

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN SISTEMA CUASI-UNIDIMENSIONAL  
CON DOS PARTICULAS SEPARADAS**

**ROSA ELVIRA CORREA PABÓN**

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

**2008**

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN SISTEMA CUASI-UNIDIMENSIONAL  
CON DOS PARTICULAS SEPARADAS**

**ROSA ELVIRA CORREA PABÓN**

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

**Director**

**DR. ILIA D. MIKHAILOV**



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2008**

*Dedico el fruto de mi esfuerzo a mis amados padres Benito y Myriam,  
a mis queridísimos hermanos Andrés, Laura, Silvia, Brenda y Andrea,  
a mis adorado sobrinos Juan Andrés y Juan Martín y  
al amor de mi vida Edgar.*

*P. C.*

*Esto no tiene nada que ver con la realidad, pero es tan bonito y tan incomprensible.*

*A. E.*

# AGRADECIMIENTOS

---

Quiero expresar mis más profundos agradecimientos a:

Al Doctor Ilia Mikhailov, verdadero maestro. Por su incondicional colaboración y paciencia en todo momento, especialmente durante los tropiezos y debilidades, por sus infaltables regaños de padre putativo le estaré eternamente agradecida.

Al Doctor Jairo Marín, compañero y amigo incansable a la hora de colaborar, por su sincera amistad, su contagioso entusiasmo y por todo su apoyo, de todo corazón muchísimas gracias.

A mis compañeros y de investigación del grupo "FICOMACO", Carlos Arnulfo Gómez, Jesús Eduardo Galván, Willian Gutiérrez, por la gran amistad que me han regalado, por su muy valiosa colaboración y apoyo en los momentos difíciles, mil y mil gracias.

A los compañeros exficomacos, Janeth Fernández, Ligia Jaimes, Juan Carlos Piña, por su amistad y ayuda.

Y por último a todos los compañeros y demás que de una y otra forma colaboraron en la realización de este trabajo.

Desde el fondo de mi alma, muchísimas gracias...

# ÍNDICE GENERAL

---

	<b>Pág.</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>9</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>10</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>11</b>
<b>1. GENERALIDADES</b>	<b>16</b>
1.1 Heteroestructuras Semiconductoras	16
1.2 Excitones en heteroestructuras semiconductoras	17
1.3 Aproximación de Born-Oppenheimer	18
1.4 Aproximación de Masa Efectiva	21
1.5 Método de Barrido Trigonométrico	24
<b>2. MODELO TEÓRICO</b>	<b>27</b>
2.1 Modelo Matemático	27
2.2 Parámetros del Material	28
2.3 Hamiltoniano del Sistema	28
2.4 Separación de Variables en ecuación de Schrödinger	30
2.5 Método de Solución de la ecuación para el Movimiento Relativo	32
<b>3. ANÁLISIS DE RESULTADOS</b>	<b>35</b>
3.1 Soluciones Exactas	35
3.2 Efecto del Tamaño sobre el Espectro Energético del Sistema	40
3.3 Efecto de Campo Eléctrico	46
<b>CONCLUSIONES</b>	<b>50</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>51</b>

# ÍNDICE DE FIGURAS

---

	Pág.
<b>Fig. 1</b> Sistema de hilos cuánticos con una partícula en cada uno.	27
<b>Fig. 2</b> Curvas de potencial para el movimiento relativo.	38
<b>Fig. 3</b> Niveles energéticos correspondientes al movimiento relativo en hilos cuánticos con diferentes parámetros $l$ y separación entre ellos $\tilde{d} = 0.001$	39
<b>Fig. 4</b> Energías $\tilde{E}_{0,n}$ para diferentes niveles $n$ en función $l$ para $\tilde{d} = 0.001$	41
<b>Fig. 5.</b> Energías renormalizadas $\tilde{\tilde{E}}_{N,n}$ (multiplicadas por el cuadrado de la longitud del hilo) en función de $l$ para $\tilde{d} = 0.001$ . La parte izquierda corresponde al caso del par electrón-hueco y la parte derecha al caso de 2 electrones.	43
<b>Fig. 6</b> Energías renormalizadas $\tilde{\tilde{E}}_{N,n}$ en función $l$ para $\tilde{d} = 0.001$ .	44
<b>Fig. 7</b> Lo mismo que en Fig. 6, pero para $\tilde{d} = 2.0$ y $\tilde{d} = 0.5$ .	45
<b>Fig. 8</b> Energías renormalizadas $\tilde{\tilde{E}}_{N,n}$ en función $l$ para $\tilde{d} = 0.5$ y $\tilde{d} = 2.0$ .	46
<b>Fig. 9</b> Sistema de hilos cuánticos paralelos con dos partículas separadas en presencia del campo eléctrico.	46
<b>Fig. 10</b> Energías renormalizadas de 4 niveles más bajos en función de la longitud de los hilos en presencia de campo eléctrico.	48

# ÍNDICE DE TABLAS

---

	Pág.
<b>Tabla 1.</b> Energías de diferentes niveles cuando $l \rightarrow 0$ .	36
<b>Tabla 2.</b> Las energías $\tilde{E}_{0,n}$ para diferentes niveles $n$ en función $l$ para $\tilde{d} = 0.001$	42

# RESUMEN

---

**TITULO:** ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN SISTEMA CUASI-UNIDIMENSIONAL CON DOS PARTÍCULAS SEPARADAS.\*

**AUTOR:** ROSA ELVIRA CORREA PABÓN\*\*

**PALABRAS CLAVES:** Hilos cuánticos, Sistemas 1D dimensionales, Sistema de dos partículas, Método de barrido trigonométrico, Espectro energético.

Se estudia el espectro energético de una heterojuntura semiconductor formada por dos hilos cuánticos paralelos con un potencial de confinamiento parabólico a lo largo de los hilos y con una partícula en cada uno de ellos. Se demuestra que en el caso estrictamente unidimensional cuando el tamaño del grosor del hilo es despreciable en comparación con su longitud la ecuación de Schrödinger es completamente separable y puede resolverse de forma exacta. Se presentan los resultados del cálculo de las energías, en función de la separación entre los hilos y de la longitud de los mismos, para un conjunto de los niveles más bajos. Se encontró que las curvas de la dependencia de los niveles energéticos en función de la longitud del hilo sufren unos cambios bruscos acompañados con las intersecciones entre ellas, su reordenamiento y reagrupación cuando separación entre los hilos no es demasiado grande. Cuando la distancia entre los hilos se incrementa estas transformaciones en las curvas ocurre en forma mucho más suave. Se demostró que el método utilizado da resultados en plena concordancia con las soluciones analíticas en los límites de hilos muy cortos y muy largos. Adicionalmente, se analiza el efecto de campo eléctrico aplicado a lo largo de los hilos en direcciones opuestas. Se encontró que la presencia de campo eléctrico conduce a la suavización de las curvas de dependencia de las energías en función de la longitud de los hilos.

---

\* Proyecto de grado.

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Illia D. Mikhailov.

# ABSTRACT

---

**TITLE:** ENERGY SPECTRUM OF A CUASI-ONE-DIMENSIONAL SYSTEM WITH TWO SEPARATED PARTICLES.\*

**AUTHOR:** ROSA ELVIRA CORREA PABÓN\*\*

**KEYWORDS:** Quantum wires, One-dimensional systems, Two particles system, Sweep trigonometric method, Energy spectrum.

The energy spectrum of a semiconductor heterojunction formed by two parallel quantum wires with only one-electron in each of them and under a parabolic potential confinement along of the wire is studied. It is demonstrated that in the strictly one-dimensional case corresponding to a very small wide wires in comparison with the length wires, the Schrödinger equation is completely separated and this one may be exactly solved. We present the energy calculation results as a function of the separation between wires and the length of them for a set of low-lying energy levels. It is found that the curves for the energy levels as a function of the length wire's suffer sharply changes accompanied of the crossover between them and the ordering and reunification as the separation it is enough great. As the distance between wires is increased these transformations in all curves appear in a much soft form. It is demonstrated that the method used may give results in good agreement with the analytic solutions for the limit case corresponding to small and large wires. Additionally, it is analyzed the effect of the electric field applied along of the each wire in opposite directions. It is found that the presence of the electric field drives to the softness of the curves for the energies as function of length wires.

---

\* Proyecto de grado.

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Illia D. Mikhailov.

# INTRODUCCIÓN

---

La primera persona que describió el concepto de Nanotecnología fue el Premio Nóbel de Física Richard Feynman, en una conferencia dada en el Caltech (Instituto Tecnológico de California) el 29 de diciembre de 1959 titulada *"There is Plenty of Room at the Bottom"*, (Al fondo hay espacio de sobra). Aunque ésta conferencia fue celebrada hace casi 50 años, es en las dos últimas décadas cuando se ha empezado a investigar de manera exhaustiva en base a lo prometedor de esta nueva tecnología [1].

Es en la escala atómica y molecular donde la Nanotecnología se ha ido desarrollando y tomando gran fuerza, porque bajo este límite se pueden observar propiedades electrónicas y opto-electrónicas específicas aplicables en la creación y miniaturización de nuevos dispositivos microelectrónicos, las cuales antes eran imposibles de observar en sistemas en bloque. Estas estructuras de orden nanométrico han sido denominadas nanoestructuras semiconductoras o sistemas de baja dimensionalidad [2].

Debido a la gran aplicación que traen consigo los sistemas de baja dimensionalidad, se hace necesario que tecnológicamente se desarrollen métodos para el crecimiento de este tipo de nanoestructuras. Entre ellos se pueden mencionar la Litografía con base en Rayos Electrónicos e Ínter- difusión a través de Impurezas en la Estructura [3], y los métodos que se designan de forma genérica por crecimiento epitaxial de cristales. Algunos métodos epitaxiales son: Epitaxia por Rayos Moleculares (MBE) [4, 5], Deposición Química Metal Orgánica al Vapor (MOCVD) [5] y Epitaxia por Fase Líquida [4, 6]. Éstas técnicas también permiten que las estructuras fabricadas confinen los portadores de carga en regiones muy pequeñas con un comportamiento cuántico relacionado con sus movimientos en todas las direcciones de la estructura.

Estos portadores pueden ser electrones, excitones e impurezas donadoras neutras  $D^0$ , así como cargadas negativamente  $D^-$ .

La historia de las nanoestructuras semiconductoras comienza en la década de los 70, con la fabricación de las primeras superredes. Paralelamente fue desarrollándose el estudio de pozos cuánticos (QW) [7, 8], los cuales consisten en una lámina de un semiconductor embebida en un semiconductor diferente. En este caso se logra confinar el movimiento de los portadores de carga en una región plana muy estrecha, de modo que su movimiento se hace cuasi-bidimensional. A partir de los 80s, han sido desarrolladas nuevas técnicas para fabricar sistemas con confinamiento adicional: los hilos cuánticos (QWW), sistemas cuasi-unidimensionales [9, 10] y la situación extrema, estructuras cuasi cero dimensionales, llamadas puntos cuánticos (QD) [2, 11]; éstos últimos han mostrado una gran diversidad de morfologías, dentro de las cuales cabe destacar formas geométricas que se aproximan a: discos, lentes, pirámides, entre otras [12, 13].

En el método de crecimiento epitaxial de cristales se encuentra la técnica de Stransky-Krastanov [14, 15], cuya importancia radica en el crecimiento natural o espontáneo de las nanoestructuras, permitiendo manejar de modo controlado su forma y tamaño, mediante un manejo estricto de la rapidez de crecimiento y de la temperatura. Además, esta técnica ha permitido desarrollar las denominadas nanoestructuras auto-ensambladas como los puntos cuánticos (SAQD) [16], los anillos (SAQR) [17] o los hilos cuánticos (SAQWW) [18] y ésta es un área de creciente actividad científica. Estas estructuras, escaladas a tamaño nanométrico se forman de manera natural debido a los efectos de tensión-relajación cuando un material semiconductor se crece sobre una superficie de un segundo material semiconductor con un ligero desajuste de red. Su tamaño resulta adecuado para el confinamiento espacial de los portadores de carga, produciendo una escalera de niveles de energía atómicamente abruptos. Estos niveles pueden ser usados como base para construir nuevos materiales semiconductores avanzados.

Algunos científicos han investigado acerca de los detalles en la formación de los SAQWW [18] por medio de técnicas de caracterización in situ como la medida de la tensión acumulada. Estas investigaciones han logrado concluir que la formación de dichas nanoestructuras auto-ensambladas, se debe a una acumulación anisotrópica de tensión. También presenta especial interés el estudio de las propiedades ópticas y eléctricas de dichas nanoestructuras auto-ensambladas [19, 20, 21]. Se puede mencionar la investigación de excitones en hilos cuánticos acoplados horizontal y verticalmente [22] en los cuales, los resultados numéricos obtenidos para los sistemas mencionados presentan ciertas diferencias. Los hilos acoplados horizontalmente presentan estados acoplados para las diferentes distancias entre los hilos y para los hilos acoplados verticalmente se predicen cruces entre los estados excitados cuando la distancia de separación se acerca al valor de la altura de los hilos.

Existe actualmente un gran interés en el estudio de sistemas de pocas partículas (electrones, excitones, impurezas aceptoras, donadoras neutras y cargada, etc.) confinadas en heteroestructuras semiconductoras. Al estar confinados los portadores de carga, sus estados ligados se hacen más estables, con respecto al sistema en bloque, y las líneas espectrales de absorción se hacen mucho más estructuradas y bien definidas, ampliándose así el rango de posibilidades para el diseño y la fabricación de dispositivos ópticos y electrónicos. Al reducir la dimensionalidad de la estructura, se afectan de manera sensible los niveles cuánticos de los sistemas confinados en ella. Ya se han realizado muchos trabajos analizando, por ejemplo, sistemas de electrones, de donadoras hidrogenoides o excitónicos en toda clase de heteroestructuras [23, 24]. Se ha mostrado que en general, las energías de electrón libre y de enlace en dichos sistemas crecen a medida que se aumenta el nivel de confinamiento y se reduce el tamaño del pozo cuántico en cada caso.

Por medio del estudio teórico, se ha demostrado que el efecto de la interacción electrón-electrón en sistemas de dimensionalidad reducida tiene gran importancia. Recientemente se han calculado los niveles energéticos de un sistema de dos electrones

confinados en QDs, utilizando diferentes técnicas, entre las cuales cabe mencionar: los Métodos de Diagonalización de Matrices [25], Variacionales [26, 27], Escalamiento Dimensional [28], Monte Carlo [29] y Dimensión Fractal [30, 31].

Entre los diferentes resultados teóricos a los que ha llevado el análisis del efecto del confinamiento sobre el espectro de sistemas de pocas partículas en heterojunturas semiconductoras, un particular interés presentan los modelos exactos los cuales por un lado describen en una forma aproximada alguna heterojuntura semiconductor y por otro, permiten encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger en forma exacta. Se puede mencionar los siguientes modelos exactos que presentan interés para análisis teórico de QDs y fueron objetos de investigación en las publicaciones: impureza donadora centrada en punto cuántico esférico [24], dos electrones en discos [25] y esferas [32] con potencial parabólico, dos electrones en un anillo unidimensional [33]. El número de modelos exactos analizados hasta el momento es limitado y en esta tesis se presenta un modelo exacto completamente nuevo, el cual es un sistema de dos partículas separadas y localizadas en dos hilos unidimensionales paralelos.

El trabajo realizado en esta investigación se centra en nanohilos. Algunas de las razones para estudiar a escala nanométrica estos sistemas son las siguientes: en primer lugar, las propiedades de conducción en sistemas unidimensionales son diferentes a los sistemas bidimensionales y tridimensionales, dando lugar a fenómenos como la cuantización de la conductancia [1], entre otros. La capacidad para medir la conductancia y las propiedades físicas de los sistemas que exhibían estos fenómenos, ha mejorado significativamente la comprensión de estas estructuras. En segundo lugar, las aplicaciones prácticas de los nanohilos en la nanoelectrónica se han demostrado, con la inclusión de elementos de lógica de funcionamiento [10,14], la memoria [11], y los interruptores [15], que si bien no de inmediato tienen aplicación tecnológica, muestran que el campo está activo y que es potencialmente útil para los resultados finales.

Entonces, se tienen varios aspectos que aún no han sido esclarecidos completamente dentro del estudio de sistemas de pocas partículas en QWWs, motivo por el cual, cualquier resultado teórico que ayude a ampliar el horizonte de conocimientos que se tiene hasta el momento, se puede considerar como un valioso aporte. En este sentido es que estuvo motivada la realización del presente trabajo de investigación.

# GENERALIDADES

---

---

## 1.1 HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

En las últimas décadas han sido desarrolladas un gran número de investigaciones, de tipo teórico y experimental, sobre una amplia variedad de nanoestructuras semiconductoras (o sistemas de baja dimensionalidad), tales como: QWs, QWWs, QDs y SLs, las cuales presentan notables diferencias entre si en lo que tiene que ver con su morfología y propiedades físicas. Esta nueva época de la nanotecnología tuvo su inicio con el trabajo de Esaki y Tsu [34], quienes analizaron las diferentes propiedades de una superred fabricada a partir de dos semiconductores bases (A y B), con diferentes anchos de banda prohibida, crecidos de forma alternada (ABABAB...).

Para crear una heterojuntura semiconductor con interfaces perfectas, se requiere que los materiales utilizados para formarla tengan una estructura cristalina similar y parámetros de red parecidos. Con el fin de cumplir este objetivo y poder fabricar una heterojuntura semiconductor que cumpla con los requerimientos necesarios y así aumentar el rango de sus propiedades físicas, se han utilizado aleaciones entre varios compuestos de los grupos III-V, de las cuales la más usada es la aleación  $Al_xGa_{1-x}As$ , la cual se investiga con gran interés por sus actuales y potenciales aplicaciones tecnológicas. Debido a la diferencia que existe entre las bandas prohibidas de energía de los dos materiales, se produce un salto de potencial en las interfaces y de esta manera se forma un pozo de potencial en el cual se pueden confinar los portadores de carga para formar estados ligados.

Las heteroestructuras están formadas por varias junturas y por consiguiente existen innumerables posibilidades y formas para éstas. Su gran utilidad tecnológica hace de estas nanoestructuras un punto fuerte de investigación.

---

## 1.2 EXCITONES EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

El excitón es una cuasi-partícula formada por un electrón que ha abandonado la banda de valencia por absorción de fotones, que inciden sobre la estructura con una energía comparable a la brecha de energía prohibida del material que conforma la misma, y ha pasado a la banda de conducción dejando un hueco (que se comporta como una partícula con carga positiva) con el cual interactúa a través del Potencial de Coulomb; dicha cuasi-partícula ha demostrado ser responsable de importantes efectos ópticos en heteroestructuras semiconductoras, ya que su energía de enlace aumenta de una manera bastante significativa cuando se ve confinada a distancias del orden de su Radio de Bohr.

En un excitón, la masa del hueco es generalmente mil veces mayor que la masa del electrón, por tal razón este sistema de dos cuerpos se asemeja a un átomo de hidrógeno, con el electrón de carga negativa orbitando alrededor del hueco con carga positiva. El excitón es una cuasi-partícula estable y puede tener un tiempo de vida relativamente largo, del orden de cientos de pico segundos o nano-segundos [35]. La recombinación del excitón a bajas temperaturas es una característica importante de la fotoluminiscencia, debido a que su energía de enlace es relativamente baja (unos pocos mili-electronvoltios (meV)) y tiende a disociarse a altas temperaturas.

Mientras que en un semiconductor en bloque, la energía total del excitón es simplemente la energía del par electrón-hueco libre (es decir la energía de la banda) ( $E_g$ ) menos la energía de enlace del excitón ( $E_b$ ), en una heteroestructura existen

aportes adicionales debido a las energías de confinamiento del electrón ( $E_e$ ) y del hueco ( $E_h$ ), es decir:

$$\begin{aligned} E &= E_g - E_b && \text{(Bloque)} \\ E &= E_g + E_e + E_h - E_b && \text{(Heteroestructura)} \end{aligned} \tag{1.1}$$

La energía total del excitón es claramente una función de la dependencia estructural de las energías de confinamiento. Además es de esperarse que la energía del potencial Coulombiano ( $E_b$ ) también dependa del tipo de estructura, este ultimo efecto es debido a que la separación electrón-hueco puede variar considerablemente entre heteroestructuras, ya que como es fácil imaginar esta separación es mucho más pequeña en heteroestructuras de gap directo que en las de gap indirecto [2].

En este trabajo se considera que la masa del hueco es igual a la masa del electrón. Esto se hace con el objetivo de poder analizar el caso de la atracción y además simplificar considerablemente los cálculos. Con ello, se está tratando al hueco, como una partícula que puede moverse fácilmente y aporta significativamente energía cinética en igual proporción al electrón.

---

### 1.3 APROXIMACIÓN DE BORN-OPPENHEINER

Es casi imposible analizar completamente el movimiento de una red cristalina con sus electrones, debido a que el Hamiltoniano de dicho sistema incluye dentro de sus variables la posición y el momento del gran numero de electrones y núcleos que conforman el cristal. Para poder obtener resultados útiles con un esfuerzo razonable, es necesario valerse de una serie de aproximaciones, las cuales permiten obtener la formulación del Hamiltoniano que se va a utilizar para desarrollar el problema planteado.

La primera aproximación que se realiza es la de considerar a los núcleos y a sus electrones internos fuertemente ligados como una única partícula, de manera que cada uno de los puntos de la red cristalina se consideran como una coraza iónica con carga neta igual a la del núcleo menos la de sus electrones internos que lo apantallan. De esta manera, los únicos electrones que se consideran como separados son los *electrones de valencia*. Estos electrones se encuentran ligados débilmente a los iones y por ello se dice que tienen una movilidad relativamente alta; en contraste, los centros iónicos, que son mucho más masivos, se mueven significativamente más lento y comparados con el movimiento del electrón, pueden considerarse prácticamente quietos.

Este hecho otorga la posibilidad de aplicar una segunda aproximación conocida como *Aproximación de Born-Oppenheimer*, la cual señala que los movimientos nucleares y electrónicos están desacoplados debido a la gran diferencia de masa, es decir, y permite separar un Hamiltoniano de electrones de valencia que interactúan con una red iónica estática, del Hamiltoniano que considera los posibles desplazamientos de esta red (interacción entre iones o de red más la interacción fonón-electrón). El segundo término, puede despreciarse en el análisis de muchos fenómenos, donde los movimientos electrónicos son los únicos considerables.

Aún, con toda la simplificación que se ha realizado, todavía se tiene un Hamiltoniano que incluye las órbitas de todos los electrones de valencia, lo cual es un número todavía bastante grande ( $10^{23}$  electrones por  $cm^3$ ). El paso a seguir, es suponer que cada electrón de valencia percibe de manera aproximada un mismo potencial promedio efectuado por todos los otros electrones, el cual se puede suponer periódico debido a las simetrías de la red cristalina. Esta consideración es conocida como *Aproximación de Campo Promedio*, y permite reducir el problema al análisis del movimiento de un electrón con una función de onda  $\psi(\vec{r})$  sometida a la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}_{le}\psi(\vec{r}) = \left( \frac{p^2}{2m_e} + V_{red}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E_{le}\psi(\vec{r}), \quad (1.2)$$

donde  $V_{red}(\vec{r})$  representa el potencial periódico y permite integrar la interacción del electrón con el campo electrónico promedio y la red iónica. Según el *Teorema de Bloch*, las soluciones de la ecuación (1.2) pueden escribirse como una función de Bloch  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$  donde  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  es periódica bajo cualquier traslación a lo largo de un vector de la red cristalina  $\vec{R}$ , es decir, las funciones de Bloch son funciones propias de un operador de traslación:  $\hat{T}_{\vec{R}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ . Para demostrar que existe un conjunto solución de funciones de Bloch que resuelvan la ecuación (1.2) note que, debido a la periodicidad de la red, el Hamiltoniano  $\hat{H}_{le}$  y el operador de traslación  $\hat{T}_{\vec{R}}$  conmutan y por lo tanto pueden diagonalizarse de manera simultánea. Debido a que  $\vec{k}$  puede elegirse de manera arbitraria en cuanto que cualquier vector  $\vec{k} + \vec{G}_n$  (con  $\vec{G}_n$  un vector de la red recíproca) es también una posible función de Bloch, estas funciones se clasifican comúnmente por medio de dos índices  $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  donde  $\vec{k}$  debe encontrarse dentro de la primera zona de Brillouin (Esquema de Zona Reducida). La *estructura de bandas electrónicas* es la dependencia del valor propio  $E_{le}(n,\vec{k})$  donde  $n$  expresa justamente el *índice de la banda*.

Hasta el momento, todo lo dicho es válido para el espectro electrónico de un semiconductor volumétrico sin considerar el efecto de ninguna perturbación externa (como un campo eléctrico o magnético) o la presencia de iones distintos (sea una impureza o toda una heteroestructura). Debido a que en esta tesis se consideran dichas alteraciones se hace necesario explicar como se han de incluir en el Hamiltoniano  $\hat{H}_{le}$ . La primera aproximación que se puede tener en cuenta es el potencial coulombiano  $U(\vec{r})$  debido a la presencia de la otra partícula (electrón o hueco):

$$\hat{H}_{le} = \hat{H}_{le} + U(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_e} + V_{red}(\vec{r}) + \frac{\tau e^2}{\epsilon \sqrt{r^2 + d^2}} \quad (1.3)$$

La forma de este potencial, donde el efecto electromagnético de la red cristalina es debido al apantallamiento hecho por la constante dieléctrica  $\epsilon$ , tiene justificación si el movimiento electrónico se desarrolla en una región de un tamaño significativamente mayor al de una celda unitaria. El paso siguiente para resolver la ecuación (1.3) es el uso de la llamada *Aproximación de Masa Efectiva*.

---

## 1.4 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

En este trabajo, se utiliza la Aproximación de Masa Efectiva (AME) como punto de partida para el cálculo de los niveles energéticos del sistema compuesto por dos electrones o un par electrón-hueco en hilos cuánticos paralelos. Esta aproximación ha sido ampliamente utilizada en el análisis de sistemas de baja dimensionalidad y fue empleada por primera vez en el trabajo de Bastard [23] para analizar el espectro energético de sistemas electrónicos y de donadoras hidrogenoides confinadas dentro de QWs.

Para llegar a esta aproximación hay que empezar definiendo unas funciones llamadas *Funciones de Wannier*  $a_n(\vec{r}, \vec{R}_i)$  las cuales se relacionan con las funciones de Bloch [36] de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \\ \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i), \end{aligned} \tag{1.4}$$

donde  $N$  el número de celdas unitarias del cristal y los  $\vec{R}_i$  son los vectores de traslación del cristal. El hecho de que el cristal sea finito obliga a imponer unas *condiciones de frontera periódica* conocidas como *Condiciones de Born-von Kármán* sobre los posibles valores de  $\vec{k}$  de manera que estos se reduzcan a un número finito y todos ellos estén dentro de la primera zona de Brillouin. Por tal motivo, para cada valor de  $n$ , el

conjunto de funciones de Wannier  $a_n(\vec{r}, \vec{R}_i)$  forma un conjunto completo de funciones para una solución del Hamiltoniano (1.3) de forma que si se tiene un valor propio  $E'$  el vector propio se puede escribir como  $\psi'(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} \phi(\vec{R}_i) a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ . La función  $\Phi(\vec{R}_i)$  se conoce como función envolvente. Si el potencial  $U(\vec{r})$  varía muy lentamente a lo largo de la red se puede suponer de alguna forma que  $\vec{R}$  varía en manera continua y que por consiguiente  $U(\vec{r}) \approx U(\vec{R}) + (\vec{r} - \vec{R}) \nabla_{\vec{R}} U(\vec{R})$ . Dadas estas suposiciones y aplicando la forma de  $\psi'(\vec{R})$ , la ortonormalidad de las funciones Wannier y de Bloch y la Ec. (1.4) en la Ec. (1.3) se obtiene lo siguiente:

$$\left[ E(n, \vec{k}) + U(\vec{R}) \right] \phi(\vec{R}) = E \phi(\vec{R}), \quad (1.5)$$

en este caso,  $\vec{k}$  debe reemplazarse por su respectivo operador mecánico-cuántico  $-i\nabla_{\vec{R}}$  debido a que en el límite continuo  $\hbar\vec{k}$  y  $\vec{R}$  forman pares de variables canónicas conjugadas análogos a  $\vec{p}$  y  $\vec{r}$ .

En el problema que se va a plantear, el portador de carga es un electrón, por lo que se debe introducir en la ecuación (1.5) una expresión para la banda de conducción del material que se esté considerando (en el caso de huecos, debemos usar una expresión apropiada para la banda de valencia). Utilizando el *Modelo de Electrones casi libres* se puede suponer que la energía de dicho electrón se encuentra algo por encima del piso de la banda de conducción. Ahora, si sobre esta banda hay un punto mínimo en el centro de la primera zona, que se supone isotrópico y no degenerado, y además que la energía no se separa mucho de la del piso de la banda de conducción, el operador  $E(n, -i\nabla_{\vec{R}})$  se puede aproximar a:

$$E(c, \vec{k}) \approx E(c, 0) + \left[ \nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right] k^2 = E_C - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2, \quad (1.6)$$

donde  $E_c = E(c,0)$  es la energía del piso de la banda de conducción y  $m^* = \frac{\hbar^2}{2[\nabla_k^2 E(c,0)]}$

es la masa efectiva de los electrones de conducción del material. La ecuación (1.5) toma la forma:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2 + U(\vec{R}) \right] \phi(\vec{R}) = (E' - E_c) \phi(\vec{R}) \quad (1.7)$$

Al utilizar la AME no se ha incluido el potencial de interacción con el cristal y solamente se ha tenido en cuenta los potenciales externos, pero ha cambio de esto, se ha tenido que renormalizar la masa de la partícula a una cierta masa efectiva  $m^*$ , es decir, la partícula en un material semiconductor bajo la AME se puede analizar como una partícula ficticia de masa  $m^*$ , bajo un potencial externo  $U(\vec{r})$ . Esta masa efectiva es constante sólo para el modelo de banda parabólica, debido a que en general depende de la energía misma del portador, y por lo tanto, queda determinada por la estructura de bandas del material [24].

La presencia de una heteroestructura puede analizarse a través de la *Aproximación de la Función Envolvente* la cual interpreta las heterojunturas como barreras de potencial cuya altura es la diferencia entre los pisos de las bandas de conducción. En el modelo aquí planteado, esto es equivalente a introducir un potencial adicional  $V(x_i)$  que en este caso se tomará de forma parabólica.

Ahora solo falta incluir la presencia de la perturbación, que en este caso corresponde a un campo eléctrico. Si la función envolvente  $\phi(\vec{R})$  fuera realmente un orbital electrónico, la presencia del campo eléctrico podría incluirse como  $V_{\text{eléctrico}} = qe\vec{E}_i$ . Es posible interpretar la función envolvente como un auténtico orbital en el caso de que el movimiento electrónico sea bastante confinado. Se llega entonces a la ecuación de Schrödinger central en esta investigación:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{p}_i^2 + V(x_i) + V_{el\acute{e}ctrico}(x_i) + \frac{\tau e^2}{\epsilon \sqrt{r^2 + d^2}} \right] \Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}), \quad (1.8)$$

donde  $\vec{R}$  se ha cambiado por  $\vec{r}$  para recalcar que  $\Phi$  se interpreta como un orbital electr3nico. De igual manera se justifica tal Hamiltoniano de la ecuaci3n (1.2), que no es m1s que la ecuaci3n (1.8) sin el t3rmino coulombiano:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} p_i^2 + V(x_i) + V_{el\acute{e}ctrico}(x_i) \right] \phi_0(\vec{r}) = E_0\phi_0(\vec{r}) \quad (1.9)$$

Debe recordarse que tanto  $E$  como  $E_0$  representan la energ3a del electr3n medida a partir del piso de la banda de conducci3n del cristal que conforma el interior del QWW.

---

## 1.5 M3TOD0 DE BARRIDO TRIGONOM3TRICO

Diferentes m3todos han sido utilizados para resolver el problema de pocas part3culas: el M3todo Variacional [37], Series de Potencia [38], Expansi3n en t3rminos de  $1/N$  [39], Diagonalizaci3n Exacta [40, 41] o M3todos Num3ricos [42]. En esta tesis se utiliza el M3todo de Barrido Trigonom3trico [32, 43], el cual da un algoritmo m1s estable para obtener las soluciones num3ricas de dos electrones y un par electr3n-hueco en "hilos cu1nticos paralelos".

El M3todo de Barrido Trigonom3trico utiliza Coordenadas Polares de Poincar3, para reducir una ecuaci3n diferencial de segundo orden a una de primer orden; obteniendo una ecuaci3n trascendente para los niveles energ3ticos, a3n para el caso de potenciales no convencionales.

Dada una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{d^2 \chi(\rho)}{d\rho^2} + \alpha(\rho) \frac{d\chi(\rho)}{d\rho} + \beta(\rho) \chi(\rho) = 0 \quad (1.10)$$

La ecuación diferencial (1.10) de segundo orden se reduce a una ecuación diferencial de primer orden a través del siguiente cambio de variables, utilizando Coordenadas Polares de Poincaré:

$$\begin{aligned} \chi(\rho) &= A(\rho) \text{Cos}\theta(\rho), \\ \chi'(\rho) &= A(\rho) \text{Sen}\theta(\rho), \end{aligned} \quad (1.11)$$

donde  $A(\rho)$  y  $\theta(\rho)$  representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré, respectivamente. Derivando la primera expresión de la ecuación (1.11) e igualando con la segunda expresión en esta misma ecuación, se obtiene:

$$A'(\rho) = A(\rho) \frac{\text{Sen}\theta(\rho)}{\text{Cos}\theta(\rho)} [\theta'(\rho) + 1] \quad (1.12)$$

Por otro lado, sustituyendo las expresiones de (1.11) en la ecuación (1.10) y utilizando la relación (1.12), se encuentra la siguiente ecuación diferencial para la fase  $\theta(\rho)$ :

$$\theta'(\rho) = -[\text{Sen}^2\theta(\rho) + \alpha(\rho) \text{Cos}^2\theta(\rho) + \beta(\rho) \text{Sen}\theta(\rho) \text{Cos}\theta(\rho)] \quad (1.13)$$

Para encontrar la función  $A(\rho)$  hay que sustituir la expresión anterior (1.13) para la derivada de  $\theta(\rho)$  en la relación (1.12) y realizar la integración:

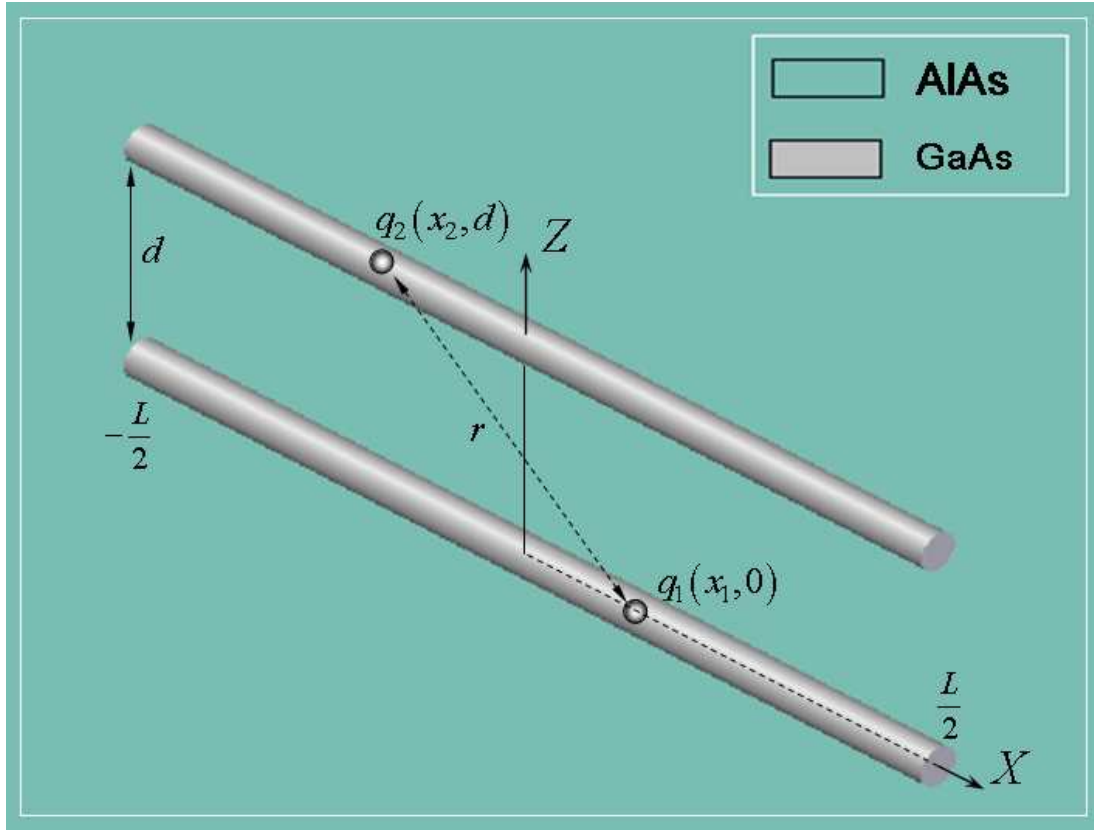
$$A(\rho) = \exp \left\{ \int_0^\rho [(1 - \alpha(\rho)) \text{Sen}\theta(\rho) \text{Cos}\theta(\rho) - \beta(\rho) \text{Sen}^2\theta(\rho)] d\rho \right\} \quad (1.14)$$

$$A(0) = 1$$

Como se puede ver, la expresión dada en (1.13) es una ecuación diferencial de primer orden que, con condiciones iniciales definidas, se transforma en un Problema de Cauchy. Como es bien sabido, este problema puede solucionarse utilizando diferentes métodos numéricos como por ejemplo, el Método de Runge Kutta, el cual ha sido empleado en este trabajo.

## MODELO TEÓRICO

### 2.1 MODELO MATEMÁTICO



**Fig. 1.** Sistema de hilos cuánticos con una partícula en cada uno.

El sistema que se analiza en esta investigación consiste de dos hilos cuánticos idénticos paralelos de material GaAs sumergidos en una matriz de AlAs (Fig. 1). Hilos orientados a lo largo del eje X se encuentran acoplados verticalmente (a lo largo del eje Z), y están separados por una distancia  $d$ . Se supone que cada hilo contiene sólo una partícula y además, que el potencial de confinamiento a lo largo de los ellos es parabólico y puede escribirse de la siguiente forma:

$$V_c(x_i) = \frac{1}{2} m_i \omega^2 x_i^2 \quad (2.1)$$

Además, se supone que la longitud de los hilos es suficientemente grande y el modelo de hilos cuánticos de longitud infinita es adecuado.

---

## 2.2 PARÁMETROS DEL MATERIAL

En el trabajo se considera el modelo con salto infinito entre las bandas de conducción en las fronteras de los hilos (junturas GaAs/AlAs) y por eso los parámetros físicos se toman del material correspondiente a la región interior (GaAs) de los QWWs debido a que el confinamiento hace que la partícula se encuentre fundamentalmente en esta región. Además, se supone que los hilos son suficientemente angostos y que los desplazamientos de las partículas en la dirección transversal de los hilos son despreciables. Por esta razón, en el trabajo se considera el modelo unidimensional, en el cual las posiciones de partículas se definen solamente por sus coordenadas  $x_1$  y  $x_2$ .

Los parámetros utilizados en los cálculos son: ambas masas efectivas de las partículas se toman iguales al correspondiente valor del electrón en material GaAs  $m_1 = m_2 = m^* = 0.0665m_e$ , siendo  $m_e$  la masa del electrón libre; la permitividad dieléctrica  $\epsilon = 15.2$ . El Radio de Bohr Efectivo correspondiente a estos parámetros del material es  $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2 \approx 9.84nm$ , el Rydberg Efectivo es  $Ry^* = e^2 / 2a_0^2 \epsilon \approx 5.83meV$ .

El uso del radio de Bohr y de Rydberg efectivo como las unidades de la longitud y de la energía, respectivamente, tiene sus ventajas, pues permiten liberar al Hamiltoniano de todo tipo de constantes, lo cual se hace conveniente en la respectiva programación.

---

## 2.3 HAMILTONIANO DEL SISTEMA

De acuerdo al modelo propuesto, se formula el Hamiltoniano del sistema en el marco de la aproximación de masa efectiva como:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_c(x_i) \right] + V(x_1 - x_2, \tau), \quad (2.2)$$

siendo  $V_c(x_i)$  potenciales de confinamiento parabólicos dados por la ecuación. (2.1). El término  $V(x, \tau)$ , representa la interacción coulombiana entre las dos partículas y tiene la siguiente forma:

$$V(x, \tau) = \frac{e^2 \tau}{\epsilon \sqrt{x^2 + d^2}}, \quad (2.3)$$

donde  $d$  es la distancia de separación entre los hilos. En esta ecuación se ha introducido un parámetro ( $\tau$ ) para considerar dos casos,  $\tau=1$  para la repulsión y  $\tau=-1$  para la atracción.

Utilizando unidades adimensionales, el Hamiltoniano renormalizado (2.4) se reduce a la forma:

$$\tilde{H}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tau) = \sum_{i=1}^2 \left[ -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_i^2} + \tilde{V}_c(\tilde{x}_i) \right] + \tilde{V}(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2, \tau), \quad (2.4)$$

donde  $\tilde{H} = H/Ry^*$ ,  $\tilde{x}_i = x_i/a_0^*$ ,  $i=1,2$  y los términos de los potenciales de interacción electrostática y de confinamiento renormalizados son:

$$\tilde{V}(\tilde{x}, \tau) = \frac{2\tau}{\sqrt{\tilde{x}^2 + \tilde{d}^2}}; \quad \tilde{d} = d/a_0^* \quad (2.5)$$

$$\tilde{V}_c(\tilde{x}_i) = \frac{\tilde{w}^2 \tilde{x}_i^2}{4}; \quad \tilde{w} = \hbar w/Ry^*; \quad i=1,2 \quad (2.6)$$

## 2.4 SEPARACIÓN DE VARIABLES EN ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

La ecuación de Schrödinger para el sistema formulado en este trabajo nos lleva a un problema de Sturm-Liouville con valores propios  $E$  y funciones propias  $\psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ :

$$\tilde{H}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)\psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = \tilde{E}\psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2), \quad (2.7)$$

donde  $\tilde{E} = E/Ry^*$  es la energía del sistema en unidades adimensionales y  $\psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ , es la función de onda que describe la densidad de distribución de probabilidades de las dos partículas consideradas. La correspondiente ecuación de Schrödinger en forma explicita es:

$$-\frac{\partial^2 \psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)}{\partial \tilde{x}_1^2} - \frac{\partial^2 \psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)}{\partial \tilde{x}_2^2} + \left( \frac{\tilde{w}^2}{4} (\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2) + \frac{2}{\sqrt{(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)^2 + \tilde{d}^2}} \right) \psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = \tilde{E}\psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) \quad (2.8)$$

Ahora, introduciendo coordenadas para el movimiento del centro de masa  $X_c = \frac{\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2}{2}$ , y para el movimiento relativo  $x_r = \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$ , del sistema considerado, y teniendo en cuenta que

$$\tilde{V}_c(\tilde{x}_1) + \tilde{V}_c(\tilde{x}_2) = \frac{\tilde{w}^2 (\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2)}{4} = \frac{\tilde{w}^2 \left( 2X_c^2 + \frac{x_r^2}{2} \right)}{4} = 2\tilde{V}_c(X_c) + \frac{\tilde{V}_c(x_r)}{2}$$

se puede reducir el

Hamiltoniano (2.4) a la siguiente forma:

$$\tilde{H}(x_r, X_c) = -2\frac{\partial^2}{\partial x_r^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X_c^2} + 2V_c(X_c) + \frac{1}{2}V_c(x_r) + V(x_r, \tau), \quad (2.9)$$

Se ve que el Hamiltoniano (2.9) es separable y por eso la función de onda, solución de la ecuación (2.7) es un producto de dos funciones; una que depende de la coordenada del centro de masa, y la otra de la coordenada relativa:

$$\psi(X_c, x_r) = \varphi_1(X_c)\varphi_2(x_r) \quad (2.10)$$

Las respectivas ecuaciones de Schrödinger para las funciones  $\varphi_1(X_c)$  y  $\varphi_2(x_r)$  son:

$$-\frac{1}{2}\varphi_1''(X_c) + \frac{1}{2}\tilde{w}^2 X_c^2 \varphi_1(X_c) = E_1 \varphi_1(X_c) \quad (2.11)$$

$$-2\varphi_2''(x_r) + \left( \frac{1}{8}\tilde{w}^2 x_r^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{x_r^2 + \tilde{d}^2}} \right) \varphi_2(x_r) = E_2 \varphi_2(x_r) \quad (2.12)$$

Al resolver los problemas de valores propios (2.11) y (2.12) se puede definir la energía de dos partículas como:

$$E = E_1 + E_2 \quad (2.13)$$

La ecuación (2.11) que describe el movimiento de Centro de Masa, es una ecuación análoga a la de un Oscilador Armónico, y por tanto las energías y funciones de onda correspondientes se pueden escribir como:

$$E_1 = E_1^{(N)} = \tilde{w} \left( N + \frac{1}{2} \right), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

$$\varphi_1(X_c) = \varphi_1^{(N)}(X_c) = H_N(X_c \sqrt{\tilde{w}}) \exp\left(-\frac{\tilde{w} X_c^2}{2}\right),$$

donde  $H_N(x)$  es un polinomio de Hermite de orden  $N$ .

La ecuación (2.12) describe el movimiento Relativo, y dicha ecuación no posee solución analítica, razón por la cual se debe hacer uso de algún método numérico para solucionar el problema.

---

## 2.5 MÉTODO DE SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN PARA EL MOVIMIENTO RELATIVO

La ecuación (2.12) puede ser escrita de la siguiente forma:

$$-\varphi_2''(x_r) + V_{eff}(x_r)\varphi_2(x_r) = \tilde{E}\varphi_2(x_r), \quad V_{eff}(x_r) = \left( \frac{1}{16}\tilde{w}^2 x_r^2 + \frac{\tau}{\sqrt{x_r^2 + \tilde{d}^2}} \right), \quad \tilde{E} = \frac{E_2}{2} \quad (2.15)$$

Es fácil notar que esta ecuación es un caso particular de la ecuación (1.10), por eso el Método de Barrido Trigonométrico descrito en la sección (1.5) también es aplicable para este problema, usando para este caso las siguientes notaciones:

$$\alpha(x_r) = 0, \quad \beta(x_r) = \tilde{E} - V_{eff}(x_r) \quad (2.16)$$

Debido a la paridad del potencial efectivo en la ecuación (2.15) existen dos grupos de soluciones con diferentes simetrías, pares e impares. En ambos casos es suficiente encontrar la solución sólo en la región de coordenadas positivas, completando la ecuación (2.15) con una condición adicional en el punto  $x_r = 0$ ,  $\varphi_2'(x_r = 0) = 0$  para las soluciones pares y  $\varphi_2(x_r = 0) = 0$  para las soluciones impares. Además, las funciones de onda en ambos casos deben anularse en el infinito. Sin embargo, en la realización práctica de este algoritmo, el proceso de integración se trunca en el punto final  $x_{fin}$ . La condición de frontera para funciones de onda en este punto se acepta como  $\varphi_2(x_r = x_{fin}) = 0$ .

Las soluciones del problema (2.15) se caracterizan con dos números cuánticos, uno que representa la paridad ( $\pm$ ), y otro que representa el número de nodos  $n$  que tiene la función de onda, y por eso en adelante se denotará como  $\varphi_2^{(n,+)}(x_r)$  o  $\varphi_2^{(n,-)}(x_r)$  y las energías correspondientes  $E_2^{(n,+)}$  o  $E_2^{(n,-)}$ . En el marco del método de barrido trigonométrico la función de onda correspondiente se busca de la forma:

$$\varphi_2^{(n,\pm)}(x_r) = A_2^{(n,\pm)}(x_r) \cos \theta_2^{(n,\pm)}(x_r), \quad \varphi_2^{(n,\pm)'}(x_r) = A_2^{(n,\pm)}(x_r) \sin \theta_2^{(n,\pm)}(x_r), \quad 0 < x_r < x_{fin} \quad (2.17)$$

Las fases  $\theta_2^{(n,\pm)}(x_r)$  en la ecuación (2.17) son soluciones del Problema de Cauchy:

$$\theta'(x_r) = -\sin^2 \theta(x_r) - \left( \frac{E_2^{(n,\pm)}}{2} - V_{eff}(x_r) \right) \cos^2 \theta(x_r); \quad \theta(0) = \begin{cases} 0, & \text{if } \theta(x_r) = \theta_2^{(n,+)}(x_r) \\ \pi/2, & \text{if } \theta(x_r) = \theta_2^{(n,-)}(x_r) \end{cases} \quad (2.18)$$

La solución del problema (2.18) en realidad es una función de dos variables, de coordenada  $x_r$  y de la energía desconocida  $E_2^{(n,\pm)}$ , la cual entra en la ecuación (2.18) como un parámetro. Por eso se puede usar la notación para esta solución como la función  $\theta(x_r, E_2^{(n,\pm)})$ . El valor real de este parámetro se puede encontrar de la segunda condición de frontera en el punto  $x_{fin}$ . Una vez encontrada la solución del Problema de Cauchy (2.18), se puede sugerir que  $\theta(x_r, E_2^{(n,\pm)})$ , cumpla la condición:

$$\theta(x_{fin}, E_2^{(n,\pm)}) = -\pi/2 - \pi n; \quad n = \begin{cases} 0, 2, 4, \dots & \text{if } \theta(x_r) = \theta_2^{(n,+)}(x_r) \\ 1, 3, 5, \dots & \text{if } \theta(x_r) = \theta_2^{(n,-)}(x_r) \end{cases} \quad (2.19)$$

En el algoritmo aquí presentado, la función  $\theta(x_r, E_2^{(n,\pm)})$  es la solución del Problema de Cauchy (2.18) y para definir de esta manera la función se resuelve la ecuación trascendente (2.19) utilizando el método de bisección con el fin encontrar los niveles energéticos  $E_2^{(n,\pm)}$ . Una vez encontrados los valores  $E_2^{(n,\pm)}$  se resuelve otra vez la ecuación (2.18) para hallar la función de fase  $\theta_2^{(n,\pm)}(x_r)$ . la cual posteriormente se utiliza para el cálculo del coeficiente  $A_2^{(n,\pm)}(x_r)$

$$A_2^{(n,\pm)}(x_r) = \exp \left\{ \int_0^{x_r} \left( 1 - \frac{E_2^{(n,\pm)}}{2} + V_{eff}(x) \right) \sin \theta_2^{(n,\pm)}(x) \cos \theta_2^{(n,\pm)}(x) dx \right\} \quad (2.20)$$

Las fórmulas finales para función de onda de dos partículas  $\psi_{N,n}(X_c, x_r)$  y para los niveles energéticos  $\tilde{E}_{N,n}$  son:

$$\psi_{N,n}(X_c, x_r) = H_N(X_c \sqrt{\tilde{w}}) \exp\left(-\frac{\tilde{w}X_c^2}{2}\right) \phi_2^{(n)}(x_r); \quad \tilde{E}_{N,n} = \tilde{w}\left(N + \frac{1}{2}\right) + E_2^{(n,\pm)}; \quad n, N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.21)$$

En adelante, para analizar el efecto de confinamiento sobre el espectro energético de dos partículas se utilizará en calidad de la característica de confinamiento parabólico la “longitud del oscilador” definida como:

$$l = \frac{1}{\sqrt{\tilde{w}}} = \sqrt{\frac{Ry^*}{\hbar w}} \quad (2.22)$$

El parámetro  $l$  se puede asociar con la longitud efectiva del QWW.

## ANÁLISIS DE RESULTADOS

---

En esta sección se presentan los resultados obtenidos aplicando los métodos planteados en las secciones anteriores. En la sección 3.1 se analizan los casos límites cuando  $l \rightarrow 0$  y  $l \rightarrow \infty$ , para los cuales se pueden obtener las soluciones analíticas que permitirán posteriormente realizar el chequeo de la precisión de los resultados obtenidos a través del software elaborado. En la sección 3.2 se analizará el efecto del tamaño de los hilos asociado con el parámetro  $l$ , sobre el espectro energético del sistema para los dieciséis primeros niveles. Adicionalmente, se estudiará el efecto de variación de la distancia de separación,  $d$ , entre los hilos sobre el espectro energético del sistema. Finalmente, en la sección 3.3 se analizará el efecto de campo eléctrico.

---

### 3.1 SOLUCIONES EXACTAS

Cuando el confinamiento es extremadamente fuerte  $l \rightarrow 0$ , la energía del sistema de dos partículas definida a través del Hamiltoniano (2.4) se incrementa ilimitadamente debido al aumento, también ilimitado, del termino correspondiente a la energía cinética, que según la relación de incertidumbre es proporcional a  $1/l^2$ . Por esta razón, el análisis teórico se simplifica al usar juntamente con la expresión (2.4) el Hamiltoniano reescalado (multiplicado por el cuadrado de la longitud del hilo):

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -\sum_{i=1}^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_i^2} + \frac{1}{4} \tilde{x}_i^2 \right] + \frac{2\tau l}{\sqrt{(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)^2 + (\tilde{d}/l)^2}}, \\ \tilde{H} &= \tilde{H} \cdot l^2 = H/\hbar\omega, \\ \tilde{x}_i &= \tilde{x}_i/l = \frac{x \sqrt{\hbar\omega/Ry^*}}{a_0^*}, \\ l &= 1/\sqrt{\tilde{\omega}} = \sqrt{Ry^*/\hbar\omega} \end{aligned} \tag{3.1}$$

Se puede ver que existen dos casos límites para los cuales el problema de valores propios para el Hamiltoniano (3.1) se puede resolver en forma analítica. Uno de estos casos corresponde al límite cuando  $l \rightarrow 0$ , cuando el Hamiltoniano (3.1) toma la siguiente forma:

$$\tilde{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_2^2} + \frac{1}{4}(\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2), \quad (3.2)$$

Este Hamiltoniano describe un sistema de dos Osciladores Armónicos Unidimensionales e Independientes para el cual los niveles energéticos son:

$$\tilde{E}_{n_1, n_2} \xrightarrow{l \rightarrow 0} n_1 + n_2 + 1; \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3)$$

Se puede demostrar que en coordenadas de centro de masas las relaciones (3.2) y (3.3) adquieren una forma similar:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} X^2 + \frac{1}{8} x^2 \quad (3.2a)$$

$$\tilde{E}_{N, n} \xrightarrow{l \rightarrow 0} N + n + 1; \quad n, N = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3a)$$

Los valores correspondientes de las energías reescaladas para diferentes niveles se presentan en la Tabla 1.

$n$	$N$	$\tilde{E}_{N, n}$	$n$	$N$	$\tilde{E}_{N, n}$
0	0	1	0	2	3
1	0	2	1	2	4
2	0	3	2	2	5
3	0	4	3	2	6
0	1	2	0	3	4
1	1	3	1	3	5
2	1	4	2	3	6
3	1	5	3	3	7

**Tabla 1.** Energías de diferentes niveles cuando  $l \rightarrow 0$

Por otro lado, cuando  $l \rightarrow \infty$  los términos en el Hamiltoniano (3.1) correspondientes al confinamiento parabólico se hacen despreciables en comparación con el término de la interacción electrostática y por eso el Hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$\tilde{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_2^2} + \frac{2\tau l}{\sqrt{(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)^2}}, \quad (3.4)$$

Introduciendo coordenadas de centro de masa y relativa  $\left( \tilde{X} = \frac{(\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2)}{2}, \tilde{x} = \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \right)$  se puede separar variables:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{2\tau \cdot l}{\tilde{x}}, \quad (3.5)$$

El comportamiento de los niveles energéticos correspondientes al Hamiltoniano (3.5) con crecimiento ilimitado del parámetro  $l$  están definidos principalmente por el último término en dicho Hamiltoniano y es diferente para los casos de repulsión ( $\tau > 0$ ) y atracción ( $\tau < 0$ ). Sin embargo, en ambos casos las energías dependen solo de la distancia relativa y no de la posición de centro de masa. En el caso de repulsión la separación reescalada  $\tilde{x}$  tiende a ser la máxima posible de tal manera que  $x \rightarrow \alpha \cdot l$ ;  $\tilde{x} \rightarrow \alpha$  y por esa razón las energías crecen con el aumento del parámetro  $l$  linealmente

$$E_{N,n}(l) \xrightarrow{l \rightarrow \infty} E_{N,n}(l=0) + \frac{l}{\alpha}; \quad n, N = 1, 2, \dots; \quad \tau > 0 \quad (3.6a)$$

Aquí los números cuánticos  $n$  y  $N$  corresponden a los movimientos relativo y de centro de masas respectivamente y el parámetro  $\alpha$  es la razón entre la separación relativa y la longitud del hilo.

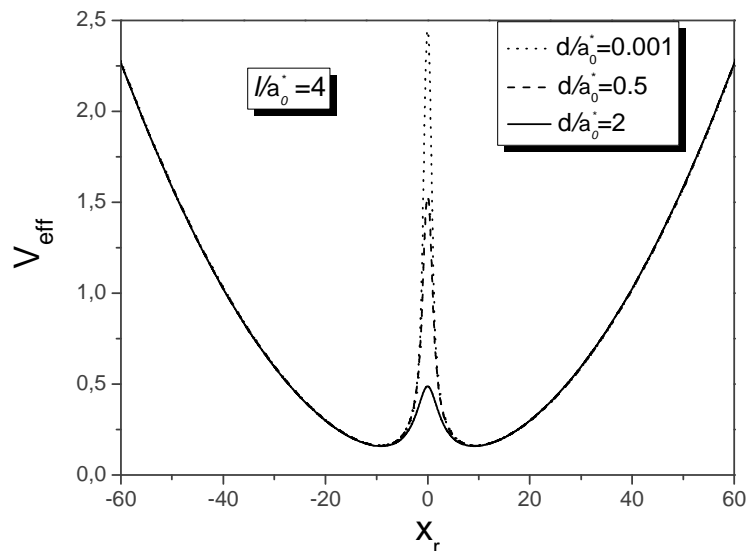
En el caso de atracción, la separación entre las partículas es muy pequeña en comparación con la longitud del hilo ( $\tilde{x} \rightarrow 0$  cuando  $l \rightarrow \infty$ ) y por eso el segundo término en (3.4) correspondiente a la energía cinética tiene el mismo orden que el tercero y el Hamiltoniano (3.5) toma la forma correspondiente al Átomo Unidimensional con un solo electrón y con la carga  $Z = l/2$  del núcleo para el cual las energías dependen del parámetro  $l$  en una forma parabólica:

$$E_{N,n}(l) \xrightarrow{l \rightarrow \infty} E_{N,n}(l=0) - \frac{l^2}{8(n-1)^2}; \quad n, N = 1, 2, \dots \quad (3.6b)$$

El potencial efectivo para el movimiento relativo definido a través de relación (2.15) puede reescribirse, utilizando en la calidad de parámetro de confinamiento la longitud del oscilador, como

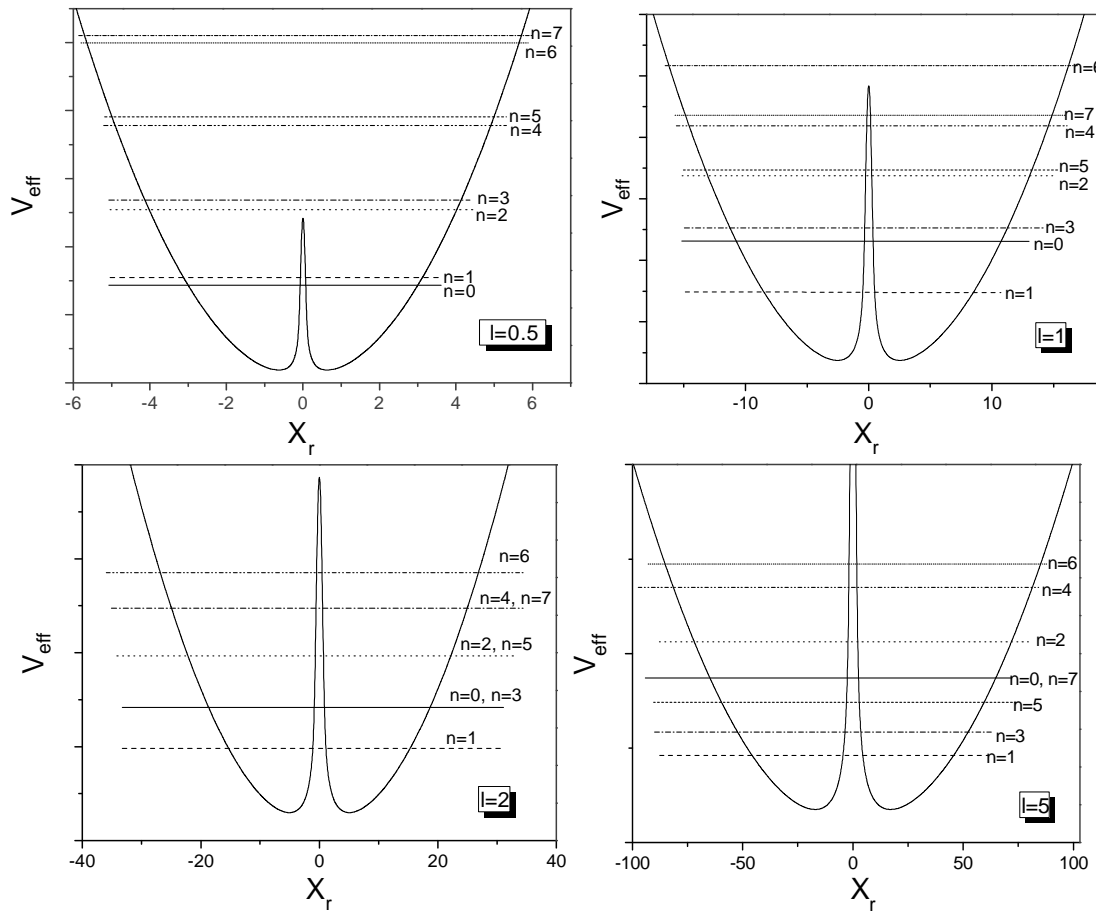
$$V_{\text{eff}}(x_r) = \left( \frac{1}{16} \frac{x_r^2}{l^4} + \frac{\tau}{\sqrt{x_r^2 + \tilde{d}^2}} \right) \quad (3.7)$$

En adelante se considerará sólo el caso de 2 electrones para el cual  $\tau = 1$  y la curva de potencial tiene un sólo mínimo en el punto  $x_r = 0$ , si  $\tilde{d} > 2l^{4/3}$  y dos mínimos en los puntos  $x_{\pm} = \pm \sqrt{4l^{8/3} - \tilde{d}^2}$  si  $\tilde{d} < 2l^{4/3}$ . En la Fig.2 se presentan las curvas de potencial correspondientes a varios conjuntos de  $l$  y  $\tilde{d}$ .



**Fig. 2.** Curvas de potencial para el movimiento relativo

Comparando las curvas en esta figura se puede ver que con el aumento de la relación  $\tilde{d}/l$  la forma del potencial se transforma rápidamente desde un perfil típico para un doble pozo hasta otro puro parabólico. Como muestran los resultados de los cálculos esta transformación se produce en una forma bastante brusca que resulta en los cambios del orden de los niveles energéticos de manera abrupta.



**Fig. 3.** Niveles energéticos correspondientes al movimiento relativo en hilos cuánticos con diferentes parámetros  $l$  y separación entre ellos  $\tilde{d} = 0.001$

En la Fig.3 se presentan los niveles energéticos correspondientes al movimiento relativo en los hilos cuánticos con diferentes parámetros  $l$  y cuando la separación relativa entre los hilos es muy pequeña ( $\tilde{d} = 0.001$ ). Se puede ver como evolucionan los niveles energéticos cuando la longitud efectiva (el parámetro  $l$ ) se incrementa desde valores muy pequeños hasta valores muy grandes. El cambio, en primer lugar, está relacionado con la reagrupación de los niveles según los números cuánticos a medida que el tamaño de los hilos se aumenta. Cuando el parámetro  $l$  es muy pequeño, el

confinamiento es muy fuerte y los niveles energéticos se ubican en la parte superior de las energías donde la barrera entre dos pozos es muy angosta. Esta barrera vertical en el punto  $x_r = 0$  se debe a la repulsión electrostática y su ancho es considerable en la parte inferior disminuyéndose a medida que la energía crece. Como el ancho de la barrera en la parte superior es muy pequeño las partículas con facilidad penetran desde parte izquierda a la derecha y viceversa, en la región superior de las energías. Por esta razón, cuando el parámetro  $l$  es muy pequeño el potencial de confinamiento puede considerarse como puramente parabólico. En este caso los niveles energéticos son casi equidistantes y su ordenamiento corresponde al número del número cuántico  $n$ .

Cuando el parámetro  $l$  crece el confinamiento disminuye, los niveles energéticos bajan y entran en las regiones donde el ancho de la barrera se hace notable. Esto se puede observar en la Fig.3. Por eso, a medida que  $l$  decrece, el tunelamiento a través de la barrera se hace cada vez más débil y la probabilidad de encontrar la partícula en la parte central del potencial (cerca del punto  $x_r = 0$ ) disminuye haciendo que los niveles vecinos pares e impares se acerquen y casi se fusionen. Si el incremento de  $l$  sigue, los niveles correspondientes se invierten del manera que los niveles impares se ubican por debajo de los pares. Cada vez que el parámetro  $l$  crece, todos los niveles bajan, pero los niveles impares bajan más rápido que los pares. Al final, cuando el parámetro  $l$  se hace muy grande los niveles se reagrupan de tal manera que forman dos subconjuntos, uno más bajo que comprende todos los niveles impares y otro con todos los niveles pares. Estos cambios en el espectro energético relacionados con el reordenamiento de los niveles y su reagrupación con la variación de la longitud de los hilos se llaman efecto de tamaño.

---

### **3.2 EFECTO DEL TAMAÑO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DEL SISTEMA**

Inicialmente, para analizar la influencia del movimiento relativo sobre el reordenamiento y la reagrupación de los niveles energéticos se ha considerando solo los

niveles con  $N = 0$ . En la Fig. 4 se presentan los resultados del cálculo de las energías de los niveles energéticos  $\tilde{E}_{0,n}$  con diferentes  $n$  en función de la longitud  $l$  de los hilos para el caso cuando la separación entre ellos es muy pequeña ( $\tilde{d} = 0.001$ ).

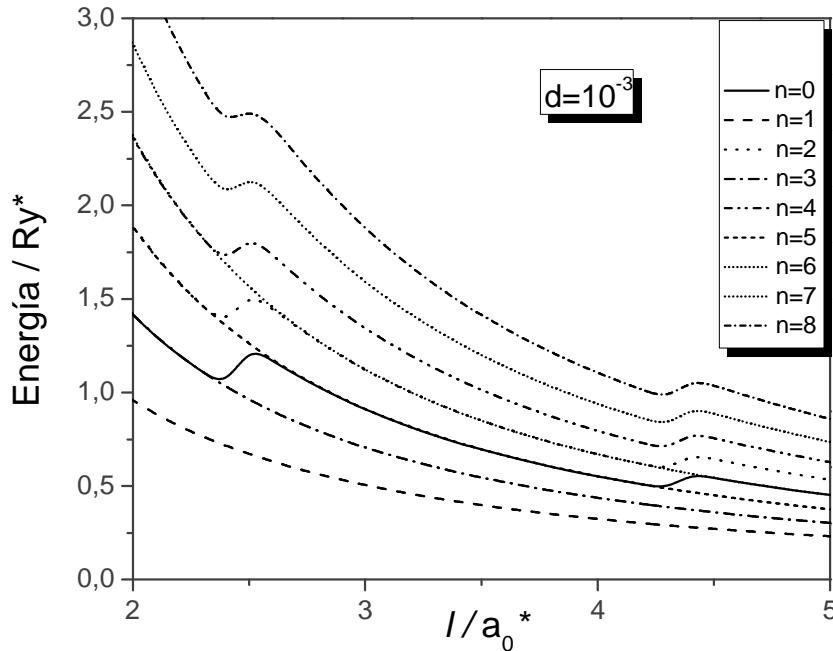


Fig. 4. Energías  $\tilde{E}_{0,n}$  para diferentes niveles  $n$  en función  $l$  para  $\tilde{d} = 0.001$

En el gráfico se presenta solo una parte del cálculo realizado para el intervalo de las longitudes intermedias  $2 < l < 5$ . Al inicio de este intervalo el nivel básico  $n = 0$  ya está por arriba del primer nivel impar  $n = 1$  y está unido con el siguiente nivel impar  $n = 3$ . Cuando la longitud de los hilos crece hasta el valor  $l = 2.3$  se observa un desacoplamiento de los niveles  $n = 0$  y  $n = 3$  debido a un salto brusco del nivel básico  $n = 0$  hacia arriba. Este salto conduce a la fusión de los niveles  $n = 0$  y  $n = 5$  los cuales posteriormente con el aumento del parámetro  $l$  decaen unidos. Cuando en adelante la longitud de los hilos crece hasta el valor  $l = 4.3$  el nivel básico salta otra vez hacia arriba y se une esta vez con el nivel impar  $n = 7$ . Un comportamiento similar muestran los otros niveles pares. Es interesante subrayar que los saltos de todos niveles pares ocurren simultáneamente para los mismos valores de las longitudes de los hilos. Esto también confirma los resultados de cálculo de las energías presentada en la Tabla 2, donde las filas correspondientes a los momentos de los saltos están marcados con negrilla.

$l$	$n=0$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$	$n=8$
0,4	<b>14,58914</b>	<b>15,17715</b>	<b>26,17193</b>	<b>27,28933</b>	<b>37,97652</b>	<b>39,55789</b>	<b>49,9218</b>	<b>51,92046</b>	<b>62,10804</b>
0,5	<b>10,39783</b>	<b>10,11575</b>	<b>18,23673</b>	<b>17,81935</b>	<b>26,10751</b>	<b>25,63905</b>	<b>33,99792</b>	<b>33,52877</b>	<b>42,04921</b>
0,6	10,69105	7,29787	15,58162	12,61721	20,77001	18,02648	26,13265	23,49063	31,79379
0,7	8,71349	5,55789	12,34126	9,4457	16,0954	13,40525	19,98009	17,40932	24,1319
0,8	6,96273	4,40229	9,77091	7,36477	12,64631	10,38576	15,61201	13,44377	18,79223
0,9	5,68105	3,59215	7,91886	5,9227	10,19742	8,30181	12,54167	10,7123	15,06005
1,0	4,75203	3,0000	6,59384	4,88024	8,46257	6,80133	10,38156	8,74941	12,44833
1,1	4,02883	2,5526	5,56603	4,10084	7,1254	5,68386	8,72867	7,29038	10,46274
1,2	3,45755	2,20533	4,75476	3,50192	6,07113	4,8284	7,42679	6,17555	8,89839
1,3	3,0017	1,92969	4,10889	3,03107	5,233	4,15836	6,39257	5,30399	7,65522
1,4	2,63309	1,70674	3,588	2,6537	4,55798	3,6233	5,56011	4,60928	6,65414
1,5	2,33158	1,5235	3,16337	2,34625	4,00871	3,18889	4,8834	4,04628	5,84065
1,6	2,08178	1,3708	2,81278	2,09216	3,55608	2,83113	4,32642	3,58343	5,17151
1,7	1,87263	1,24199	2,52038	1,87955	3,17948	2,53277	3,86375	3,19811	4,61648
1,8	1,69509	1,13219	2,27284	1,69969	2,86109	2,28119	3,47286	2,87377	4,1475
1,9	1,54305	1,0377	2,06145	1,54605	2,58958	2,06697	3,13976	2,59807	3,7479
2,0	1,41153	0,95571	1,87897	1,41367	2,35544	1,88297	2,85253	2,36164	3,40306
2,1	1,29721	0,88402	1,72082	1,29872	2,15282	1,72366	2,60417	2,15728	3,10496
2,2	1,19712	0,82093	1,5827	1,19818	1,97612	1,58475	2,38774	1,97938	2,84524
2,3	<b>1,10946</b>	<b>0,76504</b>	<b>1,46236</b>	<b>1,1097</b>	<b>1,82269</b>	<b>1,46285</b>	<b>2,20041</b>	<b>1,82351</b>	<b>2,62126</b>
2,4	<b>1,03268</b>	<b>0,71527</b>	<b>1,35767</b>	<b>1,03138</b>	<b>1,68986</b>	<b>1,35524</b>	<b>2,03898</b>	<b>1,68612</b>	<b>2,42936</b>
2,5	1,24592	0,67072	1,53826	0,96167	1,83817	1,25974	2,16074	1,56437	2,52087
2,6	1,16944	0,63066	1,447	0,89933	1,73737	1,17455	2,05912	1,45594	2,42788
2,7	1,09498	0,59447	1,35328	0,84332	1,62438	1,09822	1,9262	1,35892	2,27353
2,8	1,02712	0,56165	1,26753	0,7928	1,52034	1,02953	1,80248	1,27175	2,12763
2,9	0,96609	0,53178	1,19067	0,74704	1,42746	0,96748	1,6926	1,19312	1,99897
3,0	0,91029	0,5045	1,12028	0,70546	1,34208	0,91123	1,59095	1,12192	1,87884
3,1	0,85938	0,47951	1,05606	0,66754	1,26412	0,86005	1,49796	1,05724	1,76863
3,2	0,81283	0,45654	0,99737	0,63285	1,19287	0,81334	1,41288	0,99829	1,66764
3,3	0,77017	0,43538	0,94365	0,60103	1,12767	0,77058	1,33503	0,9444	1,57517
3,4	0,73101	0,41582	0,89439	0,57175	1,06792	0,73134	1,26369	0,895	1,49046
3,5	0,69496	0,39771	0,84911	0,54475	1,01306	0,69522	1,19823	0,84959	1,41276
3,6	0,66171	0,3809	0,8074	0,51979	0,96255	0,6619	1,13801	0,80775	1,34134
3,7	0,63095	0,36526	0,76885	0,49665	0,91591	0,63108	1,08241	0,7691	1,27538
3,8	0,60242	0,35068	0,73315	0,47517	0,87273	0,60252	1,03094	0,73333	1,21433
3,9	0,57592	0,33707	0,7	0,45518	0,83266	0,57599	0,98317	0,70014	1,15763
4,0	0,55125	0,32433	0,66919	0,43654	0,79544	0,55131	0,93881	0,66929	1,105
4,1	0,52825	0,31238	0,64049	0,41913	0,7608	0,52829	0,89754	0,64057	1,05605
4,2	0,5068	0,30117	0,61377	0,40283	0,72859	0,5068	0,85924	0,61377	1,01074
4,3	<b>0,48678</b>	<b>0,29062</b>	<b>0,5889</b>	<b>0,38756</b>	<b>0,6987</b>	<b>0,48669</b>	<b>0,82382</b>	<b>0,58873</b>	<b>0,96899</b>
4,4	<b>0,56423</b>	<b>0,28069</b>	<b>0,66791</b>	<b>0,37323</b>	<b>0,78496</b>	<b>0,46785</b>	<b>0,91846</b>	<b>0,56529</b>	<b>1,067</b>
4,5	0,54291	0,27132	0,64287	0,35975	0,7566	0,45016	0,88798	0,54331	1,03776
4,6	<b>0,52244</b>	<b>0,26247</b>	<b>0,61834</b>	<b>0,34706</b>	<b>0,72765</b>	<b>0,43354</b>	<b>0,85409</b>	<b>0,52267</b>	<b>0,99847</b>

Tabla 2. Las energías  $\tilde{E}_{0,n}$  para diferentes niveles  $n$  en función  $l$  para  $\tilde{d} = 0.001$

En Fig. 5 se presentan las energías totales reescaladas (multiplicadas por el cuadrado de la longitud del hilo) de dos partículas (incluyendo la energía correspondiente al movimiento del centro de masas) para los 16 niveles más bajos en función de la longitud de hilos cuando la separación entre ellos es 0.001. La parte derecha de los gráficos corresponde al caso de dos electrones (repulsión), mientras la parte izquierda a un par electrón-hueco (atracción).

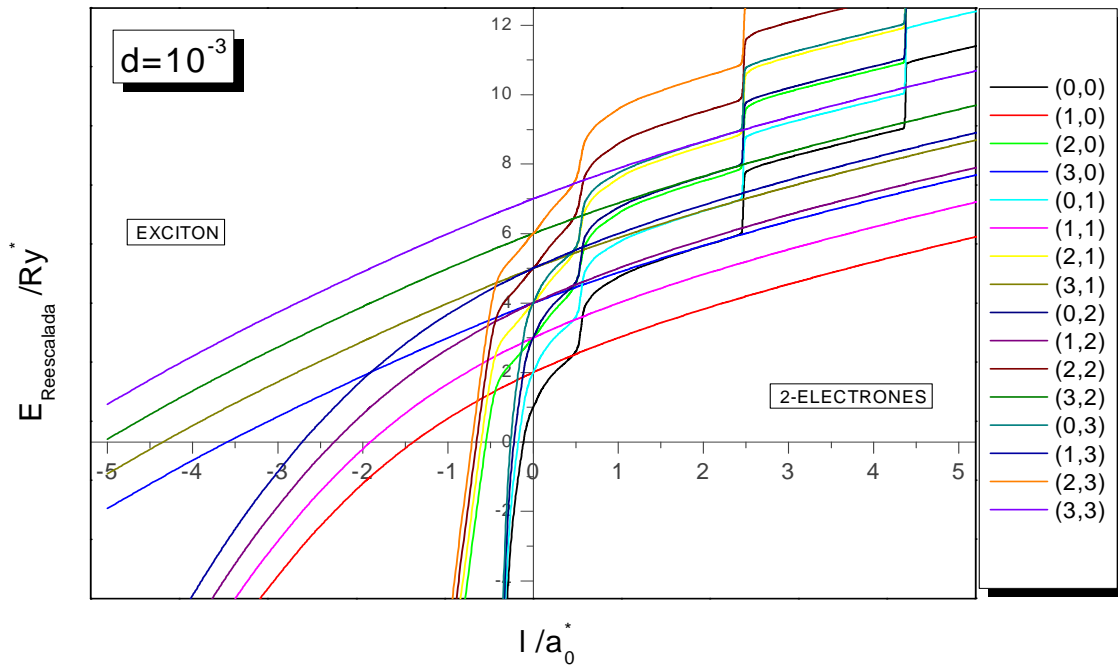


Fig. 5. Energías reescaladas  $\tilde{E}_{N,n}$  (multiplicadas por el cuadrado de la longitud del hilo) en función de  $l$  para  $\tilde{d} = 0.001$ . La parte izquierda corresponde al caso del par electrón-hueco y la parte derecha al caso de 2 electrones.

Primero hay que anotar que el comportamiento de las curvas en los casos limites cuando  $l \rightarrow 0$  y  $l \rightarrow \infty$  están en completa correspondencia con el análisis teórico realizado en la sección 3.1. Se ve que cuando  $l \rightarrow 0$  para todos niveles energéticos en la Fig.5 se cumplen las relaciones (3.3a). Además, en el otro extremo, cuando  $l \rightarrow \infty$  las curvas varían linealmente en el caso de dos electrones y en forma parabólica en el caso de un par electrón-hueco en total acuerdo con las fórmulas (3.6a) y (3.6b). Adicionalmente es interesante anotar que los niveles energéticos de un par electrón-

hueco en el límite  $l \rightarrow \infty$  se agrupan según el número cuántico  $n$  que ellos tienen. Esto también concuerda con nuestro análisis teórico y con la fórmula (3.6b).

Otra particularidad de las curvas presentadas en la Fig. 5 son los saltos de los niveles energéticos en el caso de 2 electrones los cuales producen sus reordenamientos y cruces de las curvas presentadas en Fig. 5. En contraste, los cruces similares de las curvas en la parte izquierda del gráfico correspondientes al caso de atracción se producen en una forma suave. Para presentar este resultado de forma más clara se ha desplegado en la Fig. 6 y las curvas similares solamente para 4 niveles más bajos.

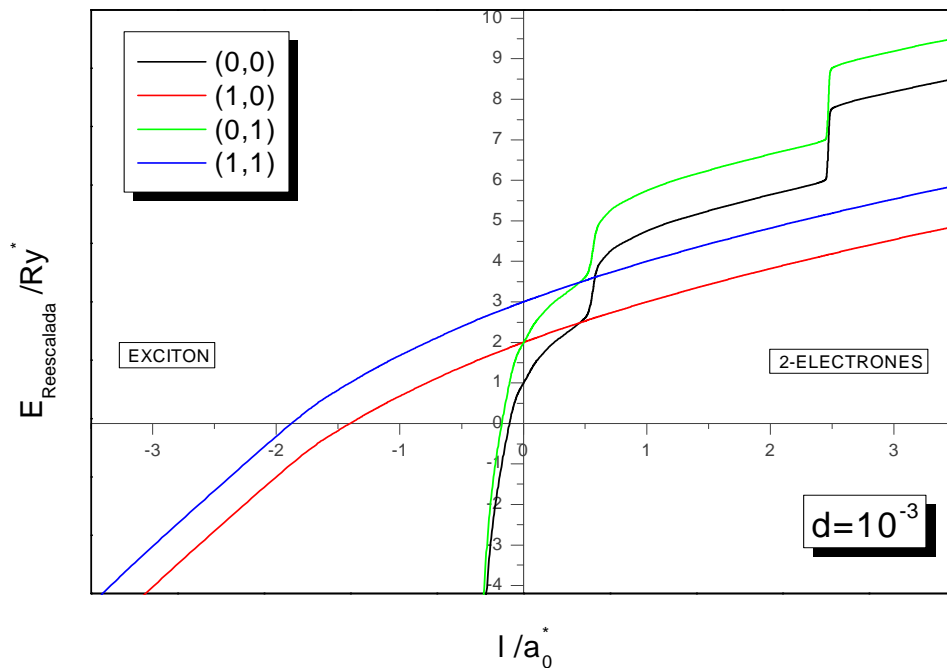


Fig. 6 Energías reescaladas  $\tilde{E}_{N,n}$  en función  $l$  para  $\tilde{d} = 0.001$ .

Como fue demostrado en la sección anterior los saltos de las curvas en la parte derecha se deben al aporte total de las energías correspondientes al movimiento relativo. Es interesante ver que los cambios en estos cruces de las curvas ocurren cuando la separación entre hilos se aumenta.

Con este fin en la Fig. 7 se han presentado las curvas similares para 4 niveles más bajos para dos distancias de separación entre los hilos más grandes.

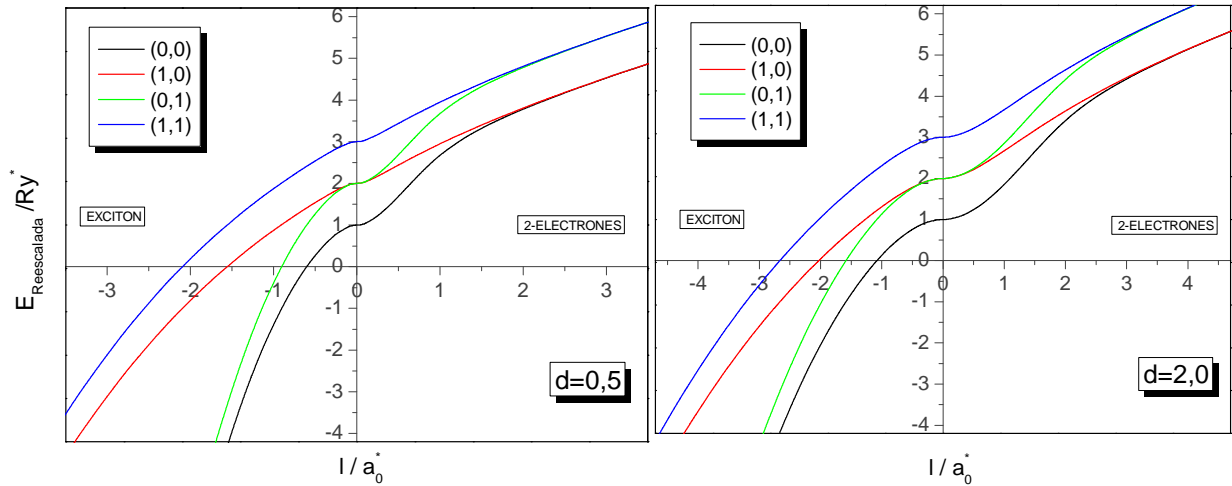


Fig. 7. Lo mismo que en Fig. 6, pero para  $\tilde{d} = 2.0$  y  $\tilde{d} = 0.5$

Analizando los resultados presentados en la Fig. 7 se puede concluir que el aumento de la distancia de la separación entre los hilos conduce a suavización de las curvas (desaparecen los saltos bruscos) y desaparición de las cruces entre las curvas. Esto se debe a la disminución del efecto de la interacción electrostática entre las partículas, ellas se comportan como dos partículas casi independientes cuando la distancia entre los hilos se hace suficientemente grande.

En conclusión en la Fig. 8 se han presentado las curvas similares para separaciones  $\tilde{d} = 0.5$  y  $\tilde{d} = 2.0$  para los primeros 16 niveles más bajos. Se puede ver que las tendencias mencionadas anteriormente son comunes para los niveles con mayores energías.

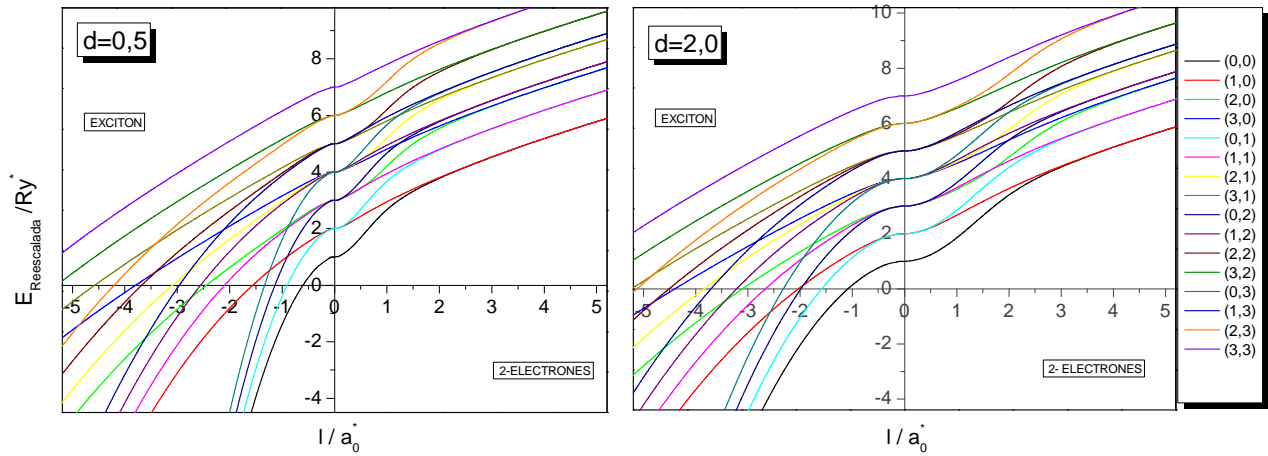


Fig. 8. Energías reescaladas  $\tilde{E}_{N,n}$  en función de  $l$  para  $\tilde{d} = 0.5$  y  $\tilde{d} = 2.0$

### 3.3 EFECTO DE CAMPO ELÉCTRICO

En esta investigación también se analiza el efecto de campo eléctrico aplicado a lo largo de los hilos en direcciones opuestas (Fig. 9), sobre el espectro energético del sistema.

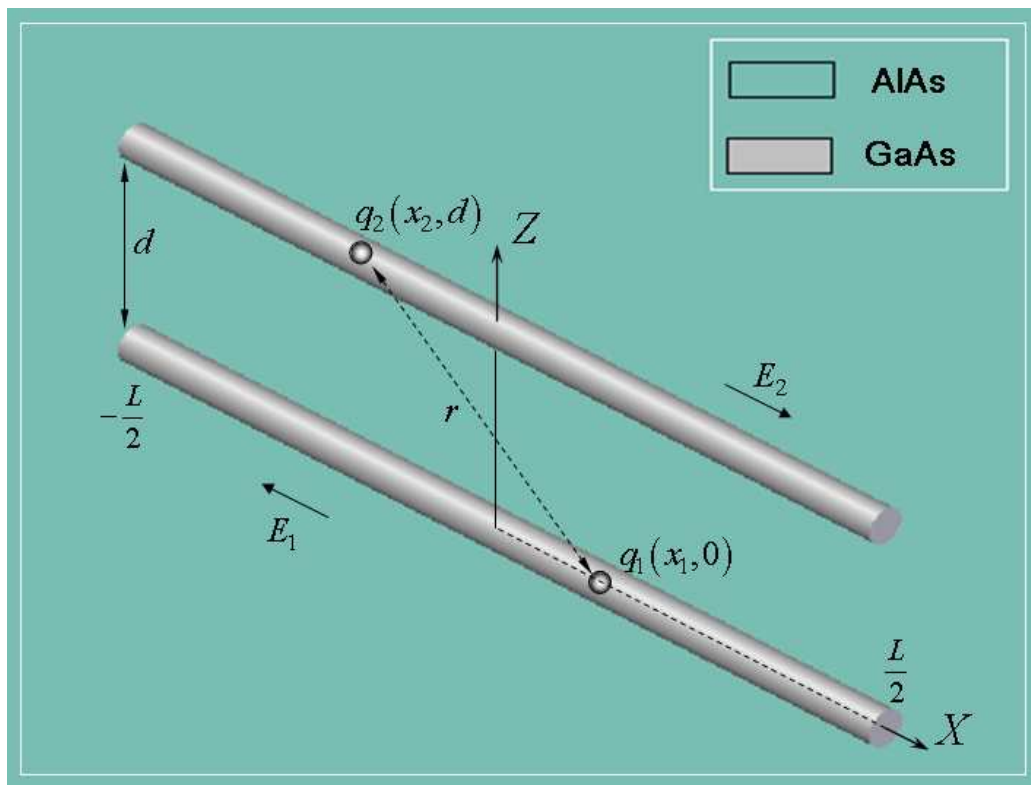


Fig. 9. Sistema de hilos cuánticos paralelos con dos partículas separadas en presencia del campo eléctrico.

Para demostrar que el problema de 2 partículas para el sistema presentado en la Fig. 9 también es exactamente soluble se presenta el Hamiltoniano de este sistema en unidades adimensionales de la siguiente forma:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[ -\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{4} w^2 x_i^2 + \alpha \varepsilon_i x_i \right] + \frac{2\tau}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + d^2}}, \quad (3.8)$$

donde  $\alpha = \frac{ea_0^*}{Ry^*} \approx 0.169 \frac{cm}{kV}$ , y representa el parámetro que permite adimensionalizar el término de campo eléctrico. La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (3.8):

$$-\frac{\partial^2 \varphi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \varphi(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} + \frac{1}{4} w^2 (x_1^2 + x_2^2) + \alpha (\varepsilon_1 x_1 + \varepsilon_2 x_2) + \frac{2\tau}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + d^2}} = E \varphi(x_1, x_2) \quad (3.9)$$

De la misma forma que en la sección 3.2, se introducen coordenadas para el movimiento de centro de masa y para el movimiento relativo, de manera que el Hamiltoniano (3.9) se hace separable. Esto permite que la función de onda se puede escribir como el producto de dos funciones; una que representa la parte del centro de masa, y la otra la parte relativa del sistema:

$$\psi(X_c, x) = \varphi_1(X_c) \varphi_2(x) \quad (3.10)$$

La ecuación de Schrödinger se separa en las siguientes dos ecuaciones:

$$-\frac{1}{2} \varphi_1''(X_c) + \left[ \frac{1}{2} w^2 X_c^2 + \alpha (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) X_c \right] \varphi_1(X_c) = E_1 \varphi_1(X_c) \quad (3.11)$$

$$-2\varphi_2''(x_r) + \left( \frac{1}{8} w^2 x_r^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{x_r^2 + d^2}} + \frac{\alpha}{2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) x_r \right) \varphi_2(x_r) = E_2 \varphi_2(x_r) \quad (3.12)$$

Para solucionar la ecuación (3.11), se realiza el cambio de variable  $x_c = \tilde{X}_c + \beta$ , con el objetivo de eliminar el término lineal y de esta forma obtener una ecuación análoga a la

de un Oscilador Armónico cuya solución es conocida. Al escoger  $\beta = -\alpha(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/w^2$  la ecuación (3.11) se reduce a la siguiente forma:

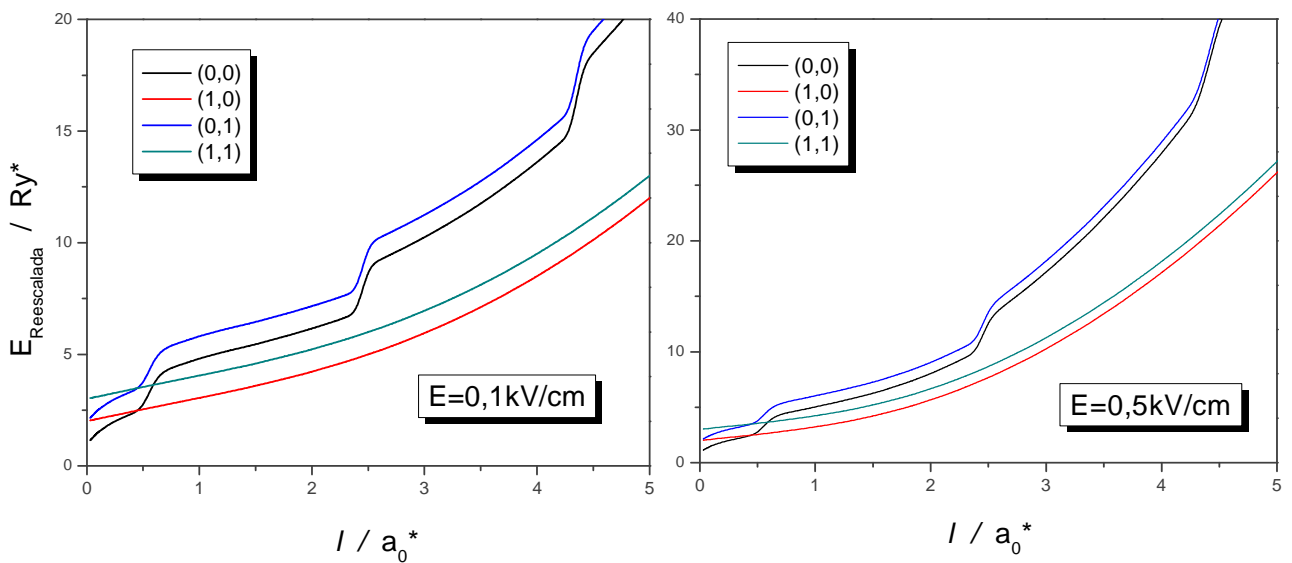
$$-\frac{1}{2}\varphi_1''(\tilde{X}_c) + \left[ \frac{1}{2}w^2\tilde{X}_c^2 - \frac{\alpha^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2}{2w^2} \right] \varphi_1(\tilde{X}_c) = E_1\varphi_1(\tilde{X}_c) \quad (3.13)$$

La ecuación (3.13) describe un oscilador armónico cuyos niveles energéticos son:

$$E_N = w \left( N + \frac{1}{2} \right) - \frac{\alpha^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2}{2w^2} \quad (3.14)$$

La segunda ecuación (3.12) correspondiente al movimiento relativo no posee solución analítica, razón por la cual en nuestros cálculos se hace uso del Método de Barrido Trigonométrico para solucionarla.

En la Fig. 10 se presentan los resultados de cálculo para las energías renormalizadas de cuatro niveles más bajos en función de la longitud de los hilos en presencia de campo eléctrico cuya intensidad en unidades en el primer caso es  $E = 0.1kV/cm$  y en el segundo  $E = 0.5kV/cm$



**Fig. 10.** Energías reescaladas de 4 niveles más bajos en función de la longitud de los hilos en presencia de campo eléctrico.

Se puede ver que las curvas de dependencia de las energías de la longitud de los hilos en presencia de campo eléctrico se hacen más suaves y los saltos en los puntos de transición se disminuyen a medida que el campo eléctrico crece. Sin embargo, las intersecciones y el cambio del orden de los niveles energéticos se conservan también en la presencia de campo eléctrico.

# CONCLUSIONES

---

De manera concreta, luego de la realización de este trabajo de investigación, se pueden establecer las siguientes conclusiones:

- ✓ En este trabajo por primera vez se trató un nuevo modelo exactamente soluble en el cual dos partículas se ubican en dos hilos unidimensionales paralelos con un confinamiento parabólico a lo largo de los hilos.
- ✓ Se demostró que la ecuación de Schrödinger para este sistema es separable en las coordenadas de centro de masa.
- ✓ Se calcularon las energías de los primeros 16 niveles energéticos de este sistema en función de la longitud de los hilos y se analizó el efecto de tamaño sobre el espectro.
- ✓ Se demostró que las curvas de dependencia de las energías de la longitud de los hilos presentan múltiples intersecciones y saltos de energía que ocurren simultáneamente en todos los niveles correspondientes a los estados pares para ciertos tamaños de los hilos. Esto resulta en un reordenamiento y una reagrupación de los niveles energéticos. Se presentó la interpretación de estos cambios en el espectro energético.
- ✓ Finalmente, se considero el efecto de campo eléctrico aplicado a lo largo de los hilos en las direcciones opuestas y se demostró que el modelo queda exactamente soluble también en presencia de campo eléctrico.

# BIBLIOGRAFÍA

---

- [1] Appenzeller, T., Science **254**, 1300 (1991)
- [2] Harrison, P.,: *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley-Interscience (2005)
- [3] Cibert, J., Petro, P.M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C., and English, J. H., Appl. Phys. Lett. **49**, 1275 (1976)
- [4] Mishournyi, V. A., Hernández del Castillo, I. C., Gorbachev, A. Yu., and Lastras Martínez, A., Avance y Perspectiva, **21**, 21 (2002)
- [5] Davis, John H., *The Physics of Low Dimensional Semiconductors and Introduction*, Cambridge University Press. (1998), p.80
- [6] Hornischer, W., Grambow, P., Demel, T. Bauser, E., Heitmann, D. VonKlitzing, K., and Ploog, K., Apply. Phys. Lett. **60**, 2998 (1998)
- [7] Chag, L. L., Esaki, L., Tsu, R., Appl. Phys. Lett. **24**, 8227 (1974)
- [8] Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. H., Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974)
- [9] Ando, T., Fowler A. B., and Stern, F., Reviews of Modern Physics, **54**, No 2, 437 (1982)
- [10] Bowler, D. R., J. Physics: Condens Matter **16**, R721-R754 (2004)
- [11] Jacak, L., Hawrylak, P., Wójs, A.: *Quantum Dots*, Springer-Verlag, New York (1997)
- [12] Timp, G., Nanotechnology (Springer-Verlag, New York, 1999)
- [13] Foford, S., Appl. Phys. Lett. **76**, 2707 (2000)
- [14] Stranski, I. N., von Krastanow, L., Akad. Wiss. Let. Mainz Math. Natur K1 IIIb 146, 797 (1939)
- [15] Stangl, J., Holy, V. and Bauer, G., Rev. Mod. Phys., Vol. **76**, No. 3, 7525 (2004)
- [16] García, J. M., Silveira J. P. and Briones, F., Appl. Phys. Lett. **77**, 409 (2000)
- [17] Lorke, A., Luyken, R- J., Fricke, V, Kotthaus, J. P., Medeiros-Ribeiro, V, García, J. M. and Petroff, P. M., Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000)
- [18] González, L., García, J. M., Martínez-Pastor, J., Ballesteros C. and Briones, F., Appl. Phys. Rev. Lett. **76**, 1104 (2000)
- [19] Li, H. X, Wu, J., Wang, V, Daniels-Race, T., Appl. Phys.Lett **75**, 1173 (1999)
- [20] Karlsson, K. F., Weman, H., Dupertuis, M. A., Leifer, K., Rudra, A., Kapon, E., Phys. Rev.B **70**, 045302 (2004)
- [21] Ma, W., Nötzel, R., Trampert, A., Ramsteiner, M., Zhu, H., Schönherr, P., Ploog, K. H., Appl. Phys.Lett **78**, 1297(2001)
- [22] Sidor, Y., Patoens, B., Peeters, F. M., Ben, T., Ponce, A., Sales, F. M., Molina, S. I., Fuster, D., Gonzáles, L., Gonzáles, Y., Phys. Condens. Matter arXiv:cond-mat/**0702206v1** (2007)
- [23] Bastard, G., Phys. Rev. B. **24**, 4714 (1981)
- [24] Zhu, J. L., Phys. Rev. B. **39**, 8780 (1989)
- [25] Zhu, J. L., Lin, D. L., and Kawazoe, Y., Phys. Rev. B. **54**, 16786 (1996)
- [26] Sandler, N. P., and Proetto, C. R., Phys. Rev. B. **46**, 7707 (1992)
- [27] Marin, J. L., and Cruz, S. A., J. Phys. B: Mol. Opt. Phys. **25**, 4365 (1992)
- [28] El-Said, M., J. Phys. (France) **5**, 1027 (1995)
- [29] Pang, T., and Louie, S. G., Phys. Rev. Lett. **65**, 1635 (1990)
- [30] Mikhailov, I.D., Betancur, F. J., Escorcia, R. A., and Sierra, J., Phys. Rev. B. **67**, 115317 (2003)
- [31] Mikhailov, I. D., Betancur, F. J., and García, L. F., Phys. Stat. Sol. (b) **224**, 757 (2001)
- [32] Mikhailov, I.D., Betancur, F.J. , Phys. Stat. sol.(b) 213,325 (1999)
- [33] Zhu, J.-L., Dai, Z. and Hu, X., Phys. Rev. B **68**, 045324 (2003)
- [34] Esaki, L., Tsu, R., IBM J. Res. Dev. **14**, 21 (1970)
- [35] Gershoni, D., Katz, M., Wegscheider, W., Pfeiffer, L. F., Logan R. A. and West, K., Phys. Rev. B **50**, 8930 (1994)
- [36] Kittel, C., *Introduction to solid state physics*, 7<sup>th</sup> Ed., Wiley, NY (1996)
- [37] Bolton, F., Solid state Electron. **37**, 1159 (1994)
- [38] Lo C. F. and Sollie, R., Solid State Commun. **79**, 775 (1991)
- [39] Zhu, J. L., Yu, J. Z., Li, Zhi-Qiank and Kawazoe, V, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 7857 (1996)
- [40] El-Said, M., J. Phys. I France **5**, 1027 (1995)
- [41] Pfannkuche, D., Gudmundsson, V. and Maksym, P., Phys. Rev. B **47**, 2244 (1993)
- [42] Maksym, P. A. and Chakraborty, T., Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990)
- [43] Betancur, F. J., Mikhailov, I. D., and Oliveira, L. E., J. Appl. Phys. D **31**, 3391 (1998)