

DOS PUNTOS CUÁNTICOS LENTICULARES ACOPLADOS VERTICALMENTE

Fernando Corzo Alvarez

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Bucaramanga

2012

DOS PUNTOS CUÁNTICOS LENTICULARES ACOPLADOS VERTICALMENTE

Fernando Corzo Alvarez

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Físico

Director
Iliá Mikhailov
Ph.D en Ciencias físicas

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ciencias
Escuela de Física
Bucaramanga
2012

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a Dios, por hacer que la vida de un físico tenga sentido al colmar la naturaleza de grandes misterios y enigmas por descubrir y resolver,

a mis padres Martin y Beatriz por apoyarme desinteresadamente en mis estudios,

a mi esposa María Helena por brindarme su amor, apoyo y paciencia de manera incondicional durante mi formación como físico y por el resto de mi vida,

a mis compañeros Saúl Pérez, Cesar Pachón, Paola Reyes, Nestor Granados, Diego Galeano, Fernando Cortés, Alfredo Blanco y Joseph Vergel quienes compartieron sus conocimientos de manera integral en mi formación académica.

AGRADECIMIENTOS

El autor ofrece sus agradecimientos:

Al Ph. D. Iliá D. Mikhailov por su invaluable orientación en la realización de este trabajo.

Al grupo de investigación en Física Computacional en Materia Condensada (FICOMACO) de la Universidad Industrial de Santander en cabeza del Ph. D. Harold Paredes por ofrecer incondicionalmente sus instalaciones y equipos necesarios para el desarrollo del presente proyecto de investigación.

A la escuela de física de la Universidad Industrial de Santander y a su cuerpo de profesores por contribuir fuertemente en mi formación profesional.

RESUMEN

TÍTULO: Dos puntos cuánticos lenticulares acoplados verticalmente*

AUTOR: Fernando Corzo Alvarez**

PALABRAS CLAVE: Puntos cuánticos acoplados verticalmente, Aproximación adiabática, Confinamiento parabólico, Correlación electrónica.

CONTENIDO: Se analiza el espectro energético de una heteroestructura formada por dos puntos cuánticos lenticulares de In-As, acoplados verticalmente, con un electrón confinado en cada uno de ellos e inmersos en una matriz de Ga-As. Se demuestra que en el límite adiabático, cuando el grosor de cada punto cuántico es mucho menor que su radio, el problema se reduce al análisis de dos partículas en un campo central bidimensional con potencial de confinamiento parabólico y la ecuación de Schrödinger que describe esta estructura es completamente separable. Se calcularon las energías de diferentes estados tanto singletes como tripletes en función de un campo magnético aplicado en la dirección axial para puntos cuánticos de distintos tamaños ubicados a diferentes distancias de separación. El análisis de los resultados muestra que un conjunto de estados se mantienen como singletes o tripletes ante la variación de los parámetros anteriormente señalados, mientras que otro grupo presenta múltiples oscilaciones de espín de diferente naturaleza. De estas observaciones se encontró además que la heterojuntura considerada puede servir como una celda de memoria con al menos dos "qubits", ya que dentro del conjunto de sus estados evaluados, existe uno en el que se presenta una transición triplete-singlete controlable a bajos valores de energía y campo magnético. De otra parte, se presentan los gráficos de la envolvente para la densidad de estados donde el efecto Zeeman es observado debido al desdoblamiento en las bandas de energía provocado por un aumento en el valor del campo magnético. Finalmente, un análisis comparativo entre los resultados obtenidos revela que tanto el grado de entrecruzamiento que da origen a la transición de estados, como el nivel de desdoblamiento en la densidad de los mismos, dependen fuertemente de una variación en el potencial de confinamiento, en comparación a una variación en el potencial de interacción coulombiana.

* Proyecto de Grado

**Facultad: Ciencias

Escuela: Física

Director: Iliá Mikhailov

ABSTRACT

TITLE: Two lens-shaped quantum dots vertically coupled*

AUTOR: Fernando Corzo Alvarez**

KEYWORDS: vertically coupled QDs, adiabatic approximation, parabolic confinement, electronic correlation.

CONTENT: We analyze the energy spectrum of a heterostructure formed by two lens-shaped vertically coupled In-As quantum dots with a single electron confined in each of them and immersed in a Ga-As matrix. We show that in the adiabatic limit when the thickness of each quantum dot is much smaller than their radius, the problem is reduced to a two-particles central-force problem with two-dimensional parabolic potential and therefore the Schrödinger equation that describes this structure is completely separable. We calculated the energies of different states both singlet as triplet in function of a magnetic field applied in axial direction for quantum dots of distinct sizes located to different separation distances. The analysis of the results shows that a set of states remain as singlet or triplet states regardless of variation of the parameters aforementioned; while another group has multiple spin oscillations of different nature. From these observations we found that the heterojunction considered can serve as a memory cell with at least two qubits, inasmuch as within the set of states evaluated, exist one which has a triplet-singlet transition controllable to low values of energy and magnetic field. Moreover, we present graphics of the enveloping for the density of states where the Zeeman effect is observed due to splitting in the energy bands caused by an increase in the value of the magnetic field. Finally, a comparative analysis between the results obtained reveals that both the degree of cross linking which gives rise to the states' transition, and the level of split in the density thereof, strongly depend on a change in the confinement potential, compared to a variation in the potential of Coulomb interaction.

* Proyecto de Grado

**Facultad: Ciencias

Escuela: Física

Director: Iliá Mikhailov

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	14
1. MARCO TEÓRICO	17
1.1 Aproximación de masa efectiva.....	17
1.2 Aproximación de Born-Oppenheimer.....	22
2. MODELO MATEMÁTICO PROPUESTO	26
2.1 Descripción del sistema.....	26
2.2 Implementación de la aproximación adiabática.....	28
2.3 Análisis del movimiento relativo y de centro de masas.....	31
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	35
3.1 Espectro energético del movimiento en el plano como función del radio y del campo magnético aplicado.....	35
3.2 Envolvente para la densidad de estados.....	41
4. CONCLUSIONES	43
ANEXOS	45
BIBLIOGRAFÍA	67

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 3.1 Estados utilizados para la generación de las curvas mostradas en las figuras 3.1. Los estados de espín se asignan de acuerdo con la naturaleza par o impar del número cuántico m_r .	36

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1.1 Dependencia respecto del número de onda (a) de la energía, (b) de la velocidad y (c) de la masa efectiva.....	21
Figura 2.1 Sistema de dos puntos cuánticos acoplados verticalmente con un electrón dentro de cada una de ellos (Las esferas contenidas en las lentes representan los electrones).....	26
Figura 2.2 Representación gráfica de la energía correspondiente al movimiento vertical de los electrones en los puntos cuánticos.....	29
Figura 3.1 Espectro energético en función del campo magnético γ para diferentes radios en cada punto cuántico y distintas distancias de separación (las líneas punteadas corresponden al estado de espín singlete mientras que las líneas sólidas al estado de espín triplete).....	37
Figura 3.2 Aumento en el número de oscilaciones de espín (líneas de color rojo) debido a una disminución en los potenciales tanto de confinamiento como de interacción Coulombiana.....	38
Figura 3.3 Estados de espín polarizado (curvas de color rojo).....	39

Figura 3.4	Comportamiento del espectro energético de los estados del sistema que cumplen la condición $M_{cm} < 1$ (curvas de color rojo). Nótese que para estos estados no hay oscilaciones de espín a pesar de las múltiples intersecciones que sufren las curvas que los representan.....	39
Figura 3.5	Estado con oscilación (tripleto-singlete) que permitiría considerar al sistema como una celda de memoria para la computación cuántica.....	40
Figura 3.6	Densidad de estados para tres diferentes magnitudes de campo magnético γ (Para la obtención de estas gráficas se tomó $s = 1$).....	40
Figura A.1	Vista de perfil del sistema compuesto por dos puntos cuánticos.....	53
Figura B.1	Comportamiento típico de la solución de la ecuación B.5.....	62
Figura B.2	Curvas análogas a las de Poincaré para el caso $n = 1$ (Derecha) y $n = 3$ (Izquierda). En estas gráficas se ha tomado $A(0) = 1$	63
Figura B.3	Gráfico de $\theta(x^*, E)$ en función de E para el átomo de Hidrógeno con $x^* = 100a_0$	64

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
A. APÉNDICE MATEMÁTICO	45
A.1 Obtención del operador hamiltoniano de Pauli adimensional.....	45
A.2 Implementación de la aproximación adiabática en el hamiltoniano de Pauli adimensional.....	49
A.2.1 Análisis del movimiento rápido.....	49
A.2.2 Análisis del movimiento lento.....	52
A.2.3 Ecuación para la energía del movimiento de centro de masas.....	55
A.2.4 Ecuación para la energía del movimiento relativo.....	58
B. MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO	60
B.1 Concepto.....	60
B.2 Aplicación del método de barrido trigonométrico.....	65

INTRODUCCIÓN

La nanotecnología es una ciencia que estudia, diseña, crea, sintetiza y manipula sistemas funcionales a través del control de la materia a escala nanométrica. El origen de esta disciplina, está basado en la exhibición de nuevas propiedades tanto físicas como químicas altamente sensibles al tamaño de las partículas incorporadas en estructuras de dimensiones inferiores a los 100 nm; así por ejemplo, se ha observado que el espectro energético, la conductividad, la reactividad, la temperatura de fusión y las propiedades mecánicas, varían cuando estas nanoestructuras (las cuales corresponden a las regiones de no homogeneidad en el material sobre el cual se encuentran inmersas), alcanzan tamaños inferiores a cierto valor crítico [1]. Este conocimiento, ha permitido fabricar estructuras artificiales o heteroestructuras en donde los átomos se estructuran lateralmente siguiendo arquitecturas prediseñadas en las que se puede hacer que los portadores de carga de un material se encuentren restringidos a moverse en una región muy pequeña de dimensiones comparables a la longitud de onda de De Broglie asociada a dicho portador (A esto se le conoce como confinamiento cuántico). De esta manera es posible observar, dependiendo del tipo de heteroestructura, un confinamiento cuántico en dos, una y cero dimensiones (2D, 1D y 0D respectivamente). Típicos ejemplos de nanoestructuras 2D son los pozos cuánticos, 1D los alambres o hilos cuánticos y 0D los puntos cuánticos [2].

La fabricación de estos materiales heteroestructurados se realiza mediante una variedad de técnicas de crecimiento de cristales, tales como la Litografía con base en rayos electrónicos e inter-difusión a través de impurezas en la estructura [3], Deposición química de metales orgánicos en vapor (MOCVD) [4], Epitaxia por fase líquida [5] y Epitaxia de haces Moleculares (MBE) [6]; siendo esta última, la técnica de interés para los propósitos del presente trabajo, ya que a través de ella se fabrican los puntos cuánticos autoensamblados (SAQDs, por sus siglas en

inglés de “SelfAssembled Quantum Dots”). En este orden de ideas, los SAQD's son nanoestructuras semiconductoras cero-dimensionales que poseen propiedades inusuales e interesantes que ofrecen la posibilidad de desarrollar aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos y en láseres debido a su baja densidad de corriente umbral y a su alta estabilidad de operación a temperaturas altas [7].

El proceso de fabricación de los SAQDs por epitaxia de haces moleculares conocido con el nombre de Stranski-Krastanow, consiste en lo siguiente [8, 9]: Sobre una capa de mojado con un espesor de aproximadamente una monocapa (MC) de InAs previamente depositada sobre el sustrato GaAs, se van depositando monocapas adicionales de InAs de forma tal que en la interfase de estas dos aleaciones, los esfuerzos debidos a un desacople de $\approx 7\%$ en los parámetros de red del material correspondiente¹, provocan la deformación elástica del InAs acumulando energía elástica mientras que avanza el crecimiento. Con el aumento de la cantidad de InAs depositado, la energía elástica se va acumulando hasta alcanzar un espesor de $\approx 1,5$ MC, denominado espesor crítico. Al llegar a este espesor la energía acumulada se libera mediante la formación espontánea (o autoensamblable) de nanoislas tridimensionales coherentes; es decir, islas de InAs libres de defectos cristalinos hasta el punto en el que en $\approx 2 - 2.5$ MC la formación de estas nanoestructuras se detiene por completo. Este mecanismo de autoensamble de nanoestructuras cero-dimensionales permite la síntesis de miles de millones de SADQ's por centímetro cuadrado con un alto grado de uniformidad en un único paso de crecimiento y con diámetros en sus bases que oscilan entre los 15 y 20 nm y una altura de entre 2 y 3 nm con una distancia de separación entre ellos de entre 50 y 100 nm. Los puntos pueden ser inmediatamente cubiertos por una segunda capa del material sustrato, configurando de esta manera un nano-material con altas calidades tanto ópticas como eléctricas.

¹ Los parámetros de red son 6,05 Å en InAs y 5,65 Å en GaAs

Un interés especial presenta el estudio de un sistema de dos electrones confinados en SAQD's que puede considerarse como un candidato natural para ser utilizado como una celda de memoria en los dispositivos microelectrónica para la computación cuántica [9, 10]. Esta es una de las razones por las cuales en los últimos años se ha publicado una gran cantidad de trabajos dedicado al estudio de este sistema. Particularmente, se han propuesto modelos y técnicas matemáticas en el marco de la aproximación de masa efectiva para sistemas constituidos por algunos portadores de carga (dos o tres a lo más), confinados en pozos cuánticos cuadrados de potencial infinito, o en puntos cuánticos esféricos, discoidales, circulares y/o elípticos; en su mayoría, con un potencial de confinamiento parabólico [11-22]. Aunque estos trabajos conceden una información muy importante para analizar el espectro energético de un sistema de pocas partículas, no tienen en cuenta para el SADQ una morfología más acorde con la evidencia experimental constituyéndose esto en un problema a resolver, puesto que se ha observado en investigaciones previas que el espectro energético de un portador de carga confinado en un punto cuántico, cambia con la morfología de este [23, 24]. Esta es la principal razón por la que con el presente trabajo se pretende obtener el espectro energético acorde a una morfología distinta, analizando además los posibles efectos electromagnéticos sobre el sistema y determinando a su vez la influencia de ellos sobre la estructura de su respectivo espectro energético. Este estudio se puede realizar al someter dos electrones en dos diferentes SAQDs muy cercanos acoplados verticalmente e interactuantes con un campo magnético externo en dirección axial a dichos puntos; de esta manera, variando la separación entre SAQD's en este modelo se puede fortalecer o debilitar los efectos de correlación.

1. MARCO TEÓRICO

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

1.1. Aproximación de Masa Efectiva (A.M.E.)

En este trabajo, se utiliza la Aproximación de Masa Efectiva (AME) como punto de partida para el cálculo de los niveles energéticos del sistema mencionado en la introducción de este escrito. Esta aproximación ha sido ampliamente utilizada en el análisis de sistemas de baja dimensionalidad y fue empleada por primera vez en el trabajo realizado por Bastard [25] con el fin de analizar el espectro energético de sistemas electrónicos y de donadoras hidrogenoides confinadas dentro de pozos cuánticos. Según [26], cuando un campo eléctrico exterior uniforme ξ que actúa sobre un electrón en un cristal debe tenerse en cuenta además de la fuerza $-e\xi$, fuerzas internas considerables creadas por el campo periódico de la red; es por esto que el movimiento de este electrón es más complejo que el del electrón libre.

El movimiento del electrón en el cristal puede describirse mediante un tren de ondas compuesto por funciones de Bloch dadas por:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (1.1)$$

Donde \vec{k} es el momentum del cristal y $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ es una función que depende en general del vector de onda \vec{k} y es periódica en \vec{r} con el periodo del potencial de la

red; El índice n aparece en el teorema de Bloch porque para un \vec{k} dado hay muchas soluciones de la ecuación de Schrödinger. Pero dado que cualquier \vec{k} puede ser trasladado a la primera zona de Brillouin, el problema se puede restringir al análisis de la ecuación de Schrödinger para una única celda del cristal. Esto hace que el subíndice n se pueda suprimir en la ecuación (1.1). La velocidad media del movimiento del electrón es igual a la velocidad de grupo del tren de ondas; por tanto:

$$v = \frac{d\omega}{dk}$$

teniendo en cuenta que $\omega = E / \hbar$, para la velocidad de grupo se tiene:

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dP} \quad (1.2)$$

donde $P = \hbar k$ es el cuasiimpulso. Se aprecia de la ecuación (1.2) que la velocidad media del electrón en el sólido viene determinada por la ley de dispersión $E(k)$. De la ecuación que define la aceleración como la derivada de la velocidad respecto del tiempo, se obtiene:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (1.3)$$

De otra parte, durante el tiempo δt el campo eléctrico ξ realiza el trabajo δA , que se invierte en incrementar la energía del electrón:

$$\delta E = \delta A = -e\xi v dt \quad (1.4)$$

tomando en consideración que

$$\delta E = \frac{dE}{dk} \delta k = \hbar v \delta k \quad (1.5)$$

de (1.4) y (1.5) se obtiene

$$\delta k = -\frac{e\xi}{\hbar} \delta t \quad (1.6)$$

o bien

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e\xi = F \quad (1.7)$$

Esta última expresión es la ecuación de movimiento del electrón en el cristal. En este caso el producto $\hbar(dk/dt)$ es igual a la fuerza F que actúa sobre el electrón por parte del campo eléctrico exterior. Ahora poniendo el valor de dk/dt , hallado por (1.7), en la expresión (1.3) para la aceleración

$$a = -\frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{e\xi}{\hbar} = -\frac{e\xi}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (1.8)$$

La ecuación (1.8) relaciona la aceleración a del electrón con la fuerza exterior $-e\xi$. Si se supone que la magnitud $\hbar^2(d^2 E / dk^2)^{-1}$ tiene sentido de masa, la ecuación (1.3) adquiere la forma de la segunda ley de Newton:

$$a = -e\xi / m^* = F / m^* \quad (1.9)$$

Donde

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (1.10)$$

La magnitud m^* recibe el nombre de masa efectiva del electrón. La masa efectiva refleja la influencia del potencial periódico de la red sobre el movimiento del electrón en el cristal bajo la acción de la fuerza exterior. De (1.10) se sigue que en el campo periódico de la red cristalina, bajo la acción de la fuerza exterior F , el electrón se mueve en promedio como se movería un electrón libre bajo la acción de esta misma fuerza si su masa fuera m^* . Por lo tanto, si al electrón en el cristal, en vez de la masa m , se le atribuyera la masa efectiva m^* , puede considerarse como libre y su movimiento describirse como se define para un electrón libre situado en un campo exterior. La diferencia entre m^* y m se debe a la interacción del electrón con el campo periódico de la red y al atribuir al electrón la masa efectiva se tiene en cuenta esta interacción. Aplicando el concepto de masa efectiva, el problema del movimiento del electrón en el campo periódico de la red $V(r)$ se puede reducir al problema del movimiento de un electrón libre de masa m^* . Esto quiere decir que, en vez de la ecuación de Schrödinger con potencial periódico

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(r) = E\psi(r) \quad (1.11)$$

hay que resolver la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(r) = E\psi(r) \quad (1.12)$$

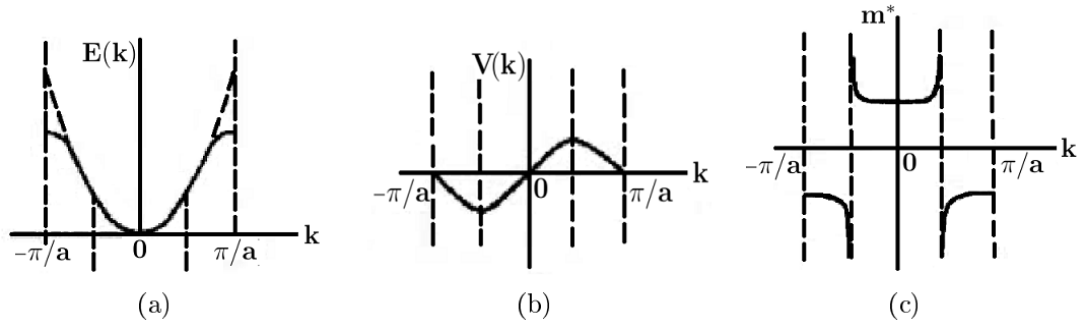
En el caso general la masa efectiva es una magnitud anisótropa y para diferentes direcciones del vector de onda \vec{k} es distinta.

Es por esto que la masa efectiva resulta ser un tensor de segundo rango:

$$m_{i,j}^* = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

La masa efectiva, a diferencia de la masa ordinaria, no determina las propiedades inerciales ni gravitacionales de la partícula. Es sólo un coeficiente en la ecuación del movimiento (1.3) y refleja la medida de la interacción del electrón con la red cristalina. Como el sistema a analizar está constituido por puntos cuánticos con forma de lentes delgadas de In-As que se encuentran inmersas en una matriz de Ga-As y dado que estos materiales presentan la misma estructura cristalina (zinc blenda según [29]), se permite catalogar al sistema como isotrópico; esto es: $m_{i,j}^* \approx m^*$. En vista de que la dependencia de $E(k)$ en la primera zona de Brillouin es de la forma que se muestra en la figura 1.1a, se pueden representar en las figuras 1.1b y 1.1c $v(k) = -(1/\hbar)(dE/dk)$ y $m^*(k) = \hbar^2(d^2E/dk^2)$ respectivamente.

Figura 1.1 Dependencia respecto del número de onda (a) de la energía, (b) de la velocidad y (c) de la masa efectiva.



Fuente: Tomado de [27].

Puede verse de estas figuras que la masa efectiva de los electrones que se encuentran en el fondo de la banda es positiva y próxima a la masa del electrón libre. En medio de la banda, donde se observa la inflexión de la curva $E(k)$, la masa efectiva se hace indeterminada y pierde su sentido físico. En el techo de la banda los electrones tienen masa efectiva negativa, lo cual significa que la aceleración del electrón tiene sentido opuesto al de la acción de la fuerza exterior; esto puede verse en la figura 1.1b. Para los valores de k próximos al límite de la zona de Brillouin, se aprecia que a pesar de que k aumenta, la velocidad del electrón disminuye. Este resultado es consecuencia de la reflexión de Bragg. En el punto $k = \pi/a$ el electrón se describe ya no por una onda progresiva, sino estacionaria ($v=0$). Como las propiedades de los electrones con masa efectiva negativa difieren mucho de las propiedades de los electrones <<normales>>, resulta conveniente describirlos utilizando la representación de cuasipartículas, con carga $+e$, de masa efectiva positiva. Esta cuasipartícula recibe el nombre de <<hueco>>.

1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer

Ignorando momentáneamente lo expuesto en la aproximación de masa efectiva únicamente con el fin de establecer el origen de la aproximación de Born-Oppenheimer, se considera nuevamente que el movimiento del electrón en cada punto cuántico de In-As inmerso en una matriz de Ga-As está descrito, según [27], por la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$H_c \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1.13)$$

donde H_c es el hamiltoniano del cristal definido por:

$$\begin{aligned}
H_c = & -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_l \frac{\hbar^2}{2M_l} \Delta_l + \frac{1}{2} \sum_{i,j \rightarrow i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \\
& - \sum_{i,l} \frac{e^2 Z_l}{4\pi |\vec{r}_i - \vec{R}_l|} + \frac{1}{2} \sum_{l,l' \rightarrow l \neq l'} \frac{e^2 Z_l Z_{l'}}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_l - \vec{R}_{l'}|}
\end{aligned} \tag{1.14}$$

en la ecuación 1.14 m es la masa de los electrones, M_l es la masa de los núcleos localizados en R_l , Z_l es el número atómico de los núcleos en R_l y e tiene la magnitud de la carga electrónica. La suma sobre i y j corre sobre todos los electrones externos asociados con cada átomo. La suma sobre l y l' corre sobre todas las coordenadas de los núcleos. Todos los términos involucrados en esta ecuación tienen una interpretación física. El primer término corresponde al operador que representa la energía cinética de los electrones. El segundo término es el operador que representa la energía cinética de los núcleos. El tercer término es la energía potencial coulombiana de interacción entre los electrones. El cuarto término es la energía potencial coulombiana de interacción entre los electrones y los núcleos. El quinto término es la energía potencial coulombiana de interacción entre los núcleos. En general, la función de onda es una función de todas las coordenadas tanto electrónicas como nucleares así como del tiempo, esto es:

$$\psi = \psi(\vec{r}_i, \vec{R}_l, t) \tag{1.15}$$

Definiendo a T_E como la energía cinética de los electrones, T_N la energía cinética de los núcleos, y U la energía coulombiana total de interacción de los núcleos y electrones, la ecuación 1.14 viene siendo:

$$H_c = T_E + U + T_N \tag{1.16}$$

donde se define también $H_0 = T_E + U$.

Los núcleos tienen grandes masas y por lo tanto en general tienen una energía cinética más pequeña. Dado que el sistema a analizar en el presente trabajo está compuesto por aleaciones semiconductoras, en la expresión $H_c = H_0 + T_N$ se considera a T_N como una perturbación a H_0 (Esta consideración no puede ser aplicada a materiales metálicos ya que sus electrones no tienen banda de energía prohibida entre sus estados base y excitado; situación por la cual T_N no puede ser considerado como una pequeña perturbación a H_0).

Tomando M_0 como la masa nuclear promedio y definiendo:

$$K = \left(\frac{m}{M_0} \right)^{1/4}$$

si se define además:

$$H_L = - \sum_l \frac{M_0}{M_l} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_l \quad (1.17)$$

entonces la energía cinética de los núcleos estaría dada por:

$$T_N = K^4 H_L \quad (1.18)$$

el hamiltoniano total tiene entonces la forma:

$$H_c = H_0 + K^4 H_L \quad (1.19)$$

y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo a resolver es:

$$H_c \psi(\vec{r}_i, \vec{R}_l) = E \psi(\vec{r}_i, \vec{R}_l) \quad (1.20)$$

Dentro del marco de la teoría de perturbaciones, al hacer una expansión de la solución de la ecuación 1.20 en potencias de K , se encuentra que si la función de onda es evaluada a segundo orden en K , aparece un producto de funciones de la forma $\psi_n(\vec{r}_i, \vec{R}_l) = \phi_n(\vec{r}_i) \chi(\vec{R}_l)$ donde n corresponde a un estado electrónico. La afirmación de que la función de onda total puede ser escrita como un producto entre la función de onda electrónica (dependiendo sólo de las coordenadas electrónicas con los núcleos en posiciones fijas), y la función de onda nuclear (que depende solo de las coordenadas nucleares con los electrones en algún estado fijo) es el contenido físico de la aproximación de Born-Oppenheimer. Esta idea también es conocida como *aproximación adiabática* y de acuerdo con [28], en ella se establece además que si una partícula está inicialmente en un eigenestado del hamiltoniano H^i , permanecerá en ese mismo estado luego de que H^i cambie gradualmente a alguna forma final H^f .

Dadas las características de los puntos cuánticos señaladas en la sección anterior, puede suponerse que el movimiento del electrón en cada punto cuántico estará compuesto por un movimiento rápido en la dirección vertical y uno lento en la dirección radial. Esta situación permite incorporar el uso la aproximación adiabática en el modelo matemático propuesto para analizar el espectro energético asociados a cada tipo de movimiento presente en el sistema.

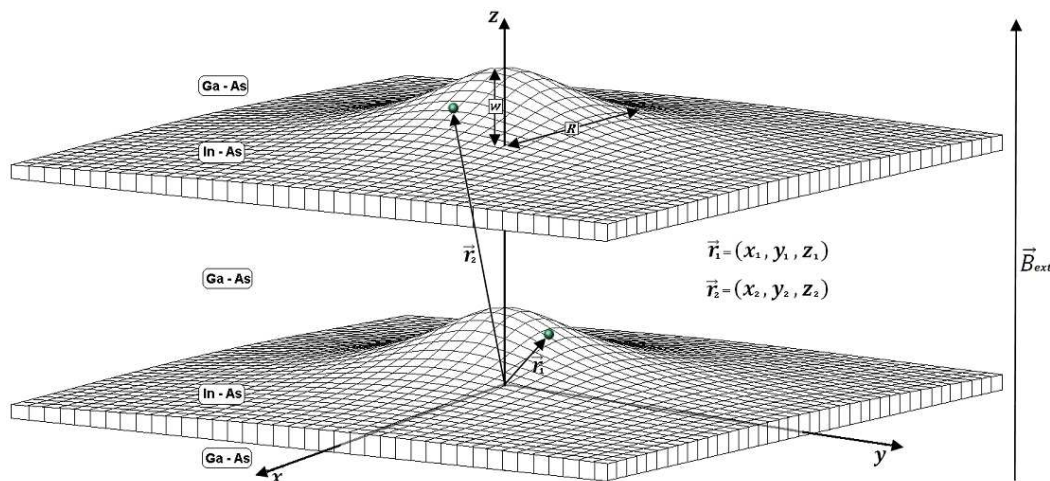
2. MODELO MATEMÁTICO PROPUESTO

En el presente capítulo se describe de manera más detallada el sistema a analizar; así mismo, se irá dando lugar a la implementación de las aproximaciones expuestas en el marco teórico en la medida en que se va desarrollando el modelo matemático propuesto para describir el movimiento de los portadores de carga dentro de cada punto cuántico y posteriormente, obtener el espectro energético correspondiente a un determinado conjunto de estados posibles del sistema.

2.1. Descripción del sistema

Como se muestra en la figura 2.1, el modelo a analizar se constituye de un sistema de dos electrones localizados en dos diferentes SAQD's de In-As acoplados verticalmente e inmersos en una matriz de Ga-As. Estas heterojunturas se encuentran en presencia de un campo magnético externo y exhiben la morfología descrita por una película delgada axialmente simétrica cuyo grosor $h(\rho)$, disminuye en función de la distancia desde el eje z en una forma especial dada por la fórmula $h(\rho) = w / \sqrt{1 + (\rho/R)^2}$ (Donde se supone que $w/R \ll 1$).

Figura 2.1: Sistema de dos puntos cuánticos acoplados verticalmente con un electrón dentro de cada una de ellos (Las esferas contenidas en las lentes representan los electrones).



Fuente: Autor del proyecto.

En vista de que en el presente trabajo se obtienen expresiones matemáticas que necesitan ser tratadas numéricamente, se requiere realizar un proceso de adimensionalización para cada ecuación del sistema que resulte de la aplicación de las diferentes aproximaciones utilizadas; de esta manera, dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, el hamiltoniano de Pauli adimensional en coordenadas cilíndricas para el sistema mostrado en la figura 2.1 es (véase el apéndice A1):

$$\tilde{H} = \frac{H}{R_y^*} = \sum_{k=1}^2 \left[-\tilde{\Delta}_k + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{\gamma^2 \tilde{\rho}_k^2}{4} + \tilde{V}_{conf}(\tilde{\rho}_k) \right] + \frac{2}{|\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2|} \quad (2.1)$$

donde el primer término de 2.1 hace referencia a la energía cinética del sistema, el segundo y tercer término corresponden a las interacciones de tipo paramagnético y diamagnético respectivamente, \tilde{V}_{conf} es el potencial de confinamiento, el cual es inducido por una discontinuidad en la banda de conducción de los dos materiales y el último término corresponde a la interacción de tipo coulombiano presente entre los dos electrones; aquí γ es la magnitud del campo magnético en unidades adimensionales y está dado por $\gamma = eB\hbar / 2m_e^*cR_y^*$ donde e es la carga del electrón, B la magnitud del campo magnético aplicado, \hbar la constante de Planck dividida por 2π , m_e^* la masa efectiva del electrón, c la velocidad de la luz y R_y^* la constante de Rydberg efectiva. En el proceso de adimensionalización para la obtención de la ecuación 2.1 se ha encontrado que $R_y^* \approx 6meV$; mientras que el radio de Bohr efectivo a_0^* es $a_0^* \approx 10nm$; este último parámetro permite expresar la ecuación que describe la morfología de los puntos cuánticos de la siguiente manera:

$$h(\tilde{\rho}) = \frac{a_0^* \tilde{w}}{\sqrt{1 + \left(\frac{a_0^* \tilde{\rho}}{a_0^* \tilde{R}}\right)^2}} \Rightarrow \tilde{h}(\tilde{\rho}) = \frac{h(\tilde{\rho})}{a_0^*} = \frac{\tilde{w}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\tilde{\rho}}{\tilde{R}}\right)^2}}$$

Donde la tilde (~) en cada una de las variables y constantes de las ecuaciones anteriormente obtenidas indican su naturaleza adimensional.

Para obtener una mejor interpretación de las implicaciones físicas inherentes al sistema mostrado en la figura 2.1 es necesario recurrir a una serie de aproximaciones adicionales tal y como se muestra en la siguiente sección.

2.2. Implementación de la Aproximación Adiabática

En el presente modelo se asume que el confinamiento en la dirección vertical es más fuerte que en el plano, haciendo que el movimiento en z sea más rápido que en la dirección planar; esta suposición hace posible el uso de la aproximación diabática, pudiéndose expresar la función de onda del electrón en el sistema como:

$$\psi = f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \phi(\tilde{\rho}, \varphi) \quad (2.2)$$

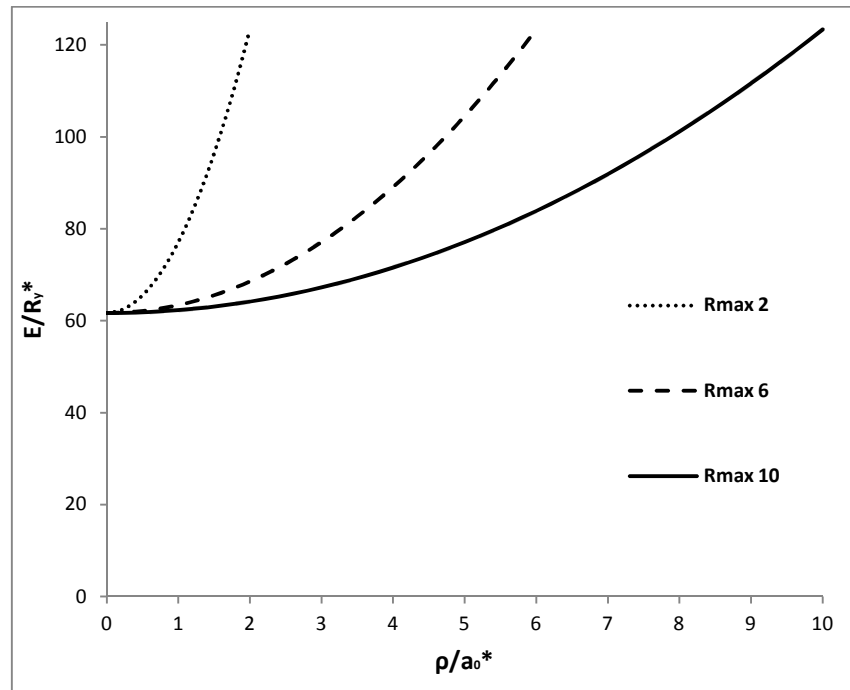
donde $f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ y $\phi(\tilde{\rho}, \varphi)$ corresponden respectivamente al movimiento vertical rápido y al movimiento radial lento. Con la función de onda de la forma dada en 2.2, la ecuación de Schrödinger asociada al hamiltoniano expuesto en 2.1 se puede resolver a través del método de variables separables, generando así ecuaciones independientes para cada tipo de movimiento presente en cada uno de los portadores de carga. De acuerdo con lo anterior, al congelar el movimiento lento, cada punto cuántico se aproxima a un sistema compuesto por un electrón confinado en un pozo de potencial infinito cuyo ancho estaría determinado por $\tilde{h}(\tilde{\rho})$. Esto es posible gracias a que entre los dos materiales, el potencial de

confinamiento es de $\sim 1eV$ en la dirección z del sistema (Este valor es relativamente grande si se tiene en cuenta que el rango de energía para el pozo de potencial infinito es del orden de $\sim 0,1eV$). De acuerdo con lo anterior, los niveles energéticos correspondientes a este tipo de movimiento se encuentran expresados mediante la siguiente ecuación (Véase el apéndice A.2.1):

$$\tilde{E}_z(\tilde{\rho}) = \frac{\pi^2}{[\tilde{h}(\tilde{\rho})]^2} n^2 \quad (2.3)$$

La figura 2.2 representa gráficamente los valores obtenidos de la expresión 2.3 con $n=1$ para tres puntos cuánticos; cada uno con una base de diferente radio (denominado R_{max} en la figura 2.2).

Figura 2.2. Representación gráfica de la energía correspondiente al movimiento vertical de los electrones en los puntos cuánticos.



Fuente: Autor del proyecto.

Estos valores de energía pueden ser tomados como punto de referencia, ya que la brecha energética entre el estado base ($n=1$) con $\tilde{E}_z(\tilde{\rho}=0) \approx 60R_y^*$ y el primer estado excitado ($n=2$) con $\tilde{E}_z(\tilde{\rho}=0) \approx 240R_y^*$ es muy grande comparado con el intervalo de valores de energía asociado al movimiento lento. De esta manera, el análisis se limita únicamente a la variación del espectro energético del movimiento en el plano frente al cambio en magnitud de parámetros como el radio del punto cuántico y el campo magnético aplicado para diferentes estados del sistema; de esta forma, al descongelar el movimiento lento, se restringe el análisis del Hamiltoniano propuesto únicamente al movimiento en el plano; es decir a un problema en 2-D. Para que el problema sea separable, el campo utilizado en la ecuación de Schrödinger debe ser de tipo central, es por esto que se debe considerar un potencial de confinamiento de tipo parabólico [11]; de acuerdo con esto, la ecuación que se propone para este potencial viene siendo $\tilde{V}_{(\rho,\varphi)}^{conf}(\tilde{\rho}_k) = (\pi / \tilde{w})^2 (1 + (\tilde{\rho}_k / \tilde{R})^2)$; de otra parte, introduciendo las coordenadas relativas y de centro de masa definidas como $\tilde{r} = \tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2$, $\theta = \varphi_1 - \varphi_2$; $\tilde{R} = (\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2) / 2$, $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2) / 2$ junto con los operadores $\tilde{\nabla}_r^{(2D)} = (\tilde{\nabla}_1^{(2D)} - \tilde{\nabla}_2^{(2D)}) / 2$, $\tilde{\nabla}_R^{(2D)} = \tilde{\nabla}_1^{(2D)} + \tilde{\nabla}_2^{(2D)}$ [30], el hamiltoniano dado en la ecuación 2.1 puede desacoplarse en dos hamiltonianos; uno para el movimiento relativo \tilde{H}_r y otro para el movimiento de centro de masas \tilde{H}_R (Véase el apéndice A.2.2):

$$\tilde{H}_R(\tilde{R}) = -\frac{1}{2}\tilde{\Delta}_R^{(2D)} + \tilde{\omega}^2\tilde{R}^2 + i\gamma\frac{\partial}{\partial\Theta} \quad (2.4)$$

$$\tilde{H}_r(\tilde{r}) = -2\tilde{\Delta}_r^{(2D)} + \frac{1}{4}\tilde{\omega}^2\tilde{r}^2 + \frac{2}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \quad (2.5)$$

donde $\tilde{\Delta}_q^{(2D)}$ con $q=r,R$, el operador laplaciano adimensional para las coordenadas cilíndricas en dos dimensiones definido como:

$$\tilde{\Delta}_q^{(2D)} = \frac{1}{\tilde{\rho}_q} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_q} \left(\tilde{\rho}_q \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_q} \right) + \frac{1}{\tilde{\rho}_q^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_q^2} \quad \text{siendo } q=r,R$$

En las anteriores ecuaciones $\tilde{\omega}$ es la frecuencia ciclotrónica del electrón y \tilde{d} la distancia de separación entre los puntos. De acuerdo con [18, 31, 32], esta separabilidad y la simetría cilíndrica del problema permiten escribir las funciones de onda de dos partículas en el plano en coordenadas polares $\tilde{\vec{r}} = (\tilde{r}, \theta)$ en la forma $\Phi(\tilde{R})f(\tilde{r})e^{(im,\theta)}$. La parte espacial de la función de onda total es simétrica (antisimétrica) con respecto a la permutación de la partícula ($\theta \rightarrow \theta + \pi$) para números cuánticos acimutales m_r pares (impares). Como el principio de exclusión de Pauli requiere que la función de onda total sea antisimétrica, se tiene por tanto estados de espín singlete ($S=0$) y triplete ($S=1$) para m_r par e impar respectivamente.

2.3. Análisis del movimiento relativo y de centro de masas

La ecuación de Schrödinger asociada a la expresión 2.4 corresponde a la de un oscilador circular [33] y puede resolverse analíticamente, por lo que la ecuación de valores propios para las energías viene dada por (Véase el apéndice A.2.3):

$$\tilde{E}_{CM} = \sqrt{2}\tilde{\omega} \left[|M_{CM}| + 1 + 2n_{CM} \right] + \gamma M_{CM} \quad (2.6)$$

$$\text{Con } n_{CM} = 0, 1, 2, \dots \text{ y } M_{CM} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Donde n_{CM} es el número cuántico radial y M_{CM} es el número cuántico acimutal. De esta manera, el problema se reduce a encontrar una expresión para la energía correspondiente al movimiento relativo cuyo hamiltoniano está dado por la

ecuación 2.5. Para esto, se utiliza en la ecuación de Schrödinger resultante el método de separación de variables, con lo cual la función de onda adquiere la forma:

$$\psi(\tilde{r}, \theta) = e^{im_r \theta} f(\tilde{r}) \quad \text{con } m_r = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.7)$$

siendo m_r el número cuántico acimutal del movimiento relativo. Introduciendo la función de onda 2.7 en la ecuación de Schrödinger, la ecuación que describe el movimiento relativo resulta ser:

$$-\frac{d^2 f(\tilde{r})}{d\tilde{r}^2} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{df(\tilde{r})}{d\tilde{r}} + \left[\frac{m_r^2}{\tilde{r}^2} + \frac{1}{8} \tilde{\omega}^2 \tilde{r}^2 + \frac{1}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \right] f(\tilde{r}) = \frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} f(\tilde{r}) \quad (2.8a)$$

con las condiciones de contorno dadas por:

$$0 < \tilde{r} < \infty, \quad f(0) < \infty, \quad f(\tilde{r})_{\tilde{r} \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (2.8b)$$

La ecuación 2.8a resulta poco práctica para hacer un análisis cualitativo (Puesto que ahora se busca una expresión análoga a la ecuación de Schrödinger). Para resolver tal inconveniente se redefine la función $f(\tilde{r})$ como sigue [34]:

$$f(\tilde{r}) = \frac{\chi(\tilde{r})}{\sqrt{\tilde{r}}} \quad (2.9)$$

Reemplazando 2.9 en 2.8a, se llega finalmente a (Véase el apéndice A.2.4):

$$\chi''(\tilde{r}) + \left(\frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} - \tilde{V}_{eff}^{m_r} \right) \chi(\tilde{r}) = 0 \quad (2.10a)$$

con las condiciones de contorno dadas por:

$$\chi(0)=0, \quad \chi(\tilde{r})_{\tilde{r} \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (2.10b)$$

donde $\tilde{V}_{eff}^{m_r}$ es el potencial efectivo, definido como:

$$\tilde{V}_{eff}^{m_r}(\tilde{r}) = \frac{m_r^2 - 1/4}{\tilde{r}^2} + \frac{1}{8} \tilde{\omega}^2 \tilde{r}^2 + \frac{2}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \quad (2.11)$$

A pesar de que la ecuación 2.10a exhibe una forma análoga a la ecuación de Schrödinger, requiere una solución numérica para encontrar los valores de la energía debido a la no linealidad dada por el término de interacción coulombiana presente en el potencial efectivo. Para esto, se recurre al método de barrido trigonométrico realizando la siguiente sustitución (véase el apéndice B.1):

$$\chi(\tilde{r}) = A(\tilde{r}) \cos[\theta(\tilde{r})] \quad \text{y} \quad \chi'(\tilde{r}) = A(\tilde{r}) \text{sen}[\theta(\tilde{r})] \quad (2.12)$$

con lo cual, la ecuación 2.10a toma la forma:

$$\theta'(\tilde{r}) = -\text{sen}^2[\theta(\tilde{r})] - \left[\frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} - \tilde{V}_{eff}^{m_r} \right] \cos^2[\theta(\tilde{r})] \quad (2.13a)$$

con las condiciones de frontera establecidas como sigue:

$$\begin{aligned} \chi(0)=0 &\Rightarrow \theta(0) = \frac{\pi}{2} \\ \chi(\infty)=0 &\Rightarrow \theta(\infty) = \frac{\pi}{2} - \pi n_r \rightarrow n_r = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (2.13b)$$

Las anteriores condiciones de frontera permiten considerar el problema representado por las ecuaciones 2.13 como un problema de Cauchy, el cual puede resolverse numéricamente por el método de Runge-Kutta de cuarto orden con correcciones de Fehlberg (RK-4F); al hacer esto, se observa que las soluciones pueden ser encontradas para cada valor del parámetro \tilde{E}_{m_r} y por tanto, cada una de ellas puede considerarse como una función $\theta(\tilde{r}, \tilde{E}_{m_r})$ para cualquier valor de energía \tilde{E}_{m_r} . De otra parte, dada la segunda condición en 2.13b, la curva de $\theta(\tilde{r})$ es asintótica en los valores determinados por $\pi/2 - \pi n_r$; esta situación permite que para grandes valores de \tilde{r} (escritos como \tilde{r}^*), la solución de 2.13a pueda ser escrita como (véase el apéndice B.2):

$$\theta(\tilde{r}^*, \tilde{E}_{m_r}) = \frac{\pi}{2} - \pi n_r \quad \text{con } n_r = 1, 2, 3, \dots \quad (2.14)$$

Esta situación hace posible que los niveles de energía para el movimiento relativo puedan ser obtenidos de la siguiente manera: Primero se, resuelve numéricamente la ecuación 2.14 a través de una combinación del método de bisección combinado con el método de la secante, encontrándose un valor de $\theta(\tilde{r}^*, \tilde{E}_{m_r})$; posteriormente, se fija un valor inicial de \tilde{E}_{m_r} y luego se determina con el método de RK-4F un nuevo valor de $\theta(\tilde{r}^*, \tilde{E}_{m_r})$ en un valor grande de \tilde{r} (como se verá en el siguiente capítulo, se utilizarán los valores de $\tilde{r}^* = 20a_0^*, 60a_0^* \text{ y } 100a_0^*$); si la diferencia entre los valores hallados por estos dos métodos numéricos no es igual o menor a $1 \cdot 10^{-10}$ (valor de la tolerancia), se fija entonces un nuevo valor de \tilde{E}_{m_r} en 2.13a, encontrándose otro valor para $\theta(\tilde{r}^*, \tilde{E}_{m_r})$ repitiéndose este proceso de manera iterativa hasta que la tolerancia especificada anteriormente sea satisfecha.

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En el presente capítulo se presentan los resultados de cálculo obtenidos utilizando los métodos planteados en el capítulo anterior. En la sección 3.1 se expone el espectro energético obtenido en función del campo magnético para dos radios distintos y dos diferentes distancias de separación con el fin de realizar comparaciones entre las diferentes variaciones del espectro energético obtenido. En la sección 3.2 se presentan los resultados encontrados para la estimación de la envolvente para la densidad de estados con los mismos valores de radio y distancia de separación utilizados en el caso anterior con el fin de realizar un análisis comparativo entre las gráficas y así, determinar el efecto que el campo magnético ejerce sobre las curvas en cada una de ellas.

3.1 Espectro energético del movimiento en el plano como función del radio y del campo magnético aplicado

De la expresión para la energía del movimiento de centro de masas (ecuación 2.6) junto con la resolución numérica de las ecuaciones dadas en 2.8 para el movimiento relativo, se obtuvo el espectro energético en función del campo magnético a dos diferentes distancias de separación entre puntos (en unidades adimensionales, 0 y 10) y a dos diferentes radios para cada punto cuántico (en unidades adimensionales, 2 y 10); esto con el fin de analizar respectivamente, la evolución de las líneas espectrales frente a un aumento o disminución en el potencial tanto de interacción coulombiana como de confinamiento. Los estados utilizados para generar cada una de estas líneas se especifican en la tabla 3.1 y las gráficas obtenidas para cada uno de estos estados, junto con la variación de los parámetros señalados se muestran en la figura 3.1; de esta figura puede apreciarse que cada línea que describe el estado del sistema se encuentra en el rango infrarrojo del espectro electromagnético [15, 35]. De acuerdo con [16, 22, 35], las intersecciones presentes entre las distintas curvas mostradas en la figura

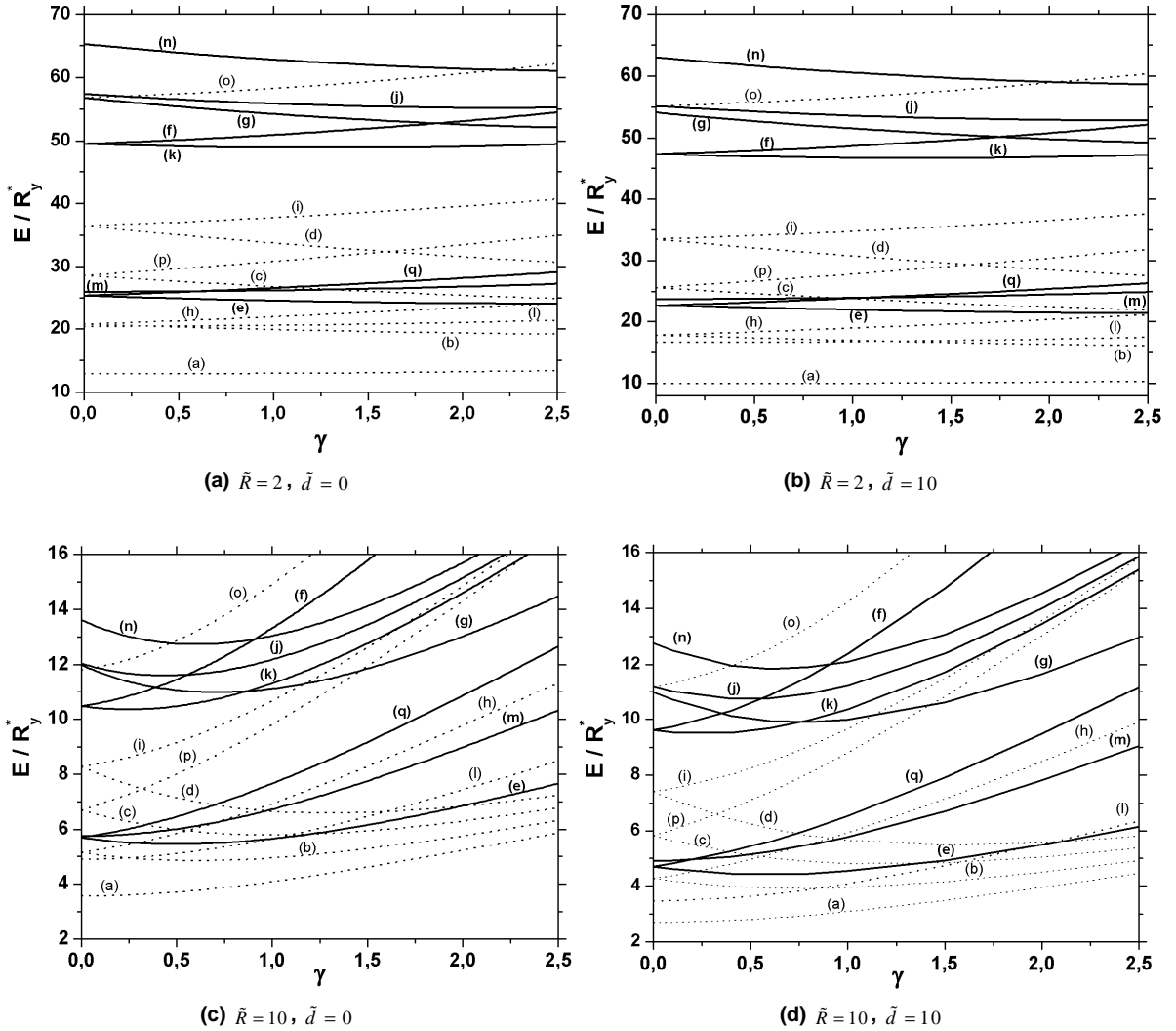
3.1 corresponden a las posibles transiciones entre los estados de espín del sistema (a estas transiciones se les conoce también como oscilaciones de espín).

Tabla 3.1. Estados utilizados para la generación de las curvas mostradas en la figura 3.1. Los estados de espín se asignan de acuerdo con la naturaleza para o impar del número cuántico m_r (sección 2.2).

Estado	$(n_{CM}, M_{CM}, n_r, m_r)$	Estado de espín
(a)	(0, 0, 0, 0)	Singlete
(b)	(0,-1, 0, 0)	Singlete
(c)	(0,-2, 0, 0)	Singlete
(d)	(0,-3, 0, 0)	Singlete
(e)	(0,-1, 0, 1)	Triplete
(f)	(1, 1, 1, 1)	Triplete
(g)	(1,-3, 0, 1)	Triplete
(h)	(0, 1, 0, 0)	Singlete
(i)	(1, 1, 0, 0)	Singlete
(j)	(1,-2, 1, 1)	Triplete
(k)	(1,-1, 1, 1)	Triplete
(l)	(0, 0, 1, 0)	Singlete
(m)	(0, 0, 1, 1)	Triplete
(n)	(1,-3, 1, 1)	Triplete
(o)	(1, 1, 1, 2)	Singlete
(p)	(0, 2, 0, 0)	Singlete
(q)	(0, 1, 0, 1)	Triplete
Fuente: Autor del proyecto		

Analizando las gráficas en la figura 3.1, se aprecia que para altos potenciales tanto de confinamiento como de interacción Coulombiana (es decir, para los valores más bajos de radio y distancia de separación respectivamente), el movimiento de los electrones se torna más caótico, por lo que se aprecia un bajo grado de entrecruzamiento de las líneas que describen los estados del sistema; de otra parte, cuando los potenciales son débiles (figura 3.1d) el movimiento se aproxima al de un rotor rígido donde las transiciones, además de ser mayores en número, están dadas únicamente por la variación en la magnitud del campo magnético.

Figura 3.1. Espectro energético en función del campo magnético γ para diferentes radios en cada punto cuántico y distintas distancias de separación (las líneas punteadas corresponden al estado de espín singlete mientras que las líneas sólidas al estado de espín triplete).

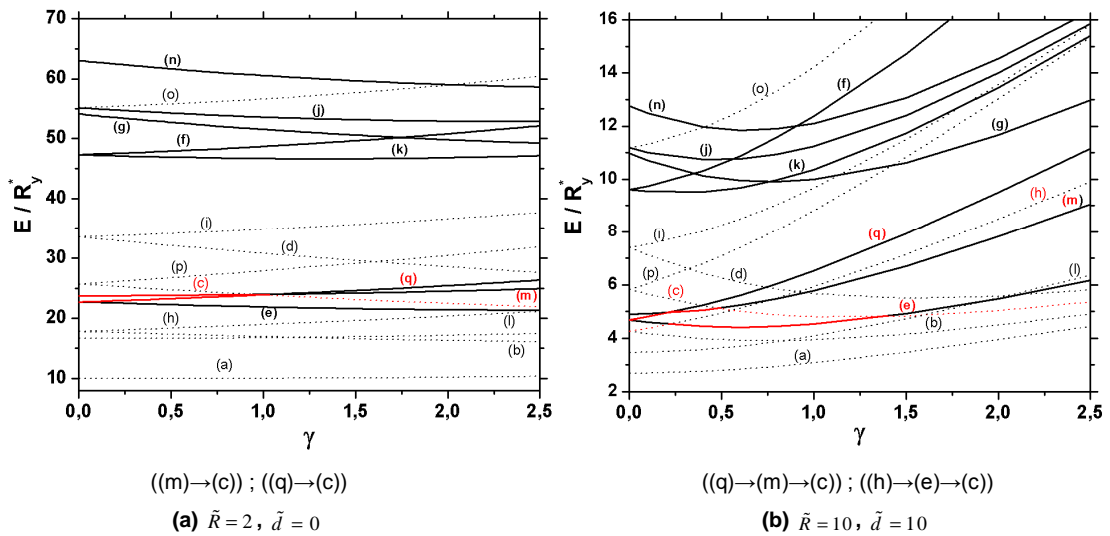


Fuente: Autor del proyecto

Comparando la evolución del espectro energético del sistema frente a una variación en la distancia de separación (figuras 3.1a-3.1b y 3.1c-3.1d) y frente a una variación en el radio de los puntos (figuras 3.1a y 3.1c junto con 3.1b y 3.1d), se aprecia que el grado de entrecruzamiento de las curvas aumenta con una disminución en el potencial de confinamiento, favoreciendo de esta manera un aumento en el número de oscilaciones de espín para un estado en particular; de

esta manera, como se muestra en la figura 3.2, cuando $\tilde{R}=2$, los estados (m) y (q) presentan oscilaciones de espín de tipo triplete-singlete ((m)→(c) y (q)→(c)), mientras que para el caso $\tilde{R}=10$ el estado (q) presenta transiciones triplete-triplete-singlete ((q)→(m)→(c)) y al estado (m) se le antepone una transición de forma tal que para el estado (h) se presentan oscilaciones de tipo singlete-triplete-singlete ((h)→(e)→(c)).

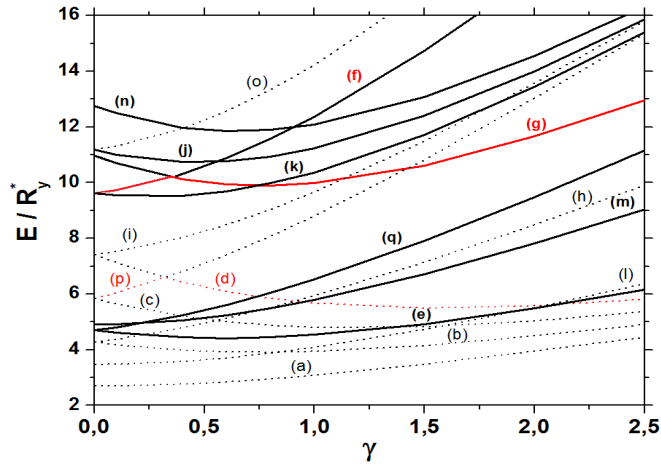
Figura 3.2. Aumento en el número de oscilaciones de espín (líneas de color rojo) debido a una disminución en los potenciales tanto de confinamiento como de interacción Coulombiana.



Fuente: Autor del proyecto

Otra característica apreciable encontrada en la figura 3.1 es que en todas las gráficas, tanto el estado (p) como el (f) se mantienen respectivamente, como un singlete polarizado y un triplete polarizado dadas las transiciones (p)→(d) (singlete-singlete) y (f)→(g) (triplete-triplete) (véase la figura 3.3); este último resultado está acorde con el comportamiento obtenido de algunas oscilaciones de espín encontradas en [35, 36].

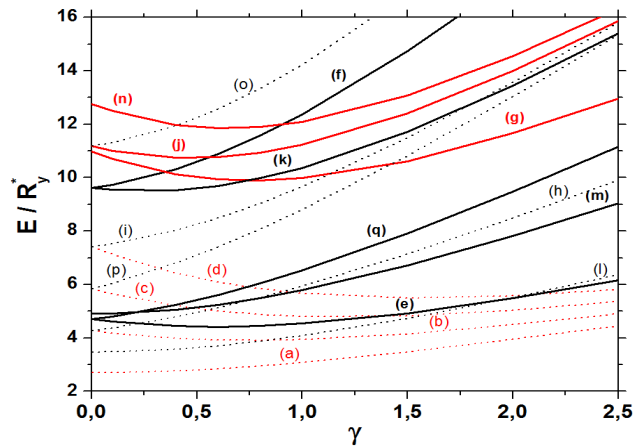
Figura 3.3. Estados de espín polarizado (curvas de color rojo).



Fuente: Autor del proyecto

Finalmente, dentro del conjunto de estados evaluados, se observa que los rotulados como (a), (b), (c) y (d), se mantienen como singletes puros sin importar el tamaño de cada punto, la distancia de separación entre los puntos o la magnitud del campo magnético aplicado; esto ocurre de manera análoga para los tripletes (g), (n) y (j) (véase las curvas de color rojo de la figura 3.4).

Figura 3.4. Comportamiento del espectro energético de los estados del sistema que cumplen la condición $M_{CM} < 1$ (curvas de color rojo). Nótese que para estos estados no hay oscilaciones de espín.

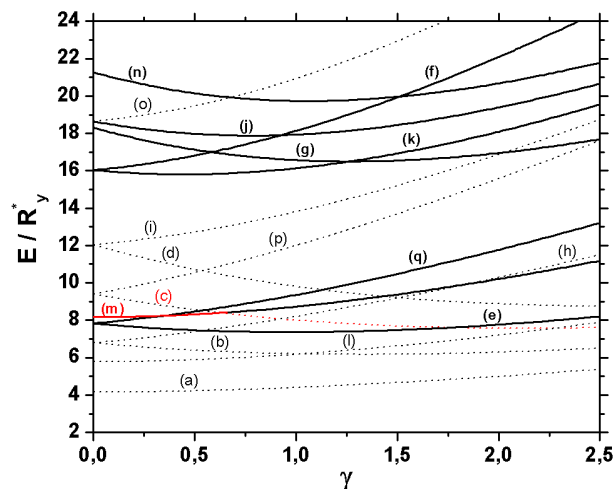


Fuente: Autor del proyecto

Esta situación refleja la alta estabilidad de los estados que cumplen la condición $M_{CM} < 1$ frente a la variación de alguno de los tres parámetros utilizados para estudiar la evolución del espectro energético del sistema.

Estos resultados sugieren que dentro del conjunto de estados contemplados, para conjugar al menos dos “qubits”, los electrones en el sistema deben estar preparados en el estado (m) puesto que su oscilación de espín (m)→(c) (triplete-singlete), además de ser controlada, ocurre a bajos valores de energía y campo magnético (véase la figura 3.5). Dado que las bifurcaciones en $\gamma=0$ corresponden a estados distintos con la misma energía, se tiene entonces que los estados $(n_{CM}, M_{CM}, n_r, m_r)$ y $(n_{CM}, -M_{CM}, n_r, m_r)$ son degenerados (esta misma apreciación fue encontrada en [14]); lo anterior implica que los demás estados podrían no ser los más adecuados para obtener dos “qubits”, ya que al menos en la mitad de las ocasiones, las transiciones a los niveles energéticos dados con los valores de campo magnético especificado podrían no presentarse y sus oscilaciones de espín ocurrirían a energías mayores y/o campos magnéticos más grandes.

Figura 3.5. Estado con oscilación (triplete-singlete).



Fuente: Autor del proyecto

3.2 Envolvente para la densidad de estados

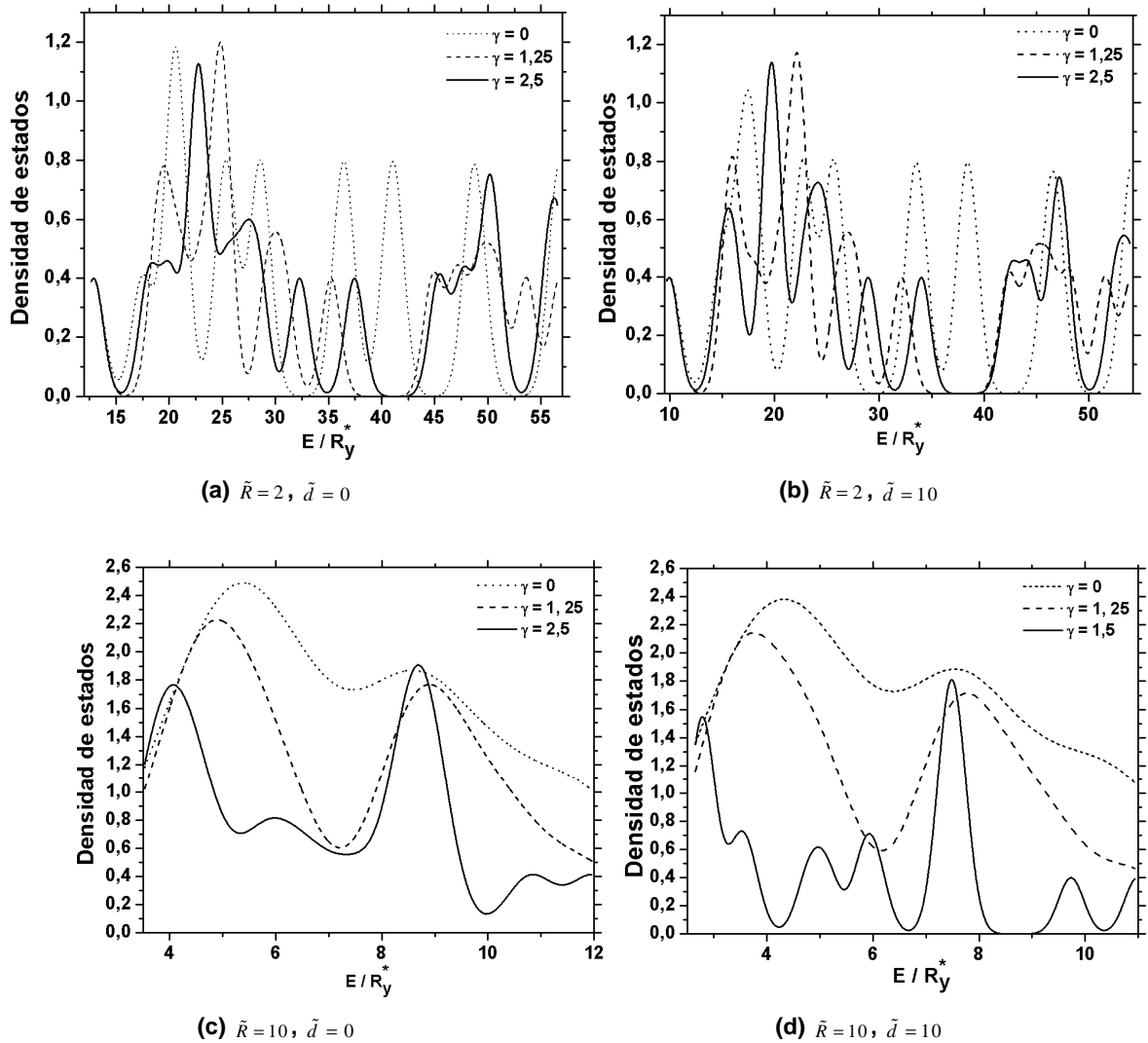
La densidad de estados para este tipo de sistemas consiste de una serie de funciones delta de Dirac [37], este hecho impide determinar claramente el efecto del campo magnético sobre la distribución de los estados en el sistema; por tanto, para describir el comportamiento de la distribución de los estados frente a las variaciones en la magnitud del campo magnético, se plantea una envolvente de tipo gaussiana definida por:

$$f(\tilde{E}) = \frac{1}{2s\sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{\tilde{E}-\tilde{E}_0}{s}\right)^2}$$

Donde s es un parámetro de ajuste que se gradúa manualmente con el fin de estimar un ancho apropiado en la distribución de los estados. De acuerdo con este planteamiento, los resultados obtenidos que describen la distribución de la densidad de estados a tres diferentes magnitudes de campo magnético se muestran en la figura 3.6; en todas las gráficas de esta figura, se aprecia que a medida que la magnitud del campo magnético aumenta, la densidad de estados del sistema se va desdoblado de manera análoga a lo que ocurre con el efecto Zeeman, formando grupos de estados que conllevan a la obtención de un espectro de bandas más definido y con una mayor discretización. Otra característica observada en las curvas de la figura 3.6 se presenta cuando el espectro permanece casi inalterado frente a las variaciones del potencial de interacción colulombiana (aumento o disminución de \tilde{d}). Este comportamiento puede deberse principalmente a un mayor predominio del potencial de confinamiento sobre el potencial de interacción coulombiana. Lo anterior no implica que el potencial de interacción coulombiana no ejerza ningún efecto sobre el espectro energético del sistema o sobre la densidad de estados del mismo; pues como se ve de las figuras 3.6c a 3.6d, cuando el potencial de confinamiento es relativamente débil en comparación con los casos anteriores, se aprecia que los desdoblamientos de la

densidad espectral están determinados únicamente por el potencial de interacción coulombiana.

Figura 3.6. Densidad de estados para tres diferentes magnitudes de campo magnético γ (Para la obtención de estas gráficas se tomó $s=1$).



Fuente: Autor del proyecto

4. CONCLUSIONES

- Se analizó el espectro energético de una heteroestructura conformada por dos puntos cuánticos acoplados verticalmente con un electrón confinado en cada uno de ellos.
- Se demostró que para cada punto cuántico que exhibe una morfología especial con una altura despreciable en comparación con sus diámetro, la ecuación de Schrödinger correspondiente es completamente separable y las soluciones exactas dependen de cuatro números cuánticos, dos radiales n_{CM} y n_r y dos angulares M_{CM} y m_r asociados de manera respectiva a los movimientos de centro de masas y relativo.
- El análisis de las soluciones exactas para puntos cuánticos de diferentes tamaños y las separaciones entre ellos muestran la importancia de los efectos de la correlación electrónica que se manifiesta en las múltiples intersecciones de las curvas de las energías en la función del radio, la separación y del campo magnético acompañado por reordenamiento de los niveles energéticos.
- Las oscilaciones de espín presentes en el conjunto de estados evaluados para el sistema estudiado dependen únicamente de la magnitud del campo magnético aplicado y de la manera en que estén configurados los números cuánticos n_{CM} , M_{CM} , n_r , m_r .
- Dentro del conjunto de estados evaluados para el sistema estudiado, sólo el estado (m) , definido por $(n_{CM}=0, M_{CM}=0, n_r=1, m_r=1)$ podría ser utilizado para conjugar por lo menos dos “qubits”, debido a la presencia de una transición triplete-singlete controlable a valores relativamente bajos de energía y campo magnético.

- El desdoblamiento de las bandas que sufren las envolventes correspondientes a la densidad de estados relacionados con el efecto Zeeman se hacen menos notorios, con el aumento tanto en el potencial de confinamiento dado por una disminución en la magnitud del radio de los puntos cuánticos, como en el potencial de interacción Coulombiana producido por una disminución en la distancia de separación de los puntos.

ANEXO A: APÉNDICE MATEMÁTICO

A.1. Obtención del Hamiltoniano de Pauli Adimensional

El Hamiltoniano no relativista para el sistema de dos partículas mostrado en la figura 2.1 es:

$$H = \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m_k} (\vec{P}_k)^2 + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \quad (\text{A.1})$$

dado que $\vec{P}_k = \vec{p}_k - (e/c)\vec{A}$ y $m_1 = m_2 = m$, la ecuación A.1 toma la forma:

$$H = \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m_k} \left(\vec{p}_k - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \quad (\text{A.2})$$

Ahora bien, para cuantizar la expresión A.2, se elevan las variables dinámicas a estatus de operador en la representación de coordenadas, dando como resultado:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla}_k - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|}$$

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_k + \frac{ie\hbar}{c} \vec{\nabla}_k \cdot \vec{A} + \frac{ie\hbar}{c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \|\vec{A}\|^2 \right) + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \quad (\text{A.3})$$

Con el fin de obtener una expresión desglosada del operador Hamiltoniano dado anteriormente, se procede a aplicarlo sobre una función como se observa a continuación:

$$\begin{aligned}
\hat{H}f &= \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_k + \frac{ie\hbar}{c} \vec{\nabla}_k \cdot \vec{A} + \frac{ie\hbar}{c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \|\vec{A}\|^2 \right) + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] f + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} f \\
\hat{H}f &= \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_k f + \frac{ie\hbar}{c} \vec{\nabla}_k \cdot (\vec{A}f) + \frac{ie\hbar}{c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k f + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \|\vec{A}\|^2 f \right) + V_{conf}(\vec{r}_k) f \right] \\
&\quad + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} f
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Mediante la imposición de las condiciones de Gauge siguientes:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} (-By(i) + Bx(j)) \tag{A.5a}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \tag{A.5b}$$

el término en la ecuación A.4 dado por $\vec{\nabla}_k \cdot (\vec{A}f) = (\vec{\nabla}_k \cdot \vec{A})f + (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k)f$ se reduce a:

$\vec{\nabla}_k \cdot (\vec{A}f) = (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k)f$; así, retirando la función f , la ecuación A.4 pasa a ser:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^2 \left[\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \Delta_k + 2 \frac{ie\hbar}{c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_k + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \|\vec{A}\|^2 \right) + V_{conf}(\vec{r}_k) \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} \tag{A.6}$$

Ahora bien, con el fin de adimensionalizar la expresión dada en A.6 se realiza una sustitución de las variables como sigue:

$$m \rightarrow m_e^* \equiv \text{masa efectiva}$$

$$\vec{r} \rightarrow \tilde{r} a_0^* \text{ Siendo } m \rightarrow m_e^* \equiv \text{Radio de Bohr efectivo}$$

realizando la anterior sustitución y teniendo en cuenta que $\vec{A} \cdot \vec{\nabla} = \frac{B}{2} \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right)$,

la ecuación A.6 dividida por la constante R_y^* (Rydberg efectivo) pasa a ser:

$$\tilde{H} = \sum_{k=1}^2 \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^* a_0^* R_y^*} \tilde{\Delta}_k + \frac{2ie\hbar B}{2m_e^* c R_y^*} \left(-\tilde{y}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} + \tilde{x}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{y}_k} \right) + \frac{e^2 B^2 a_0^{*2}}{2m_e^* 4c^2 R_y^*} (\tilde{x}_k^2 + \tilde{y}_k^2) \right) + \tilde{V}_{conf}(\tilde{\vec{r}}_k) \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon R_y^* a_0^*} \frac{1}{\|\tilde{\vec{r}}_1 - \tilde{\vec{r}}_2\|} \quad (\text{A.7})$$

Haciendo que el siguiente conjunto de parámetros tome los valores:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^* a_0^* R_y^*} = 1 \quad (\text{A.8a})$$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon R_y^* a_0^*} = 2 \quad (\text{A.8b})$$

se encuentra que el radio de Bohr efectivo sea $a_0^* = 9,8nm$ y la constante de Rydberg efectiva tome el valor de $R_y^* = 5,9meV$. Mediante el reemplazo de las expresiones A.8 en A.7, el operador Hamiltoniano adimensional toma la forma:

$$\tilde{H} = \sum_{k=1}^2 \left[-\tilde{\Delta}_k + \frac{ie\hbar B}{2m_e^* c R_y^*} \left(-\tilde{y}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} + \tilde{x}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{y}_k} \right) + \frac{\alpha'}{2m_e^* 4c^2 R_y^*} (\tilde{x}_k^2 + \tilde{y}_k^2) + \tilde{V}_{conf}(\tilde{\vec{r}}_k) \right] + \frac{2}{\|\tilde{\vec{r}}_1 - \tilde{\vec{r}}_2\|} \quad (\text{A.9})$$

De la ecuación A.8a se tiene que: $\hbar^2 = 2m_e^* a_0^{*2} R_y^*$ con esta definición, el coeficiente del tercer término de la ecuación A.9 (α') se transforma como sigue:

$$\begin{aligned}
\alpha' &= \frac{e^2 B^2 a_0^*}{2m_e^* 4c^2 R_y^*} \frac{2m_e^* R_y^*}{2m_e^* R_y^*} \\
&= \frac{e^2 B^2}{4c^2 4m_e^* R_y^{*2}} \overbrace{2m_e^* a_0^{*2} R_y^*}^{\hbar^2} \\
&= \frac{e^2 B^2 \hbar^2}{4c^2 4m_e^{*2} R_y^{*2}}
\end{aligned}$$

De este resultado y de la definición del siguiente parámetro:

$$\gamma = \frac{\hbar e B}{2m_e^* c R_y^*} \Rightarrow \gamma^2 = \frac{\hbar^2 e^2 B^2}{4m_e^{*2} c^2 R_y^{*2}} = 4(\alpha')^2$$

Escribiendo la ecuación A.9 en términos de γ se tiene:

$$\tilde{H} = \sum_{k=1}^2 \left[-\tilde{\Delta}_k + i\gamma \left(-\tilde{y}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} + \tilde{x}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{y}_k} \right) + \frac{\gamma^2}{4} (\tilde{x}_k^2 + \tilde{y}_k^2) + \tilde{V}_{conf}(\tilde{r}_k) \right] + \frac{2}{\|\tilde{r}_1 - \tilde{r}_2\|} \quad (\text{A.10})$$

Dado que el sistema analizado en el presente trabajo posee simetría axial, conviene expresar la ecuación A.10 en coordenadas cilíndricas; para esto es necesario en primer lugar realizar el siguiente paso intermedio:

Con las siguientes ecuaciones de transformación:

$$\begin{array}{lll}
\tilde{x} = \tilde{\rho} \cos \varphi & h_1 = h_{\tilde{\rho}} = 1 & \hat{e}_{\tilde{x}} = \hat{e}_{\tilde{\rho}} \cos \varphi - \hat{e}_{\varphi} \sin \varphi \\
\tilde{y} = \tilde{\rho} \sin \varphi & h_2 = h_{\varphi} = \tilde{\rho} & \hat{e}_{\tilde{y}} = \hat{e}_{\tilde{\rho}} \sin \varphi + \hat{e}_{\varphi} \cos \varphi \\
\tilde{z} = \tilde{z} & h_3 = h_{\tilde{z}} = 1 & \hat{e}_{\tilde{z}} = \hat{e}_{\tilde{z}}
\end{array}$$

El operador gradiente en coordenadas cilíndricas es:

$$\tilde{\nabla} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{h_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \hat{e}_i = \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \hat{e}_{\tilde{\rho}} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{e}_{\varphi} + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \hat{e}_{\tilde{z}}$$

Con este cambio de coordenadas, los siguientes términos de la ecuación A.10 quedan expresados como sigue:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_k &= \tilde{\rho}_k \\ \tilde{x}_k^2 + \tilde{y}_k^2 &= \tilde{\rho}_k^2 \\ -\tilde{y}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k} + \tilde{x}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{y}_k} &= \frac{\partial}{\partial \varphi_k} \end{aligned}$$

De esta manera, la ecuación A.10 adopta la forma:

$$\tilde{H} = \sum_{k=1}^2 \left[-\tilde{\Delta}_k + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{\gamma^2 \tilde{\rho}_k^2}{4} + \tilde{V}_{conf}(\tilde{\rho}_k) \right] + \frac{2}{\|\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2\|} \quad (\text{A.11})$$

El cual corresponde al hamiltoniano de Pauli adimensional. En esta expresión $\tilde{\Delta}_k$ está definido en coordenadas cilíndricas como:

$$\tilde{\Delta}_k = \frac{1}{\tilde{\rho}_k} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_k} \left(\tilde{\rho}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_k} \right) + \frac{1}{\tilde{\rho}_k^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_k^2}$$

A.2. Implementación de la aproximación adiabática en hamiltoniano de Pauli adimensional

A.2.1 Análisis del movimiento rápido

Como resultado de la aproximación adiabática la función de onda para el sistema a analizar puede ser escrita como:

$$\psi(\vec{r}) = f(\tilde{\rho}, \tilde{z})\phi(\tilde{\rho}, \varphi) \quad (\text{A.12})$$

No obstante, para obtener las expresiones de la energía en dirección vertical se requiere primero congelar el movimiento lento y utilizar la expresión resultante de la incorporación de A.12 en la ecuación de Schrödinger; de esta manera:

$$\tilde{H}f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = \tilde{E}_z(\tilde{\rho}) f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$$

Donde H , está definido por A.11. Como en este caso sólo se analiza la dirección \tilde{z} , los términos diamagnético y paramagnético son cero; pues el electrón se mueve en dirección paralela a las líneas del campo magnético externo \vec{B}_{ext} y por tanto la fuerza de Lorentz ejercida sobre el electrón es nula. De otra parte, la consideración de una morfología que cumple con la condición para películas delgadas ($\tilde{w}/\tilde{R} \ll 1$) permite asumir que las contribuciones de $f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ en la ecuación de Schrödinger son tan pequeñas que se puede hacer la siguiente aproximación:

$$\left(\frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \left[\tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}} \right] \right) f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \approx 0$$

De manera similar, dado que $f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ no depende de la coordenada angular resulta también que las contribuciones de $f(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ a la ecuación de Schrödinger son nulas; esto es:

$$\frac{1}{\tilde{\rho}^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = 0$$

De esta manera la ecuación de Schrödinger resultante para el movimiento lento es:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}_{\tilde{z}}^{conf}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \right] f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = \tilde{E}_{\tilde{z}} f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \quad (\text{A.13})$$

En vista de que en los alrededores del punto cuántico se induce una discontinuidad en la banda de conducción por la presencia de un material conductor distinto, origina la posibilidad de introducir en la dirección vertical, un pozo compuesto de dos barreras de potencial finito de ancho $\tilde{h}(\tilde{\rho}, \tilde{z})$ en los infinitos puntos de plano definido por $(\tilde{\rho}, \varphi)$. Sin embargo, debido a que la constante de barrera para estos pozos es muy alta; dichos pozos pueden considerarse de paredes infinitas. De esta manera, se define $\tilde{V}_{\tilde{z}}^{conf}$ como:

$$\tilde{V}_{\tilde{z}}^{conf}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = \begin{cases} 0 & \rightarrow 0 \leq \tilde{z} \leq \tilde{h}(\tilde{\rho}) \\ \infty & \text{En otra parte} \end{cases}$$

Con esta aproximación para $\tilde{V}_{\tilde{z}}^{conf}$, la ecuación A.13 adopta la forma de la muy conocida expresión para la de un pozo de potencial infinito cuya solución es:

$$f(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = \sqrt{\frac{2}{\tilde{h}(\tilde{\rho})}} \text{sen}\left(\frac{\pi \tilde{z}}{\tilde{h}(\tilde{\rho})}\right) \quad \text{siendo} \quad \tilde{h}(\tilde{\rho}) = \frac{\tilde{w}}{\sqrt{1 + (\tilde{\rho}/\tilde{R})^2}}$$

Y la ecuación de energía está dada por:

$$\tilde{E}_{\tilde{z}}(\tilde{\rho}) = \frac{\pi^2}{[\tilde{h}(\tilde{\rho})]^2} n^2$$

A.2.2 Análisis del movimiento lento

Una vez obtenida la contribución del movimiento rápido al espectro energético, se procede al descongelar el movimiento lento presente en el plano (ρ, φ) ; de esta manera, el hamiltoniano correspondiente adopta la forma:

$$\tilde{H} = \sum_{k=1}^2 \left[-\tilde{\Delta}_k^{(2D)} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{\gamma^2 \tilde{\rho}_k^2}{4} + \tilde{V}_{(\rho, \varphi)}^{conf}(\tilde{\rho}_k) \right] + \frac{2}{\|\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2\|} \quad (\text{A.14})$$

Con el potencial de confinamiento propuesto de la forma:

$$\tilde{V}_{(\rho, \varphi)}^{conf}(\tilde{\rho}_k) = \left(\frac{\pi}{\tilde{w}} \right)^2 \left(1 + \left(\frac{\tilde{\rho}_k}{\tilde{R}} \right)^2 \right) \quad (\text{A.15})$$

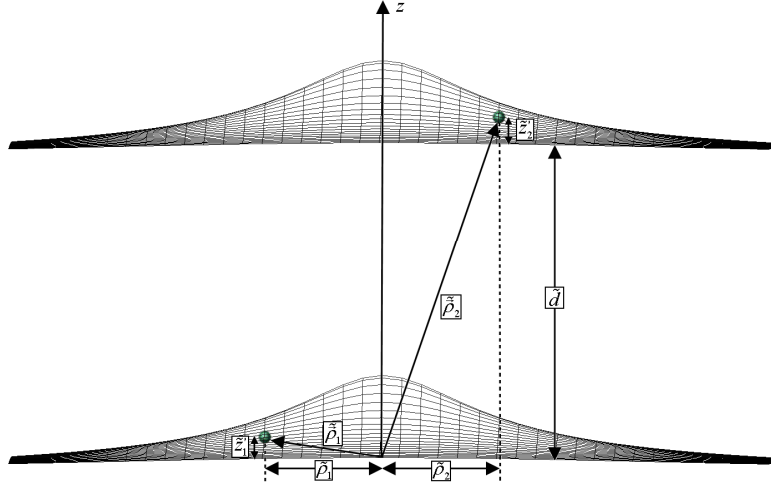
De otra parte, el denominador del término de interacción coulombiana es escrito como $\|\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2\| = \sqrt{(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2 + (\tilde{d} + \tilde{z}_2 - \tilde{z}_1)^2}$; sin embargo, de acuerdo con la figura A.1 se aprecia que $\tilde{d} \gg \tilde{z}_2 - \tilde{z}_1$, por lo que esta distancia puede ser aproximada como $\|\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2\| \approx \sqrt{(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2 + \tilde{d}^2}$. Ahora bien, mediante la definición de los términos:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0(\tilde{\rho}_k) &= -\frac{1}{\tilde{\rho}_k} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_k} \left(\tilde{\rho}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_k} \right) - \frac{1}{\tilde{\rho}_k^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_k^2} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}_k^2 + \left(\frac{\pi}{\tilde{w}} \right)^2 \left(1 + \left(\frac{\tilde{\rho}_k}{\tilde{R}} \right)^2 \right) \\ &= -\tilde{\Delta}_k^{(2D)} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}_k^2 + \left(\frac{\pi \tilde{\rho}_k}{\tilde{w} \tilde{R}} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{\tilde{w}} \right)^2 \end{aligned}$$

y

$$\tilde{U}(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2) = \frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2 + \tilde{d}^2}}$$

Figura A.1. Vista de perfil del sistema compuesto por dos puntos cuánticos.



Fuente: Autor del proyecto.

el hamiltoniano del sistema dado en A.14, queda expresado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \tilde{H} &= \tilde{H}_0(\tilde{\rho}_1) + \tilde{H}_0(\tilde{\rho}_2) + \tilde{U}(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2) \\
 &= -\tilde{\Delta}_1^{(2D)} - \tilde{\Delta}_2^{(2D)} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_2} + \frac{1}{4} \gamma^2 (\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2) + \left(\frac{\pi}{\tilde{w}\tilde{R}} \right)^2 (\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2) + \\
 &\quad + \left(\frac{\pi}{\tilde{w}} \right)^2 + \tilde{U}(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2) \\
 &= -\tilde{\Delta}_1^{(2D)} - \tilde{\Delta}_2^{(2D)} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_2} + \frac{\tilde{\omega}^2}{2} (\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2) + \tilde{U}(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2) + \tilde{E}_0
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

donde

$$\tilde{\omega}^2 = \frac{\gamma^2}{2} + 2 \left(\frac{\pi}{\tilde{w}\tilde{R}} \right)^2 \quad ; \quad \tilde{E}_0 = \left(\frac{\pi}{\tilde{w}} \right)^2$$

introduciendo las coordenadas relativas y de centro de masa definidas como $\tilde{r} = \tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2$, $\theta = \varphi_1 - \varphi_2$; $\tilde{R} = (\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2)/2$, $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$ junto con los operadores $\tilde{\nabla}_r^{(2D)} = (\tilde{\nabla}_1^{(2D)} - \tilde{\nabla}_2^{(2D)})/2$, $\tilde{\nabla}_R^{(2D)} = \tilde{\nabla}_1^{(2D)} + \tilde{\nabla}_2^{(2D)}$, el hamiltoniano obtenido en A.16 se transforma término a término como sigue:

✓ Primer y segundo término:

$$\begin{aligned} (\tilde{\nabla}_1^{(2D)} + \tilde{\nabla}_2^{(2D)})^2 &= \tilde{\Delta}_1^{(2D)} + 2\tilde{\nabla}_1^{(2D)} \cdot \tilde{\nabla}_2^{(2D)} + \tilde{\Delta}_2^{(2D)} = \tilde{\Delta}_R^{(2D)} \\ (\tilde{\nabla}_1^{(2D)} - \tilde{\nabla}_2^{(2D)})^2 &= \tilde{\Delta}_1^{(2D)} - 2\tilde{\nabla}_1^{(2D)} \cdot \tilde{\nabla}_2^{(2D)} + \tilde{\Delta}_2^{(2D)} = 4\tilde{\Delta}_r^{(2D)} \\ \hline \tilde{\Delta}_1^{(2D)} + \tilde{\Delta}_2^{(2D)} &= 2\tilde{\Delta}_r^{(2D)} + \frac{1}{2}\tilde{\Delta}_R^{(2D)} \end{aligned}$$

✓ Tercer y cuarto término:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi_1} &= \frac{\partial}{\partial \Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi_1} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi_2} &= \frac{\partial}{\partial \Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial \varphi_2} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi_2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \hline \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} &= \frac{\partial}{\partial \Theta} \end{aligned}$$

✓ Quinto término:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\omega}^2}{2} (\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2) &= \frac{\tilde{\omega}^2}{2} \frac{1}{2} [(\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2)^2 + (\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2] \\ &= \frac{\tilde{\omega}^2}{4} \left[4 \left(\frac{\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2}{2} \right)^2 + (\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2 \right] \\ &= \frac{\tilde{\omega}^2}{4} [4\tilde{R}^2 + \tilde{r}^2] = \tilde{\omega}^2 \tilde{R}^2 + 4\tilde{\omega}^2 \tilde{r}^2 \end{aligned}$$

✓ Sexto término:

$$\frac{2}{\sqrt{(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2)^2 + \tilde{d}^2}} = \frac{2}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}}$$

El término \tilde{E}_0 puede ignorarse, pues al desacoplar el hamiltoniano con la introducción de las coordenadas relativas y de centro de masa, su contribución sólo varía la amplitud de la función de onda del sistema; lo cual hace que el estado asociado a dicha función permanezca invariante. Finalmente, con el reemplazo de las anteriores expresiones, el hamiltoniano del sistema puede desacoplarse en uno para el movimiento relativo y otro para el movimiento de centro de masas, matemáticamente:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_R(\tilde{R}) + \tilde{H}_r(\tilde{r})$$

siendo

$$\tilde{H}_R(\tilde{R}) = -\frac{1}{2}\tilde{\Delta}_R^{(2D)} + \tilde{\omega}^2\tilde{R}^2 + i\gamma\frac{\partial}{\partial\Theta} \quad (\text{A.17})$$

$$\tilde{H}_r(\tilde{r}) = -2\tilde{\Delta}_r^{(2D)} + \frac{1}{4}\tilde{\omega}^2\tilde{r}^2 + \frac{2}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \quad (\text{A.18})$$

A.2.3 Ecuación para la energía del movimiento de centro de masas

Como el potencial en la ecuación A.17 depende solamente de \tilde{R} , se puede escribir la solución de la ecuación de Schrödinger como:

$$u(\tilde{R}, \Theta) = v(\tilde{R})e^{iM_{CM}\Theta} \quad ; \quad M_{CM} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Reemplazando esta función en la ecuación de Schrödinger se llega a:

$$\left(v''(\tilde{R}) + \frac{1}{\tilde{R}} v'(\tilde{R}) - \frac{M_{CM}^2}{\tilde{R}^2} v(\tilde{R}) \right) + (2\tilde{E}_{CM} - 2\gamma M_{CM} - 2\tilde{\omega}^2 \tilde{R}^2) v(\tilde{R}) = 0 \quad (\text{A.19})$$

Definiendo

$$\begin{aligned} K^2 &= 2\tilde{E}_{CM} - 2\gamma M_{CM} \\ \lambda^2 &= 2\tilde{\omega}^2 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

se tiene entonces que la ecuación A.19 toma la forma:

$$\left(v''(\tilde{R}) + \frac{1}{\tilde{R}} v'(\tilde{R}) - \frac{M_{CM}^2}{\tilde{R}^2} v(\tilde{R}) \right) + (K^2 - \lambda^2 \tilde{R}^2) v(\tilde{R}) = 0 \quad (\text{A.21})$$

Redefiniendo la función de onda como:

$$v(\tilde{R}) = \tilde{R}^{|M_{CM}|} F(\tilde{R}) e^{-\frac{\lambda}{2} \tilde{R}^2} \quad (\text{A.22})$$

Reemplazando A.22 en A.21 se llega a:

$$F''(\tilde{R}) + \left(\frac{2|M_{CM}|+1}{\tilde{R}} - 2\lambda\tilde{R} \right) F'(\tilde{R}) - [2\lambda(|M_{CM}|+1) - K^2] F(\tilde{R}) = 0 \quad (\text{A.23})$$

Realizando el cambio de variable $t = \lambda\tilde{R}^2$, la ecuación A.23 se transforma en la ecuación de Kummer:

$$t \frac{d^2}{dt^2} F(t) + [(|M_{CM}|+1)-t] \frac{d}{dt} F(t) - \left[\frac{1}{2}(|M_{CM}|+1) - \frac{K^2}{4\lambda} \right] F(t) = 0 \quad (\text{A.24})$$

cuya solución regular en $t=0$ es la serie confluyente:

$$F(t) = {}_1F_1(a, |M_{CM}|+1; t)$$

donde

$$a = \frac{1}{2}(|M_{CM}|+1) - \frac{K^2}{4\lambda} \quad (\text{A.25})$$

Para grandes valores de t , esta función diverge como e^t , por esta razón se escoge:

$$a = -n_{CM} \quad \text{con} \quad n_{CM} = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.26})$$

de esta manera se tienen entonces las soluciones:

$$u_{n_{CM}, M_{CM}}(\tilde{R}, \Theta) = C_{n_{CM}, M_{CM}} \tilde{R}^{|M_{CM}|} e^{-\frac{\lambda}{2}\tilde{R}^2} {}_1F_1(-n_{CM}, |M_{CM}|+1; \lambda\tilde{R}^2) e^{iM_{CM}\Theta}$$

Ahora, de las condiciones dadas en A.25 y A.26 se obtiene:

$$-n_{CM} = \frac{1}{2}(|M_{CM}|+1) - \frac{K^2}{4\lambda} \quad (\text{A.27})$$

Reemplazando A.20 en A.27 se llega finalmente a:

$$\tilde{E}_{CM} = \sqrt{2}\tilde{\omega} \left[|M_{CM}| + 1 + 2n_{CM} \right] + \gamma M_{CM} \quad (\text{A.28})$$

Con $n_{CM} = 0, 1, 2, \dots$ y $M_{CM} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

A.2.4 Ecuación para la energía del movimiento relativo

Para el movimiento relativo, la ecuación de Schrödinger correspondiente es:

$$\tilde{H}_r(\tilde{r})\psi(\tilde{r}, \theta) = \tilde{E}_r\psi(\tilde{r}, \theta) \quad (\text{A.29})$$

donde $\tilde{H}_r(\tilde{r})$ está dado por la ecuación A.18. En vista de que los potenciales presentes en el hamiltoniano para el movimiento relativo dependen solamente de la distancia, la función $\psi(\tilde{r}, \theta)$ puede escribirse como:

$$\psi(\tilde{r}, \theta) = e^{im_r\theta} f(\tilde{r}) \quad \text{con } m_r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

reemplazando esta función en la ecuación A.29 se llega a:

$$-f''(\tilde{r}) - \frac{1}{\tilde{r}} f'(\tilde{r}) + \left[\frac{m_r^2}{\tilde{r}^2} f(\tilde{r}) + \frac{1}{8} \tilde{\omega} \tilde{r}^2 + \frac{1}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \right] f(\tilde{r}) = \frac{\tilde{E}_r}{2} f(\tilde{r}) \quad (\text{A.30})$$

con las condiciones de frontera dadas por:

$$0 < \tilde{r} < \infty \quad ; \quad f(0) < \infty \quad ; \quad f(\tilde{r})_{\tilde{r} \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (\text{A.31})$$

Puesto que lo que se busca es una expresión análoga a la ecuación de Schrödinger; para esto, es necesario redefinir la función $f(\tilde{r})$. De acuerdo con lo establecido en [33], como la función $f(\tilde{r})$ depende únicamente de \tilde{r} , puede ser modificada mediante el re-escalamiento definido como:

$$f(\tilde{r}) = \tilde{r}^{-\frac{(D-1)}{2}} \chi(\tilde{r})$$

Dado que el problema está definido en dos dimensiones, el parámetro D toma el valor de 2; razón por la cual $f(\tilde{r})$ adquiere la forma:

$$f(\tilde{r}) = \frac{\chi(\tilde{r})}{\sqrt{\tilde{r}}} \quad (\text{A.32})$$

Así, luego de reemplazar en A.30 la ecuación de $f(\tilde{r})$ expresado en A.32 se llega a:

$$-\chi''(\tilde{r}) + \left[\frac{m_r^2 - 1/4}{\tilde{r}^2} + \frac{1}{8} \tilde{\omega}^2 \tilde{r}^2 + \frac{1}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}} \right] \chi(\tilde{r}) = \frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} \chi(\tilde{r}) \quad (\text{A.33})$$

Definiendo el potencial efectivo $\tilde{V}_{eff}^{m_r}$ como:

$$\tilde{V}_{eff}^{m_r}(\tilde{r}) = \frac{m_r^2 - 1/4}{\tilde{r}^2} + \frac{1}{8} \tilde{\omega}^2 \tilde{r}^2 + \frac{1}{\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{d}^2}}$$

la ecuación A.33 pasa a ser:

$$\frac{\chi''(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})} + \left[\frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} - \tilde{V}_{eff}^{m_r}(\tilde{r}) \right] = 0 \quad (\text{A.34})$$

ANEXO B: MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

B.1. Concepto

El método de Barrido Trigonométrico expuesto en [11], utiliza Coordenadas Polares de Poincaré, para reducir una ecuación diferencial de segundo orden a una de primer orden; de esta manera se obtiene una ecuación trascendente para los niveles energéticos, aún para el caso de potenciales no convencionales.

Sean definidas dos funciones $S_0(x)$ y $V(x)$ dentro del intervalo $x \in [0, \infty)$ que satisfacen las condiciones $V(x) < 0$; $V(x)_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0$; $S_0 = 0$ y $S_0(x) > 0$ para $x > 0$.

Ahora bien, considérese el método de solución del problema de contorno:

$$-\frac{1}{S_0(x)} \frac{d}{dx} \left[S_0(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{B.1})$$

con las condiciones de frontera siguientes:

$$0 < x < \infty \quad ; \quad \psi(0) < \infty \quad ; \quad \psi(x)_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (\text{B.2})$$

El problema comprendido por las ecuaciones B.1 a B.2 puede ser presentado en forma diferente haciendo $\psi(x) = \chi(x) / \sqrt{S_0(x)}$:

$$-\chi''(x) + V_{eff}(x) = E\chi(x) \quad \text{con} \quad \chi(0) = 0 \quad \text{y} \quad \chi(x)_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (\text{B.3})$$

donde

$$V_{eff} = V(x) + \left[S_0''(x) S_0(x) - [S_0'(x)]^2 \right] / 4S_0^2(x)$$

La ecuación diferencial de segundo orden B.3, se reduce a una ecuación diferencial de primer orden a través del siguiente cambio de variables, utilizando coordenadas polares de Poincaré:

$$\begin{aligned} \chi(x) &= A(x)\cos[\theta(x)] \\ S_0(x)\frac{d}{dx}\chi(x) &= A(x)\text{sen}[\theta(x)] \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

donde $A(x)$ y $\theta(x)$ representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré respectivamente. Sustituyendo las expresiones de B.4 en la ecuación B.3, se encuentra la siguiente ecuación diferencial para la fase $\theta(x)$:

$$\theta'(x) = -\left[\frac{\text{sen}^2[\theta(x)]}{S_0(x)} + (E - V(x))S_0(x)\cos^2[\theta(x)] \right] \quad (\text{B.5})$$

Como se puede ver, la expresión dada en B.5 es una ecuación diferencial de primer orden que, con condiciones de frontera apropiadas, se transforma en un problema de Cauchy. Este problema puede solucionarse utilizando diferentes métodos numéricos como por ejemplo, el Método de Runge Kutta, el cual será empleado en este trabajo. Así, la primera condición de frontera se establece como:

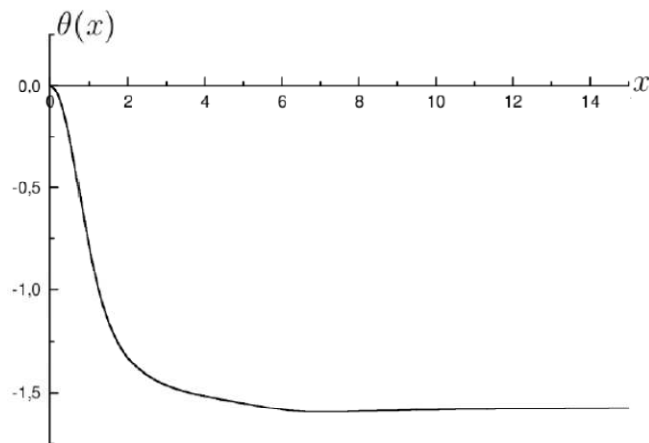
$$\chi(0) = 0 \Rightarrow \theta(0) = \frac{\pi}{2} \quad (\text{B.6})$$

En vista de que la ecuación B.5 puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro E , esta solución puede considerarse como una función $\theta(x, E)$ para cualquier valor de energía E . De la ecuación B.5, $\theta'(x) < 0$ cuando $x < x_0$, siendo x_0 el punto de retorno (La raíz de la ecuación para $V(x) = E$; pues para

$x < x_0$ (o $x > x_0$) la energía es $E < V(x)$ (o $E > V(x)$). Por eso, cuando $x < x_0$, la función $\theta(x)$ decrece monótonamente, mientras que para valores $x > x_0$ su decremento se hace paulatinamente más suave hasta el punto en el que para grandes valores de x , la función se hace casi una constante. En la figura B.1 se presenta la forma típica de la curva $\theta(x)$ para el caso en el que $n=1$ y $\theta(x)_{x \rightarrow \infty} \rightarrow -\pi/2$; para $n \neq 1$, las curvas $\theta(x)$ disminuyen en el origen más bruscamente en comparación a la curva exhibida en la figura B.1 y tienden después asintóticamente a los valores $-3\pi/2$ para $n=2$ y a $-5\pi/2$ para $n=3$ y así sucesivamente para los demás valores de n . De otra parte, la condición de que la función $\chi(x)$ se anula para $x \rightarrow \infty$ conduce a una ecuación trascendente para los niveles energéticos E de la forma:

$$\theta(x, E) = \frac{\pi}{2} - \pi n \quad \text{con} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.7})$$

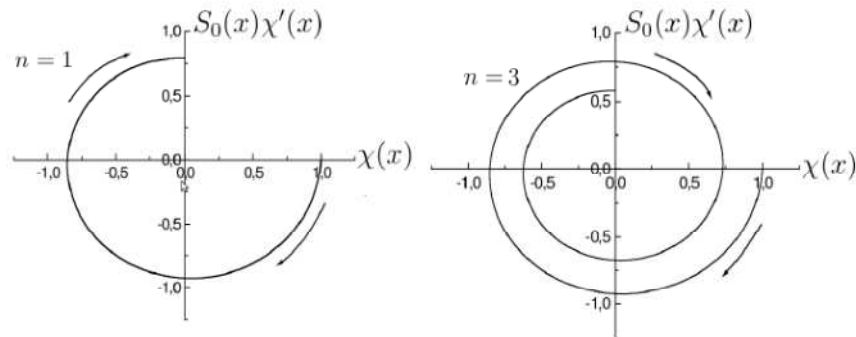
Figura B1. Comportamiento típico de la solución de la ecuación B.5.



Fuente: Material didáctico del grupo de Investigación en Física Computacional en Materia Condensada (FICOMACO).

Realizando un proceso análogo a la obtención de las curvas de Poincaré se toma en el plano como abscisa $\chi(x)$ y como ordenada a $\chi'(x)$; de esta forma, la ecuación paramétrica B.4 describe una curva espiral decreciente que se desarrolla en el sentido de las manecillas del reloj y se inicia desde el punto $(\chi(0)=A(0), \chi'(0)=0)$, cruzando sobre el eje ordenado cada vez que la función $\chi(x)$ se aproxima a cero. Esta analogía permite mostrar que en el intervalo $(0, \infty)$, el parámetro n corresponde al número de nodos de la función de onda $\chi(x)$ y por tanto se puede catalogar como el número del estado vibracional en el cual se encuentra el sistema (véase la figura B.2).

Figura B.2. Curvas análogas a las de Poincaré para el caso $n=1$ (Derecha) y $n=3$ (Izquierda). En estas gráficas se ha tomado $A(0)=1$.



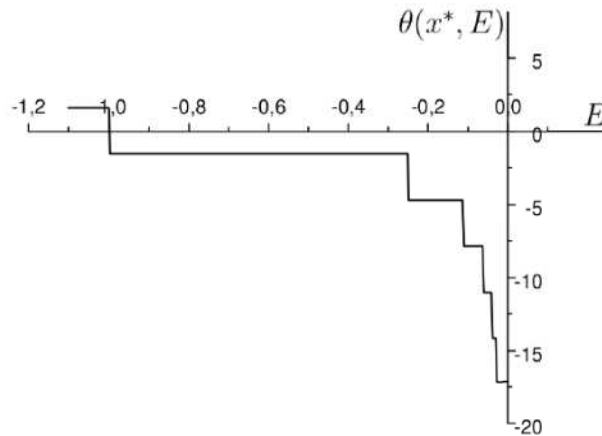
Fuente: Material didáctico del grupo de Investigación en Física Computacional en Materia Condensada (FICOMACO).

En el cálculo numérico, la sustitución de valores x bastante grandes (denominados aquí como x^*), permite que la ecuación trascendente B.7 se pueda escribir a través de la siguiente forma:

$$\theta(x^*, E) = \frac{\pi}{2} - \pi n \quad \text{con} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.8})$$

Los niveles de energía pueden ser obtenidos resolviendo numéricamente la ecuación B.8, considerando a $\theta(x, E)$ como la solución al problema de Cauchy (ecuaciones B.5 - B.6). Para resolver esta ecuación se debe tener en cuenta que la curva $\theta(E)$, en un valor fijo de x , es similar a una escalera con regiones casi verticales, donde la función es aproximada a $(\pi/2 - n\pi)$. En la figura B.3 se presenta el gráfico de $\theta(x^*, E)$ en función de E obtenido al resolver la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno con $x^* = 100a_0$.

Figura B.3. Gráfico de $\theta(x^*, E)$ en función de E para el átomo de Hidrógeno con $x^* = 100a_0$.



Fuente: Material didáctico del grupo de Investigación en Física Computacional en Materia Condensada (FICOMACO)

Si se desea encontrar $A(x)$ se deriva la primera expresión de la ecuación B.4 y se iguala con la segunda expresión en esta misma ecuación, obteniéndose:

$$A'(x) = A(x) \frac{\text{sen}[\theta(x)]}{\cos[\theta(x)]} \left[\theta'(x) + \frac{1}{S_0(x)} \right] \quad (\text{B.9})$$

Para encontrar la función $A(x)$ hay que sustituir la anterior expresión en la relación B.5 y realizar la integración:

$$A(x) = \exp\left\{\int_0^x [(1-\alpha(x))\text{sen}[\theta(x)]\cos[\theta(x)] - \beta(x)\text{sen}^2[\theta(x)]] dx\right\} \quad (\text{B.10})$$

B.2. Aplicación del método de barrido trigonométrico

Una vez conocido el funcionamiento del método, se procederá a aplicarlo a la ecuación del movimiento relativo. Definiendo las ecuaciones correspondientes a las coordenadas de Poincaré en términos de las variables del sistema se tiene:

$$\begin{aligned} \chi(\tilde{r}) &= A(\tilde{r})\cos[\theta(\tilde{r})] \\ \chi'(\tilde{r}) &= A(\tilde{r})\text{sen}[\theta(\tilde{r})] \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

de esta manera:

$$\frac{\chi'(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})} = \text{tg}[\theta(\tilde{r})] \quad (\text{B.12})$$

la derivada de la anterior expresión se determina como:

$$\frac{d}{d\tilde{r}}\left(\frac{\chi'(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})}\right) = (\text{tg}[\theta(\tilde{r})])' = \frac{1}{\cos^2[\theta(\tilde{r})]}\theta'(\tilde{r}) \quad (\text{B.13})$$

de otra parte:

$$\frac{d}{d\tilde{r}}\left(\frac{\chi'(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})}\right) = -\left(\frac{\chi'(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})}\right)^2 + \frac{\chi''(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})} \quad (\text{B.14})$$

Sustituyendo B.13 en B.14 y despejando $\chi''(\tilde{r})/\chi(\tilde{r})$ se tiene:

$$\frac{\chi''(\tilde{r})}{\chi(\tilde{r})} = \frac{\theta'(\tilde{r})}{\cos^2[\theta(\tilde{r})]} + \text{tg}^2[\theta(\tilde{r})] \quad (\text{B.15})$$

Reemplazando B.15 en A.34 se llega a:

$$\theta'(\tilde{r}) = -\text{sen}^2[\theta(\tilde{r})] - \left[\frac{\tilde{E}_{m_r}}{2} - \tilde{V}_{\text{eff}}^{m_r}(\tilde{r}) \right] \cos^2[\theta(\tilde{r})] = 0 \quad (\text{B.16})$$

con las condiciones de frontera dadas por:

$$\begin{aligned} \chi(0) = 0 &\Rightarrow \theta(0) = \frac{\pi}{2} \\ \chi(\infty) = 0 &\Rightarrow \theta(\infty) = \frac{\pi}{2} - \pi n_r \quad \rightarrow \quad n_r = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Para grandes valores de \tilde{r} (definidos como \tilde{r}^*) la ecuación B.16 debe cumplir la siguiente condición:

$$\theta(\tilde{r}^*, \tilde{E}_{m_r}) = \frac{\pi}{2} - \pi n_r \quad \text{con} \quad n_r = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.18})$$

Para el caso $\tilde{r}^* = \text{cte}$, la ecuación B.18 pasa a ser:

$$\theta(\tilde{E}_{m_r}) - \frac{\pi}{2} + \pi n_r = 0 \quad (\text{B.19})$$

BIBLIOGRAFÍA

- [1] POOLE Charles P. Jr. y OWENS Frank J. "Introducción a la nanotecnología", Editorial Reverté S.A., España, (2007), págs. v - vi.
- [2] FANSTEIN A. y HALLBERG K., "Confinamiento cuántico en sistemas nanoscópicos", División de Propiedades ópticas y teoría del sólido, Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, CNEA, documento disponible en la página web <http://grupocaos2007.brinkster.net/confina/confinamiento.htm> (Activa Marzo de 2012).
- [3] LIPSON Michal, Cornell University, College of engineering, "Controlling Ligth with Ligth", documento disponible en la página web <http://people.ece.cornell.edu/lipson/nature/fabrication.htm> (Activa Marzo de 2012).
- [4] WANG S. et al., "Novel C/Cu Sheath/core nanostructures synthesized via low-temperature MOCVD", IOP Science - Phys.: Nanotechnology, (2011), págs. 1 - 7.
- [5] HORNISCHER W., GRAMBOW P., DEMEL T., BAUSER E., HEITMANN D., VONKLITZING K., and PLOOG K., "Quantum wires prepared by liquid-phase-epitaxial overgrowth of dry-etched AlGaAs-GaAs heterostructures", AIP - Appl. Phys. Lett. 60, 2998 (1992), págs. 2998 - 3000.
- [6] GRANADOS D. y GARCÍA J. M., "In(Ga)As self-assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy", AIP - Applied Physics Letter, Vol. 82, No 15, (2003), págs. 2401 - 2403.
- [7] PULZARA A. et al., "Puntos cuánticos autoensamblados de InAs crecidos sobre substratos de GaAs por Epitaxia de haces moleculares", Revista Colombiana de Física, Vol. 40, No. 1, (2008), págs. 183 - 185.

[8] LYON Steve, "Self-Assembled InAs Quantum Dots", Department of Electrical Engineering, documento disponible en la página web <http://www.princeton.edu/~pccm/outreach/REU2004/S.%20LYON%20SHORT%20COURSE.PDF> (Activa diciembre de 2011).

[9] LÓPEZ Máximo, MENDEZ Victor H. "Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores", CINESTAV, (2008). Documento disponible en la página web <http://www.fis.cinvestav.mx/~orosas/REVCINV/p44.pdf> (Activa diciembre de 2011).

[10] BARNES E., KESTNER J. P., NGUYEN N. T. T. and DAS SARMA S. "Screening of charged impurities with multielectron singlet-triplet spin qubits in quantum dots", American Physical Society - Physical review B 84, (2011), págs. 235309-1 - 235309-15.

[11] MIKHAILOV I.D., and BETANCUR F.J. "Energy spectra of two particles in a parabolic quantum dot: Numerical sweep method", Phys. Stat. Sol. (b) 213, (1999), págs. 325 - 332.

[12] MIKHAILOV I.D., BETANCUR F.J. AND GARCÍA L.F., "Two-Electron Ground State Instabilities in Small Quantum Dots", phys. stat, sol. (b) 224, No 3, (2001), págs. 757 - 761.

[13] TOKURA Y., SASAKI S., AUSTING D. G. and TARUCHA S. "Excitation spectra and exchange interactions in circular and elliptical quantum dots", Elsevier-Physica B,(2001), págs. 260 - 266.

[14] PEETERS F.M. and SCHWEIGERT V.A., "Two-electron quantum disks", American Physical Society - Physical Review B, Vol. 53, No 3, (1996), págs. 1468 - 1474.

- [15] PFANNKUCHE Daniela, et al, "Theory of quantum dot helium", Elsevier-Physica B189, (1993), págs. 6 - 15.
- [16] EL-SAID Mohammad, "The spectral properties of two-electron quantum dot", Elsevier - Physica E 14, (2002), págs. 323 - 329.
- [17] WEIDONG Sheng, XU Hongqi, "Quantum dots with interacting electrons: Energy and spectra magnetization". Elsevier - Solid State Physics - Physica B, (1998), págs. 152 - 156.
- [18] LAMOUCHE G. and FISHMAN G. "Two interacting electrons in a three-dimensional parabolic quantum dot: a simple solution", IOP Science - Phys.: Condens. Matter, (1998), págs. 7857 - 7867.
- [19] LIU Y. and LIU B-G., "Electronic structure of two-electron systems with the short-range repulsive interaction", Elsevier - Science Direct, (2003), págs. 308 - 311.
- [20] WENFANG Xie, "Ground state transitions in vertically coupled three-layer single-electron quantum dots", Elsevier - Physica B, (2005), págs. 89 - 94.
- [21] MELNIKOV D. V., ZHANG L.X. and LEBURTON J.P., "Exchange coupling between two electrons in double quantum dot structures", Elsevier-ScienceDirect, Solid State & Materials Science, (2006), págs. 114 - 119.
- [22] LIU Z., WANG L. and SHEN K., "Energy spectra of three electrons in Si/SiGe single and vertically coupled double quantum dots", American Physical Society - Physical review B 85, (2012), págs. 045311-1 - 045311-11.

- [23] SANTOS Jr. D. R., QU F., ALCALDE A. M. and MORAIS P. C., “Influence of the quantum dot shape on the determination of the electronic structure and electron decoherence”, Elsevier - Science Direct, Physica E, (2005), págs. 331 - 336.
- [24] ZHU J. L., LI Z. Q. YU J. Z., OHNO K. and KAWAZOE Y., “Size and shape effects of quantum dots on two-electron spectra”, The American Physical Society - Physical Review B, Vol. 55, No. 23, (1997), págs. 15 819 - 15 823.
- [25] Bastard G., “Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model”, The American Physical Society - Physical Review B, Vol. 24, No. 8, (1981), págs. 4714 - 4722.
- [26] PAVPLOV P.V. “Física del estado sólido”, Primera edición, Editorial MIR, Moscú (1985), págs. 260-264.
- [27] PATTERSON J. D., BAILEY B. C., “Solid-State Physics: Introduction to the Theory”, 1st edition, Ed. Springer-Verlag, Berlin (2007), págs. 42 - 46.
- [28] GRIFFITHS David J. “Introduction to quantum mechanics”, Segunda edición, Editorial Prentice Hall, USA (1995), págs. 323 - 332.
- [29] VURGAFTMAN I., MEYER J. R., RAM-MOHAN L. R., “Band Parameters for III – V Compound Semiconductors and their Alloys”, Applied Physics review, Journal of Applied Physics, Vol. 89, No. 11, (2001), pág. 5818.
- [30] JIA-LIN ZHU, SHAOFENG ZHU, ZIQIANG ZHU, Y. KAWAZOE, and T. YAO, “Exact spectra and spin oscillations for two electrons in quantum dots”, Elsevier – Physics Letters A 246 (1998), págs. 157 – 162.

- [31] JIA-LIN ZHU, JING-ZHI YU, ZHI-QIANG LI and YOSHIYUKI KAWAZOE, “Exact solutions of two electrons in a quantum dot”, IOP Science - J. Phys.: Condens. Matter 8 (1996), págs. 7857 – 7862.
- [32] MATULIST A. and PEETENT F. M., “Renormalized perturbation series for quantum dots”, IOP Science - J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994), págs. 7751 - 7762.
- [33] FLÜEGGE S. “Practical Quantum Mechanics”, Primera edición - Segunda Impresión, Editorial Springer, Alemania (1994), págs. 107 - 110.
- [34] HERSCHBACH D., AVERY J., GOSCINSKI O., “Dimensional Scaling in chemical physics”. Primera edición, Kluwer academic publishers, Netherlands (1993), págs. 63 – 65.
- [35] MARLO-HELLE M., HARJU A. and NIEMINEN R. M., “Singlet–triplet oscillations and far-infrared spectrum of four-minima quantum-dot molecule” Elsevier – Science Direct, Physica E 26 (2005), págs. 286 – 290.
- [36] WENFANG XIE, “Impurity effect on low-lying spectra in a two-electron quantum dot with parabolic confinement”, Elsevier - Science Direct, Physica B 334 (2003) 317 - 322.
- [37] KOBLMÜLLER G., Semicondutor Physics II “Low-dimensional systems”. documento disponible en la página web http://www.wsi.tum.de/Portals/0/Media/Lectures/95c087ee-a154-429b-9f1e-c701ff0f2c4e/HLPhysII_1.pdf (Activa en junio de 2012)