

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE  $D^0$  Y  $D^-$  EN SISTEMAS  
CASI-UNIDIMENSIONALES**

**WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga, Enero de 2007**

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE  $D^0$  Y  $D^-$  EN SISTEMAS  
CASI-UNIDIMENSIONALES**

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

**WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO**

**Director**

**Dr. JAVIER BETANCUR**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga, Enero de 2007**

*Dedico este fruto del entendimiento a mis queridos padres Gabriel y Miriam.,  
a mis tres hermanos y a Mary, luz y consuelo de mi alma.*

*W. G.*

## *Agradecimientos*

*Porque como bien expresó Goethe: el arte y la ciencia, como todos los sublimes bienes del espíritu, pertenecen al mundo entero, y sólo pueden prosperar con el libre influjo mutuo de todos los contemporáneos, respetando siempre todo aquello que el pasado nos legó; quiero expresar aquí mis agradecimientos más profundos:*

*A Dios, por sostener cada fibra de mi ser durante esta etapa, y por elevar mi humilde inteligencia para poder comprender y disfrutar de la bella música que diariamente se teje entre la ciencia y la naturaleza.*

*A los profesores, Javier Betancur e Ilia Mikhailov, verdaderos maestros, quienes no solo me han convidado a entrar en la mansión de su saber, sino que antes me han iniciado en el camino que conduce al umbral de mi propia mente. Por su entera colaboración y paciencia en todo momento, especialmente durante los tropiezos y debilidades, que son los más, les estaré eternamente agradecido.*

*A la universidad Industrial de Santander (UIS), quien a través de la Vicerrectoría de Investigaciones (DIF Ciencias) y el Centro de Excelencia de Nuevos Materiales – ECNM, financió mi participación como ponente en diferentes eventos nacionales, e hizo posible la publicación de los resultados obtenidos en este trabajo.*

*A mis padres, porque todo lo que soy se lo debo a ellos.*

*A mis hermanos: Giovanni, Liliana y Nelson, por todo su cariño y tolerancia.*

*A Mary, por todo su cariño y comprensión, por permanecer a mi lado en todo momento, especialmente en los momentos de oscuridad, como un cielo colmado de estrellas.*

*A mi abuela Trina, quien avivó en mi, un profundo amor por el saber.*

*A Jairo Marín, Francisco García, y Juan Carlos Piña, compañeros y amigos incansables a la hora de colaborar, por su sincera amistad, su contagioso entusiasmo y todo su apoyo.*

*A los Profesores Harold Paredes y Carlos Beltrán, por su valiosa colaboración durante la realización de este trabajo.*

*A todos los compañeros del grupo FICOMACO, por propiciar ese calido ambiente de trabajo.*

*A todos ellos, y los muchos amigos que de alguna u otra forma, me alentaron en la tarea de estos últimos dos años.*

*Dios los bendiga y los acompañe siempre.*

---

## ***CONTENIDO***

---

	Pág.
LISTA DE FIGURAS.....	viii
LISTA DE TABLAS.....	x
RESUMEN.....	xi
ABSTRACT.....	xii
INTRODUCCIÓN.....	1
<b>PRIMERA PARTE: <math>D^0</math> CONFINADA EN UN QR DELGADO.....</b>	<b>5</b>
GENERALIDADES.....	5
1. MODELO MATEMÁTICO.....	7
1.1 Geometría del anillo cuántico.....	7
1.2 Parámetros del material.....	8
1.3 Hamiltoniano del sistema .....	8
1.4 Modelo de QR unidimensional.....	10
2. METODOLOGÍA EMPLEADA.....	12
2.1 Aproximación adiabática.....	12
2.2 Método de barrido trigonométrico.....	15
2.3 Método de diagonalización exacta.....	16
2.4 Densidad de estados de donadoras neutras.....	19
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	20
3.1 Potencial Periódico Unidimensional.....	20
3.2 Efecto de la posición de la impureza sobre el espectro energético de una $D^0$ en QR.....	21
3.3 Efectos del radio medio del anillo sobre el espectro energético de una $D^0$ en QR.....	25
3.4 Comparación entre los métodos: Barrido trigonométrico y Diagonalización exacta.....	27
3.5 Energías de enlace para los estados más bajos de una $D^0$ en QR.....	28
3.6 Densidad de estados (DOS) para una $D^0$ en QR.....	29
3.7 Cristalización de Wigner para una $D^0$ en QR.....	30
<b>SEGUNDA PARTE: <math>D^-</math> CONFINADA EN UN QR DELGADO.....</b>	<b>32</b>
GENERALIDADES.....	32
4. MODELO MATEMÁTICO Y METODOLOGÍA.....	34
4.1 Geometría del anillo cuántico y parámetros del material.....	34
4.2 Hamiltoniano del sistema.....	35

4.3 Metodología .....	36
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	38
5.1 Efecto del tamaño del anillo sobre el espectro energético de dos electrones en QR.....	38
5.2 Efecto del tamaño del anillo sobre el espectro energético de una $D^-$ centrada en QR.....	39
5.3 Efecto de la posición de la impureza sobre el espectro energético de una $D^-$ centrada en QR.....	40
CONCLUSIONES.....	42
REFERENCIAS.....	43

## LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Fig. 1. Esquema de una $D^0$ confinada en un anillo cuántico de forma toroidal.....	7
Fig. 2. Esquema del anillo en las nuevas coordenadas polares.....	9
Fig. 3. Potencial de confinamiento en el plano $x$ - $y$ .....	9
Fig. 4. Curvas del potencial efectivo para la interacción Coulombiana $v_c(\varphi)$ para diferentes posiciones de la impureza.....	20
Fig. 5. Energías renormalizadas para el estado base y primeros estados excitados de la $D^0$ en función de la posición de la impureza para un QR unidimensional con radio $R_a = 5.0 a_0^*$ .....	21
Fig. 6. Energías renormalizadas para los estados más bajos de la $D^0$ en función de la posición de la impureza para un QR con $R_t = 1.0 a_0^*$ y radios: (a) $R_a = 5.0 a_0^*$ , y (b) $R_a = 10.0 a_0^*$ .....	22
Fig. 7. Funciones de onda en dirección azimutal para los tres estados más bajos de la $D^0$ en un QR con radio $R_a = 10.0 a_0^*$ , considerando dos posiciones de la impureza $\beta = 0.0$ y $\beta = 0.5$ .....	23
Fig. 8. Energías renormalizadas para los estados impares más bajos de la $D^0$ en función de la posición de la impureza para un QR con radio $R_a = 5.0 a_0^*$ y diferentes radios de la sección transversal.....	24
Fig. 9. Energías renormalizadas para los estados impares más bajos de la $D^0$ en función de la posición de la impureza para un QR con radio $R_a = 10.0 a_0^*$ y diferentes radios de la sección transversal.....	25
Fig. 10. Energías renormalizadas para algunos de los estados más bajos de la $D^0$	

en función del radio de la sección transversal con $\beta = 1.0$ y para un QR con radios (a) $R_a = 5.0 a_0^*$ y (b) $R_a = 10.0 a_0^*$ .....	26
Fig. 11. Energías normalizadas para algunos de los estados más bajos de la $D^0$ en función del radio medio del anillo, para un QR con radio $R_t = 1.0 a_0^*$ y con $\beta = 1.0$ .....	26
Fig. 12. Energías de enlace para los cuatro estados más bajos de la $D^0$ en función de la posición de la impureza, para un QR con $R_t = 1.0 a_0^*$ , con radios: (a) $R_a = 5.0 a_0^*$ y (b) $R_a = 10.0 a_0^*$ .....	28
Fig. 13. Densidad de estados de impurezas neutras en QRs de forma toroidal con $R_t = 1.0 a_0^*$ y con radios: (a) $R_a = 5.0 a_0^*$ y (b) $R_a = 10.0 a_0^*$ .....	29
Fig. 14. Densidad de probabilidad electrónica en el plano $x$ - $y$ para diferentes posiciones de la impureza ( $\beta$ ), en el estado $(0,+)$ , y confinada en un QR con $R_a = 5.0 a_0^*$ y $R_t = 2.0 a_0^*$ .....	30
Fig. 15. Densidad de probabilidad electrónica en el plano $x$ - $y$ para diferentes posiciones de la impureza ( $\beta$ ) en el estado $(1,-)$ , y confinada en un QR con $R_a = 5.0 a_0^*$ y $R_t = 2.0 a_0^*$ .....	31
Fig. 16. Desplazamiento angular cuadrático medio del electrón respecto de la posición de equilibrio en función de $R_t$ , para la impureza dentro y fuera del QR.....	31
Fig. 17. Esquema de una $D^-$ confinada en un anillo cuántico de InGaAs de forma toroidal.....	34
Fig. 18. Energías normalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un anillo casi-unidimensional.....	38
Fig. 19. Energías para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_t = 0.5 a_0^*$ .....	39
Fig. 20. Energías para los cinco estados más bajos de una $D^-$ centrada en función del radio medio del anillo, para un QR con $R_t = 0.5 a_0^*$ .....	40
Fig. 21. Energías para los cinco estados más bajos de una $D^-$ centrada en función de la distancia al plano del anillo, para un QR con $R_t = 0.5 a_0^*$ .....	41

## LISTA DE TABLAS

Pág.

Tabla. 1. Valores de la energía normalizada para un anillo con $R_a = 10.0a_0^*$ , $R_t = 1.0a_0^*$ y $\beta = 1.0$ obtenidos mediante los métodos de barrido trigonométrico y diagonalización exacta (matriz 61x61).....	27
Tabla. 2. Composición de los estados mixtos de una $D^0$ en un anillo con, $R_a = 10.0a_0^*$ , $R_t = 1a_0^*$ y $\beta = 1.0$ obtenidos mediante el método de diagonalización exacta (matriz 61x61).....	27

## RESUMEN

**TITULO:** ESPECTRO ENERGÉTICO DE  $D^0$  Y  $D^-$  EN SISTEMAS CASI-UNIDIMENSIONALES\*

**AUTOR:** WILLIAN GUTIERREZ NIÑO\*\*

**PALABRAS CLAVES:** Anillos cuánticos, Sistemas 1D dimensionales, Donadoras, Espectro energético, Cristalización de Wigner, Densidad de estados, Aproximación adiabática, Sistema de dos electrones.

Se analiza el espectro energético de una donadora neutra localizada dentro o fuera de un anillo cuántico de forma toroidal de barrera finita, cuyo radio medio es mucho mayor que el radio de la sección transversal. Haciendo uso de la aproximación adiabática derivamos una ecuación de onda unidimensional que describe los niveles más bajos de la donadora, los cuales corresponden al movimiento lento del electrón a lo largo del anillo. La solución numérica de ésta ecuación se ha obtenido mediante el método de barrido trigonométrico. Se ha estudiado la dependencia del espectro energético de la posición de la impureza, del radio medio y el radio de la sección transversal del anillo. Se discute la contribución de los estados excitados más bajos a la densidad de estados de la impureza. Además, se estudia la variación de la distribución de carga del electrón de una donadora neutra, el cual permanece al interior del anillo, cuando la impureza se desplaza gradualmente desde el centro de simetría hacia el centro de la sección transversal del anillo. El objetivo de dicho estudio es establecer la posibilidad de que exista una transición de Wigner en heteroestructuras con forma de anillo.

Por otro lado, se analizan los estados más bajos de una donadora cargada negativamente centrada en un anillo con las mismas características del caso anterior. Siguiendo el bien conocido procedimiento de la aproximación adiabática, hemos deducido una ecuación de onda unidimensional con condiciones periódicas, la cual describe la rotación de los dos electrones dentro del anillo. La atracción Coulombiana ejercida por la impureza sobre los dos electrones y la repulsión entre ellos son dadas por potenciales efectivos que dependen de parámetros geométricos del anillo y la distancia de la impureza al plano de simetría.

---

\* Proyecto de Investigación de Maestría.

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Javier Betancur.

## ABSTRACT

**TITLE:**  $D^0$  and  $D^-$  Energy Spectrum in Quasi-One-Dimensional Systems\*.

**AUTHOR:** WILLIAN GUTIERREZ NIÑO\*\*

**KEYWORDS:** Quantum ring, One-dimensional systems, Donors, Energy spectrum, Wigner crystallization, Density of states, Adiabatic approximation, Two-electron system.

It is analyzed the energy spectrum of a neutral donor located inside or outside of a finite-barrier toroidal-shaped quantum ring, whose mean radius is much larger than the cross-section radius. We derive a one-dimensional wave equation which describes the low-lying donor levels corresponding to the slow electron motion along the ring, by using the adiabatic approximation. Numerical solution of this equation has been obtained by using the trigonometric sweep method. The dependence of the energy spectrum on the donor position, mean radius and cross-section radius of the ring has been studied. The contribution of different low-lying excited states in the density of the impurity states is discussed. Also, variation of the charge distribution of the excessive electron inside the ring is studied in order to establish the possibility of the existence of a Wigner transition in heterostructures with ring-like geometry.

On the other hand, Low-lying states of an on-axis negatively charged donor in a ring with characteristics similar to the previous case are analyzed. Following the well-known adiabatic procedure, we have deduced a one-dimensional wave equation with periodic conditions, which describe the two-electron rotation inside the ring. The Coulomb attraction exercised on the two-electrons by the impurity and repulsion between them is given by effective potentials that depend of the geometric parameters of ring and distance of the impurity from the symmetry plane.

---

\* Proyecto de Investigación de Maestría.

\*\* Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Javier Betancur

---

## ***INTRODUCCIÓN***

---

El diálogo entre la ciencia y la naturaleza parece interminable en todas las escalas. Las investigaciones en la escala fundamental de la materia han traído consigo extraordinarios avances científicos y tecnológicos, los cuales han permitido ampliar nuestra comprensión sobre los complejos mecanismos que operan al interior de la naturaleza. Gracias a ello, podemos afirmar hoy, que es en los dominios del mundo cuántico donde están establecidos los componentes básicos de la materia, y donde están definidas sus propiedades fundamentales. Este conocimiento, sumado a la capacidad para manipular la materia a escala nanométrica ha cimentado una de las revoluciones científicas más importantes de los últimos años, conocida como nanociencia [1]. En este sentido, la física del estado sólido ha sido una de las áreas más beneficiadas. La sofisticación de las técnicas de fabricación de heterojunturas semiconductoras ha llegado a tal punto, que ahora es posible fabricar sistemas artificiales, conocidos como nanoestructuras [2], cuyos tamaños, formas y diseños se pueden ajustar con exactitud nanométrica.

La historia de las nanoestructuras semiconductoras comienza en la década del 70, con la fabricación de las primeras superredes. Esto estuvo ligado íntimamente al desarrollo de los métodos adecuados de crecimiento por vía de epitaxia de haces moleculares y deposición de vapor metal-orgánico. Paralelamente fue desarrollándose el estudio de pozos cuánticos (QW) [2,3], los cuales consisten en una lámina de un semiconductor embebida en un semiconductor diferente. En este caso se logra confinar el movimiento de los electrones 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 [2,4] y la situación extrema, estructuras cuasi cero dimensionales, denominadas puntos cuánticos (QD) [2,5].

Estos últimos generaron grandes expectativas en torno a sus potenciales aplicaciones, debido a que ofrecen una gran variedad de fenómenos cuánticos por tener un mayor grado de confinamiento. Los QDs se pueden considerar básicamente como pequeñas islas de material semiconductor, inmersas en una matriz de otro material semiconductor con propiedades físicas ligeramente diferentes. Debido a la diferencia que existe entre los anchos de las brechas de energía de los dos materiales, aparece un potencial de confinamiento que permite mantener portadores de carga confinados al interior del punto, en las tres dimensiones. El tamaño de dichas islas es del orden nanométrico, por lo tanto, sus dimensiones son comparables con la longitud de onda de De Broglie asociada a los portadores de carga, lo cual garantiza que exhiban un comportamiento cuántico [6]. En este sentido, los QDs son particularmente sensibles a las variaciones de su escala, morfología y composición.

De la amplia variedad de QDs que actualmente hay bajo investigación, los denominados puntos cuánticos autoensamblados (Self-Assembled Quantum Dots - SAQDs), crecidos mediante la técnica de Stranski Krastanow [7], son los que gozan de mayor atención. Uno de sus principales atractivos radica en la diversidad de morfologías que pueden presentar, pueden surgir en forma de lentes [8], pirámides [9], pirámides truncadas [10], entre otras; todas con una característica particular: el tamaño de sus bases es mucho mayor que el de sus alturas. Trabajos recientes han mostrado que si durante el proceso de crecimiento de SAQDs de InAs sobre GaAs, estos se recubren con una capa delgada (2 nm) de GaAs, entonces tiene lugar una redistribución anisotrópica del material del punto, lo cual altera dramáticamente su morfología. Como resultado, el QD (20 nm de diámetro, 7 nm de altura) se transforma en un anillo cuántico (QR) con un tamaño lateral mayor (diámetro externo entre 60 y 140 nm), una altura reducida (2-4 nm) y un hueco central bien definido (20 a 30 nm de diámetro). La formación de nanoestructuras en forma de anillo fue reportada por primera vez para islas de GaAs recubiertas con InAs mediante la técnica de crecimiento por epitaxia de haz molecular [11], después para islas de GaAs recubiertas con  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  mediante la técnica de crecimiento por epitaxia en fase de vapor metalorgánico y más recientemente, la realización de anillos semiconductores nanoscópicos ha sido demostrada por Lorke y colaboradores [12] usando técnicas de autoensamblado. Los QRs tienen una estructura topológica distinta a los QDs y resultan

más interesantes de estudiar por varios motivos: i) la aparición de oscilaciones Aharonov-Bohm y corrientes persistentes en presencia de campo magnético, ii) la mayor posibilidad de ajustar sus estados electrónicos; iii) permiten realizar variaciones topológicas que van desde un sistema bidimensional, como es el caso del disco cuántico, el cual se obtiene cuando el radio interno tiende a cero, hasta la situación casi unidimensional correspondiente al caso límite en el cual el espesor del anillo es muy pequeño. De acuerdo con la situación física real, los QRs de GaAs presentan radios mayores que el ancho de sus secciones transversales, por lo tanto se pueden considerar como anillos delgados, lo cual facilita la realización de estudios teóricos.

Existe actualmente un gran interés en el estudio de sistemas de pocas partículas (impurezas aceptoras, donadoras neutras y cargadas, 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 fabricación de dispositivos ópticos y electrónicos. Lo anterior se ha establecido debido a que la reducción de la dimensionalidad del sistema trae como consecuencia un incremento importante sobre la energía de enlace  $E_b$ , tanto para donadoras neutras  $E_b(D^0)$ , como para donadoras cargadas negativamente  $E_b(D^-)$ .

Desde el punto de vista teórico, el interés por el análisis de impurezas confinadas en heteroestructuras semiconductoras se ha hecho cada vez mayor. El primero en tratar este problema, fue Bastard [13], considerando una  $D^0$  en un QW bajo la aproximación de la masa efectiva. Hasta la fecha, son innumerables los trabajos teóricos que se han realizado para el análisis de impurezas en QDs utilizando diferentes métodos. Para el caso del método variacional podemos citar el trabajo de Zhu *et al.* [14], en el cual se obtienen los niveles de energía de una  $D^0$  y una  $D^-$  confinadas en QDs, junto con la razón  $\sigma$  de  $E_b(D^-)$  a  $E_b(D^0)$ ; el de García y coinvestigadores [15], en el cual se calculan las energías del estado base para impurezas  $D^0$  y  $D^-$  centradas en un disco. El método de dimensión fractal elaborado en el grupo de Física Computacional de Materia Condensada de la UIS también ha sido utilizado para analizar  $D^0$  y  $D^-$  en diferentes situaciones [16-20].

Hasta el momento, se han realizado relativamente pocas investigaciones teóricas sobre donadoras confinadas en QRs, dentro de las cuales tenemos: el trabajo realizado por Zhu [21] donde se analiza una  $D^0$  y una  $D^-$  en un anillo bidimensional mediante el método de diagonalización exacta; el de Bruno-Latgé [22], donde se analizó una  $D^0$  confinada en un toroide de sección transversal rectangular mediante el método variacional. Otro estudio que podemos mencionar es el de una  $D^-$  centrada en un QR, realizado por Gutiérrez *et al.* [23] usando el método variacional. Adicionalmente, se han estudiado otros sistemas de pocas partículas confinadas en anillos. Podemos citar el trabajo de Planelles y coinvestigadores [24] quienes analizaron un excitón en un QR bajo la influencia de un campo magnético haciendo uso del método  $k \cdot p$  y la aproximación de la función envolvente. Dos estudios importantes fueron realizados por Zhu [25, 26]; en el primero se analizan dos electrones en un anillo nanoscópico mediante el método de diagonalización exacta; y en el segundo se obtiene una solución exacta para el problema de dos electrones en un anillo unidimensional mediante expansión en series. Por último podemos citar el trabajo de García *et al.* [27] donde se calcularon los estados más bajos para dos electrones en un QR casi unidimensional.

De acuerdo con lo anterior, se tienen varios aspectos que aún no han sido esclarecidos completamente dentro del estudio de sistemas de pocas partículas en QRs, motivo por el cual, cualquier resultado teórico que ayude a ampliar el horizonte de conocimientos que se tienen hasta ahora, se puede considerar como un valioso aporte. En este sentido es que está motivada la realización del presente trabajo de investigación.

---

## PRIMERA PARTE

# $D^0$ CONFINADA EN UN QR DELGADO

---

---

## GENERALIDADES

Los átomos de tipo hidrogenoide tienen sus análogos en la física del estado sólido; sistemas de dos partículas de carga opuesta (electrón-ión), como es el caso de una impureza donadora neutra  $D^0$ . Si en una red cristalina, por ejemplo de GaAs, se introduce un átomo del grupo IV de tal manera que reemplace a un átomo de Ga, uno de los electrones de este átomo introducido no participa en el enlace químico y queda casi libre en la banda de conducción. Este electrón se encuentra débilmente ligado en una “órbita” de radio muy grande en torno al ión monovalente y por lo tanto puede ser fácilmente removido por excitaciones térmicas o eléctricas. Tales sistemas son conocidos como donadoras neutras. El espectro energético de una impureza donadora en el volumen de GaAs tiene una estructura tipo hidrogenoide, sin embargo la energía de ionización de una donadora en el GaAs es mucho menor que la del átomo de hidrogeno; esto se debe a que la atracción de Coulomb del ión se encuentra, en gran parte, apantallada por la naturaleza dieléctrica del cristal. Cuando una impureza es introducida dentro de una heteroestructura, la situación se hace considerablemente más compleja e interesante que en el bloque, debido principalmente a la presencia de un potencial de confinamiento. El

confinamiento geométrico trae consigo algunos efectos interesantes: por un lado se tiene que la energía de enlace y la forma de la función de onda dependen notoriamente de la forma y las dimensiones de dicho confinamiento, y por otro lado, la energía de enlace y la función de onda son también función de la posición de la impureza dentro de la heteroestructura.

---

## 1. MODELO MATEMÁTICO

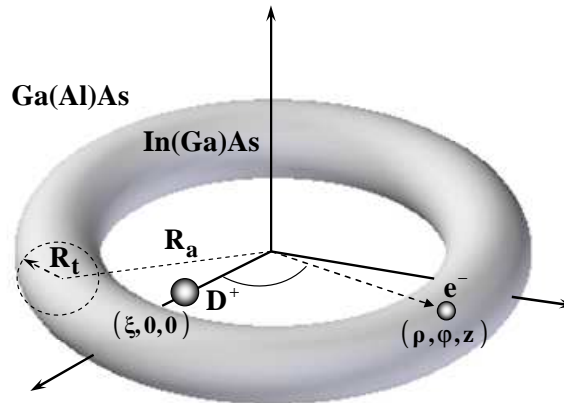
---

En las secciones que se exponen a continuación se dará una descripción de los diferentes parámetros geométricos y físicos que se introdujeron para modelar el sistema a estudiar en esta primera parte del trabajo, el cual consiste en una  $D^0$  confinada en un QR de forma toroidal, además del modelo matemático que describe dicho sistema.

---

### 1.1 Geometría del anillo cuántico

En este trabajo se considerara un QR de forma toroidal, como se muestra en la figura 1. El QR es generado por la revolución de una sección transversal circular de radio  $R_t$  alrededor del eje  $z$ . El círculo está centrado a la distancia media  $R_a$  del eje de giro.



**Fig. 1** Esquema de una  $D^0$  confinada en un anillo cuántico de forma toroidal

Una  $D^0$  puede describirse como un sistema compuesto por una impureza donadora cargada positivamente y un electrón. Se supone la impureza localizada en el plano de simetría ( $z = 0$ ), y su posición, a lo largo del eje  $x$ , está dada por la distancia  $\xi$  desde el origen de coordenadas, sin que se pierda por ello generalidad en el problema, debido a la simetría que se tiene. El potencial de confinamiento, que aparece debido a la discontinuidad que existe entre las bandas de conducción de los dos materiales, el material del QR y el de su exterior, está expresado en coordenadas cilíndricas, por la función seccionalmente constante  $V(\rho, z)$  que se expone a continuación:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} 0 & ; (\rho - R_a)^2 + z^2 < R_t^2 \\ V_0 & ; (\rho - R_a)^2 + z^2 > R_t^2 \end{cases} \quad (1)$$

la cual indica que el potencial es cero dentro del QR, y presenta un valor constante  $V_0$  fuera del QR. Para este modelo, se considerará que el electrón permanecerá siempre en el interior del QR, debido a que el pozo de potencial actúa como una trampa para los portadores de carga. Para la impureza se pueden tener dos posibles situaciones: una, cuando ésta se encuentra fuera del QR; la otra alternativa es cuando el electrón y la donadora están atrapados dentro del QR. En el presente trabajo se van a analizar ambas situaciones.

---

## 1.2 Parámetros del material

Los cálculos realizados en este trabajo son para un electrón localizado dentro de un QR y para una impureza cargada positivamente localizada dentro o fuera del QR. El anillo de  $In_{0.55}Ga_{0.45}As$  se encuentra inmerso en una matriz de  $Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ . Los parámetros físicos, a excepción desde luego del salto entre bandas de conducción, se toman del material correspondiente a la región interior del QR debido a que el confinamiento hace que el electrón se encuentre fundamentalmente en esta región. La masa efectiva del electrón para este material está dada como  $m^* = 0.076 m_e$ , siendo  $m_e$  la masa del electrón en el vacío. El salto entre las bandas de conducción para el electrón es  $V_0 = 258 meV \approx 40 Ry^*$ . El radio de Bohr efectivo correspondiente a estos parámetros del material es  $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2 \approx 8.86 nm$ , el Rydberg efectivo es  $Ry^* = e^2 / 2 a_0^* \epsilon \approx 6.40 meV$ . La constante de red del material del anillo es cercana a los  $0.6 nm$ .

---

## 1.3 Hamiltoniano del sistema

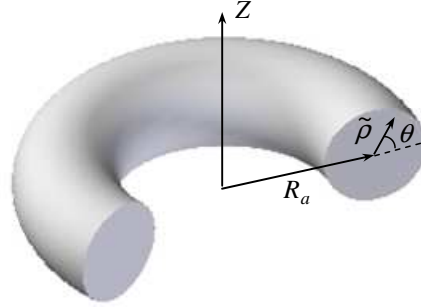
Este modelo consta de un electrón confinado dentro del QR con una impureza cargada positivamente, la cual puede estar tanto fuera, como dentro del QR. En el marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional en coordenadas cilíndricas de la  $D^0$  está dado por:

$$H = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2 + \xi^2 - 2\xi\rho \cos \varphi}} \quad (2)$$

donde  $V(\rho, z)$  es el potencial de confinamiento definido en (1). Considerando que el electrón permanecerá prácticamente siempre dentro del anillo debido al confinamiento y teniendo que  $R_i \ll R_a$ , se puede hacer la siguiente sustitución  $\rho = R_a + x$ , donde  $x \ll R_a$ . Con base en la anterior sustitución, el Hamiltoniano (2) se puede escribir en forma aproximada como sigue:

$$H = -\frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} - \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_c(\tilde{\rho}, \theta, \varphi) + V(\tilde{\rho}) \quad (3)$$

para lo cual se han introducido coordenadas polares  $(\tilde{\rho}, \theta)$  para la sección transversal, como se muestra en la figura 2, donde  $\tilde{\rho}^2 = z^2 + x^2$  y  $x = \tilde{\rho} \cos \theta$ , además de la coordenada azimutal  $(\varphi)$  alrededor del eje  $z$ .



**Fig. 2** Esquema del anillo en las nuevas coordenadas polares

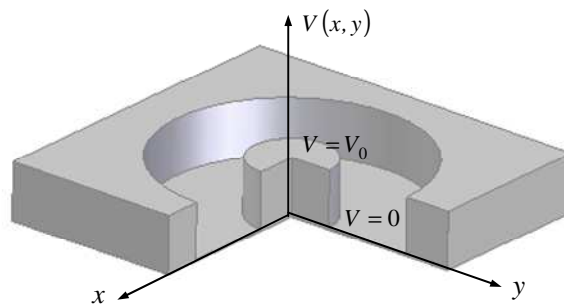
El potencial Coulombiano, dado por el último término en la ecuación 2, bajo esta transformación de coordenadas, queda expresado así:

$$V_c(\tilde{\rho}, \theta, \varphi) = -\frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + R_a^2 + \zeta^2 + 2R_a\tilde{\rho}\cos\theta - 2\zeta(R_a + \tilde{\rho}\cos\theta)\cos\varphi}} \quad (4)$$

y el potencial de confinamiento expresado en estas nuevas coordenadas puede escribirse en una forma más sencilla gracias a la simetría que presenta; así:

$$V(\tilde{\rho}) = \begin{cases} 0 & ; \tilde{\rho} < R_t \\ V_0 & ; \tilde{\rho} > R_t \end{cases} \quad (5)$$

En la figura 3 se muestra una representación del potencial de confinamiento para el QR en el plano  $x$ - $y$ , donde puede apreciarse claramente que dicho potencial tiene un valor de cero dentro del anillo, y  $V_0$  para cualquier punto fuera de este.



**Fig. 3** Potencial de confinamiento en el plano  $x$ - $y$

Como se verá en el siguiente capítulo, estas coordenadas de tipo polar, favorecen la separación de variables al utilizar la aproximación adiabática.

## 1.4 Modelo de QR unidimensional

Por propósitos heurísticos, se considera el caso límite de un anillo muy delgado, es decir, un QR unidimensional ( $R_i \rightarrow 0$ ;  $V_0 \rightarrow \infty$ ;  $R_i^2 V_0 \rightarrow \text{const}$ ). El Hamiltoniano renormalizado (multiplicado por el radio del anillo) para una  $D^0$  descentrada y confinada en dicha estructura, en unidades adimensionales, puede ser escrito como:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = HR_a^2 &= -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \tilde{V}_c(\varphi); & -\pi \leq \varphi < \pi \\ \tilde{V}_c(\varphi) &= -2R_a / \sqrt{1 + \beta^2 - 2\beta \cos \varphi}; & \beta = \xi / R_a \end{aligned} \quad (6)$$

donde los valores propios del Hamiltoniano renormalizado (6) denotados como  $\tilde{E}_m$ , están medidos en unidades de  $[Ry^* a_0^{*2}]$ .

Se puede ver que para este sistema existen dos situaciones particulares para las cuales el Hamiltoniano (6) describe un rotor rígido unidimensional: cuando  $\beta \rightarrow 0$  (donadora centrada) y cuando  $\beta \rightarrow \infty$  (cuando la impureza se encuentra fuera del anillo). En ambos casos las funciones propias de (6) tiene la forma  $\varphi_{\pm m}(\varphi) = \exp(\pm im\varphi)$ , las cuales corresponden a estados doblemente degenerados con energías:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_m &= m^2 - 2R_a; & (\beta \rightarrow 0); & \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \tilde{E}_m &= m^2; & (\beta \rightarrow \infty); & \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (7)$$

En el caso intermedio, para cualquier valor finito de  $\beta$ , el potencial  $\tilde{V}_c(\varphi)$  en la ecuación (6), presenta simetría par; por lo tanto, existen dos conjuntos de funciones de onda, un conjunto de funciones pares y un conjunto de funciones impares. Las funciones pares siempre están asociadas con energías más bajas que las correspondientes funciones impares, debido a que en estos estados se tiene una separación media menor entre la impureza y el electrón. Se puede ver, que para el caso concreto cuando  $\beta = 1$  el potencial de interacción Coulombiana dado en (6), adquiere la forma

$$\tilde{V}_c(\varphi) = -\frac{R_a}{|\sin \varphi / 2|} \quad (8)$$

La expresión anterior es similar a un modelo hipotético de átomo hidrogenoide unidimensional con condiciones periódicas, donde el potencial estaría dado como:

$$\tilde{V}_c(\varphi) = -\frac{2R_a}{|\varphi|} \quad (9)$$

Obsérvese que la relación (9) es equivalente a la aproximación de (8) en primer orden. Es bien conocido de la teoría de escalamiento dimensional [28], que las energías de los estados impares de un átomo hidrogenoide unidimensional, están expresadas por una relación análoga a la que se tiene para un átomo hidrogenoide tridimensional:

$$E_m = -R_a^2/m^2; \quad (\beta \rightarrow 1); \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (10)$$

para el estado base ( $m=0$ ), el átomo de hidrogeno en una dimensión se hace inestable y por lo tanto  $E_0 \rightarrow -\infty$ . Las relaciones dadas en (7) y (10) sirven para controlar los resultados de los cálculos obtenidos para un QR delgado de forma toroidal, para los casos cuando la impureza esté centrada, esté alejada suficientemente del anillo, o esté centrada en el interior de éste.

---

## 2. METODOLOGÍA EMPLEADA

---

La mayoría de los problemas relacionados con sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras no pueden ser resueltos en forma exacta. Soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger existen solamente para unos pocos sistemas idealizados. Por esta razón, para resolver problemas generales se debe recurrir a métodos aproximados y numéricos. A continuación se presentan los métodos que se emplearon para desarrollar este trabajo de investigación.

---

### 2.1 Aproximación Adiabática

La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (3) no es separable debido al potencial Coulombiano (4), el cual presenta dependencia de las variables  $\tilde{\rho}, \theta, y \varphi$ . Lo anterior hace que resulte imposible obtener una solución analítica. Además, una solución numérica directa de esta ecuación de onda en tres dimensiones, requiere una cantidad enorme de cálculos y una gran memoria para almacenar la información que define la función de onda. Por tales razones, se debe recurrir a una técnica aproximada que permita separar las variables y reducir notablemente el tedioso trabajo computacional; tal técnica es conocida como aproximación adiabática (A.A) [29,30]. Dicha aproximación toma ventaja de la clara diferencia que se tiene entre las dimensiones de la heteroestructura, para nuestro caso en dirección transversal y azimutal, puesto que  $R_t \ll R_a$ .

La justificación para el uso de la A.A en nuestro problema se puede apreciar más claramente si realizamos un reescalamiento  $\tilde{\rho} = R_t \rho$  en el Hamiltoniano (3), donde  $R_t$  es el radio de la sección transversal del QR. Entonces, se tiene que el Hamiltoniano (3) en las nuevas coordenadas adquiere la siguiente forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_t^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\varphi^2 + V_c(\rho, \theta, \varphi) + V(\rho) \quad (11)$$

donde:

$$\nabla_t^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad y \quad \nabla_\varphi^2 = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (12)$$

Estas ecuaciones se pueden interpretar como el Hamiltoniano para un sistema de dos partículas que interactúan por medio del potencial  $V_c(\rho, \varphi, \theta)$ , donde una de ellas, la más liviana con masa  $R_t^{-2}$ , se mueve rápidamente en dirección transversal del QR, mientras que

la segunda, mucho más pesada que la anterior, con masa  $R_a^2$ , rota lentamente en la dirección azimutal y sus respectivas energías cinéticas, están dadas por las ecuaciones en (12). En nuestro caso la relación entre las supuestas masas, el cuadrado de los radios, está dentro del rango  $R_a^2/R_t^2 \approx 25$  a  $400$ , con lo cual queda justificado el uso de la A.A.

Lo anterior hace posible que el movimiento del electrón dentro del anillo pueda descomponerse en dos, un movimiento transversal rápido, el cual constituye el aporte más significativo a la energía total, y un movimiento rotacional lento en dirección azimutal. Siguiendo el esquema estándar de la aproximación adiabática se puede presentar la función de onda  $f(\mathbf{r})$ , para el Hamiltoniano (3), como un producto de dos funciones, la primera,  $f_f(\tilde{\rho}, \theta)$  la cual describe el movimiento rápido debido al fuerte confinamiento en la dirección transversal y satisface la parte del Hamiltoniano que describe el movimiento rápido del electrón:

$$H_f = -\frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} - \frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(\tilde{\rho}) \quad (13)$$

La segunda parte de la función de onda,  $f_s(\varphi)$  corresponde al movimiento azimutal lento y satisface el Hamiltoniano que describe el movimiento lento:

$$H_s = -\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_c(\varphi) \quad (14)$$

La solución de la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (13):  $H_f f_f = E_f f_f$ , nos da una función de onda para el movimiento rápido en términos de exponenciales complejas para la componente angular  $\theta$  y de funciones de Bessel para la dirección radial, descrita de la siguiente forma:

$$f_f(\tilde{\rho}, \theta) = f_f(\tilde{\rho}) f_f(\theta) \quad (15)$$

donde la parte angular de la función de onda para el movimiento trasversal rápido tiene la forma

$$f_f(\theta) = \exp(in\theta); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

y la parte radial está dada como

$$f_f(\tilde{\rho}) = \begin{cases} J_0(k\tilde{\rho}) & ; \tilde{\rho} < R_t \\ \frac{J_0(kR_t)}{K_0(\chi R_t)} K_0(\chi\tilde{\rho}) & ; \tilde{\rho} > R_t \end{cases} \quad \text{con: } k = \sqrt{E_f} \text{ y } \chi = \sqrt{V_0 - E_f} \quad (17)$$

Los valores de  $E_f$  que corresponden a los valores de la energía para el movimiento del electrón en la sección transversal son hallados de la ecuación trascendente:

$$k \frac{J_1(kR_t)}{J_0(kR_t)} - \chi \frac{K_1(\chi R_t)}{K_0(\chi R_t)} = 0 \quad (18)$$

El factor de normalización ( $FN_f$ ) para  $f_f(\tilde{\rho}, \theta)$  es definido como:

$$FN_f = 2\pi \left[ \int_0^{R_t} \tilde{\rho} J_0^2(k\tilde{\rho}) d\tilde{\rho} + \int_{R_t}^{\infty} \tilde{\rho} \left( \frac{J_0(kR_t)}{K_0(\chi R_t)} K_0(\chi\tilde{\rho}) \right)^2 d\tilde{\rho} \right] \quad (19)$$

Ahora descongelando el movimiento lento, tenemos para la dirección azimutal la siguiente ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} f_s(\varphi) + V_c(\varphi) f_s(\varphi) = E_s f_s(\varphi) ; \text{ donde: } E_s = E - E_f \quad (20)$$

El potencial Coulombiano efectivo está definido como:

$$V_c(\varphi) = \int_0^{\infty} \tilde{\rho} d\tilde{\rho} \int_0^{2\pi} d\theta V_c(\tilde{\rho}, \theta, \varphi) f_f^2(\tilde{\rho}) \quad (21)$$

donde la integral respecto a  $\theta$  puede expresarse en términos de integrales elípticas completas de primera clase ( $\mathbf{K}$ ) como sigue:

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\sqrt{A+B \cos \theta}} = \frac{4 \mathbf{K}\left(\sqrt{\frac{2B}{A+B}}\right)}{\sqrt{A+B}} \quad (22)$$

$$\text{donde: } A = \rho^2 + R_a^2 + \xi^2 - 2\xi R_a \cos \varphi \quad \text{y} \quad B = 2R_a \rho - 2\xi \rho \cos \varphi$$

por lo tanto podemos expresar el potencial efectivo unidimensional en términos de funciones de Bessel e integrales elípticas completas de primera clase en la forma siguiente:

$$V_c(\varphi) = -8 \left( \int_0^{R_t} \frac{\tilde{\rho} J_0^2(k\tilde{\rho})}{\sqrt{A+B}} \mathbf{K}\left(\sqrt{\frac{2B}{A+B}}\right) d\tilde{\rho} + \left( \frac{J_0(kR_t)}{K_0(\chi R_t)} \right)^2 \int_{R_t}^{\infty} \frac{\tilde{\rho} K_0^2(\chi\tilde{\rho})}{\sqrt{A+B}} \mathbf{K}\left(\sqrt{\frac{2B}{A+B}}\right) d\tilde{\rho} \right) \quad (23)$$

La ecuación (20) se resuelve mediante el método de barrido trigonométrico, como se muestra en la siguiente sección.

## 2.2 Método de Barrido Trigonométrico

La ecuación diferencial unidimensional de segundo orden (20) junto con un par de condiciones de frontera, constituyen lo que se denomina un problema de contorno. Existe variedad de métodos computacionales para resolver dichos problemas, dentro de los cuales se encuentran: el método de disparo y los métodos de barrido, entre otros. El método de barrido trigonométrico [31] utiliza coordenadas polares de Poincaré, para reducir la ecuación diferencial de segundo orden a una de primer orden; obteniendo una ecuación trascendente para los niveles energéticos, aún para el caso de potenciales no convencionales. Rescribiendo la ecuación (20) de la siguiente forma:

$$f_s''(\varphi) + \alpha(\varphi)f_s(\varphi) = 0 ; \text{ con } \alpha(\varphi) = R_a^2 [E - E_f - V_c(\varphi)] \quad (24)$$

la ecuación diferencial (24) de segundo orden se reduce a una ecuación diferencial de primer orden a través del siguiente cambio de variables, utilizando coordenadas polares de Poincaré:

$$f_s(\varphi) = A(\varphi) \cos \vartheta(\varphi); \quad f_s'(\varphi) = A(\varphi) \text{sen} \vartheta(\varphi) \quad (25)$$

donde  $A(\varphi)$  y  $\vartheta(\varphi)$  representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré, respectivamente. Derivando la primera relación de (25), y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada  $f'(\varphi)$  en la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(\varphi) = A(\varphi) \frac{\sin \vartheta(\varphi)}{\cos \vartheta(\varphi)} [\vartheta'(\varphi) + 1] \quad (26)$$

Por otro lado sustituyendo las expresiones (25) en la ecuación (24) y utilizando la relación (26), se obtiene la ecuación diferencial para la fase  $\vartheta(\varphi)$ :

$$\vartheta'(\varphi) + [\text{sen}^2 \vartheta(\varphi) + \alpha(\varphi) \cos^2 \vartheta(\varphi)] = 0 \quad (27)$$

Para encontrar la función  $A(\varphi)$  hay que sustituir la expresión (27) para la derivada de  $\vartheta(\varphi)$  en (26) y realizar la integración:

$$A(\varphi) = \exp \left\{ \int_0^\varphi [1 - \alpha(\varphi) \text{sen}(\varphi) \cos(\varphi) - \tan(\varphi) \text{sen}^2(\varphi)] d\varphi \right\}; \quad A(0) = 1 \quad (28)$$

Debido a que el potencial  $V_c(\varphi)$  es simétrico, la solución de la ecuación (20) presentará estados pares e impares. Para los estados pares tenemos que la función de onda  $f_s(\varphi)$  debe cumplir las siguientes condiciones:  $f'_s(0)=0$  y  $f'_s(\pi)=0$ , condiciones de paridad y periodicidad, respectivamente.

Mediante la segunda relación en (25) y las condiciones anteriores, se establece que las condiciones que debe satisfacer la ecuación (27) son las siguientes:

$$\vartheta(0)=0, \vartheta(\pi)=-\pi m; \text{ para } m=0,1,2,\dots \quad (29)$$

aquí  $m$  es el número del nivel. La ecuación diferencial (27) junto con la primera condición en (29) constituyen un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden, el cual puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro  $E_m$  (Energía del nivel  $m$ -ésimo) dado, por lo tanto su solución puede considerarse como una función de dos variables  $\vartheta = \vartheta(\varphi, E_m)$ , la cual junto con la segunda condición de frontera en (29) lleva a la ecuación trascendente para los niveles de energía de los estados pares:

$$\vartheta(\pi, E_m) = -\pi(m+1), \quad m=0,1,2,3\dots \quad (30)$$

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

$$f_s(0)=0 \quad \text{y} \quad f_s(\pi)=0 \quad (31)$$

se derivan las condiciones que debe satisfacer la ecuación (27) para los estados impares:

$$\vartheta(0)=\frac{\pi}{2}, \quad \vartheta(\pi)=-\frac{\pi}{2}(1+2m), \quad \text{para } m=0,1,2,\dots \quad (32)$$

junto con la respectiva ecuación trascendente para sus niveles energéticos:

$$\vartheta(\pi, E_m) = -\pi\left(m + \frac{1}{2}\right), \quad m=0,1,2,\dots \quad (33)$$

Las funciones de onda que describen la rotación azimutal del electrón,  $f_s(\varphi)$ , se obtienen como una solución de los problemas de Cauchy para estados pares (27,29) y para estados impares (27,32), además de la integral (28); y la energía de los diferentes estados, como una solución de las respectivas ecuaciones trascendentes (30 y 33).

---

### 2.3 Método de Diagonalización Exacta

El método de diagonalización exacta se basa en el hecho de que el problema que se quiere resolver se puede dividir en dos partes, una de las cuales tiene solución exacta y su solución conforma un conjunto completo de estados, y la otra se puede considerar como una perturbación. Para ilustrar lo anterior consideremos un sistema con Hamiltoniano  $H$ ,

para el cual se quieren obtener todos sus estados, es decir los autovalores  $E_n$  junto con sus respectivas autofunciones  $|\psi_n\rangle$ . Dicho Hamiltoniano no tiene solución exacta, pero se puede escribir en dos partes, como sigue:

$$H = H_0 + H', \quad (34)$$

donde el Hamiltoniano  $H_0$  es la parte que se puede resolver en forma exacta y su solución constituye un conjunto completo de estados puros. El segundo término del Hamiltoniano completo,  $H'$  no tiene que ser una contribución pequeña en el Hamiltoniano total del sistema, como si debe serlo para el caso de la teoría de perturbaciones. Lo anterior representa una ventaja sobresaliente del método de diagonalización exacta sobre la teoría de perturbaciones. Ahora, para el Hamiltoniano  $H_0$  tenemos:

$$H_0 |\varphi_m\rangle = E_m |\varphi_m\rangle, \quad (35)$$

donde todos las  $|\varphi_m\rangle$  constituyen un conjunto completo. Debido a la condición anterior de tener un conjunto completo, se puede describir cualquier estado del sistema inicial  $|\psi_n\rangle$  como combinación lineal de las  $|\varphi_m\rangle$ :

$$|\psi_n\rangle = \sum_m C_m |\varphi_m\rangle \quad (36)$$

Tenemos entonces que las  $|\psi_n\rangle$  serán estados mixtos, es decir mezcla de los estados puros  $|\varphi_m\rangle$ . La ecuación de Schrödinger que describe el sistema completo está dada como:

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (37)$$

la cual se puede reescribir de la siguiente forma, usando la ecuación (36):

$$\sum_m C_m H |\varphi_m\rangle = E_n \sum_m C_m |\varphi_m\rangle \quad (38)$$

Ahora si se escribe  $H$  como en (34), tenemos:

$$\sum_m C_m (H_0 + H') |\varphi_m\rangle = E_n \sum_m C_m |\varphi_m\rangle \quad (39)$$

Multiplicando ambos lados de (39) por  $\langle\varphi_{m'}|$ :

$$\begin{aligned} \sum_m C_m \langle\varphi_{m'}| (H_0 + H') |\varphi_m\rangle &= E_n \sum_m C_m \langle\varphi_{m'}||\varphi_m\rangle \\ \sum_m C_m [H_0 \langle\varphi_{m'}||\varphi_m\rangle + \langle\varphi_{m'}| H' |\varphi_m\rangle] &= E_n \sum_m C_m \langle\varphi_{m'}||\varphi_m\rangle \end{aligned} \quad (40)$$

Se tiene que  $\langle \varphi_{m'} | \varphi_m \rangle = \delta_{mm'}$ ,  $H_0 \langle \varphi_{m'} | \varphi_m \rangle = E_m$  y  $\langle \varphi_{m'} | H' | \varphi_m \rangle = H'_{mm'}$ , con lo cual se llega a la siguiente relación:

$$\sum_m [(E_n - E_m) \delta_{mm'} - H'_{mm'}] C_m = 0 ; m, m' = 1, 2, 3, \dots, k \quad (41)$$

La condición de que el anterior sistema de ecuaciones tenga una solución diferente de cero lleva a la siguiente ecuación secular de grado  $k$ :

$$\det \|(E_n - E_m) \delta_{mm'} - H'_{mm'}\| = 0, \quad m, m' = 1, 2, 3, \dots, k \quad (42)$$

Diagonalizando la ecuación secular (42), mediante alguna técnica numérica de diagonalización de matrices, se puede obtener el  $n$ -ésimo nivel de energía  $E_n$  y su correspondiente función de onda  $\psi_n$ .

En el caso de nuestro problema particular, se quiere resolver la ecuación de onda unidimensional (20) que aparece para el movimiento lento del electrón en dirección azimutal, dicha ecuación está relacionada con el Hamiltoniano (14), el cual al renormalizarlo por  $R_a^2$  adquiere la forma:

$$\tilde{H}_s = R_a^2 H_s = -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \tilde{V}_c(\varphi) ; \text{ con } \tilde{V}_c(\varphi) = R_a^2 \int_0^\infty \tilde{\rho} d\tilde{\rho} \int_0^{2\pi} d\theta V_c(\tilde{\rho}, \theta, \varphi) f_f^2(\tilde{\rho}) \quad (43)$$

En el Hamiltoniano (43) se ve claramente que el término que puede ser resuelto en forma exacta y cuya solución constituye un conjunto completo de estados puros, es:

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (44)$$

La ecuación (44) corresponde al Hamiltoniano de un rotor rígido unidimensional, las funciones de onda que describen los estados de dicho sistema están dadas como exponenciales complejas de la forma

$$\varphi_m = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (45)$$

donde  $m$  es el número cuántico azimutal del sistema. Los valores de la energía están dados como

$$E_m = m^2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (46)$$

Ahora, calculando los elementos matriciales de la parte restante del Hamiltoniano (43), obtenemos:

$$\tilde{V}_{m,m'} = \langle \varphi_{m'} | \tilde{V}_c | \varphi_m \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(m-m')\varphi} \tilde{V}_c(\varphi) d\varphi \quad (47)$$

Nótese que dicha expresión corresponde a la transformada de Fourier para el potencial efectivo  $\tilde{V}_c(\varphi)$ . Debido a la simetría par que presenta dicho potencial efectivo,  $\tilde{V}_c(\varphi) = \tilde{V}_c(-\varphi)$ , tenemos que los elementos  $\tilde{V}_{m,m'}$  conforman una matriz simétrica:

$$\tilde{V}_{m,m'} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{Cos}[(m-m')\varphi] \tilde{V}_c(\varphi) d\varphi \quad (48)$$

y en forma análoga, como se hizo para la ecuación (41), se tiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\sum_m [(E_{sn} - E_m) \delta_{mm'} - \tilde{V}_{mm'}] C_m = 0 ; m, m' = 1, 2, 3, \dots k \quad (49)$$

de donde obtenemos la ecuación secular

$$\det \left\| (E_{sn} - E_m) \delta_{mm'} - \tilde{V}_{mm'} \right\| = 0 \quad (50)$$

la cual se debe diagonalizar para obtener el  $n$ -ésimo nivel de energía para el movimiento lento  $E_{sn}$  y la correspondiente función de onda  $\psi_n$  de cada estado.

## 2.4 Densidad de estados

El conocimiento de la densidad de estados es fundamental para el estudio de propiedades ópticas y de transporte electrónico en las distintas heteroestructuras ya mencionadas. Para determinar la densidad de estados de impurezas en un QR, consideramos un modelo en el cual las impurezas se encuentran distribuidas homogéneamente en un plano, donde el número de donadoras  $dN$  localizadas dentro de un anillo de radio interno  $\xi_r$  y radio externo  $\xi_r + d\xi_r$ , es igual a,  $dN = 2n\pi \xi d\xi = 2n\pi \xi \left| \frac{d\xi(E_b)}{dE_b} \right|^{-1} dE_b$ , donde  $n$  es la densidad de impurezas por unidad de área de la sección transversal y  $E_b(\xi)$  es la energía de enlace de la donadora, la cual depende de la posición de la impureza al eje azimutal ( $z$ ). Esta energía de enlace es muy sensible al potencial de confinamiento y tendrá efectos considerables sobre la densidad de estados de impurezas por unidad de energía de enlace,  $g(E_b)$  la cual está dada por:

$$g(E_b) = 2\pi n \xi(E_b) \left| \frac{d\xi(E_b)}{dE_b} \right| = 2\pi n \xi(E_b) \left| \frac{dE_b(\xi)}{d\xi} \right|^{-1} ; \quad (51)$$

la función (51) se puede calcular una vez se haya determinado  $\xi_\rho(E_b)$ , lo cual puede hacerse mediante interpolación cúbica a las curvas  $E = E_b(\xi_\rho)$ .

---

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

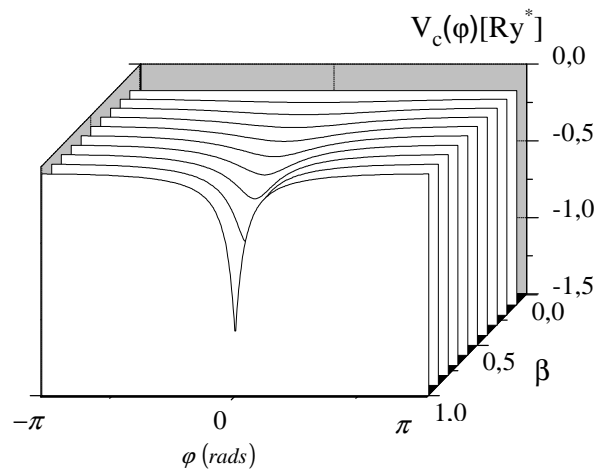
---

En las siguientes secciones se presentan diversos resultados que muestran cómo la presencia de una impureza cargada positivamente, influye sobre las funciones de onda y los niveles de energía de un electrón confinado en un QR delgado con forma toroidal.

---

#### 3.1 Potencial Periódico Unidimensional

El potencial unidimensional dado por la relación (21), es el potencial efectivo que siente el electrón durante su movimiento azimutal. Las curvas para dicho potencial se muestran en la figura 4, para un QR con  $R_a = 10a_0^*$ ,  $R_t = 1a_0^*$  y para diferentes valores de  $\beta = \xi/R_a$ , parámetro que como se ve, está relacionado con la posición de la impureza.



**Fig. 4** Curvas del potencial efectivo para la interacción Coulombiana  $V_c(\varphi)$  considerando diferentes posiciones de la impureza

En los casos cuando  $\beta$  tiende a cero, es decir, cuando la impureza se aproxima al eje  $z$ , ó  $\beta$  llega a ser considerablemente mayor que uno (impureza lejos del anillo), el potencial efectivo tiende a presentar un perfil constante. Esta forma en el potencial, hace que el movimiento del electrón confinado, adquiera la forma típica de un rotor isotrópico unidimensional. Lo anterior muestra cómo la presencia de una impureza centrada o localizada lejos del QR, no introduce más que un potencial constante adicional, lo cual no produce cambios importantes sobre el comportamiento del electrón confinado.

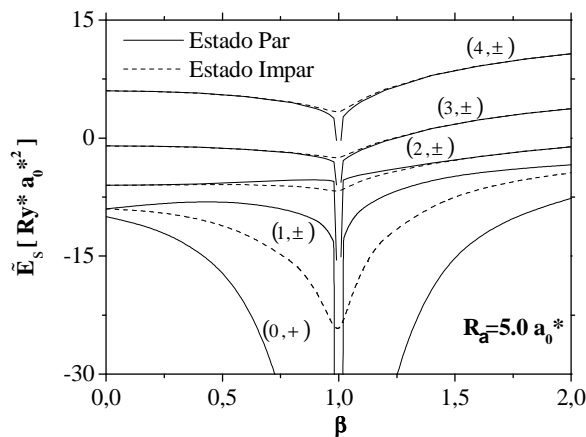
La presencia de la impureza cargada negativamente al estar descentrada causa una ruptura en la simetría rotacional del potencial efectivo; por lo tanto, para valores intermedios de  $\beta$  las curvas adquieren la forma típica de un pozo con un único mínimo para  $\varphi = 0$ , el cual se hace más y más profundo en la medida en que la impureza se aproxima al centro del anillo ( $\beta \rightarrow 1$ ). Esta ruptura de la simetría rotacional del potencial hace que el electrón tenga ahora el comportamiento típico de un rotor anisotrópico unidimensional, lo cual posibilita la aparición de efectos interesantes relacionados con la posición de la impureza. Como puede apreciarse en la figura 4, el potencial efectivo es simétrico respecto a  $\varphi = 0$  y además es periódico, con periodo igual a  $2\pi$  radianes.

### 3.2 Efecto de la posición de la impureza sobre el espectro energético de una $D^0$ en QR

Como ya se mencionó en la sección anterior, la atracción Coulombiana introducida por la presencia de una impureza cargada positivamente y descentrada, destruye la invarianza rotacional del movimiento azimutal del electrón confinado al interior del QR.

De igual manera, la posición de dicha impureza tiene un efecto significativo sobre los niveles energéticos del electrón. Como puede apreciarse claramente en la figura 4, el potencial que introduce la impureza tiene simetría par respecto a la variable angular  $\varphi$ , lo que implica la existencia de dos conjuntos de valores propios al resolver el problema (20): uno de ellos corresponde a los estados pares ( $m, +$ ) con  $m = 0, 1, 2, \dots$  y el otro a los estados impares ( $m, -$ ) con  $m = 1, 2, \dots$

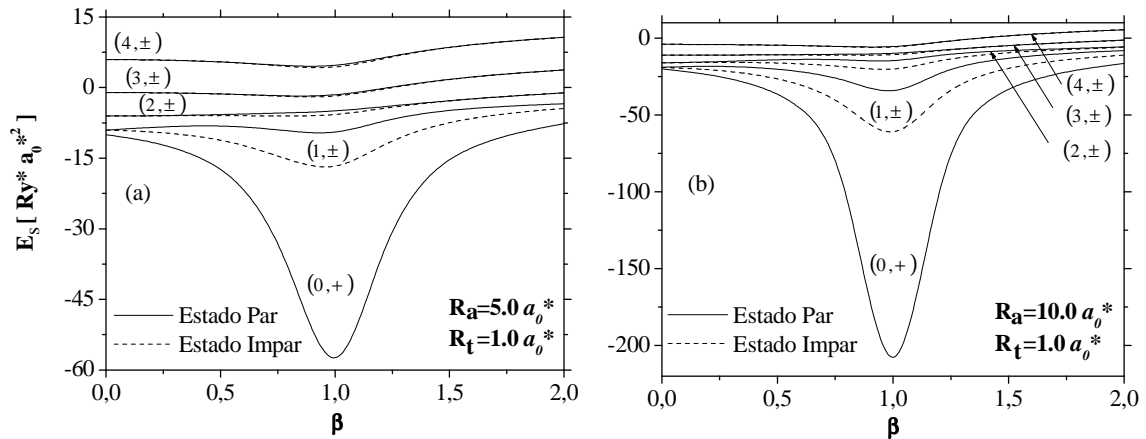
Inicialmente, se considera el caso límite de un anillo muy delgado, es decir, un QR unidimensional cuyo modelo fue descrito en la sección 1.4. Para dicho sistema, mediante el método de barrido trigonométrico se resuelve la ecuación de onda unidimensional que resulta para el Hamiltoniano (6). Los resultados de los cálculos de las energías renormalizadas de los estados más bajos en función de la posición de la impureza son mostrados en la figura 5.



**Fig. 5.** Energías renormalizadas para el estado base y primeros estados excitados de la  $D^0$  en función de la posición de la impureza para un QR unidimensional con radio  $R_a = 5.0 a_0^*$

Para los casos cuando  $\beta \rightarrow 0$  (donadora centrada) y cuando  $\beta \rightarrow \infty$  (impureza alejada fuera del anillo), el electrón confinado presenta el comportamiento típico de un rotor rígido unidimensional, y se observa que los valores de energía en las gráficas coinciden exactamente con los valores dados por (7). Por otra parte, cuando  $\beta \rightarrow 1$ , un comportamiento interesante aparece en el espectro energético, se rompe la degeneración que presentan los niveles para  $\beta = 0$ , y la separación entre los niveles pares e impares se incrementa drásticamente debido al hecho de que los estados pares llegan a ser inestables y sus respectivos valores de energía tienden casi verticalmente a  $-\infty$ , mientras los estados impares adquieren valores negativos finitos que corresponden a los valores obtenidos por la expresión (10). Lo anterior se puede justificar acudiendo al hecho de que las funciones de onda, para los estados pares, presentan valores máximos en el punto donde el potencial  $\tilde{V}_c(\varphi)$  se hace mínimo, o dicho de otra manera, el punto donde está ubicada la impureza; por lo tanto, la máxima probabilidad de encontrar el electrón estará precisamente sobre la impureza, lo cual llevará a que el electrón necesariamente colapse hacia la impureza, dado que no tiene más que un grado de libertad para moverse. En este mismo sentido se puede justificar la estabilidad de los estados impares, ya que sus respectivas funciones de onda presentan un valor de cero para la posición  $\varphi = 0$  y sus respectivos valores máximos están separados de la posición de la impureza, por lo tanto, la probabilidad de que el electrón colapse en la impureza es nula.

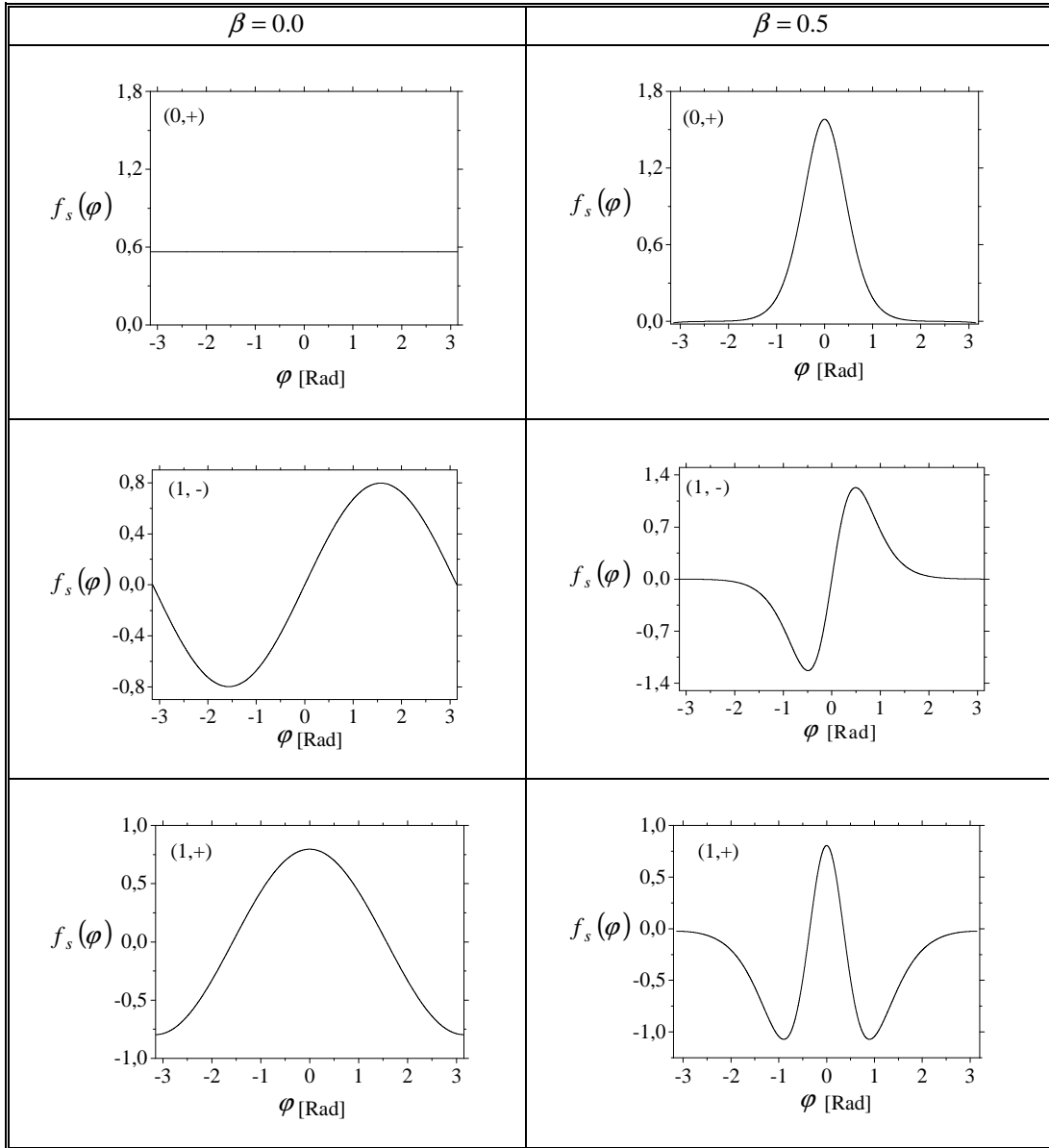
Ahora se consideran los resultados de los cálculos para el QR delgado con forma toroidal, los cuales fueron obtenidos mediante el método de barrido trigonométrico aplicado a la ecuación de onda unidimensional dada en (20).



**Fig. 6.** Energías renormalizadas para los estados más bajos de la  $D^0$  en función de la posición de la impureza para un QR con  $R_t = 1.0 a_0^*$  y radios: (a)  $R_a = 5.0 a_0^*$ , y (b)  $R_a = 10.0 a_0^*$

Como un primer resultado se tienen las figuras 6a y 6b, donde se muestran las energías renormalizadas del movimiento de rotación azimutal  $E_s$ , para los estados más bajos, en función de la posición de la impureza respecto al eje  $z$ , para dos radios diferentes del anillo. Tal vez el principal aspecto a destacar, al realizar un análisis de estas curvas, es el hecho de que para un QR con sección transversal de ancho finito aparece estabilidad en los niveles pares del espectro energético, los cuales, como se mostró anteriormente, resultaron

inestables para el caso unidimensional. Dicho comportamiento aparece, en virtud de que para un QR con un espesor dado, el electrón tiene dos grados de libertad adicionales para moverse alrededor de la impureza, sin tener que caer necesariamente hacia el núcleo de la  $D^0$ . Además en nuestro modelo se tiene que el potencial de confinamiento es de barrera finita, lo cual permite que el electrón pueda tunelar, por lo tanto existe cierta probabilidad de encontrar al electrón en la vecindad inmediata fuera del anillo

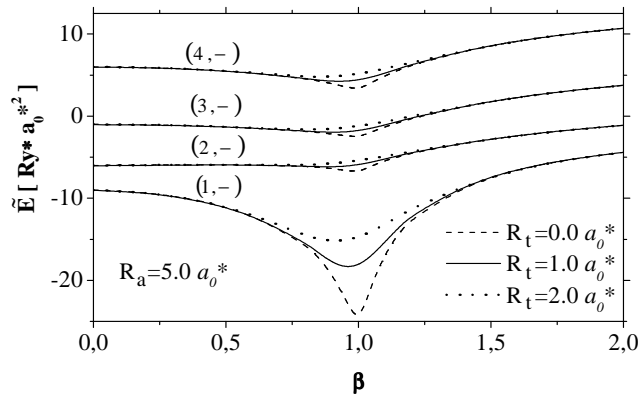


**Fig. 7.** Funciones de onda en dirección azimutal para los tres estados más bajos de la  $D^0$  en un QR con radio  $R_a = 10.0 a_0^*$ , considerando dos posiciones de la impureza  $\beta = 0.0$  y  $\beta = 0.5$

Por otro lado, las figuras 6a y 6b revelan claramente como la posición de la impureza tiene una fuerte influencia sobre la energía del estado base, la cual decrece notoriamente hacia un valor mínimo cuando  $\beta \rightarrow 1$ . Esto es resultado del acople que existe entre el potencial Coulombiano y el potencial de confinamiento, lo cual hace que la interacción electrón-

impureza dependa de la posición de la impureza. Otro aspecto apreciado en las figuras 6a y 6b, relacionado con el radio del QR, es que para  $R_a$  pequeños, el término de la energía cinética en el Hamiltoniano (14) predomina, y el espectro en este caso es rotacional en su mayor parte, muy similar al de un rotor rígido, con pocos niveles negativos de energía. Por el contrario, para radios grandes, el término correspondiente a la energía potencial llega a ser más importante, lo cual hace que se tengan más niveles del espectro energético con energías negativas y presenten una distribución típica para impurezas hidrogenoides confinadas en heteroestructuras unidimensionales.

En la figura 7 se puede observar el marcado efecto que tiene la posición de la impureza sobre las funciones de onda de los estados más bajos, en dirección azimutal. Cuando la impureza se acerca al interior del anillo se tiene un incremento notable en la interacción Coulombiana, lo cual hace que los estados se hagan cada vez más localizados. La transformación más drástica se da para la función de onda del estado base de la  $D^0$ , la cual pasa de ser una función extendida a ser fuertemente localizada. Lo anterior está en consonancia con la considerable caída que sufre la energía. Por otro lado, la posición de la impureza tiene menos influencia sobre los niveles de energía más altos debido a que el electrón en estos estados tiene mayor energía cinética, y por lo tanto, las respectivas funciones de onda difícilmente se hacen localizadas; tal efecto puede apreciarse en la figura 7.

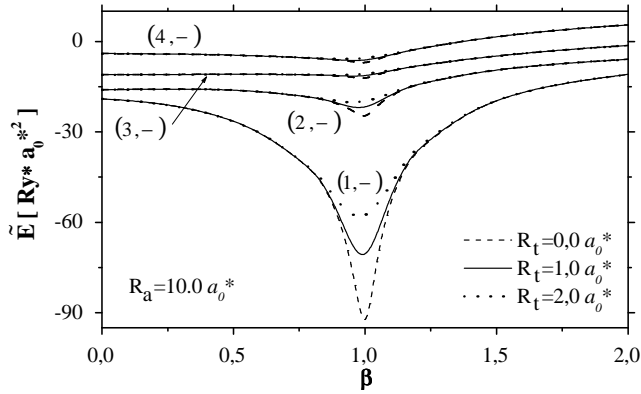


**Fig. 8.** Energías renormalizadas para los estados impares más bajos de la  $D^0$  en función de la posición de la impureza para un QR con radio  $R_a = 5.0 a_0^*$  y diferentes radios de la sección transversal.

En las figuras 8 y 9 se muestran las curvas que describen las energías renormalizadas de los tres niveles impares más bajos para la  $D^0$ , en función de la distancia de la impureza al eje  $z$ , para  $R_a = 5.0 a_0^*$  y  $R_a = 10.0 a_0^*$ , respectivamente. Las líneas a trazos en estas figuras corresponden a un QR unidimensional ( $R_t = 0.0$ ), calculadas en forma exacta para el Hamiltoniano (6), mientras que las líneas sólidas y punteadas corresponden a QR con sección transversal delgada  $R_t = 1.0 a_0^*$  y  $R_t = 2.0 a_0^*$ , respectivamente.

Se ve cualitativamente que el comportamiento de las curvas para diferentes  $R_t$  es similar, sin embargo las curvas se hacen más suaves cuando el radio de la sección transversal se incrementa. También puede verse cuantitativamente que para la  $D^0$  centrada ( $\beta = 0.0$ ),

las posiciones de los niveles de energía en el extremo izquierdo de las figuras 8 y 9 coinciden exactamente con los valores de las energías renormalizadas dadas por la primera relación en (10).



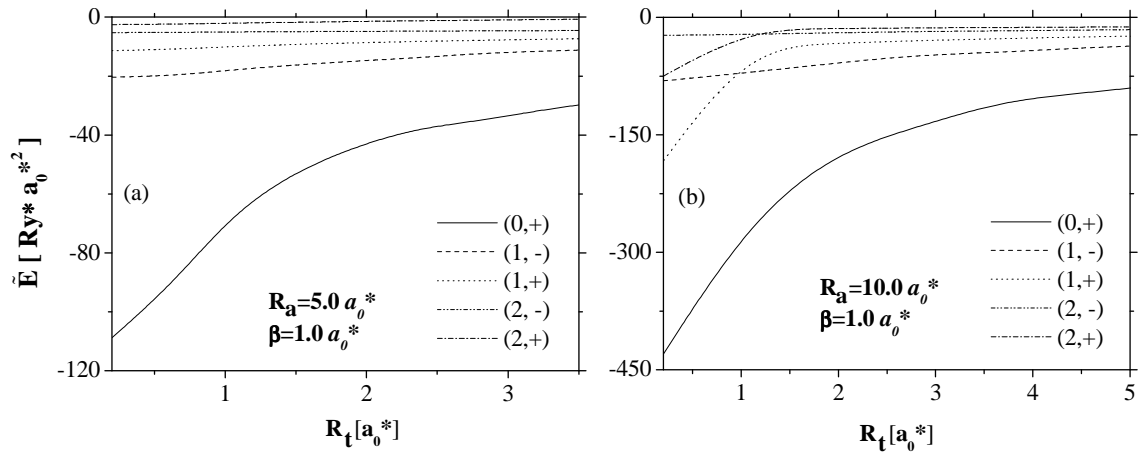
**Fig. 9.** Energías renormalizadas para los estados impares más bajos de la  $D^0$  en función de la posición de la impureza para un QR con radio  $R_a = 10.0 a_0^*$  y diferentes radios de la sección trasversal.

Cuando  $\beta = 1.0$  y  $R_t = 0.0$ , se observa una excelente concordancia entre los valores de la energía para los estados mostrados en las figuras 8 y 9, con los valores conocidos para un sistema hidrogenoide unidimensional dados por la relación (10). Lo anterior da lugar a que una  $D^0$  confinada en un QR unidimensional se pueda interpretar como un sistema hidrogenoide unidimensional con condiciones de frontera periódicas. Cuando el parámetro  $\beta$  se incrementa desde 1 hasta infinito, las energías comienzan a crecer y tienden por el extremo derecho de las figuras 8 y 9 a los valores dados por la segunda relación en (10).

### 3.3 Efectos de los parámetros geométricos del anillo sobre el espectro energético de una $D^0$ en QR

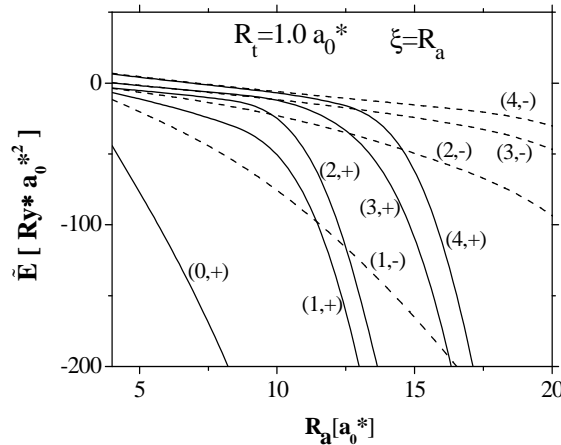
Las figuras 10a y 10b muestran la dependencia de las energías renormalizadas para los cinco niveles más bajos respecto al radio de la sección transversal del QR, para  $R_a = 5.0 a_0^*$  y  $R_a = 10.0 a_0^*$ , respectivamente. Para los dos casos se consideró la impureza en el interior del anillo con  $\beta = 1.0$ , o lo que es igual, para  $\xi = R_a$ . Al comparar los resultados mostrados en las figuras 10a y 10b, en el límite cuando  $R_t \rightarrow 0$ , con los valores conocidos para un sistema hidrogenoide unidimensional dados por la relación (10), se observa una tendencia de los niveles de los estados impares hacia los valores previstos por esta última relación, lo cual muestra una similitud entre estos dos problemas uniparticulares en una dimensión. Por otra parte, en la figura 10b se observa un comportamiento peculiar, para valores de  $R_t \leq 2a_0^*$ , las energías renormalizadas para los estados pares experimentan un incremento apreciable en la pendiente de descenso, llegando al punto de cruzar y rebasar los niveles correspondientes a los estados impares, que están inmediatamente por debajo de estos. Tal comportamiento era de esperarse, ya que en la misma medida en que  $R_t$  sea

menor, el QR se acerca cada vez mas al modelo unidimensional analizado en la sección anterior (figura 5), y como se mostró, tal sistema exhibe inestabilidad en los estados pares.



**Fig. 10.** Energías renormalizadas para algunos de los estados más bajos de la  $D^0$  en función del radio de la sección trasversal con  $\beta=1.0$  y para un QR con radios (a)  $R_a = 5.0 a_0^*$  y (b)  $R_a = 10.0 a_0^*$ .

En la figura 11 se presentan las energías correspondientes a los cinco estados pares (líneas sólidas) y cuatro estados impares (líneas a trazos) más bajos, en función del radio del QR, para el caso en el cual la impureza está localizada en el centro del interior del anillo. Se observa cómo las energías correspondientes a los niveles pares inicialmente decrecen en forma suave; en esta parte la energía cinética prima sobre la atracción Coulombiana y el movimiento del electrón es más rotacional que vibracional. Pero a medida que el radio se incrementa, la relación entre las energías cinética y potencial se invierte y las energías de los estados pares comienzan a caer rápidamente.



**Fig. 11.** Energías normalizadas para algunos de los estados más bajos de la  $D^0$  en función del radio medio del anillo, para un QR con radio  $R_t = 1.0 a_0^*$  y con  $\beta=1.0$

La vertiginosa caída que revelan los estados pares en sus niveles de energía al incrementar el radio medio del QR se puede explicar también desde un punto de vista topológico, en

vista de que sí se mantiene fijo el valor de  $R_t$  mientras se aumenta  $R_a$ , tal estructura pasará de ser tridimensional a ser cada vez más parecida a un sistema unidimensional.

### 3.4 Comparación entre los métodos: Barrido trigonométrico y Diagonalización exacta

Para chequear la precisión de los cálculos obtenidos mediante el método de barrido trigonométrico [31], se encontraron los valores propios del Hamiltoniano renormalizado (43) usando el método de diagonalización exacta [21], que fue descrito en la sección 2.3 y el cual, en este caso, coincide con el método de series de Fourier. En todos los casos, la discrepancia entre los resultados obtenidos por ambos métodos no llegó a exceder el 1%.

ESTADO ( $m, \pm$ )	ENERGÍA [ $Ry^* a_0^{*2}$ ]		$\Delta =  E_S - E_D $
	B. Trigonométrico	Diagonalización	
(0,+)	-273.2	-270.0	3.20
(1,-)	-71.89	-71.50	0.39
(1,+)	-39.13	-38.84	0.29
(2,-)	-21.88	-21.81	0.07
(2,+)	-15.67	-15.60	0.07
(3,-)	-11.33	-11.31	0.02
(3,+)	-10.14	-10.13	0.01

**Tabla.1** Valores de la energía normalizada para un anillo con  $R_a = 10.0a_0^*$ ,  $R_t = 1.0a_0^*$  y  $\beta = 1.0$  obtenidos mediante los métodos de barrido trigonométrico y diagonalización exacta (matriz 61x61)

En la tabla 1 se muestran los resultados de los cálculos realizados por los dos métodos, barrido trigonométrico y diagonalización exacta. Para tales cálculos se consideró un QR con  $R_a = 20.0a_0^*$ ,  $R_t = 1.0a_0^*$  y  $\beta = 1.0$ . En el método de diagonalización se diagonalizó numéricamente una matriz simétrica real de 61x61, la cual se originó a partir de las expresiones (48) y (49) tomando los primeros 61 estados puros, obtenidos para el Hamiltoniano (44).

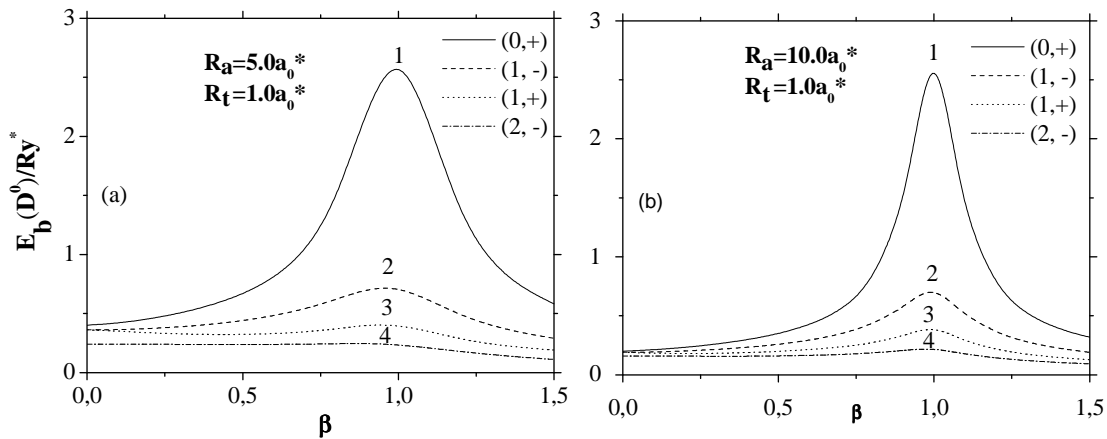
ESTADO NUEVO	COMPOSICIÓN DE ESTADOS PUROS (%)							%Total
	(0,+) <sub>p</sub>	(1,-) <sub>p</sub>	(1,+) <sub>p</sub>	(2,-) <sub>p</sub>	(2,+) <sub>p</sub>	(3,-) <sub>p</sub>	(3,+) <sub>p</sub>	
(0,+)	46.78	46.22	2.20	2.28	0.58	0.60	0.23	98.89
(1,-)	3.03	3.18	42.83	42.52	2.65	2.75	0.70	97.66
(1,+)	0.23	0.25	4.41	4.72	40.75	40.06	2.95	93.37

**Tabla.2** Composición % de los estados mixtos de una  $D^0$  en un anillo con  $R_a = 10.0a_0^*$ ,  $R_t = 1a_0^*$  y  $\beta = 1.0$  obtenidos mediante el método de diagonalización exacta (matriz 61x61)

El método de diagonalización exacta permite dar una interpretación adicional a la solución del problema. Como se mostró en la sección 2.3, el problema en ausencia de la impureza corresponde a un rotor rígido unidimensional, con estados puros dados por la expresión (45). Ahora, cuando se introduce la impureza, el potencial de interacción Coulombiana que aparece, se toma como una perturbación del sistema original (rotor rígido), la cual produce una transformación de los estados iniciales (estados puros) en unos estados nuevos que son mezcla de los primeros (estados mixtos). La información concerniente a la composición de los estados nuevos en términos de los estados puros, está dada en los vectores propios que se obtienen al resolver el problema. En la tabla 2, se dan las composiciones de algunos de los estados mixtos más bajos, en términos de los primeros estados puros dados por (45). De los datos expuestos se observa que el estado base nuevo está principalmente compuesto de los dos estados puros más bajos, y se aprecia como, para los estados (1,-) y (1,+) la composición cambia, y predominan en este caso estados puros más altos.

### 3.5 Energías de enlace para los estados más bajos de una $D^0$ en QR

Para analizar la existencia de estados ligados de la  $D^0$  en el QR, se ha definido la energía de enlace  $E_b(D^0)$  como la diferencia entre la energía obtenida para el electrón libre y la energía del sistema ligado electrón-ión  $E(D^0)$ . En este sentido la energía de enlace está relacionada con la interacción Coulombiana entre el electrón y el núcleo de la donadora.



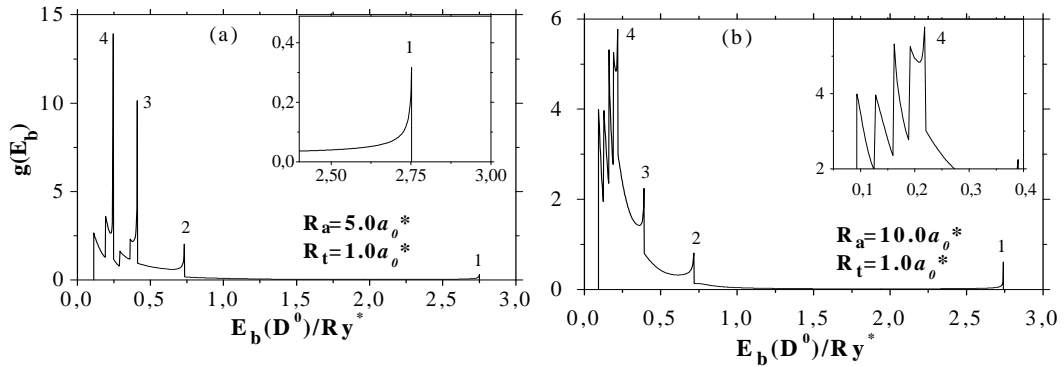
**Fig. 12.** Energías de enlace para los cuatro estados más bajos de la  $D^0$  en función de la posición de la impureza, para un QR con  $R_t = 1.0a_0^*$ , con radios: (a)  $R_a = 5.0a_0^*$  y (b)  $R_a = 10.0a_0^*$

Los cálculos de las energías de enlace para los cuatro estados más bajos son presentados en la figura 12. Para entender el comportamiento que muestran dichos resultados se debe tener en cuenta que, independientemente de la posición de la impureza, el electrón siempre estará localizado casi completamente dentro del anillo, por lo tanto, la separación entre el electrón y la impureza decrecerá cuando esta última se acerque al anillo y viceversa. En

consecuencia, cuando el parámetro  $\beta$  se incrementa desde  $\beta = 0$  hasta  $\beta = 1$ , las energías de enlace para la donadora  $E_b(D^0)$  en la figura 12 aumentan hasta alcanzar un máximo, debido a que la distancia media entre la impureza y el electrón se reduce. De igual manera, cuando  $\beta$  se hace mayor que la unidad, la separación entre la impureza y el electrón se incrementa otra vez, y por lo tanto  $E_b(D^0)$  comienza a descender rápidamente para el estado base y suavemente para los estados excitados.

### 3.6 Densidad de estados (DOS) para una $D^0$ en QR

En las figuras 13a y 13b se presentan las curvas de densidad de estados  $g(E_b)$ , de impurezas neutras en un QRs de forma toroidal considerando dos radios diferentes  $R_a = 5.0a_0^*$  y  $R_a = 10.0a_0^*$ , y manteniendo el mismo radio transversal en los dos casos  $R_t = 1.0a_0^*$ . La forma que muestran estas curvas está determinada por el comportamiento de las curvas de energía de enlace al variar la posición de la impureza (figuras 12a y 12b). Tal relación está dada en la expresión (51), donde se define la DOS en términos de la variación de  $E_b(\xi)$  respecto a la posición de la impureza.



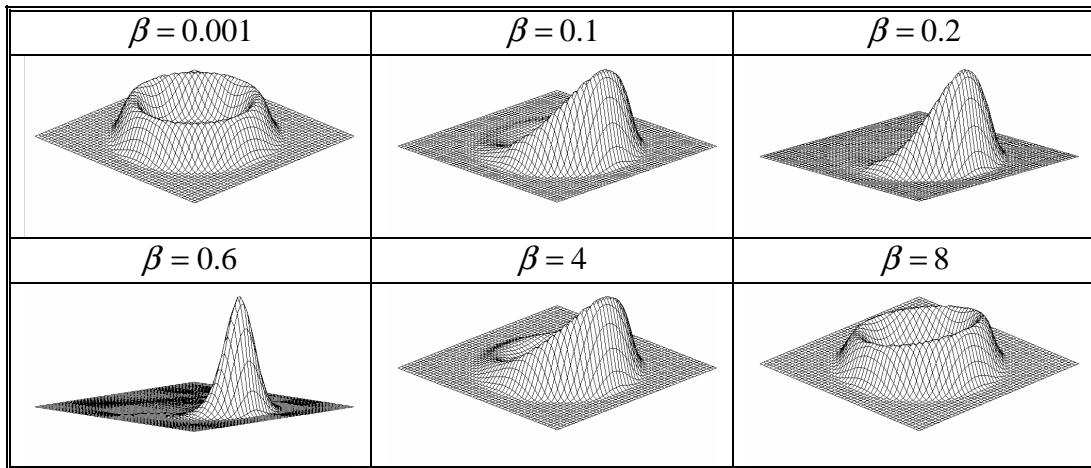
**Fig. 13.** Densidad de estados de impurezas neutras en QRs de forma toroidal con  $R_t = 1.0a_0^*$  y con radios: (a)  $R_a = 5.0a_0^*$  y (b)  $R_a = 10.0a_0^*$

Se puede observar en las figuras 13a y 13b una serie de picos, etiquetados con números del 1 al 4, los cuales son conocidos como singularidades de Van Hove. Los números indican la correspondencia con los máximos de las curvas de energía de enlace mostrados en las figuras 12a y 12b. De lo anterior, se puede determinar que existe una notable contribución a la DOS por parte de los diferentes estados más bajos, cuando la impureza se encuentra ubicada en el interior del anillo. Por otro lado, los picos correspondientes a las energías de enlace para los estados excitados más altos son desplazados hacia la región infrarroja y sus alturas se incrementan en forma sucesiva. Además de los cuatro picos etiquetados, se puede observar la presencia de cuatro picos adicionales los cuales corresponden a los valles que presentan las energías de enlace cuando  $\beta \rightarrow 0$ .

### 3.7 Cristalización de Wigner para una $D^0$ en QR

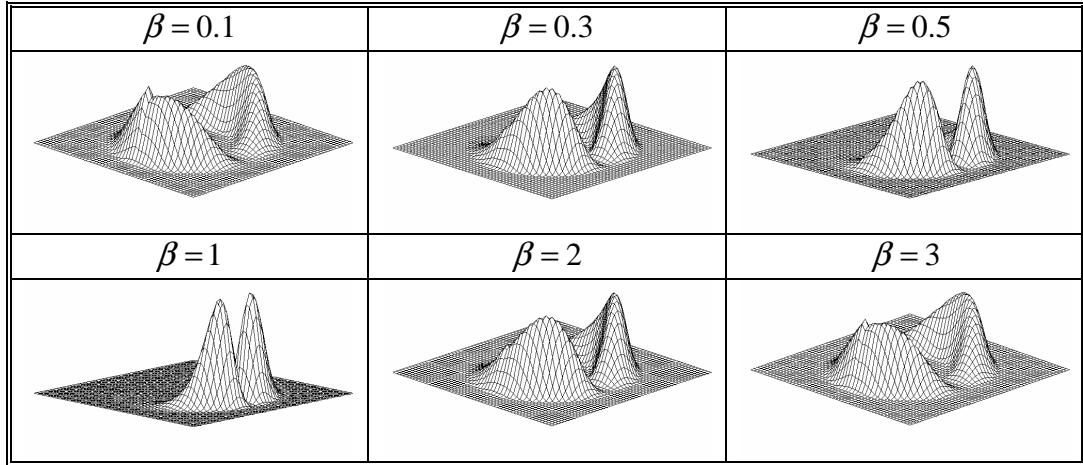
Ya se ha mencionado el papel esencial que desempeña la posición de la impureza, en lo que se refiere a la forma del espectro energético y de las funciones de onda correspondientes a cada estado. Para observar mejor este efecto se ha calculado la densidad de probabilidad electrónica en el plano  $x$ - $y$  para los dos estados más bajos, considerando diferentes posiciones de la impureza. Estos resultados se presentan en las figuras 14 y 15.

Las superficies de la figura 14 corresponden al estado base de la  $D^0$  y muestran claramente cómo la distribución a lo largo del anillo se hace cada vez más inhomogénea cuando la impureza se aproxima al interior del QR, transformándose de una distribución para un movimiento rotacional a lo largo de todo el anillo, en una distribución típica para un movimiento oscilatorio alrededor del punto más cercano a la impureza dentro del anillo. Lo anterior sumado al comportamiento de las curvas de energía al variar las dimensiones del QR (figuras 10 y 11) son manifestaciones de la existencia de una transición de Wigner [33-35].



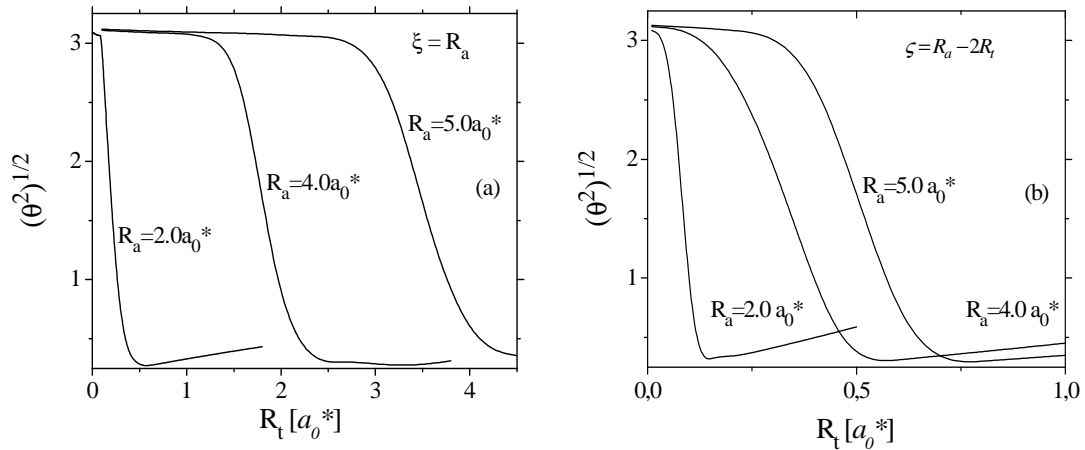
**Fig. 14.** Densidad de probabilidad electrónica en el plano  $x$ - $y$  para diferentes posiciones de la impureza ( $\beta$ ), en el estado  $(0,+)$ , y confinada en un QR con  $R_a = 5.0a_0^*$  y  $R_t = 2.0a_0^*$

Las superficies presentadas en la figura 15 corresponden al primer estado excitado de la  $D^0$ , y muestran claramente cómo la distribución de densidad electrónica se hace más localizada cuando la impureza se aproxima al interior del QR, de igual manera, retorna al estado inicial, cuando la impureza se aleja del QR. Adicionalmente, al comparar las superficies de distribución de densidad electrónica de la figura 14, con las de la figura 15, se distingue cómo la distribución para el estado base sufre un cambio más notable en su forma, cuando se aproxima la impureza al anillo, que el experimentado por el primer estado excitado.



**Fig. 15.** Densidad de probabilidad electrónica en el plano  $x$ - $y$  para diferentes posiciones de la impureza ( $\beta$ ) en el estado  $(1,-)$ , y confinada en un QR con  $R_a = 5.0 a_0^*$  y  $R_t = 2.0 a_0^*$

A fin de asegurar la existencia de una transición de Wigner, se calculó adicionalmente la desviación cuadrática media de la posición angular del electrón, con respecto a la posición de equilibrio (punto medio dentro del QR), en función del radio de la sección transversal del anillo, para QRs de diferentes tamaños y diferentes posiciones de la impureza. Estos resultados se presentan en las figuras 16a y 16b.



**Fig. 16.** Desplazamiento angular cuadrático medio del electrón respecto de la posición de equilibrio en función de  $R_t$ , para la impureza (a) dentro y (b) fuera del QR.

Los saltos agudos observados en estas curvas están relacionados con la transición de un movimiento rotacional extendido a uno oscilatorio fuertemente localizado. Dicha transición se introduce al realizar un cambio en la dimensión del espacio efectivo del QR, y constituye una manifestación característica de la existencia de una transición de Wigner en heteroestructuras con forma de anillo.

---

## SEGUNDA PARTE

# $D^-$ CONFINADA EN UN QR DELGADO

---

---

### GENERALIDADES

Una impureza donadora neutra ( $D^0$ ), inmersa en un semiconductor, puede capturar un electrón extra para formar una impureza cargada negativamente ( $D^-$ ). Una  $D^-$  es uno de los más simples sistemas electrónicos de “pocas partículas”, y se considera como el sistema de estado sólido análogo al ión  $H^-$  de la física atómica, el cual, hasta la fecha, no ha podido resolverse en forma exacta. Existe una descripción detallada de estudios realizados entre los años 30’s y 50’s para sistemas atómicos de dos electrones [36] en los cuales se demostró que entre menor carga nuclear tenga el sistema, el efecto de la correlación electrónica se hace más importante. Por tal razón, este sistema se hace interesante y puede usarse como modelo de prueba para verificar la eficiencia y la exactitud de los diferentes métodos de la teoría cuántica de pocas partículas. Como se ya se ha mencionado, los recientes avances en lo que se refiere a técnicas de fabricación de heteroestructuras semiconductoras, han hecho posible confinar estos sistemas de pocas partículas en estructuras de dimensionalidad reducida, como pozos, hilos, puntos o anillos cuánticos. Para el caso de los QD’s, al confinar en su interior una  $D^-$ , llegan a ser los

análogos artificiales del ión  $H^-$ . En este sentido, si la estructura fuese un QR delgado, se tendrá que la  $D^-$  confinada de esta manera, podrá ser considerada como un ión  $H^-$  casi-unidimensional. A primera vista, el problema de una  $D^-$  confinada en una heteroestructura semiconductor, no parece ser muy diferente del de una  $D^-$  en el bloque, o del de su análogo atómico, el ión  $H^-$  en tres dimensiones, no obstante, se tienen diferencias notables, debido al potencial de confinamiento adicional al potencial Coulombiano. Una de las diferencias más importantes es la posibilidad de tener más de un estado ligado, lo cual es imposible para una  $D^-$  en el bloque, la cual sólo soporta un estado ligado singlete, como fue demostrado por Hill [37] para el ión  $H^-$ . Lo anterior se debe a la competencia que existe entre la atracción del núcleo sobre los electrones y la repulsión entre estos. Otro aspecto que se debe tener en cuenta es el hecho de que en tales sistemas, no se puede asumir que los portadores se comporten como un sistema débilmente correlacionado. En este sentido, el interés por estudiar la estructura de una  $D^-$  centrada en QDs está relacionada con la existencia de estados excitados ligados, los cuales son posibles, gracias al confinamiento de los electrones en la nanoestructura. El confinamiento cuántico produce un incremento significativo en la energía de enlace de la  $D^-$ , y como consecuencia aparecen otros estados ligados, para los cuales los electrones están en un estado triplete [38]. Algunos trabajos importantes, adicionales a los mencionados en la introducción, que se han realizado con relación al análisis de  $D^-$  confinadas en heteroestructuras, son dados en la referencia [39,41]. Con base en los aspectos más importantes mencionados anteriormente, se puede entrever que el estudio de una  $D^-$  confinada en heteroestructuras semiconductoras resulta ser un tema de gran interés debido a la rica variedad de propiedades electrónicas que tales sistemas despliegan.

---

## 4. MODELO MATEMÁTICO Y METODOLOGÍA

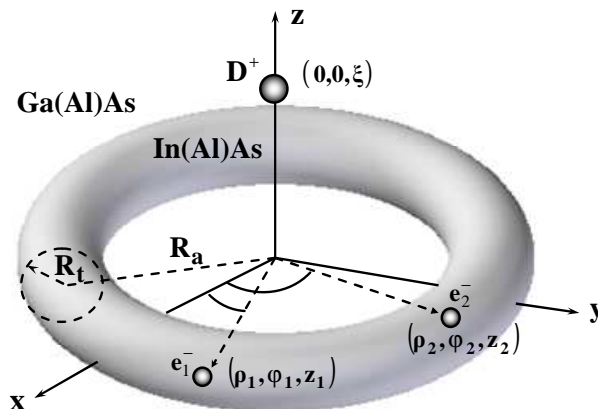
---

En las secciones que se exponen a continuación se dará una descripción de los diferentes parámetros geométricos y físicos que se introdujeron para modelar el sistema a estudiar, una  $D^-$  confinada en un QR de forma toroidal, además del modelo matemático que describe dicho sistema.

---

### 4.1 Geometría del anillo cuántico y Parámetros del material

Se considerara un QR de forma toroidal, como se muestra en la figura 17, el cual presenta los mismos parámetros físicos y geométricos descritos para el QR de la sección 1.1 en la primera parte.



**Fig. 17** Esquema de una  $D^-$  confinada en un anillo cuántico de InGaAs de forma toroidal

En este caso se tiene una  $D^-$ , la cual puede describirse como un sistema compuesto por una impureza donadora cargada positivamente y dos electrones. Se supone la impureza centrada, la cual puede estar localizada sobre cualquier punto del eje de simetría ( $z$ ), y su posición está dada por la distancia  $\xi$  a lo largo de dicho eje. El potencial de confinamiento del QR está definido de igual manera que en (1), en el cual el potencial es cero dentro del QR, y presenta un valor constante  $V_0$  fuera del QR. Para este modelo, se considerará que los electrones permanecerán siempre en el interior del QR.

## 4.2 Hamiltoniano del sistema

En el marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional del sistema en coordenadas cilíndricas esta dado como:

$$H = \sum_{i=1}^2 H_0(\vec{r}_i) + \frac{2}{r_{12}} \quad (52)$$

$$H_0(\vec{r}_i) = -\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \rho_i \frac{\partial}{\partial \rho_i} - \frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_i(\rho_i, z_i) - \frac{2\tau}{\sqrt{\rho_i^2 + (z_i - \xi)^2}}$$

donde  $r_{12}$  es la separación entre los dos electrones, y  $V_i(\rho_i, z_i)$  es el potencial de confinamiento para el  $i$ -ésimo electrón. Se ha introducido el parámetro  $\tau$  con el propósito de poder considerar el problema de la  $D^-$ , para el cual  $\tau = 1$ , y adicionalmente el problema de dos electrones en el QR, para el cual  $\tau = 0$ . Considerando que el par de electrones permanecerá prácticamente siempre dentro del anillo debido al confinamiento y teniendo que  $R_i \ll R_a$ , se puede hacer la siguiente sustitución  $\rho_i = R_a + x_i$ , con  $x_i = \tilde{\rho}_i \cos \theta_i$ , donde se tiene que  $x_i \ll R_a$ . Más detalles sobre este procedimiento se tratan en la sección 1.3 de la primera parte. En este sentido, el Hamiltoniano (52) puede ser escrito como sigue:

$$H = \sum_{i=1}^2 H_0(r_i) + \frac{2}{\sqrt{\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2 + 4R_a^2 \sin^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right)}} \quad (53)$$

donde:

$$H_0(r_i) = -\frac{1}{\tilde{\rho}_i} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_i} \tilde{\rho}_i \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_i} - \frac{1}{\tilde{\rho}_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + V_i(\tilde{\rho}_i) + V_{Ne}(\tilde{\rho}_i, \theta_i)$$

Aquí, el potencial de confinamiento para el  $i$ -ésimo electrón en estas nuevas coordenadas esta dado como:

$$V_i(\tilde{\rho}_i) = \begin{cases} 0 & ; \tilde{\rho}_i < R_t \\ V_0 & ; \tilde{\rho}_i > R_t \end{cases} \quad (54)$$

y el potencial de interacción Coulombiana entre cada electrón y el núcleo de la donadora esta dado por la siguiente expresión:

$$V_{Ne}(\tilde{\rho}_i, \theta_i) = -\frac{2\tau}{\sqrt{(R_a + \tilde{\rho}_i \cos \theta_i)^2 + (\tilde{\rho}_i \sin \theta_i - \xi)^2}} \quad (55)$$

### 4.3 Metodología

La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (53) no es separable debido al potencial de repulsión entre los dos electrones, el cual presenta dependencia de cuatro variables  $\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \varphi_1, \varphi_2$ . Lo anterior hace que resulte imposible obtener una solución analítica. Por lo tanto, se debe aplicar el procedimiento de la aproximación adiabática para realizar una separación de variables en forma aproximada. Dicha aproximación toma ventaja de la clara diferencia que se tiene entre las dimensiones transversal y longitudinal del QR, de la misma manera que se hizo para la  $D^0$  en la sección 2.1. Lo anterior hace posible que el movimiento de cada uno de los electrones dentro del anillo pueda descomponerse en dos, un movimiento transversal rápido, y un movimiento rotacional lento en dirección azimutal.

La solución correspondiente al movimiento transversal rápido de cada uno de los dos electrones, nos da una función de onda en términos de exponenciales complejas para la componente angular  $\theta$  y de funciones de Bessel para la dirección radial  $\tilde{\rho}$  (ver ecuaciones 15-17). Las energías correspondientes a dicho movimiento se obtienen como solución de la ecuación (18). En este trabajo sólo se considerarán los estados más bajos, por lo tanto, sólo se calculará el primer nivel para el movimiento transversal, mientras que para el movimiento azimutal se tomarán algunos de los niveles más bajos. La segunda parte del Hamiltoniano total corresponde al movimiento azimutal lento del par de electrones a lo largo del anillo, y está dada como:

$$H_a = -\frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} - \frac{1}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} + V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2) + 2V_{Ne}. \quad (56)$$

Aquí el potencial efectivo de la interacción electrón-electrón  $V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2)$  es expresado como sigue:

$$V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2) = 2 \int_0^\infty \tilde{\rho}_1 f_0^2(\tilde{\rho}_1) d\tilde{\rho}_1 \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho}_2 f_0^2(\tilde{\rho}_2) d\tilde{\rho}_2}{\sqrt{\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2 + 4R_a^2 \text{sen}^2[(\varphi_1 - \varphi_2)/2]}} \quad (57)$$

y el potencial efectivo de interacción Coulombiana entre cada electrón y el núcleo de la donadora esta dado por la siguiente expresión:

$$V_{Ne} = -2\tau \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho} f_0^2(\tilde{\rho}) d\tilde{\rho}}{\sqrt{(R_a + \tilde{\rho} \cos \theta)^2 + (\tilde{\rho} \text{sen} \theta - \xi)^2}} \quad (58)$$

Donde  $f_0(\tilde{\rho})$  es la componente radial de la función de onda para el estado base, la cual está expresada en términos de funciones de Bessel (ver ecuación 17).

El Hamiltoniano (56) puede hacerse separable, si se introduce una coordenada de centro de masa  $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$ , y una coordenada angular relativa  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ , para describir el

movimiento de los dos electrones a lo largo del QR. Después de hacer la transformación de coordenadas, el Hamiltoniano (56) adquiere la siguiente forma:

$$H_a = -\frac{1}{2R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} - \frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_{ee}(\varphi) + 2V_{Ne} \quad (59)$$

Aquí el potencial efectivo  $V_{Ne}$ , es un término constante, el cual varía sólo al mover la impureza, o al cambiar los parámetros geométricos del anillo. El potencial efectivo de la interacción electrón-electrón  $V_{ee}(\varphi)$  es un potencial unidimensional, el cual sólo depende de la posición angular relativa del par de electrones. El Hamiltoniano (59) es separable, y la parte correspondiente a la coordenada del centro de masa presenta la forma de un rotor rígido unidimensional, por lo tanto, el problema de valores propios correspondiente se reduce a la siguiente ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2 \Phi_{m,s}(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \left[ \frac{M^2}{2R_a^2} + V_{ee}(\varphi) + V_{Ne} \right] \Phi_{m,s}(\varphi) = E(M, m, s) \Phi_{m,s}(\varphi) \quad (60)$$

donde la función de onda correspondiente se expresa en forma de producto:

$$\psi_{M,m,s}(\varphi_1, \varphi_2) = e^{iM\Theta} \Phi_{m,s}(\varphi) \quad (61)$$

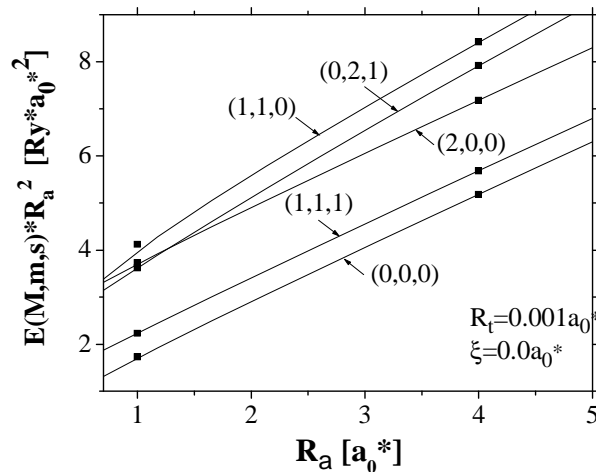
Los tres números cuánticos que aparecen aquí están relacionados con el momento angular del centro de masa  $M$ , con las rotaciones relativas  $m$ , donde  $(M, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$  y con el spin  $s$ , el cual es igual a cero cuando la solución de la ecuación (60) es par, y es igual a uno cuando la solución es impar. La ecuación (60) se resuelve mediante el método de barrido trigonométrico, de manera análoga a como se hizo en la sección 2.2.

## 5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las siguientes secciones se presentan diversos resultados que muestran el espectro energético de dos electrones confinados en un QR de forma toroidal, con potencial de confinamiento de barrera finita. También se considera una impureza cargada negativamente y centrada en el QR, y se muestra cómo la presencia del potencial de confinamiento influye sobre los niveles de energía, permitiendo la aparición de estados ligados adicionales al estado base.

### 5.1 Efecto del tamaño del anillo sobre el espectro energético de dos electrones en QR

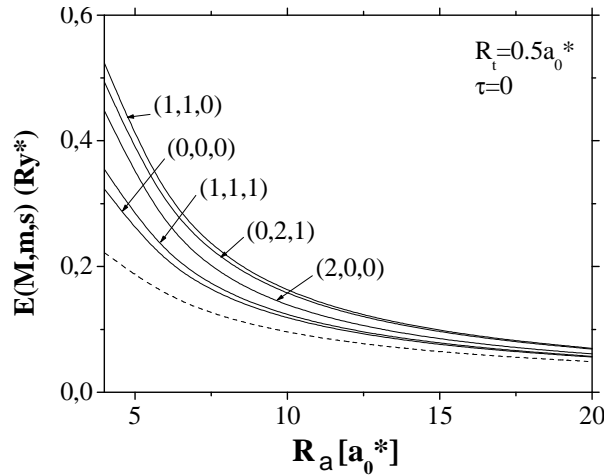
Con el propósito de controlar la precisión de nuestro procedimiento numérico, primero se han calculado las energías de algunos de los niveles más bajos para dos electrones confinados en el QR. Este problema ha sido considerado anteriormente en otros trabajos, y en uno de estos se encontró una solución exacta para el caso límite cuando el radio de la sección transversal del anillo tiende a cero, es decir se consideró un QR unidimensional [26].



**Fig. 18** Energías normalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un anillo casi-unidimensional. Las líneas sólidas son nuestros resultados, y los rectángulos negros son puntos tomados de la referencia [26]

En el la figura 18 se muestran las energías renormalizadas para los cinco estados más bajos de dos electrones confinados en un QR muy delgado ( $R_t = 0.001a_0^*$ ), en función del radio medio del anillo. Se han comparado nuestros resultados (líneas sólidas), con los resultados

obtenidos para un modelo unidimensional el cual tiene solución exacta (rectángulos negros) Ref. [26]. Se ve una concordancia excelente entre nuestros resultados y los obtenidos mediante la solución exacta.

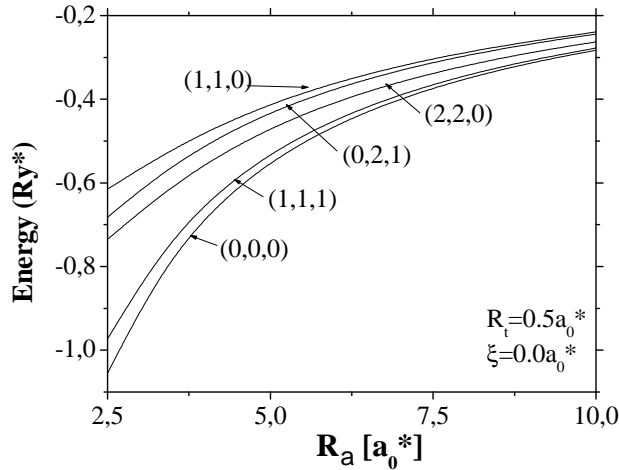


**Fig. 19** Energías para los cinco estados más bajos de dos electrones en función del radio medio del anillo, para un QR con  $R_t = 0.5a_0^*$ . La línea punteada muestra la energía de dos electrones congelados en los lados diametralmente opuestos del anillo.

En la figura 19 se presentan los resultados de los cálculos de las energías para dos electrones en un QR de ancho finito, cuya sección transversal tiene un radio  $R_t = 0.5a_0^*$ . Adicionalmente, se ha graficado en línea punteada la energía de una estructura congelada hipotética, constituida por dos electrones, los cuales están fijos en puntos diametralmente opuestos y a la máxima distancia posible dentro del anillo. Lo anterior, con el objeto de aclarar la forma como cambian las contribuciones de energía cinética y potencial en la energía total de los diferentes estados. El valor de la energía para la estructura de los dos electrones congelados se ha estimado como  $E \approx 2/(2R_a + 2R_t)$ . Debido a que la diferencia entre las líneas sólidas y la línea punteada representa aproximadamente la energía cinética correspondiente a cada uno de los estados, puede observarse, que la contribución de la energía cinética llega a ser menor y menos significativa a medida que el radio medio del anillo aumenta, y a la vez, la estructura electrónica se hace cada vez más parecida a la estructura congelada. Con base en lo anterior, se puede afirmar que el efecto de la correlación electrónica se refuerza a medida que el radio del anillo se incrementa, y este llega a ser predominante para un radio de  $20a_0^*$ .

## 5.2 Efecto del tamaño del anillo sobre el espectro energético de una $D^-$ centrada en QR

En la figura 20, se presentan los resultados de los cálculos de las energías para algunos de los niveles más bajos de una  $D^-$  centrada ( $\xi = 0$ ) en un QR con radio transversal  $R_t = 0.5a_0^*$ , en función del radio medio del anillo.

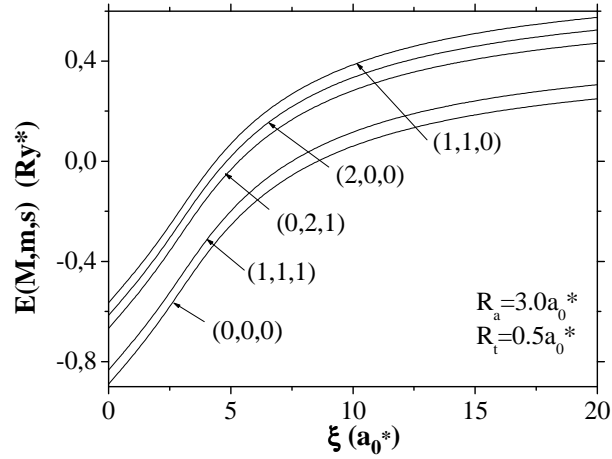


**Fig. 20** Energías para los cinco estados más bajos de una  $D^-$  centrada en función del radio medio del anillo, para un QR con  $R_t = 0.5a_0^*$ .

Es bien sabido que el ión negativo del hidrogeno, el cual es matemáticamente análogo de una donadora cargada negativamente en un semiconductor en bloque, presenta un único estado ligado con energía igual a  $-1.055Ry^*$ . En nuestro caso, los dos electrones están confinados dentro del anillo, y ninguno de ellos puede escapar del pozo, a pesar de existir una fuerte repulsión entre estos; por lo tanto, para la  $D^-$  confinada en esta heteroestructura es posible la aparición de estados ligados adicionales. Se puede ver en la figura 20 que cuando el radio medio del anillo se reduce, las energías de todos los niveles decrecen en forma monótona, y la energía del estado base tiende exactamente al valor correspondiente para la  $D^-$  en el bloque,  $-1.055Ry^*$ . Esto es debido a que la energía de atracción se incrementa cuando la separación entre el núcleo de la donadora y los electrones se reduce, y cuando el radio medio del anillo llega a ser aproximadamente de un par de radios de Bohr efectivos, esta separación es similar a la de una  $D^-$  en el bloque. También se puede observar que la separación entre diferentes niveles de energía decrece cuando el radio se incrementa. De la ecuación (60) es claro ver que las contribuciones, de las rotaciones relativas y del centro de masa, a la energía total, decrecen en forma inversamente proporcional al cuadrado del radio medio del anillo. Por lo tanto, las diferencias entre las energías de los diferentes niveles con diferentes números cuánticos  $M$  y  $m$ , proporcionales a  $M/R_a^2$  o  $m/R_a^2$ , llegan a ser cada vez más insignificantes cuando el radio medio del anillo se incrementa.

### 5.3 Efecto de la posición de la impureza sobre el espectro energético de una $D^-$ centrada en QR

En la figura 21, se muestra la variación de las energías, para los cinco estados más bajos, cuando se desplaza la impureza a lo largo del eje  $z$ .



**Fig. 21** Energías para los cinco estados más bajos de una  $D^-$  centrada en función de la distancia al plano del anillo, para un QR con  $R_t = 0.5a_0^*$ .

Cuando la impureza se desplaza a lo largo del eje alejándose del anillo, la separación entre esta y los electrones se incrementa, ya que estos permanecen dentro del anillo, independientemente de la posición de la impureza. Esta es la razón por la cual todos los niveles en la figura 21 crecen a medida que la impureza se aleja del plano de simetría del anillo. Este crecimiento inicialmente es significativo, pero cuando la separación entre la impureza y el plano del anillo llega a ser mayor que  $20a_0^*$ , la razón de crecimiento se reduce.

---

## ***CONCLUSIONES***

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

- ☒ En este trabajo se presenta un método simple basado en la aproximación adiabática para calcular el espectro energético de una  $D^0$  descentrada confinada en un anillo cuántico delgado, de forma toroidal y con barrera de potencial finita. Dicha aproximación permite reducir el problema tridimensional a una ecuación de onda unidimensional, la cual describe todos los estados más bajos del sistema.
  
- ☒ Se consiguió determinar cuales son los efectos más sobresalientes que aparecen al variar la posición de la impureza y el tamaño del anillo, sobre el espectro energético y las funciones de onda de una  $D^0$  en un QR. Además, se determinó cuál fue el aporte del estado base y de los primeros estados excitados en las curvas de DOS para la  $D^0$  confinada en un QR.
  
- ☒ Se logró mostrar, de manera cualitativa, la posibilidad de que aparezca una cristalización tipo Wigner en heteroestructuras semiconductoras con forma de anillo.
  
- ☒ Se propuso un método simple basado en la aproximación adiabática para calcular el espectro energético de dos electrones y de una  $D^-$  centrada en un anillo cuántico delgado de forma toroidal, el cual en los casos limite, de un anillo unidimensional y de una  $D^-$  en el bloque, dio resultados que se hallan en una excelente concordancia con soluciones exactas. Además, se mostró que el efecto de la correlación electrónica se hace importante cuando el radio medio del anillo se incrementa.
  
- ☒ Los principales resultados de este trabajo se publicaron en: Braz. Jour. Phys. **36**, No. 3B, 882 (2006), Rev. Col. Fís. **38**, No. 1, 9 (2006), Rev. Col. Fís. **39**, No. 1, 123 (2007), Rev. Col. Fís. **39**, No. 1, 175 (2007), Physica B **396** 12 (2007).

---

## ***REFERENCIAS***

- [1] T. Appenzeller, *Science* **254**, 1300 (1991)
- [2] P. Harrison: *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley-Interscience (2005)
- [3] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Reviews of Modern Physics*, **54**, N° 2, 437 (1982)
- [4] D. R. Bowler, *J. Phys.: Condens Matter* **16**, R721-R754 (2004)
- [5] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs: *Quantum Dots*, Springer-Verlag, New York (1997)
- [6] M. Kastner, *Physics Today*, January, 24 (1993); M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, and A. Forchel, *Nature*, **405**, 923 (2000); D. Gammon, *Nature*, **405**, 899 (2000)
- [7] J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. **76**, No. 3, 725 (2004)
- [8] J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne, and R. Leon, *Phys. Rev. B* **59**, 12279 (1999)
- [9] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **52**, 11969 (1995)
- [10] P. W. Fry, I. E. Itskevich, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, J. J. Finley, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, L. R. Wilson, I. A. Larkin, P. A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J. P. R. David, A. G. Cullis, G. Hill, and J. C. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 733 (2000)
- [11] J. M. Garcia, T. Mankad, P. O. Holtz, P. J. Wellman, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3172 (1998)
- [12] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000)
- [13] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981)
- [14] J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong, *Phys. Rev. B* **50**, 1832 (1994)
- [15] F. García, F. J. Betancur, R. Robayo, W. Gutiérrez, J. H. Marín and I. D. Mikhailov, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, No. 10, 3626 (2005)
- [16] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Rev. B.* **67**, 1153XX (2003)
- [17] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* **234**, 590 (2002)
- [18] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* **240**, 747 (2003)
- [19] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur and L. F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **224**, 757 (2001)
- [20] I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 1636 (2005)

- [21] H. Pan and J. L. Zhu, *J. Phys.: Condens Matter* **15**, 7287 (2003)
- [22] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, *Phys. Rev. B.* **61**, 15887 (2000)
- [23] W. Gutiérrez, J. H. Marín, F. García and I. D. Mikhailov, *Rev. Col. Fís* **37**, 150 (2005)
- [24] J. Planelles, W. Jaskolski and J. I. Aliaga, *Phys. Rev. B.* **65**, 33306 (2001)
- [25] H. Hu, J. Zhu and J. Xiong, *Phys. Rev. B.* **62**, 16777 (2000)
- [26] J. L. Zhu, Z. Dai and X. Hu, *Phys. Rev. B.* **68**, 45324 (2003)
- [27] F. García, J. H. Marín, H. Paredes Gutiérrez and I. D. Mikhailov, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, 3630 (2005)
- [28] D. R. Herschbach, J. A. Very and O. Goscinski, *Dimensional Scaling in Chemical Physics*, (Kluwer Academic Publishers)
- [29] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [30] I. D. Mikhailov, J. H. Marín and F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, No 8, 1636 (2005)
- [31] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391 (1998)
- [32] Zhu J-L, *Phys. Rev. B* **39**, 8780 (1989); Zhu J-L, Xiong J-J and Gu B-L, *Phys. Rev. B* **41**, 6001 (1990); Zhu J-L, Zhao J-H, Duan W H and Gu B L, *Phys. Rev. B* **46**, 7546 (1992); Zhu J-L, Zhao J-H and Xiong J-J, *Phys. Rev. B* **50**, 1832 (1994)
- [33] E. Wigner, *Trans. Faraday Soc.* **34**, 678 (1938)
- [34] B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, T.Chwiej, and Adamowski, *Phys. Rev. B* **70**, 35401 (2004)
- [35] G. Piacente, I. V.Schweigert, J. J. Betouras, and, F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **69**, 45324 (2004)
- [36] A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms* (Springer, Berlin, 1957), p. 154.
- [37] R. N. Hill, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 643 (1977)
- [38] B. Szafran, J. Adamowski and B. Stébé, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** 7575 (1998)
- [39] J-L. Zhu, J-H. Zhao, W. H. Duan and B. L. Gu, *Phys. Rev. B* **46** 7546 (1992)
- [40] W. Xie, *Phys. Lett. A* **263** 127 (1999)
- [41] J. H. Marín, F. J. Betancur and I. D. Mikhailov, *J. Phys.: Condens. Matter* **18** 1005 (2006)