarrollar sistemas en los cuales los portadores de carga se encuentren confinados. El *auto ensamblaje* ofrece una alternativa para los materiales de nanoestructuras semiconductoras. En particular, el modo de crecimiento Stranski-Krastanow puede usarse en la producción de puntos cuánticos de InAs en GaAs, en donde los puntos tienen la forma típica de lentes [1]. Sin embargo esta no es la única posibilidad. Ha sido demostrado que el pausar el crecimiento después de depositar puntos cuánticos de InAs en unos pocos nanómetros de GaAs, se induce a una transformación en la forma de la forma de lente a una forma de anillo [2].

Los Anillos Cuánticos, son llamadas aquellas estructuras que poseen simetría axial y presentan una cavidad semiconductoras en la región comprendida entre su radio interno y externo [3]. El movimiento de los portadores de carga se restringe generalmente en esta región. Gracias a la simetría axial del sistema, este movimiento puede ser descrito mediante el uso de las coordenadas cilíndricas, expresando la naturaleza de los movimientos por separado: radial, axial y acimutal. A diferencia de las otras estructuras, los anillos cuánticos semiconductoras tienen otro tipo de topología, esto conduce a un enriquecimiento de propiedades y fenómenos físicos que pueden ser observadas claramente [4]. Afortunadamente,

muchas propiedades pueden ser explicadas con la teoría de un solo electrón. Particularmente, debido al confinamiento periódico en la coordenada acimutal, el comportamiento de los portadores de carga en esta estructura debe tener un carácter diferente en presencia de un campo magnético externo. Principalmente conocido como el Efecto Oscilatorio de *Aharonov-Bohm*. Este es un fenómeno mecánico-cuántico descubierto por *Yakir Aharonov* y *David Joseph Bohm* en el año de 1959 [5]. Este fenómeno se observa generalmente cuando una partícula cargada confinada en un sistema de baja dimensionalidad está afectada por un campo electromagnético externo. Es más fácil de observar experimentalmente el efecto *AB* para el caso cuando la partícula confinada se encuentra solo en presencia de campo magnético. Sufrido por diferentes nanoestructuras, especialmente anillos con sección transversal uniforme. Afortunadamente muchas propiedades de esta clase de anillos pueden ser explicados mediante un solo electrón confinado en un anillo uniforme [6-9]. Esta solución puede utilizarse como punto de partida en la aproximación adiabática para analizar también anillos delgados imperfectos y con una sección transversal no-uniforme, siempre y cuando su morfología presente pequeñas alteraciones, así como fue hecho en las referencias [10-12].

2. Marco Teórico

Para analizar el efecto AB en un anillo uniforme, es conveniente usar las coordenadas polares. En un anillo uniforme, sus radios interno $R_i(\varphi)$ y externo $R_e(\varphi)$ son constantes para diferentes ángulos, al igual como el ancho $w(\varphi)$ de su sección transversal, definida como la diferencia entre el radio externo e interno para determinado ángulo. Para analizar el movimiento del electrón confinado en este anillo en el marco de la aproximación adiabática, se plantea que la sección transversal tiene que ser muy pequeña $w(\varphi) \ll R_i(\varphi)$. Por lo tanto, podemos decir que el electrón estará circulando con un radio R constante (radio de línea central) y definimos al anillo delgado, como aquel anillo que su mínimo de sección transversal sea mucho menor que su longitud mínima de radio interno [13].

Para explicar el efecto AB consideremos un modelo más sencillo con un potencial de confinamiento de barrera infinita, cero dentro la región comprendida por el radio interno y externo e infinito por fuera. Este potencial solo depende de la coordenada acimutal, entonces la función de onda del electrón, con la masa efectiva m^* , en presencia del campo magnético, es dependiente del número cuántico magnético m . Dada como la solución más simple gracias la simetría existente. $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$. Mientras que la energía cinética correspondiente a este movimiento rotacional es m^2/R^2 . De aquí y en adelante utilizamos las unidades adimensionales en las cuales las distancias se miden en unidades de radio de Bohr efectivo (a_0^* , valor típico alrededor de 10nm) y las energías de Rydberg efectivo (Ry^* , valor típico alrededor 5-10 meV). El campo magnético externo y homogéneo, \vec{B} orientado a lo largo del eje de simetría está

definido a través su potencial vectorial $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$, descrito en unidades adimensionales a través del parámetro $\gamma = \hbar\omega_c/Ry^*$, donde $\omega_c = eB/m^*$ es la frecuencia ciclotrónica. El aporte del campo magnético en la energía total del electrón $E(\gamma)$ dentro del anillo de radio R tiene dos términos, uno es paramagnético, γm , que ocasiona una disminución de la energía del electrón para los números cuánticos negativos ($m = 1, 2, 3, \dots$) y el otro, diamagnético, proporcional a $\gamma^2 R^2/4$ produce el aumento de la energía del electrón.

$$E(\gamma) = \frac{m^2}{R^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} - \gamma m \quad (1)$$

La competencia entre estos dos términos conduce a una oscilación de la energía del estado base. El resultado de esta oscilación se manifiesta en la existencia de los “números mágicos” para dos efectos más importantes: la energía del estado base se anula para valores equidistantes de intensidad de campo magnético definidos con los números mágicos” pares $\gamma_{2m} = 2|m|/R^2$, la brecha entre el estado base y el primer excitado se anula para valores equidistantes de intensidad de campo magnético definidos con los números mágicos” impares $\gamma_{2m+1} = 2|m+1|/R^2$. En este último caso debe observarse un efecto de transparencia del anillo ante el flujo magnético, debido a que el electrón no requiere la adición de energía para realizar la transición del estado base al estado excitado más cercano. Esta es la manera más clara de explicar el efector Aharonov-Bohm para un anillo cuántico de forma circular, con sección transversal uniforme y un electrón en su región de confinamiento.

Desafortunadamente hay que tener en cuenta que la forma real de los anillos cuánticos fabricados, son muy diferentes de este modelo simplificado, sus geometrías en la mayoría de los casos no son circulares y sus anchos varían en una forma arbitraria. Como sus formas no son tan perfectas, en el análisis teórico sería importante considerar el modelo más apropiado que incluiría la posibilidad de analizar la influencia de los defectos sobre las propiedades de los anillos cuánticos. Hace poco un análisis de este tipo en el marco de la aproximación adiabática fue realizado en los artículos [10-12]. Para analizar el efecto de la forma del anillo en estos trabajos se utilizaron sistemas coordenadas curvilíneas ortogonales, (s, q) relacionadas con la línea media existente entre la frontera externa e interna de la sección transversal del anillo, llamada *Línea Central*. El movimiento del electrón en estas coordenadas se describe a través del vector posición, que define los movimientos longitudinal s y transversal q respecto a la línea central [14,15]. Los coeficientes métricos necesarios para poder escribir un Laplaciano en coordenadas generalizadas se expresan en los términos de la curvatura de la línea central.

Igualmente al definir el grosor de la sección transversal, se analiza también el movimiento del electrón cuando el ancho de esta sección para determinado ángulo es mucho menor que la longitud mínima del radio interno. Esta es la condición de aplicabilidad de la Aproximación Adiabática. Esta permite considerar el movimiento del electrón bidimensional como si este estuviera compuesto por dos movimientos unidimensionales de dos partículas independientes, uno es el movimiento rápido a lo largo de la coordenada transversal (vibración) y el otro es un movimiento lento a lo largo de la coordenada longitudinal (rotación).

2.1. Análisis radial del anillo en campo magnético

Para poder realizar un adecuado análisis del comportamiento cuántico sufrido por un electrón confinado en un anillo no-homogéneo, con potencial de confinamiento tipo barrera infinita. Partimos de la idea de radios dependientes del ángulo y consecuentemente la sección transversal como el potencial de confinamiento también.

$$V(r, \varphi) = \begin{cases} 0, & R_i(\varphi) < r < R_e(\varphi) \\ \infty, & r < R_i(\varphi) \wedge r > R_e(\varphi) \end{cases} \quad (2)$$

El hamiltoniano con campo magnético y la transformación de gauge.

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r, \varphi); \quad \vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \quad (3)$$

Trabajando en el marco de la aproximación adiabática, entonces procedemos a asociar los términos del hamiltoniano de acuerdo a su naturaleza: rotacional y vibracional. Sí comenzamos a realizar sustituciones, $x = \gamma r^2$, obtenemos una ecuación diferencial conocida, Ecuación de Kummer, asociada al movimiento radial del electrón.

$$xu''(x) + (b-x)u'(x) - au(x) = 0; \quad a = \frac{1}{2} \left(m+1 - \frac{k^2}{\gamma} \right); \quad b = m+1 \quad (4)$$

La función de onda radial, solución de esta ecuación, está dada por la combinación lineal entre las funciones hipergeométricas confluentes.

$$u(x) = C_1 M(a, b; x) + C_2 U(a, b; x) \quad (5)$$

Según las condiciones de contorno, la función de onda debe anularse en las fronteras del anillo.

$$\begin{aligned} x_i &= \gamma R_i^2(\varphi) \\ x_e &= \gamma R_e^2(\varphi) \end{aligned} \quad (6)$$

Hallamos la ecuación trascendente después de expresar las anteriores condiciones sobre la ecuación (5). Expresando los

resultados de forma matricial para un mejor análisis y comprensión, hallamos el determinante igual a cero. Obtenemos la función de onda normalizada del movimiento vibracional.

$$M(a, b; x_i)U(a, b; x_e) - M(a, b; x_e)U(a, b; x_i) = 0 \quad (7)$$

$$u(x) = C \left[\frac{M(a, b; x_i)}{U(a, b; x_i)} U(a, b; x) - M(a, b; x) \right]; \quad C = \left[\int_{x_i}^{x_e} u^2(x, \varphi) \cdot x \cdot dx \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (8)$$

Sí deseamos analizar el caso cuando el anillo no se encuentra en presencia del campo magnético, obtenemos que la función de onda radial es expresada como una combinación lineal de las funciones de Bessel de primer y segundo tipo.

$$f(r, \varphi) = C_1 J_m(kr) + C_2 Y_m(kr) \quad (9)$$

2.2. Análisis angular del anillo en campo magnético mediante el principio variacional de Schrödinger

Partimos del hamiltoniano del anillo expuesto anteriormente y teniendo en cuenta que la aproximación adiabática nos facilita el cálculo, podemos expresar el movimiento del electrón confinado como dos partículas independientes de naturalezas diferentes. Esto ayuda en la descomposición el hamiltoniano en dos coordenadas; radial y angular para facilitar el análisis cuántico de la partícula confinada.

$$H_R = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\gamma^2 r^2}{4} + V(r, \varphi) \quad (10)$$

$$H_\varphi = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (11)$$

Nuevamente la función de onda puede ser expresada como

$$\Psi(r, \varphi) = f(r, \varphi) \phi(\varphi) \quad (12)$$

Entonces procedemos a realizar la minimización mediante el formalismo de Dirac.

$$\langle f\phi | H_R + H_\varphi - E | f\phi \rangle = \underbrace{\langle f\phi | H_R - E | f\phi \rangle}_I + \underbrace{\langle f\phi | H_\varphi | f\phi \rangle}_{II} \quad (13)$$

Para el primer término de esta minimización es preciso expresar un potencial efectivo correspondiente a la suma del potencial de confinamiento y al término diamagnético correspondiente con la energía del campo magnético aplicado.

Para el segundo término de la minimización es necesario decir que la función de onda radial presenta pequeñas variaciones respecto al ángulo. Esto indica que la primera y segunda derivada de esta función respecto al ángulo, pueden ser despreciadas en el presente cálculo como consecuencia de analizar un anillo delgado en el marco de la aproximación adiabática.

Construyendo el Lagrangiano correspondiente a la minimización de los Hamiltonianos y aplicando la ecuación de Euler-Lagrange, obtenemos la ecuación diferencial que describe el movimiento angular del electrón, respecto a campo magnético aplicado.

$$-\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(B \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} \right) + i\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} + [E_0(\varphi) - E] \phi = 0 \quad (14)$$

El término $E_0(\varphi)$ y E , son correspondientes a la energía radial y total del electrón confinado.

Dado que la ecuación diferencial (14) es compleja, planteamos una función solución compuesta por una función amplitud y otra función encargada de la fase.

$$\phi(\varphi) = u(\varphi) e^{i\alpha(\varphi)} \quad (15)$$

Reemplazamos la función planteada en la ecuación (14). Después de haber anulado los términos imaginarios

correspondientes que aparecen en la expansión, obtenemos la fase de la función de onda angular para el electrón.

$$\alpha(\varphi) = \frac{\gamma}{2} \int_0^\varphi \frac{d\varphi}{B(\varphi)} ; \quad B(\varphi) = \int_{R_i(\varphi)}^{R_e(\varphi)} \frac{f^2(r, \varphi)}{r} dr \quad (16)$$

La función $B(\varphi)$ tiene el significado físico de describir la forma del anillo. Finalmente la función de onda angular adquiere la forma

$$\phi(\varphi) = u(\varphi) e^{i \frac{\gamma}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{B(\varphi)}} \quad (17)$$

2.3. Método de Fourier para solucionar la ecuación diferencial angular del anillo cuántico

La ecuación diferencial (14) que describe un movimiento rotacional en un anillo con el potencial no-homogéneo $V(r, \varphi)$ en presencia de un campo magnético con la intensidad γ , cumple las condiciones de continuidad, las cuales indican que la función y su derivada después de realizar un ciclo deben coserse.

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi); \quad \Phi'(\varphi + 2\pi) = \Phi'(\varphi) \quad (18)$$

Como todas las funciones que entran en esta ecuación son periódicas, estas pueden representarse a través de sus series de Fourier:

$$B(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n e^{in\varphi}; \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi \quad (19a)$$

$$B'(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} in b_n e^{in\varphi}; \quad \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B'(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi = in b_n \quad (19b)$$

$$V_{ef}(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_n e^{in\varphi}; \quad v_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} V_{ef}(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi \quad (19c)$$

$$\Phi(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\varphi}; \quad c_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \Phi(\varphi) e^{-in\varphi} d\varphi \quad (19d)$$

Al sustituir (19d) en (14) se obviemos el resultado de la expansión de los términos de la ecuación diferencial y si aplicamos una pequeña identidad

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m-n)\varphi} d\varphi = \delta_{m,n} \quad (20)$$

Se obtiene

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[E\delta_{n,m} - (m \cdot n \cdot b_{m-n} + v_{m-n} - n\gamma\delta_{n,m}) \right] c_n = 0 \quad (21)$$

Este último sistema de ecuaciones puede reescribirse en la forma matricial

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[E\delta_{m,n} - A_{m,n} \right] c_n = 0; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (22)$$

$$A_{m,n} = m \cdot n \cdot b_{m-n} + v_{m-n} - \gamma \cdot n \delta_{m,n}$$

Los coeficientes de Fourier deben satisfacer algunas condiciones adicionales. En el caso general, las funciones $B(\varphi)$ y $V_{ef}(\varphi)$ son funciones reales y los coeficientes de Fourier cumplen las condiciones:

$$v_{-n} = v_n^*, \quad b_{-n} = b_n^* \quad (23a)$$

En el caso cuando las funciones $B(\varphi)$ y $V_{ef}(\varphi)$ son pares las condiciones son:

$$B(-\varphi) = B(\varphi) \Rightarrow b_{-n} = b_n \quad V_{ef}(-\varphi) = V_{ef}(\varphi) \Rightarrow v_{-n} = v_n \quad (23b)$$

En el caso cuando las funciones $B(\varphi)$ y $V_{ef}(\varphi)$ son impares las condiciones son:

$$B(-\varphi) = -B(\varphi) \Rightarrow b_{-n} = -b_n \quad V_{ef}(-\varphi) = -V_{ef}(\varphi) \Rightarrow v_{-n} = -v_n \quad (23c)$$

En adelante vamos a considerar solamente el caso de las funciones pares correspondiente a las relaciones dado (23b), debido a que los anillos trabajados presentan paridad respecto a la coordenada acimutal.

3. Modelos de Trabajo

Hay que anotar, que el método aplicado en estos trabajos es bastante complicado y tiene varias restricciones. En este proyecto de grado se propuso desarrollar un método mucho más simple para el cálculo teórico del espectro energético de un electrón confinado en un sistema de baja dimensionalidad, específicamente un anillo cuántico de forma arbitraria con el área de su sección transversal variable en presencia de un campo magnético externo. El método se utilizado, expresa el movimiento por medio de las coordenadas polares. Este método general en la tesis se aplico para analizar dos morfologías diferentes. El primer modelo consta de un anillo cuyas fronteras poseen geometría circular, pero su frontera interna se encuentra desconcéntrica respecto a la externa dado por un parámetro de corrimiento característico (ver Fig.1).

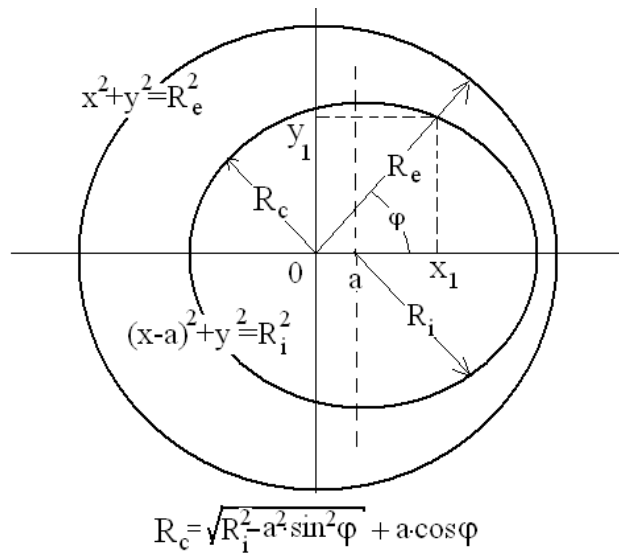


Fig. 1 Modelo I

$$(x-a)^2 + y^2 = R_i^2; \quad R_e = \text{const} \quad (24a)$$

El segundo modelo consta de dos elipses confocales, en donde sus parámetros de semiejes son variados positiva y negativamente

por ciertos valores, pero con la condición de mayor variación para el parámetro del semieje menor y la menor variación para el parámetro del semieje mayor (ver Fig. 2)

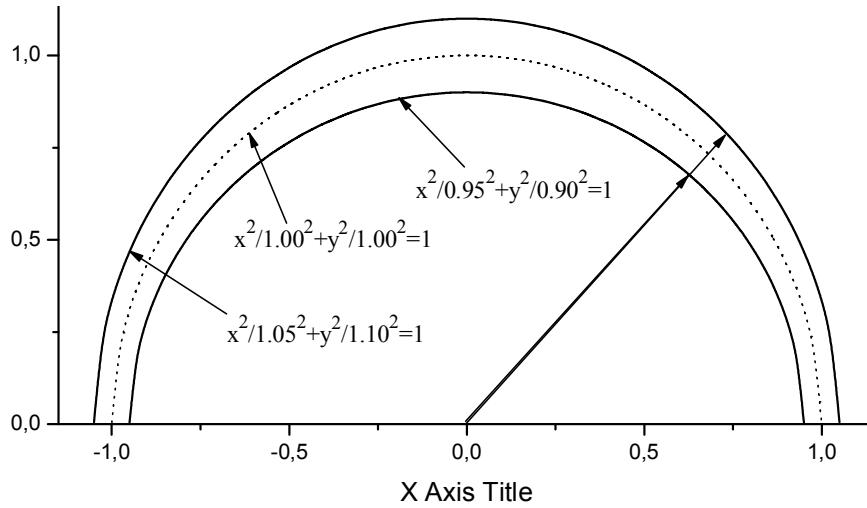


Fig.2 Modelo II

$$\frac{x^2}{(R \pm a)^2} + \frac{y^2}{(R \pm b)^2} = 1; \quad (24b)$$

Estos dos modelos ayudaron a explicar y demostrar que los anillos cuánticos con sección transversal variable conducen a la extinción del efecto Aharonov-Bohm u oscilación del estado base a medida que los defectos se hacen más notables.

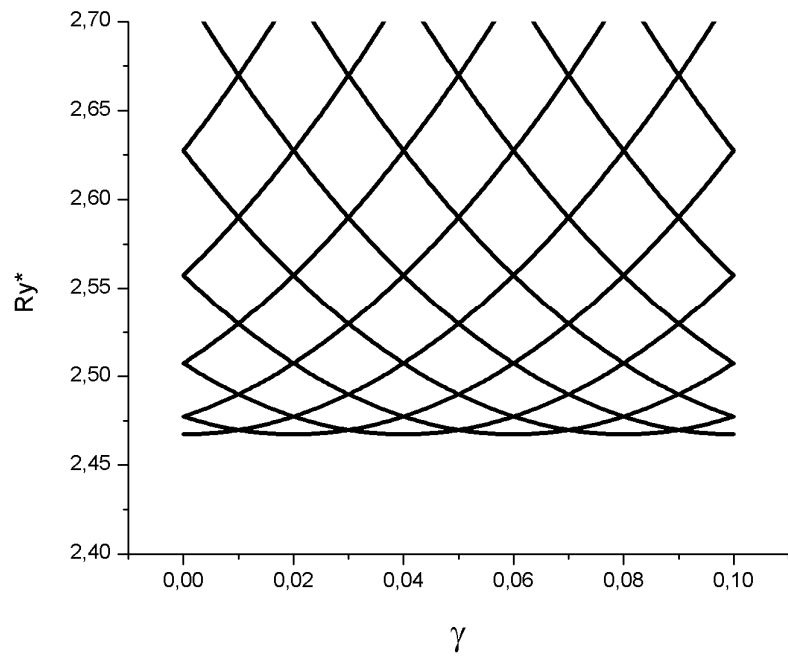
4. Resultados y discusiones

Analizaremos los anillos cuánticos correspondientes al primer modelo planteado y explicaremos que sucede cuando esta clase de anillos presentan pequeños desplazamientos de su radio interno y consecuentemente pérdida de la simetría axial.

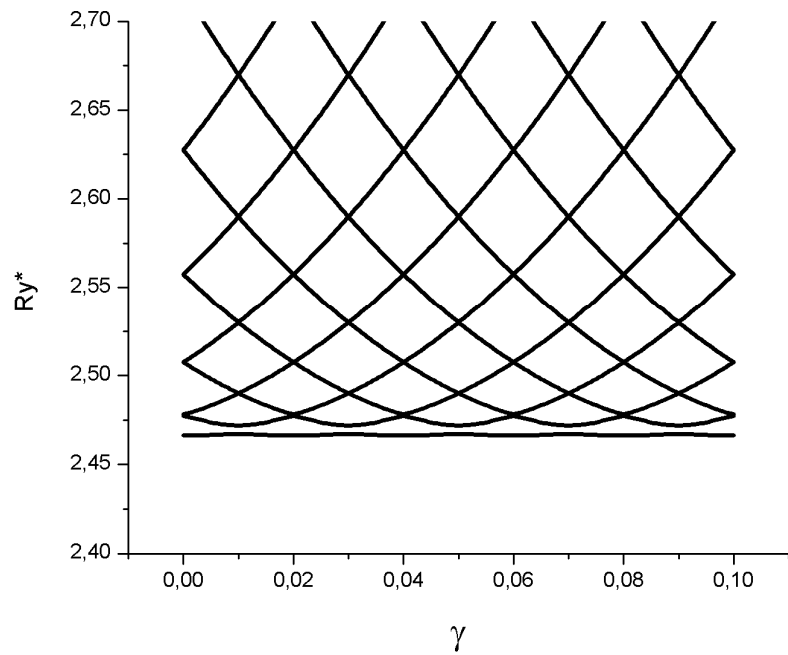
Partimos de un anillo con radio interno de 90nm y externo de 110nm, esto significa que la sección transversal es igual a 20nm de grosor. Al realizar desplazamientos del radio interno menores iguales al 0.5% del valor de sección transversal (ver Fig. 3), observamos cómo se extingue gradualmente el efecto *AB* para los primeros niveles energéticos a medida que aumentamos el desplazamiento y disminuimos la sección transversal. Esto se debe a la pérdida de simetría del anillo y a la variación de la distribución de probabilidad de encontrar el electrón alrededor de la estructura. En otras palabras, como el desplazamiento del radio interno conlleva a tener diferentes valores de sección transversal, entonces es mucho más favorable encontrar el electrón o la partícula confinada donde exista la región con el máximo ancho posible. Por lo tanto, en este caso el campo magnético producirá una alteración de aquel electrón que se encuentra realizando movimientos vibracionales en la región de mayor probabilidad, obligándolo a realizar movimiento de rotación a lo largo de toda la región de confinamiento del anillo.

Fig. 3. Anillo cuántico de radio interno de 90nm, externo de110nm, línea central 100nm. Desplazamientos de **a)**0.0nm, **b)**0.02nm, **c)**0.04nm y **d)**0.1nm.

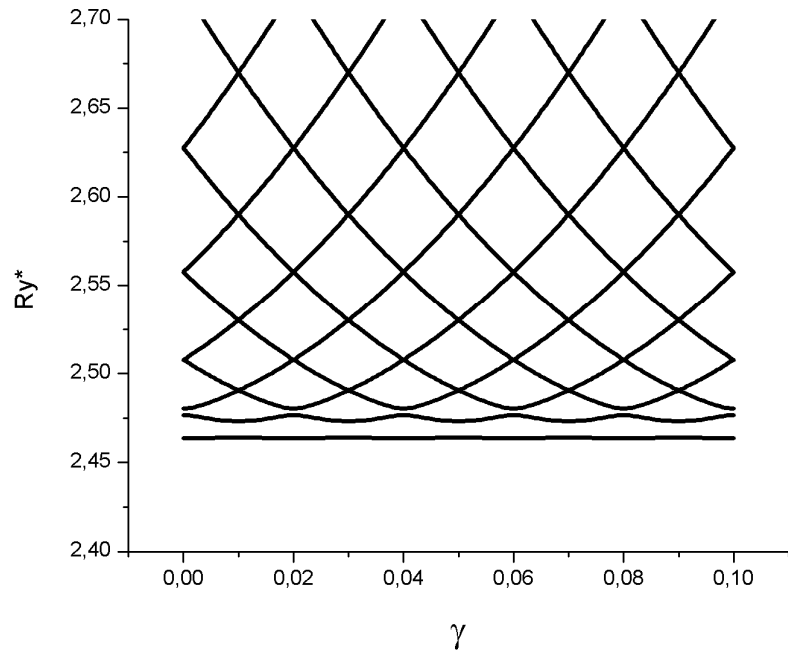
a)



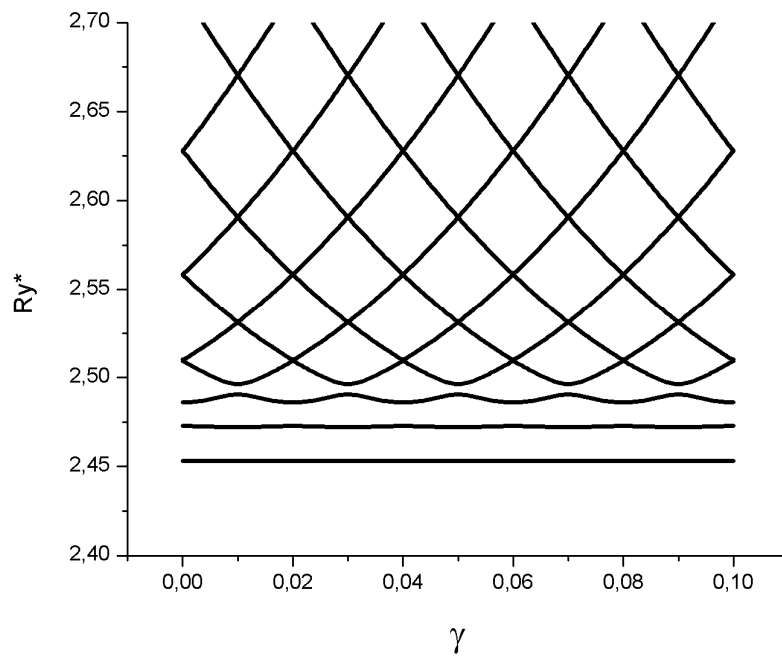
b)



c)



d)



Fácilmente podemos observar la oscilación de la energía, en la gráfica a). La periodicidad de la oscilación y conocer con precisión los mínimos energéticos de acuerdo con la teoría expuesta anteriormente. El electrón confinado, puede realizar cambios de nivel energético sin la necesidad de incrementar su energía, solo con el aumento del flujo magnético es suficiente para que el estado base sea una mezcla de todos los estados energéticos correspondientes a los diferentes valores del número cuántico angular. Adicionalmente podemos observar las diferentes intersecciones de las curvas con su vecina próxima en el estado base, estos cruces de curvas están relacionados con la aparición de corrientes persistentes o corrientes de baja temperatura, similares a la de los superconductores, también a la transparencia aparente del anillo ante el flujo magnético en valores exactos.

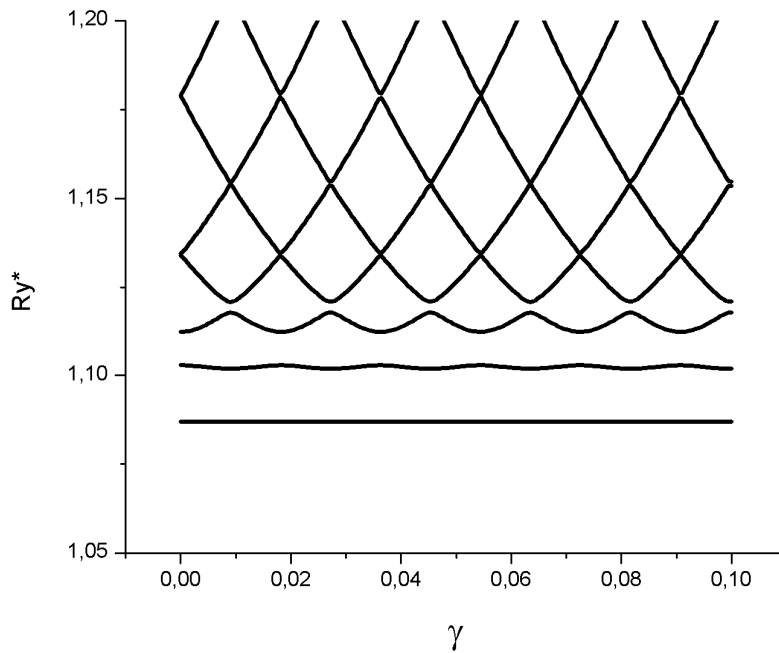
Para las gráficas b),c) y d) observamos la aparición de estados localizados para el primer, segundo y tercer nivel energético, respectivamente. Además de oscilaciones de la energía para el siguiente estado energético correspondiente, oscilaciones de Aharonov-Bohm. Esta oscilación no puede ser explicada igualmente por la teoría utilizada para el estado base, debido a que corresponde a otro nivel energético. Presenta otro periodo de oscilación no correspondiente con el respectivo estado base para el anillo con sección transversal constante.

Consideremos el caso de dos anillos con diferentes radios de línea central, misma sección transversal y mismo desplazamiento (ver Fig. 4). Observamos un cambio en la posición de los mínimos de las curvas y las distancias relativas entre ellas al comparar entre los dos anillos. Esto nos quiere mostrar lo siguiente: entre más cerca al centro se encuentre la línea central del anillo, mayor distancia van a tener los mínimos energéticos y las curvas unas con otras, mientras que entre más grande el resultado es el opuesto.

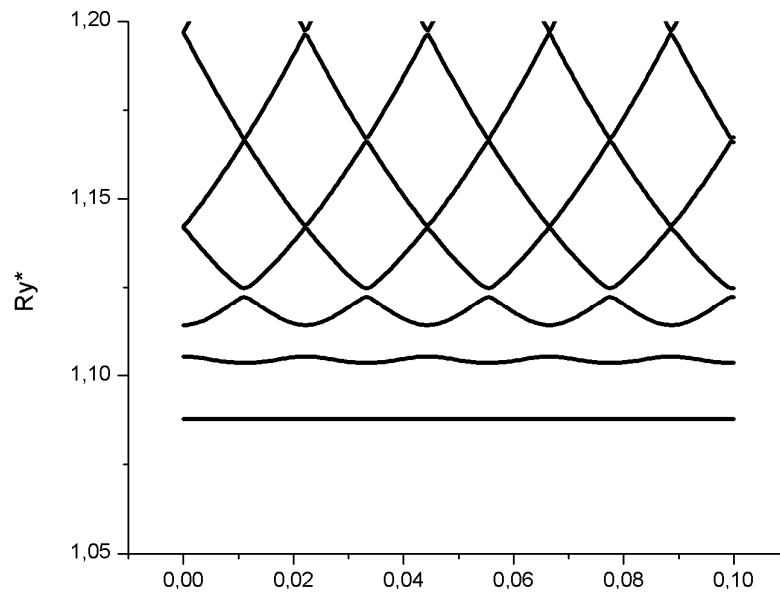
Según el análisis teórico, nos muestra que el periodo es inversamente proporcional al cuadrado del radio de la línea central. Por esta razón para los anillos más grande, el número de curvas observadas en la gráfica, con las mismas variaciones de campo magnético, son mayores que el anillo más pequeño.

Fig. 4. Anillos cuánticos de sección transversal 30nm. El primer anillo presenta radio interno igual a 90nm, externo 120nm, línea central 105nm, con desplazamiento de **a)**0.25nm y **c)**0.50nm. El segundo anillo presenta radio interno igual a 80nm, externo 110nm, línea central 95nm, con desplazamientos de **b)**0.25nm y **d)**0.50nm.

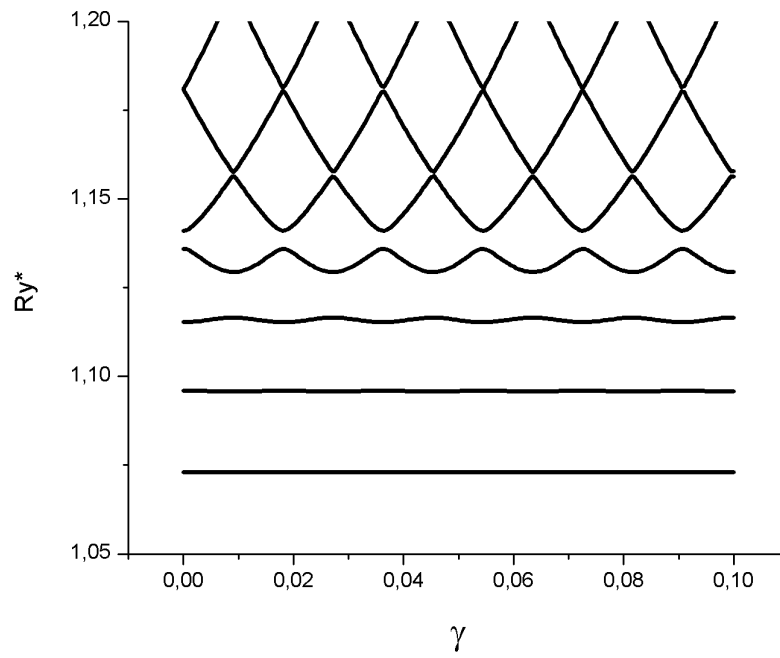
a)



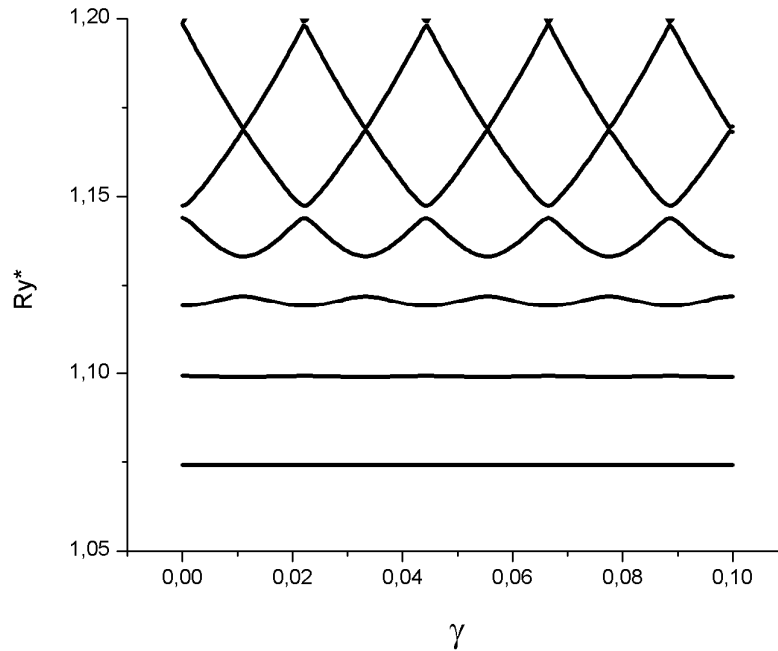
b)



c)



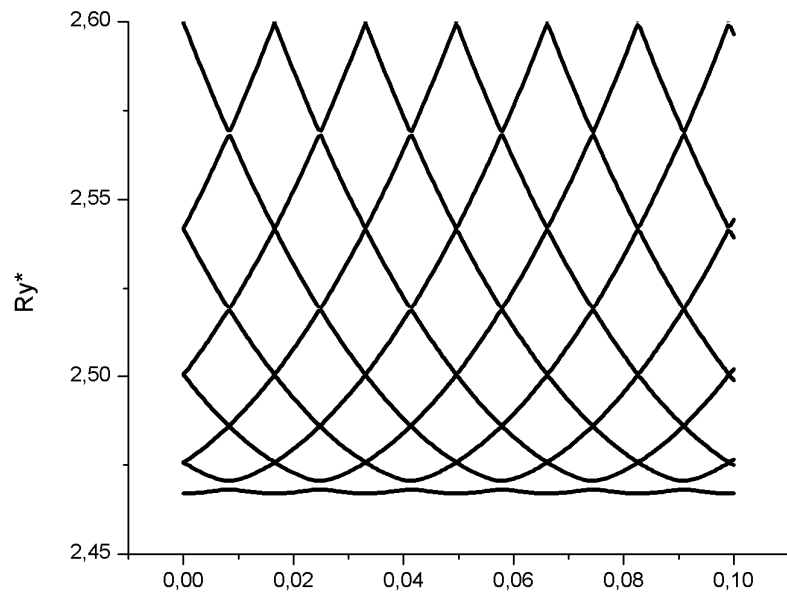
d)



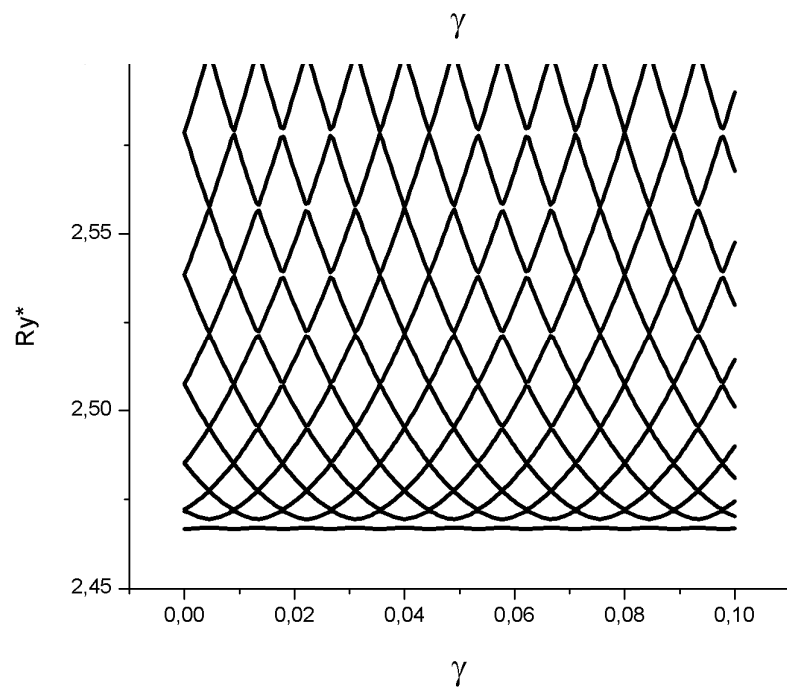
Otro caso para analizar es cuando tenemos tres anillos cuánticos con igual dimensión de sección transversal, 20nm, desplazamiento de 0.01nm, igualmente para los tres, pero diferente radio de línea central (ver Fig. 5). Entonces observamos el mismo patrón de oscilación en el primer estado excitado para los tres anillos en común. La gran diferencia radica en las distancias relativas entre los mínimos de las diferentes curvas energéticas asociadas a los diferentes valores del número cuántico magnético angular. Consecuencia explicada nuevamente por la expresión relacionada con el periodo de oscilación del nivel energético más bajo, inversamente proporcional al cuadrado del radio de la línea central.

Fig. 5. Tres anillos cuánticos con igual sección transversal, 20nm, e igual desplazamiento, 0.01nm, la principal diferencia radica en el radio de la línea central perteneciente a cada uno, **a)**110nm, **b)**150nm y **c)**190nm.

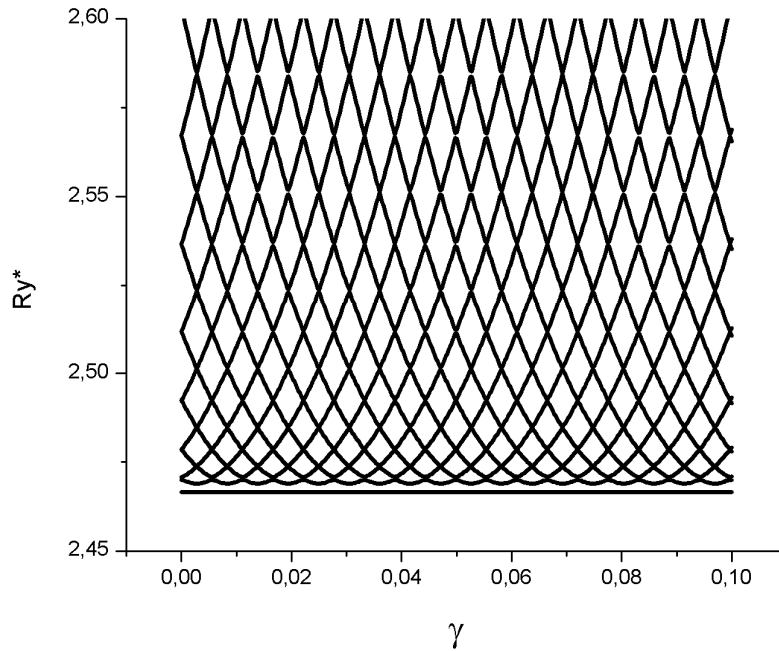
a)



b)



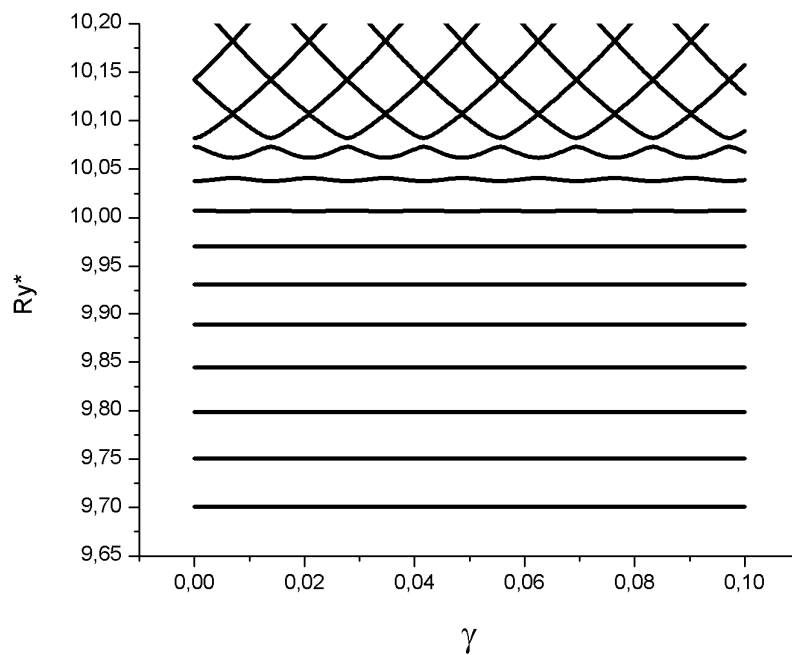
c)

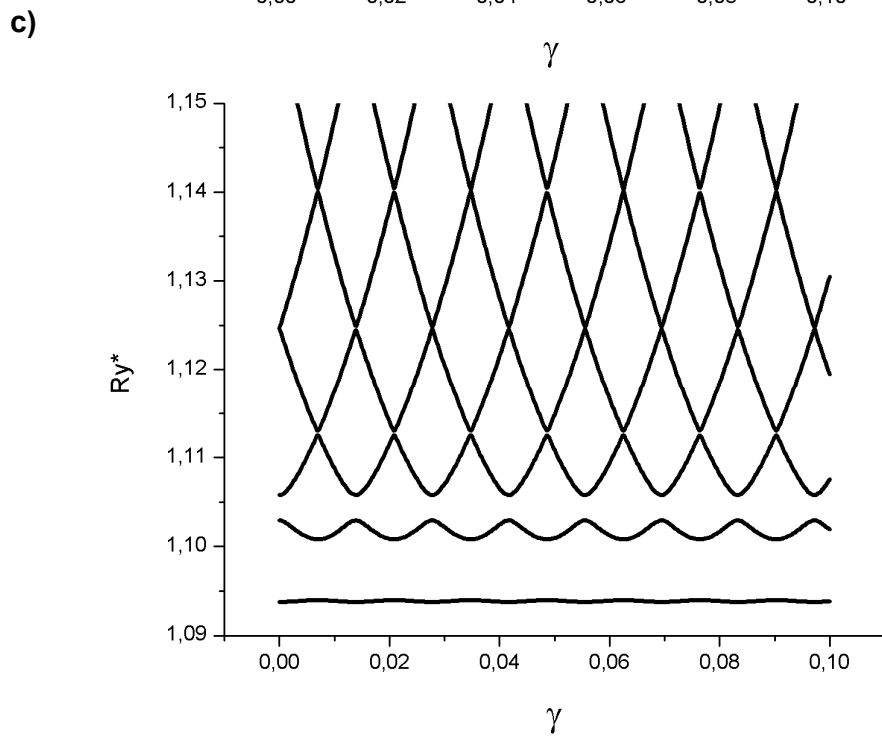
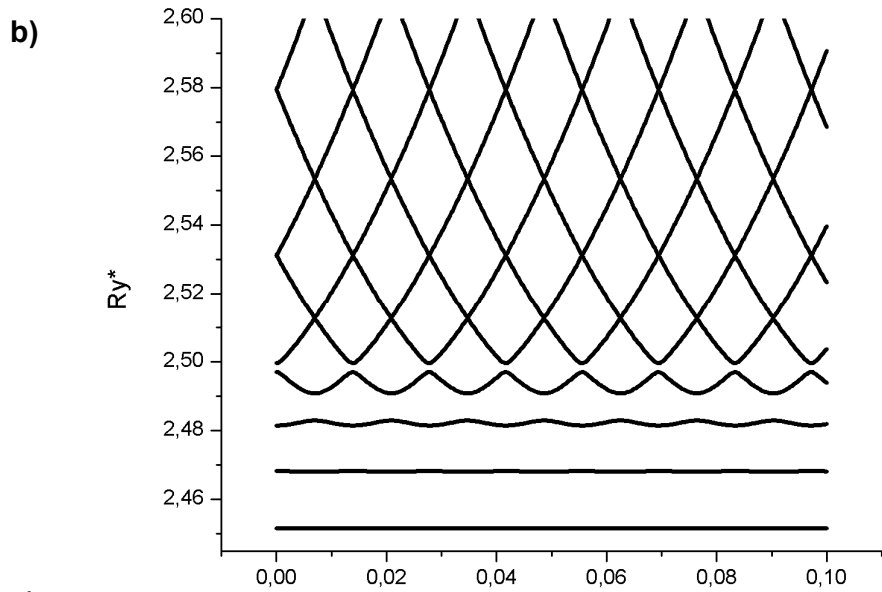


Analizando otro caso de tres anillos trabajados, ellos presentan en común el radio de línea central, 120nm, pero cada uno posee diferente dimensión de sección transversal (ver Fig. 6). Entonces observamos lo siguiente. Entre más grande sea la dimensión de sección transversal del anillo, menor será la extinción del efecto AB en el espectro energético al realizar un desplazamiento del radio. Esto significa que el electrón confinado en un anillo cada vez más ancho sufre un desplazamiento de la probabilidad hacia el centro, producido por la fuerza magnética o fuerza de Lorentz y además el anillo con una sección transversal cada vez más grande deja de ser unidimensional 1D y por consiguiente se convierte en una estructura de confinamiento bidimensional, 2D.

Fig. 6. Tres anillos cuánticos de igual radio de línea central, 120nm, igual desplazamiento, 0.1nm, pero diferente sección transversal. **a)** El primer anillo tiene radio interno igual a 115nm y externo 125nm, observamos diez estados localizados, los ocho primeros son constantes y los dos restantes presentan pequeñas oscilaciones. **b)** El segundo anillo tiene radio interno igual a 110nm y externo 130nm. Cuatro estados localizados, los dos primeros constantes o planos y los otros dos con pequeñas oscilaciones. **c)** El tercer anillo tiene radio interno igual a 105nm y externo 135nm. Dos estados localizados. uno plano y el otro con oscilaciones.

a)



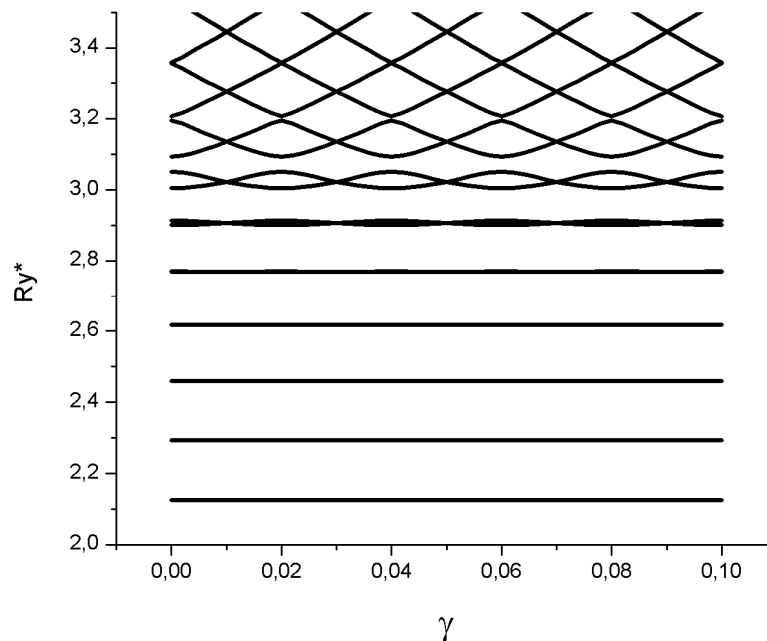


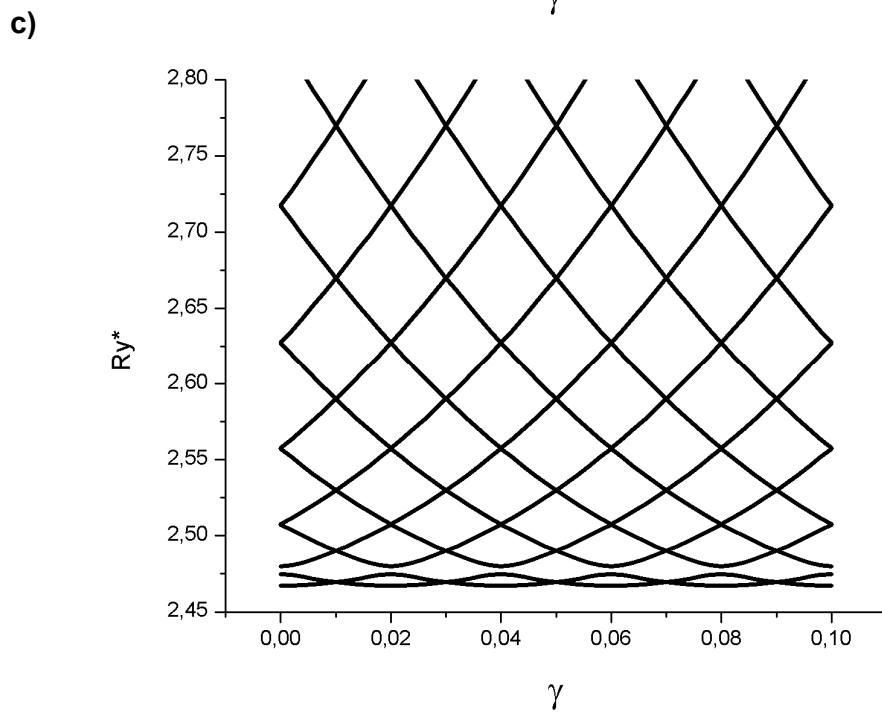
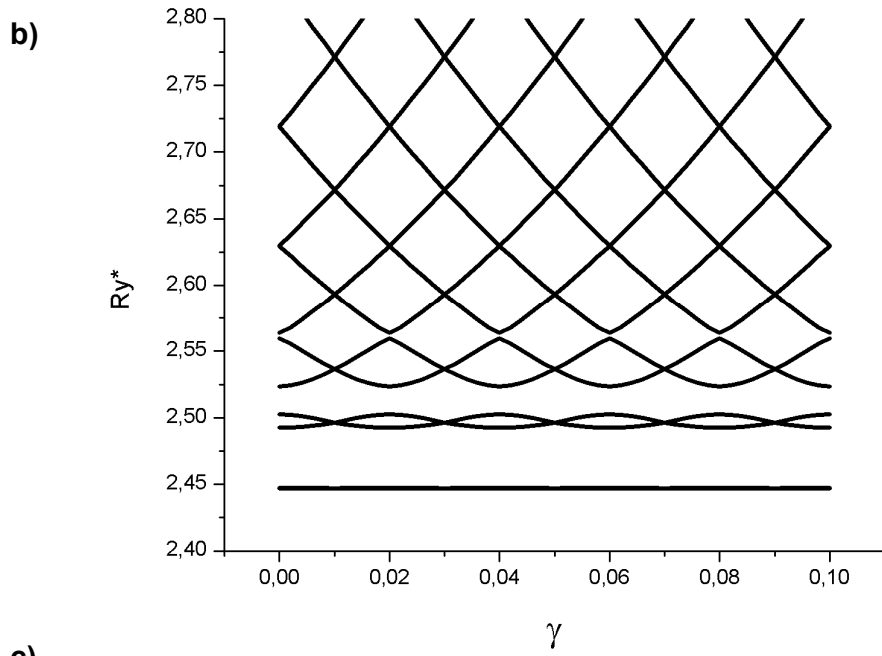
Continuando con el estudio de nuestro segundo modelo planteado, analizamos las pequeñas variaciones de sección transversal para diferentes tamaños de anillos en el marco de la aproximación adiabática (ver Fig.7). Observamos grandes cambios de las curvas energéticas para esta clase de anillo en comparación

con lo anterior. El electrón confinado es mucho más sensible a los cambios aplicados a este tipo de estructura. Esto sucede gracias a los dos ejes de simetría existentes o semiejes. Las elipses con diferentes parámetros de semiejes, (frontera interna y externa), traen consigo como resultado, tener dos regiones con la máxima y mínima amplitud de sección transversal, equidistantes angularmente a $\pi/2$, intercaladamente. Ocasionando así que el electrón prefiera estar en la región con mayor ancho, siempre buscando la energía más baja o el menor confinamiento posible. Por el contrario, será menos probable encontrar el electrón en las regiones de mínima amplitud, sin estar presente el campo magnético externo.

Fig. 7. Realizamos variaciones en los parámetros de semiejes y consecuentemente su sección transversal no es constante. La línea central está dada por la circunferencia de radio 100nm. Al realizar cambios en los semiejes menor y mayor, obtuvimos las gráficas **a)** $a=9\text{nm}$, $b=11\text{nm}$ con diferencia entre la sección transversal de los semiejes, $\Delta=4\text{nm}$. **b)** $a=9.9\text{nm}$, $b=10.1\text{nm}$ y $\Delta=0.4\text{nm}$. **c)** $a=9.99\text{nm}$, $b=10.01\text{nm}$ y $\Delta=0.04\text{nm}$.

a)



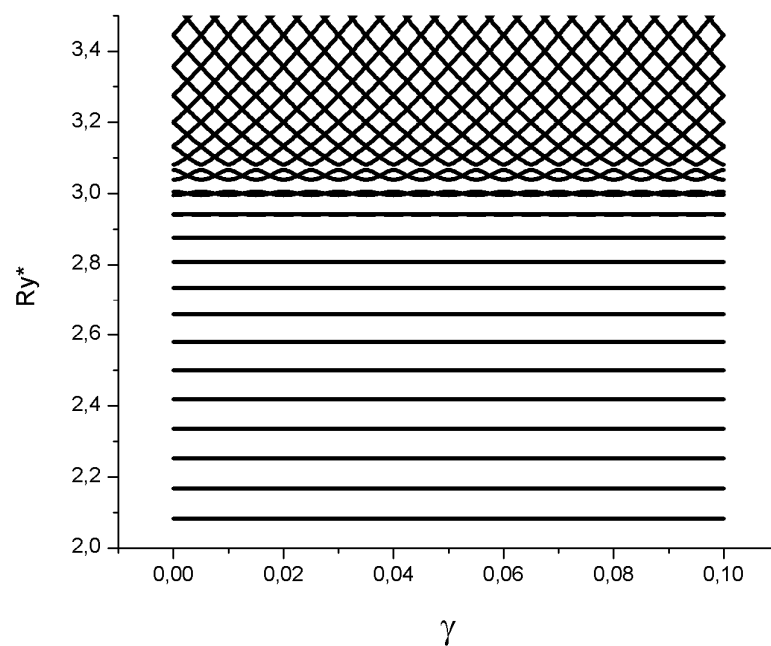


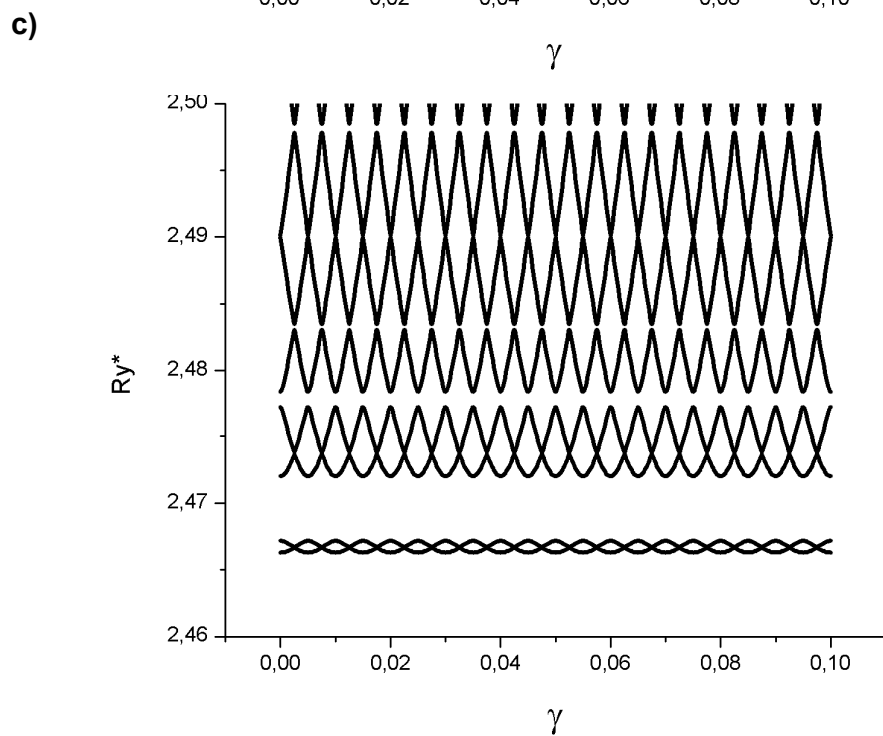
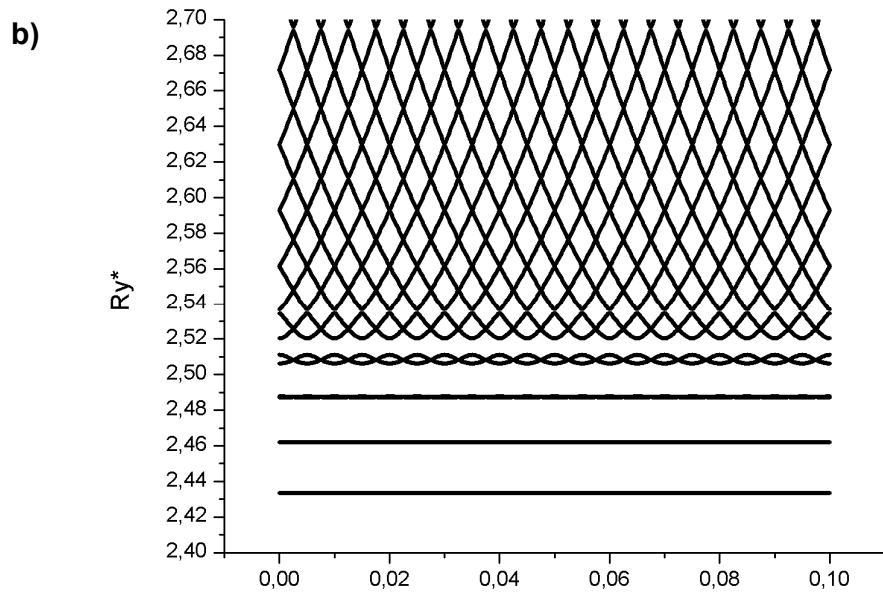
Analizamos un anillo similar al anterior, con línea central dada por la circunferencia de 200nm. Aplicando las mismas tres variaciones a los semiejes (ver Fig. 8), obtuvimos que al tener anillos con línea central grande, gráficamente se observa que las curvas energéticas se encuentran cada vez más juntas, menor distancia

relativa entre ellas y mayor frecuencia al estado excitado y base, presenta el efecto *AB*. La anterior descripción concuerda con la relación de proporcionalidad existente entre la frecuencia de oscilación y el cuadrado del radio de la línea central.

Fig. 8. Realizamos variaciones en los parámetros de semiejes. Su línea central está dada por la circunferencia de radio 200nm. Al realizar cambios en las dimensiones de semieje menor y mayor, obtuvimos las gráficas **a)** $a=9\text{nm}$, $b=$, $\Delta=4\text{nm}$. **b)** $a=9.9\text{nm}$, $b=10.1\text{nm}$ y $\Delta=0.4\text{nm}$. **c)** $a=9.99\text{nm}$, $b=10.01\text{nm}$ y $\Delta=0.04\text{nm}$.

a)

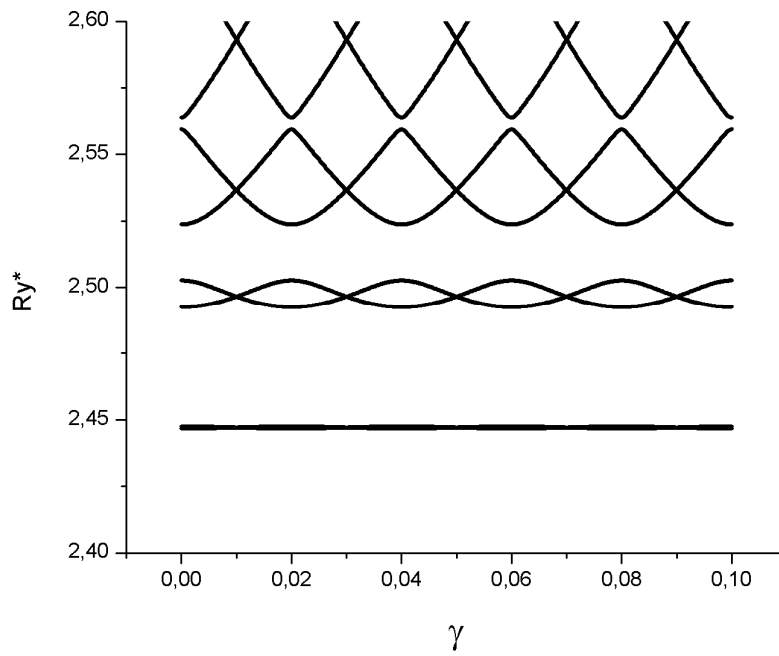




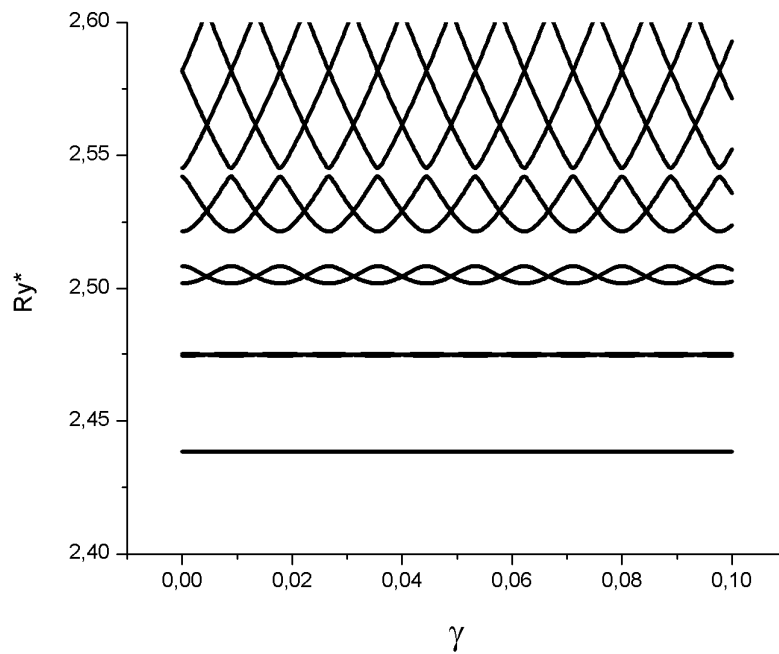
Por último analizaremos mejor esta clase de anillo, observemos que sucede con las oscilaciones energéticas de AB , cuando el anillo se hace cada vez más grande, manteniendo constante los parámetros de semiejes (ver Fig.9).

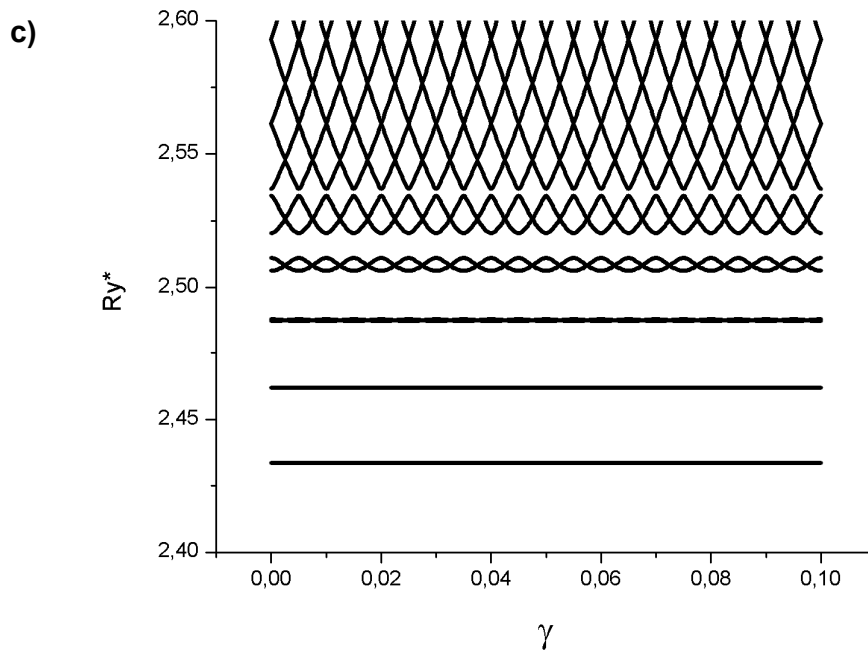
Fig. 9.. Parámetros de semiejes constantes $a=9.9\text{nm}$, $b=10.1\text{nm}$, $\Delta=0.4\text{nm}$. La línea central está dado por las circunferencias de radio **a)100nm, b)150nm y c)200nm**.

a)



b)





Podemos decir que esta clase de anillo es realmente diferente al modelo 1. Realizando variaciones en el tamaño y la sección transversal observamos que las distancias relativas entre los mínimos de las oscilaciones y las diferentes curvas energéticas cumplen la relación de proporcionalidad de línea central mencionada con el análisis del anterior modelo. La extinción del efecto *AB* y el número de estados localizados es diferente a lo observado con el anteriormente. En otras palabras, al tener tres anillos cuánticos con iguales parámetros de semiejes pero diferentes líneas central (ver Fig. 9), observamos que el número de estados localizados y el estado con oscilaciones, no es el mismo para los tres diferentes casos. A medida que aumentamos el tamaño del anillo, más estados localizados aparecen y la oscilación *AB* corresponderá a un nivel energético cada vez mayor.

5. Conclusiones

Se propuso un método nuevo para calcular el espectro energético de un electrón confinado en un anillo cuántico de forma arbitraria y con grosor no uniforme. El método se basa sobre la aproximación adiabática y es aplicable solo para anillos delgados. En diferencia con métodos utilizados por autores anteriores, el algoritmo trabajado en la tesis es mucho más sencillo que permite extenderlo para analizar sistemas con dos y tres partículas.

Se realizó el chequeo de eficiencia del método a través de la reproducción de los resultados para los modelos analizados en los trabajos anteriores [10-12], obtenidos por medio de técnicas diferentes. Buena concordancia de nuestros resultados con los anteriores nos permitió llevar a cabo correctamente el análisis de los dos modelos de anillos planteados para este trabajo, uno con las fronteras en forma de dos circunferencias desconcéntricas y otro con fronteras elípticas confocales con el fin de analizar la modificación de las curvas de niveles energéticos en función de campo magnético, asociada con los cambios en la sección transversal, tamaño y alteración de la simetría de anillos.

Análisis teórico de nuestros modelos muestra que la modificación de las curvas energéticas es causada por la variación de la curvatura de la línea central del anillo y por la variación del ancho del anillo a lo largo de esta línea central. Se encontró que la más notable modificación de estas curvas, está relacionada con el cambio de la sección transversal. Las alteraciones pequeñas de la dimensión de sección transversal del anillo, conllevan a grandes cambios en el espectro energéticos que se manifiesta en la extinción de efecto AB para los primeros niveles y la aparición de estados localizados, cuyas energías no dependen de valores de flujo magnético.

Se estudio el efecto de tamaño del anillo, pero con iguales cambios de sección transversal, observamos la relación inversamente proporcional entre el periodo de oscilación de AB y el cuadrado del radio de la línea central del anillo, mencionada por la teoría simple de un electrón confinado en un anillo unidimensional. Aunque esta relación solo está dada para la oscilación de la energía del estado base, podemos extrapolarla y concluir que es apropiada para entender el efecto AB en niveles excitados.

Cambios importantes fueron observados en el análisis de anillos de diferentes anchos de sección transversal, misma línea central y mismas variaciones. Cuando la sección transversal del anillo se hace cada vez más grande, esto ocasiona que el ancho del pozo sea mayor y las energías de los niveles sean cada vez menores, pero también hace que el anillo evolucione a una estructura cada vez más bidimensional, desde el punto de vista de la aproximación adiabática y la condición de anillo cuántico delgado mencionada anteriormente en el marco teórico. En otras palabras, podemos concluir una mayor probabilidad de encontrar el electrón en la región más cercana a la frontera interna o externa, dependiendo de la dirección del campo magnético. Consecuencia directa de la fuerza de Lorentz.

En el caso de anillos de forma elíptica, se encontró que las líneas de niveles energéticos en función del campo magnético se separan en dos subniveles para cada uno de los estados de localizados. Esto es debido a que la presencia de dos ejes de simetría respecto a transformaciones de inversión.

6. Bibliografía

- [1] D. Leonard, K. Pond, P.M Petroff, Phys. Rev. B 50 (1994) 11 687.
- [2] J.M. García et al., Appl. Phys. Lett. 73 (1997) 2014.
- [3] H. Pettersson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, P.M. Petroff, Physica E 6 (2000) 510-513.
- [4] J.-L. Zhu and Zh. Dai, Two electrons in one-dimensional nanorings, Phys. Rev. B **68**, 045324(2003).
- [5] Y. Aharonov and D. Bohm, Significance of Electromagnetic Potential in the quantum Theory, Phys. Rev. Vol. 115 No. 3, (1959).
- [6] J. Planelles, J.I.Climente, F.Rajadell, Quantum rings in tilted magnetic fields, Phys E 33 (2006) 370-375.
- [7] S. Viefers, P. Koskinen, P. S. Deo, M. Manninen, Phys. E (Amsterdam) 21, 1 (2004).
- [8] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Phys. Rev. B 61, 15 887 (2000).
- [9] Z. Barticevic, M.Pacheco, and A. Latgé, Phys. Rev, B 62, 6963 (2000).
- [10] Y. V. Pershin and C. Permarocchi, Persistent and radiation-induced currents in distorted quantum rings, Phys. Rev. B **72**, 125348(2005).
- [11] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field, Phys. Rev. B **77**, 205303(2008).
- [12] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé. Aharonov Bohm oscillation in a quantum ring: Eccentricity and electric field effects, Phys. Rev. B 71,125312 (2005).
- [13] F. García, J. H. Marín, H. Paredes and I. D. Mikhailov, Phys. Stat, Sol. (c) 2, No. 10, 3630-3633 (2005).
- [14] R. C. T. da Costa, Phys. Rev A 23, 1982 (1981).
- [15] S. N. Shevehenko and Yu. A. Kolesnichenko, JETP 92, 811 (2001).