

***EFFECTO DE LA CURVATURA DE UN LAZO NANOSCÓPICO CERRADO
SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN ELECTRÓN***

Autores

JHON FREDDY TORRES GÓMEZ
NANCY LILIANA MORALES VILLAMIZAR

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2018

***EFECTO DE LA CURVATURA DE UN LAZO NANOSCÓPICO CERRADO
SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN ELECTRÓN***

Autores

JHON FREDDY TORRES GÓMEZ
NANCY LILIANA MORALES VILLAMIZAR

Trabajo de grado para optar al título de
Físico

Director

WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO
Doctor En Ciencias Naturales (Física)

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2018

Dedicatoria

A Dios por el parentizaje intelectual que he adquirido en las distintas disciplinas a lo largo de éste proceso académico; esto me ha permitido ampliar la percepción de lo que observo en la vida para poder solucionar los problemas que se me presentan cada día. Gracias por llenarme de fortaleza y tenacidad para alcanzar una meta más y por alimentarme de tolerancia y perseverancia para lograr un sueño a pesar de las dificultades que se me han presentado en el camino y que aun así hacen parte de mi enriquecimiento espiritual.

A mi hermana Mónica y mi madre adorada por ser los pilares más importantes para hacer realidad esta construcción de sueños.

A mi padre querido, a mi hermana Heydi Carolina, mi hermosa sobrina Dannita que amo con todo mi corazón, mi gran amiga Sandra Johanna que tanto quiero y a Juan Sebastián Barrios Hernández por su constante motivación, colaboración y sobre todo por creer en mis capacidades.

A mi esposo Jhon Freddy Torres Gómez por su amor, compañía, dedicación, constante apoyo, colaboración y fortaleza para superar las dificultades presentes en el camino y llevar a cabo la realización de mis metas.

A mi hijo Andrés Felipe a quien amo con toda mi alma, por ser mi inspiración para continuar en la lucha de nuevos y grandes retos.

A M. Ing Anderson Andrés Sandoval, por su apoyo incondicional, apreciable orientación y constante interés en el desarrollo del proyecto de grado I.

A Ph. D Rafael Ángel Torres Amarís, por su apoyo y colaboración en el cumplimiento de los objetivos del proyecto de grado I.

A Ph. D Dario Yesid Peña, por abrirme las puertas del grupo de investigaciones en corrosión (GIC), para la realización del proyecto de grado I.

A M. Ing Custodio Vásquez, por depositar su confianza en mí y lograr que pudiera culminar la realización del proyecto de grado I.

A M. Ing Iván Uribe Pérez, por acercarme a la GIC, su constante apoyo, motivación y preocupación para lograr culminar el proyecto de grado I.

A Ing. Francy Catalina García, por su paciencia, dedicación y gran colaboración en el manejo de equipos y demás.

A Ing. John Harrison Sierra y M. Ing Adán León, por su amistad, su colaboración y dedicación en el aporte de conocimiento.

Al laboratorio de electroquímica del centro de materiales y nanociencias de la Universidad Industrial de Santander.

Al laboratorio de Microscopia del edificio de investigaciones del Parque Tecnológico de Guatiguará, Carolina Mendoza y Carlos Chacón.

Nancy Liliana Morales Villamizar

Dedicatoria

A Dios, por darme la sabiduría necesaria para asumir con éxito cada uno de los desafíos presentes en mi vida.

A mis padres, porque me han dado ejemplo de perseverancia, entrega y sacrificio en el alcance de mis metas.

A mi tía Zoraida Gómez, por el apoyo brindado en mis momentos de crisis financiera.

A Diana Hernández, porque sin duda alguna es la persona más relevante en la culminación de esta etapa de mi vida.

A la familia Hernández Barrios, por el apoyo recibido, por la confianza y por todos los instantes de alegrías y tristezas compartidos.

A mis profesores, porque me han impulsado hacia la búsqueda del conocimiento, en especial a Gladys, Edgar Contreras, Fabio Reyes y Leonor, a los que considero mis pilares académicos.

A Alexis Ochoa, por enseñarme el valor de defender aquello en lo que se cree y dar siempre el máximo esfuerzo en todo lo que se hace.

A la familia Morales Villamizar, por el apoyo incondicional recibido durante este tiempo.

A mi esposa Nancy Morales, por su amor, sacrificio, entrega, apoyo y motivación en cada momento de mi vida.

A mi amado hijo Andrés, por ser mi fuente de motivación para poder superarme y luchar por un mejor futuro.

Jhon Freddy Torres Gómez

Agradecimientos

Los autores expresan sus más sinceros agradecimientos a:

El **Doctor Willian Gutiérrez Niño**, director de esta investigación, por su apoyo incondicional, apreciable orientación y constante interés para que se llevara a cabo el desarrollo de este trabajo.

El **Doctor Jorge Humberto Martínez Téllez**, director de escuela, por su absoluto apoyo, colaboración y preocupación para lograr alcanzar esta meta.

Al Grupo de Física Computacional de la Materia Condensada (**FICOMACO**)

A **Cecilia Niño Peñuela**, secretaria de pregrado de la escuela de física, por su paciencia, preocupación y gran colaboración en nuestros trámites administrativos.

A **Adriana Lucia Gélvez** y **José Roberto Herrera**, físicos UIS, por su colaboración en el manejo del software COMSOL Multiphysics.

Al abogado **Jaime Sánchez Naranjo**, por alentarnos a culminar esta importante etapa de nuestras vidas.

Índice general

INTRODUCCIÓN	21
1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS GENERALES	23
1.1 FABRICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS . . .	23
1.2 ANILLOS CUÁNTICOS	25
1.2.1 Técnicas de fabricación	26
1.2.2 Morfologías de anillos cuánticos	27
1.3 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA	29
1.4 ESPECTRO DE ENERGÍA DE UN ELECTRÓN EN UN ANILLO - 1D .	30
1.5 INFLUENCIA DE DEFECTOS SOBRE LAS PROPIEDADES ELEC- TRÓNICAS DE ANILLOS CUÁNTICOS	33
1.5.1 Defectos estructurales	34
1.5.2 Defectos por impurezas	35
2 MODELO TEÓRICO	37
2.1 GEOMETRÍA DEL SISTEMA	37
2.2 MATERIALES DEL SISTEMA	38
2.3 HAMILTONIANO MONO-ELECTRÓNICO DEL SISTEMA	39
2.4 ESQUEMA DE SOLUCIÓN	40
3 ANÁLISIS DE RESULTADOS	42
3.1 ARQUITECTURA DE LOS LAZOS	42
3.2 LAZO CIRCULAR	43
3.2.1 Efecto del campo magnético	43
3.2.2 Efecto del campo eléctrico	46
3.2.3 Efecto de los campos eléctrico y magnético	47
3.3 LAZO RECTANGULAR OVALADO	49
3.3.1 Potencial de confinamiento estructural	51
3.3.2 Efecto del campo magnético	51
3.3.3 Efecto del campo eléctrico	55
3.3.4 Efecto de los campos eléctrico y magnético	57
3.3.5 Efecto de la variación del radio de curvatura	61
3.4 LAZO CUADRANGULAR REDONDEADO	62
3.4.1 Potencial de confinamiento estructural	65

3.4.2	Efecto del campo magnético	65
3.4.3	Efecto del campo eléctrico	71
3.4.4	Efecto de los campos eléctrico y magnético	74
3.4.5	Efecto de la variación del radio de curvatura	79
4	CONCLUSIONES	80
	BIBLIOGRAFÍA	82
	ANEXOS	86

Índice de figuras

Figura 1	Modos básicos de crecimiento en heteroepitaxia: (a) Frank – van der Merwe, (b) Volmer – Weber y (c) Stranski – Krastanov.	27
Figura 2	Imágenes 2D y perfiles de QRs por AFM: (a) Anillos cuánticos dobles de $GaAs$ crecidos por goteo epitaxial, (b) Anillos cuánticos de $In_{0,08}Ga_{0,92}As$ con nano-huecos de forma cuadrada y (c) Anillos cuánticos de $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ con nano-huecos profundos de forma cuadrada [25].	28
Figura 3	Imágenes 3D por AFM de superficies de $Ge_{0,3}Si_{0,7}/Si(100)$ crecidas a $550^{\circ}C$, $0,09\text{ nm}/s$ con capas de espesor medio de: (a) 5 nm , (b) 25 nm , (c) 20 nm y (d) 30 nm [38].	29
Figura 4	Aproximación de masa efectiva aplicado en una heterojuntura semiconductor.	30
Figura 5	Esquema de un electrón confinado en un anillo cuántico.	31
Figura 6	Oscilaciones Aharonov-Bohm en un anillo cuántico 1D con un electrón [22].	33
Figura 7	Modelos de estructuras anulares no-uniformes con simetría axial y con variación de ancho [12].	34
Figura 8	Modelos de estructuras anulares no-uniformes con simetría axial y con variación de grosor [12].	34
Figura 9	Modelos de estructuras no-uniformes con variación en la curvatura [24].	35
Figura 10	Modelo teórico general de la geometría de un lazo nanoscópico cerrado.	38
Figura 11	Geometría de un lazo circular para un radio de curvatura medio $r = 45\text{ nm}$	43
Figura 12	Energía de un electrón en un lazo circular, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento.	44

Figura 13	Energía de un electrón en un lazo circular, en función del campo eléctrico F en la dirección positiva del eje x	46
Figura 14	Energía de un electrón en un lazo circular, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento, para un campo eléctrico homogéneo F en la dirección positiva del eje x	47
Figura 15	Geometría de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$	50
Figura 16	Geometría de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$	50
Figura 17	Potencial de confinamiento estructural de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función de la longitud del perímetro para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	51
Figura 18	Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	52
Figura 19	Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo eléctrico F en la dirección positiva del eje x para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	55
Figura 20	Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento, para un campo eléctrico homogéneo F en la dirección positiva del eje x y para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	58
Figura 21	Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del radio de curvatura medio r para tres diferentes configuraciones de campos aplicados. (a) Sin campos, (b) Con campo magnético $B = 2 \text{ T}$ y (c) Con campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$	62
Figura 22	Geometría de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$	63
Figura 23	Geometría de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$	64
Figura 24	Geometría de un lazo cuadrangular redondeado asimétrico para dos radios de curvatura medio $r_I = 15 \text{ nm}$ y $r_{II} = 45 \text{ nm}$	64

Figura 25	Potencial de confinamiento estructural de un electrón en un lazo cuadrangular redondeado, en función de la longitud del camino para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$, (b) $r = 15 \text{ nm}$ y (c) Ambos radios.	65
Figura 26	Energía en función del campo magnético para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$, (b) $r = 15 \text{ nm}$ y (c) combinación de (a) y (b).	66
Figura 27	Energía en función del campo eléctrico para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	71
Figura 28	Energía en función del campo magnético con un campo eléctrico constante aplicado en la dirección positiva del eje x para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$	75
Figura 29	Energía de un electrón en un lazo cuadrangular redondeado, en función del radio de curvatura medio r para tres diferentes configuraciones de campos aplicados. (a) Sin campos, (b) Con campo magnético $B = 2 \text{ T}$ y (c) Con campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$	79

Índice de tablas

Tabla 1	Parámetros geométricos de un lazo circular para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$	43
Tabla 2	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo circular con $r = 45 \text{ nm}$	45
Tabla 3	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo circular con $r = 45 \text{ nm}$	48
Tabla 4	Parámetros geométricos de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$	50
Tabla 5	Parámetros geométricos de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$	50
Tabla 6	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 45 \text{ nm}$	53
Tabla 7	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$	54
Tabla 8	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$	56
Tabla 9	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 45 \text{ nm}$	59
Tabla 10	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$	60
Tabla 11	Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$	63

Tabla 12	Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$	63
Tabla 13	Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado asimétrico para dos radios de curvatura medio $r_I = 15 \text{ nm}$ y $r_{II} = 45 \text{ nm}$	64
Tabla 14	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 45 \text{ nm}$	68
Tabla 15	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$	69
Tabla 16	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.	70
Tabla 17	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$	72
Tabla 18	Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.	73
Tabla 19	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 45 \text{ nm}$	76
Tabla 20	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$	77
Tabla 21	Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.	78

Índice de anexos

Anexo A	VERIFICACIÓN DEL GAUGE DE COULOMB	87
Anexo B	HAMILTONIANO MONO-ELECTRÓNICO	88

Acrónimos y símbolos

SL	—	Super Red
QW	—	Pozo Cuántico
QWW	—	Hilo Cuántico
QD	—	Punto Cuántico
$SAQD$	—	Punto Cuántico Autoensamblado
QR	—	Anillo Cuántico
MBE	—	Deposición Molecular Epitaxial
$MOCVD$	—	Deposición Química Metal-orgánica
MBE	—	Epitaxia de Fase Líquida
AME	—	Aproximación de Masa Efectiva
AFM	—	Microscopía de Fuerza Atómica
AB	—	Aharonov Bohm
A	—	Potencial Vectorial Magnético
B	—	Campo Magnético
Φ	—	Potencial Escalar Eléctrico
F	—	Campo Eléctrico
EDP	—	Ecuación Diferencial en Derivadas Parciales
V_0	—	Potencial de confinamiento
V_c	—	Potencial de curvatura
e	—	Carga del Electrón
m_e^*	—	Masa Efectiva del Electrón
ΔB	—	Periodo de Oscilación de Aharonov Bohm
r	—	Radio de Curvatura Medio del Lazo
w	—	Anchura del Lazo
L_c	—	Longitud del Lazo

RESUMEN

TÍTULO: EFECTO DE LA CURVATURA DE UN LAZO NANOSCÓPICO CERRADO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN ELECTRÓN ¹

AUTORES: JHON FREDDY TORRES GÓMEZ, NANCY LILIANA MORALES VILLAMIZAR ^{2 3}

PALABRAS CLAVE: Anillo Cuántico, Lazo Nanoscópico, Oscilaciones Aharonov-Bohm, Potencial de Curvatura.

DESCRIPCIÓN: En este trabajo de grado se ha estudiado el efecto de la curvatura del camino sobre el espectro energético de un electrón confinado en un lazo nanoscópico cerrado en presencia de campos externos magnético y eléctrico. El sistema fue modelado utilizando la ecuación de Schrödinger estacionaria en el marco de la aproximación de masa efectiva y función envolvente, la cual fue solucionada utilizando el método de elementos finitos con condiciones de frontera de Dirichlet.

El lazo cerrado se ha modelado teóricamente como una guía de onda plana, cuyo ancho es pequeño comparado con la longitud del camino. El modelo propuesto permitió obtener diferentes arquitecturas, mediante la variación de algunos parámetros geométricos. En el estudio se consideraron tres morfologías diferentes: lazo circular, lazo rectangular ovalado y lazo cuadrangular redondeado. Éstas geometrías permitieron poner en evidencia la variación en el potencial de confinamiento del electrón debido a cambios en la curvatura.

Para los tres modelos, se analizó la variación del espectro electrónico y de las densidades electrónicas para algunos de los estados de menor energía en función de la intensidad de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento y de un campo eléctrico aplicado en el plano estructural. Los resultados demuestran, con claridad, la alta sensibilidad que tiene el espectro electrónico de un lazo nanoscópico cerrado ante la presencia de cambios en la curvatura del camino, lo cual se traduce en alta sensibilidad en las propiedades electrónicas, magnéticas y ópticas.

¹Trabajo de Grado.

²FICOMACO. Grupo de Física Computacional en Materia Condensada.

³Facultad de ciencias. Escuela de Física. Director Dr. WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO.

ABSTRACT

TITLE: EFFECT OF CURVATURE OF A NANOSCOPIC CLOSED LOOP ON ELECTRON ENERGY SPECTRUM ¹

AUHTORS: JHON FREDDY TORRES GÓMEZ, NANCY LILIANA MORALES VILLAMIZAR ^{2 3}

KEYWORDS: Quantum Ring, Nanoscopic Loop, Aharonov-Bohm Oscillations, Curvature Potential.

DESCRIPTION: In this degree work, the effect of the curvature of the path on the energy spectrum of an electron confined in a closed nanoscopic loop in the presence of magnetic and electric external fields has been studied. The system was modeled using the stationary Schrödinger equation in the framework of the approximation of effective mass and enveloping function, which was solved using the finite element method with Dirichlet boundary conditions.

The closed loop has been modeled theoretically as a flat waveguide, whose width is small compared to the length of the path. The proposed model allowed to obtain different architectures, by means of the variation of some geometric parameters. In the study, three different morphologies were considered: circular loop, oval rectangular loop and rounded quadrangular loop. These geometries allowed to put in evidence the variation in the confinement potential of the electron due to changes in the curvature.

For the three models, the variation of the electronic spectrum and of the electronic densities for some low-lying energy states was analyzed as a function of the intensity of a magnetic field applied in the direction of growth and of an electric field applied in the structural plane. The results demonstrate, with clarity, the high sensitivity of the electronic spectrum of a closed nanoscopic loop in the presence of changes in the curvature of the path, which translates into high sensitivity in electronic, magnetic and optical properties.

¹Degree Work

²FICOMACO. Group of Computational Physics Condensed Matter.

³Science Faculty. Physics School. Director Ph.D. WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO.

INTRODUCCIÓN

A lo largo de la historia, el ser humano sin ser consciente de ello, ha tratado naturalmente con nanopartículas todo el tiempo, por ejemplo, las moléculas o los virus. Por otra parte, los artistas medievales utilizaron nanopartículas de oro para lograr el color rojo brillante en las ventanas de las iglesias (las partículas de oro en la nanoescala son rojas, no doradas). Así mismo, los fabricantes de neumáticos utilizaron nanopartículas conocidas como negro de carbón (las cuales se producen por la combustión incompleta de los productos derivados del petróleo), para mejorar el rendimiento de los neumáticos ya por la década de 1920. Recientemente, los toxicólogos se han ocupado de las nanopartículas que son el resultado de la vida humana moderna, como las partículas de carbono en los gases de escape de los motores de combustión [7].

Por otro lado, la física de los materiales estudia, entre otras cosas, las propiedades y características a nivel macroscópico de las estructuras; sin embargo, con el auge de la nanociencia y la nanotecnología, también enfoca su atención en otras escalas mucho más pequeñas que abren una amplia gama de posibilidades para manipular la materia y cambiar el comportamiento de las partículas que la componen, dándole nuevos usos y propiedades. El interés por estructuras de magnitud mínima, que remiten al estudio y manejo de átomos y moléculas, ha sido histórico, ya en 1905 Albert Einstein se cuestionaba estas dimensiones, publicando un artículo donde estimó el tamaño de una molécula de azúcar. En 1959, el físico Richard Feynman enfatizó que si vas a dimensiones más pequeñas hay muchas posibilidades para hacer cosas. En sus ponencias anticipaba el campo de la nanotecnología. Su frase significativa fue: *There's plenty of room at the bottom* (hay mucho sitio en el fondo) [10].

Es importante agregar que, la búsqueda continua de la miniaturización ha dado lugar a herramientas como el microscopio de fuerza atómica (AFM), entre otros. Estos instrumentos han permitido la manipulación y fabricación deliberada de nanoestructuras, algo que antes no era posible. Como resultado de la miniaturización, las propiedades de estos materiales a menudo cambian drásticamente, ya que aproximadamente por debajo de los 100 nanómetros, los materiales rompen una barrera de tamaño por la cual la cuantización de energía para los electrones en los sólidos se vuelve relevante [7]. De ahí que la descripción física de las propiedades electrónicas en sólidos este sujeta a efectos cuánticos, que a su vez afectan el comportamiento magnético y óptico de los materiales nanométricos.

Como resultado de los efectos cuánticos, los materiales reducidos a la nanoescala pueden mostrar de repente propiedades muy diferentes en comparación con lo que muestran en la macroescala. Un ejemplo de esto son las sustancias que son opacas y se vuelven transparentes (cobre); los materiales que son inertes y se convierten en catalizadores (platino); los materiales que son estables y se convierten en combustibles (aluminio); los sólidos se convierten en líquidos a temperatura ambiente (oro); los aislantes se convierten en conductores (silicio), etc [7]. En consecuencia, debido a la gran aplicación que traen consigo los materiales nanoestructurados, ha sido necesario que tecnológicamente se desarrollen métodos para el crecimiento de este tipo de nanoestructuras, y al mismo tiempo ha sido importante ahondar el estudio teórico de las mismas.

FUNDAMENTOS TEÓRICOS GENERALES

En este capítulo se intenta poner en contexto el presente trabajo de investigación. Primero se hace una breve introducción a las nano-estructuras semiconductoras, haciendo énfasis en los anillos cuánticos (QRs - Quantum Rings), por ser este el sistema de interés en esta investigación. Luego, se presenta en forma general el marco teórico y el estado del arte en cuanto concierne con el estudio teórico de los QRs , así como algunas aproximaciones y consideraciones de interés que se abordan comúnmente en el estudio de estos sistemas.

1.1. FABRICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS SEMI- CONDUCTORAS

Los materiales semiconductores han sido a la fecha ampliamente estudiados, por lo que sus propiedades son suficientemente conocidas y se sabe que están determinadas en su mayoría por parámetros como: el tipo de contenido de compuestos, la constante de red, la constante dieléctrica, la brecha entre la banda de valencia y de conducción, entre otros. También es bien sabido desde hace algunas décadas, que si en un material estos parámetros o algunos de ellos permanecen constantes solo dentro de regiones de tamaño nanométrico y cambian a otro valor en las regiones vecinas, entonces estamos hablando de nano-estructuras semiconductoras. Estas nano-estructuras brindan la posibilidad de controlar las propiedades físicas del material dependiendo de la técnica y de las condiciones de crecimiento empleadas, ya que permiten sintonizar dichas propiedades, no solo por su composición, sino

1.1. FABRICACIÓN DE NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

también por su tamaño y su forma.

Estos dos nuevos grados de libertad que se ganan al nanoestructurar un material llevó a un incremento notable en las investigaciones realizadas sobre técnicas de crecimiento de cristales, y dio como fruto la creación de procesos nuevos de fabricación de películas de espesor nanométrico. Dentro de las principales técnicas que se utilizan actualmente con este fin, se encuentran: la epitaxia de haces moleculares, la deposición de vapor metal-orgánico, la litografía basada en rayos moleculares y la epitaxia en fase líquida [1]. Por otra parte, los materiales más ampliamente usados en la fabricación de estas nano-estructuras semiconductoras son: GaAs-AsIn, GaInAs-GaAlAs, In-GaInAs, InP-GaAs, GaSb-GaAs, InAs-Si, InSb-CdTe, etcétera. En la técnica de epitaxia de haces moleculares, la elección de estos materiales tiene en cuenta dos aspectos importantes para el diseño de nano-estructuras: diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy similares. El primer aspecto se relaciona con el confinamiento de los portadores de carga al interior de la nano-estructura debido a la trampa de potencial que se crea por la diferencia existente entre los anchos de las brechas de los dos materiales. El segundo aspecto tiene la finalidad de reducir al mínimo la tensión en las juntas y disminuir así las deformaciones en las interfaces.

La primera nano-estructura fabricada fue una heteroestructura conocida como super red (*SL* – Super Lattice), la cual estaba constituida por una serie de capas de dos semiconductores alternados con periodicidad nano-métrica. Este nuevo material fue predicho en 1970 por los investigadores de la IBM, Leo Esaki y Rau Tsu [2], y fue obtenido en su laboratorio años más tarde. Junto a las super redes se desarrolló también la fabricación y estudio de otras estructuras conocidas como pozos cuánticos (*QW* – Quantum Well) [3, 4], en los cuales se logra confinar el movimiento de los portadores de carga en una región plana muy estrecha, restringiendo su movimiento básicamente en dos dimensiones. Desde los años 80 se han desarrollado nuevas técnicas para fabricar sistemas con uno y dos grados de confinamiento adicional como los hilos cuánticos (*QWW* – Quantum Well Wire), sistemas cuasi-unidimensionales [3, 5], y estructuras cuasi cero dimensionales denominadas puntos cuánticos (*QD* – Quantum Dot) [3, 6].

1.2. ANILLOS CUÁNTICOS

Los puntos cuánticos (QD - Quantum Dots) son estructuras que confinan los portadores de carga en las tres dimensiones y puede presentar diferentes formas, algunas similares a un disco, a una pirámide, a una lente, a un anillo o volcán, entre otras [11]. Estos sistemas en general se pueden considerar como pequeñas islas semiconductoras que confinan en su interior sistemas de pocas partículas que interactúan mutuamente a solo algunos nanómetros de distancia, por lo que son llamados también “átomos artificiales” [12]. Los puntos cuánticos despliegan una amplia gama de propiedades físicas de gran interés, actualmente debido al espectro energético discreto que los caracteriza y a sus aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos, tales como: diodos emisores de luz monocromática de cualquier color, ya que la luz emitida depende del tamaño del punto, transistores de un solo electrón, compuertas para computación cuántica, láseres de QDs , entre otras aplicaciones [13].

De la amplia variedad de QDs que actualmente hay bajo investigación, los QDs en forma de anillo, conocidos como anillos cuánticos, gozan de ser actualmente el foco de atención desde el punto de vista tanto experimental como teórico. Esto se debe principalmente a las maravillosas propiedades que exhiben debido a que su geometría no es simplemente conexa como sucede con el resto de las morfologías de los QDs . Estas estructuras en forma de lazos cerrados de tamaño nanométrico pueden considerarse como verdaderas guías de onda cuánticas, donde los portadores de carga, ya sean electrones o huecos, exhiben un comportamiento ondulatorio debido a que su longitud efectiva de recorrido es comparable con su longitud de onda de De Broglie correspondiente. Es gracias a esta configuración de lazo cerrado que los QRs presentan propiedades únicas como: corrientes persistentes, oscilaciones Aharonov-Bohm (AB) en la energía y en la magnetización, las cuales son periódicas con un periodo equivalente al denominado “quantum de flujo magnético” $\phi_0 = \frac{h}{e}$ [14]. Asimismo, el periodo de la oscilación AB es fuertemente dependiente del tamaño de la estructura, ya que es inversamente proporcional al radio medio del anillo si éste es muy estrecho.

1.2.1. Técnicas de fabricación

Los diferentes métodos de fabricación existentes se pueden dividir en dos clases: una clase de métodos se conocen como técnicas “*top-down*”. Estas técnicas se utilizan para crear estructuras a partir del tallado de material, implicando procesos de litografía y grabado como por ejemplo la litografía con base en rayos electrónicos (*e-beam*). Otra clase de métodos se denominan técnicas “*bottom-up*”. Éstas se fundamentan en el auto - ensamblado epitaxial o el crecimiento auto - organizado con el fin de generar una organización estructural de los átomos [12]. Esta clase de métodos involucran procesos heteroepitaxiales tales como: deposición molecular epitaxial (*MBE*), deposición química metal-orgánica en la fase de vapor (*MOCVD*) [17] y epitaxia de fase líquida (*LPE*) [18]. Por otro lado, la técnica epitaxial es una de las más utilizadas en la fabricación de puntos cuánticos autoensamblados (*SAQD*-Self-Assembled Quantum Dots), ya que ofrece diferentes modos de crecimiento y cada modo está determinado por las condiciones en las que dicho crecimiento se realiza (temperatura del sustrato, velocidad de deposición de los materiales, etc.), y las propiedades de los materiales (constantes de red, constantes elásticas, etc.) [15, 16]. Estos *SAQDs* crecen en una amplia variedad de morfologías, incluyendo la anular. Por otra parte, el desajuste entre las constantes de red del material depositado y del sustrato, hace que los *QDs* crezcan de manera espontánea y de un modo particular que recibe el nombre de Stranski-Krastanov [21].

En la actualidad se distinguen tres diferentes modos fundamentales de crecimiento heteroepitaxial, éstos se muestran esquemáticamente en la figura 1. En (a), se muestra un crecimiento capa por capa que se denomina modo de crecimiento de Frank – van der Merwe [19]. En este modo las capas bidimensionales crecidas se pueden utilizar para fabricar estructuras bidimensionales. Sin embargo, la tensión pseudomórfica entre las capas establece una limitación del espesor máximo de las mismas; más allá de este espesor crítico, la denominada capa de tensión se relaja ocasionando un desajuste en la estructura cristalina. En el crecimiento Volmer – Weber [20], por el contrario, los átomos depositados forman “*islas*” tridimensionales directamente sobre la superficie, como se muestra en (b). El modo de crecimiento de Stranski – Krastanov [21] que se muestra en (c), se establece por el crecimiento de una capa bidimensional que generalmente se conoce como capa húmeda. Sin

embargo, cuando esta capa adquiere un espesor crítico, se da lugar a la formación de una isla.

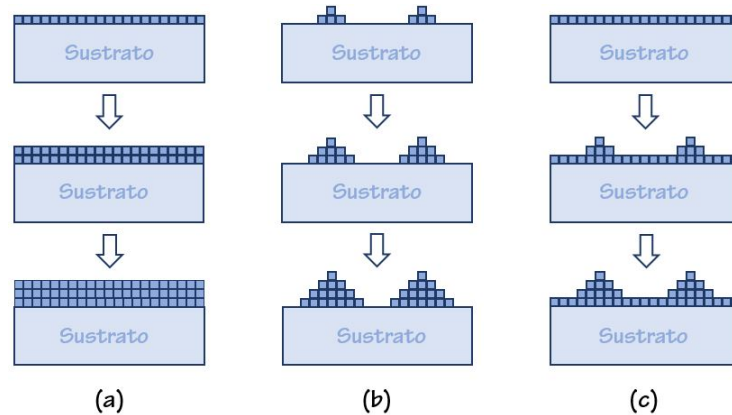


Figura 1: Modos básicos de crecimiento en heteroepitaxia: (a) Frank – van der Merwe, (b) Volmer – Weber y (c) Stranski – Krastanov.

La formación de nanoestructuras en forma de anillo fue reportada por primera vez para islas (QDs) de GaAs recubiertas con InAs mediante la técnica de crecimiento por epitaxia de haces moleculares en el modo de Stranski-Krastanov [21]. En la última década se ha reportado el crecimiento de nanoestructuras de In(Ga)As en forma de anillo mediante una técnica conocida como epitaxia por goteo sobre sustratos de GaAs usando MBE . Esta técnica permite crecer QDs , QRs y nanohuecos de diferentes perfiles. Para el caso de la formación de QRs la temperatura del sustrato debe ser relativamente alta (250-450°C), y el crecimiento anular se da mediante el aumento de la migración de la superficie de átomos de Indio, lo cual puede entenderse en términos de diferentes mecanismos como entremezclado y difusión superficial [26, 27, 34, 35, 36, 37].

1.2.2. Morfologías de anillos cuánticos

Los QRs que son fabricados en los laboratorios actualmente distan mucho de los modelos perfectamente circulares que generalmente se estudian en los trabajos teóricos. Son muchos los tipos de irregularidades que pueden presentar en su morfología, respecto a una morfología perfecta, ya sea en el ancho, en la altura, o en la curvatura del camino medio seguido por los portadores. Dado que dichas irregularidades pueden llegar a producir cambios importantes en las energías y densidades electrónicas de los portadores de carga, se hace muy importante incluirlas en los

estudios teóricos, con el fin de obtener una mejor comprensión de los principales aspectos que modifican las diferentes propiedades del sistema en cuestión. Estos defectos pueden conducir a la transformación de estados puramente rotacionales, que se darían en un QR perfecto, en estados localizados vibracionales. En la figura 2 se presentan algunas imágenes reveladas por Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) de estructuras reales de QDs con forma de cráter. A la derecha se muestran los perfiles obtenidos al hacer un corte diametral en algunas de las estructuras mostradas en las imágenes insertadas en la parte izquierda. En estas curvas se observan las irregularidades estructurales que pueden aparecer con relación a una estructura perfecta. Además, es interesante destacar que la forma del hueco central de estos anillos dista mucho de ser circular, siendo en algunas ocasiones más semejante a un cuadrado. Este último aspecto motivó en buena medida el estudio de los modelos que se han propuesto en el presente trabajo.

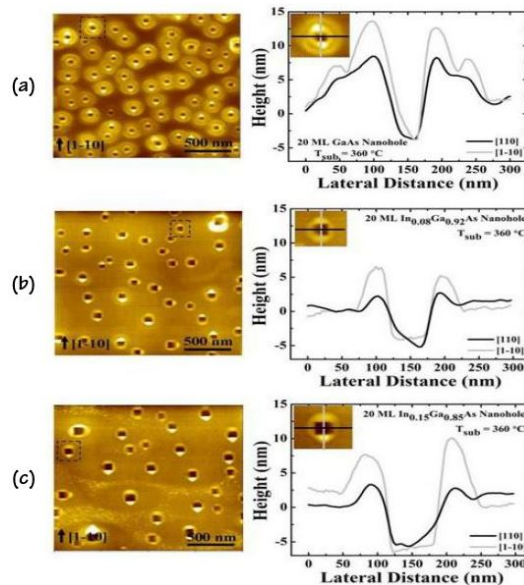


Figura 2: Imágenes 2D y perfiles de QRs por AFM: (a) Anillos cuánticos dobles de $GaAs$ crecidos por goteo epitaxial, (b) Anillos cuánticos de $In_{0,08}Ga_{0,92}As$ con nano-huecos de forma cuadrada y (c) Anillos cuánticos de $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ con nano-huecos profundos de forma cuadrada [25].

En la figura 3 se observan complejas nano-estructuras que crecen como un conjunto cuádruple de islas que delimitan un pozo cuadrado que forman una pared casi continua. La estabilidad de este sistema se debe a que la energía de deformación disminuye continuamente a medida que aumentan las dimensiones del QR .

1.3. APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

Estas nano-estructuras de Ge_xSi_{1-x} con $0,2 < x < 0,4$ crecen por deposición molecular epitaxial (*MBE*) dentro de los rasgos específicos de temperatura y tasa de crecimiento propios de esta técnica. Sin embargo, para conseguir su particular forma cuadrada, es necesario utilizar temperaturas y tasas de deposición de entre $(550 \sim 750)^\circ C$ y $(0,015 \sim 0,09) nm/s$ [38]. Es importante anotar que la geometría cuadrada de estas nano-estructuras, en particular la que se observa en la imagen (d) de la figura 3, también ha motivado la realización del presente trabajo, por lo que hace parte de los modelos estudiados en el mismo.

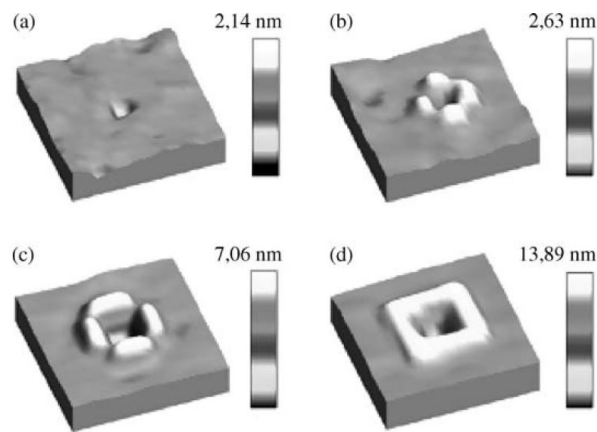


Figura 3: Imágenes 3D por AFM de superficies de $Ge_{0,3}Si_{0,7}/Si(100)$ crecidas a $550^\circ C$, $0,09 nm/s$ con capas de espesor medio de: (a) $5 nm$, (b) $25 nm$, (c) $20 nm$ y (d) $30 nm$ [38].

1.3. APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

Los electrones en nanoestructuras semiconductoras generalmente se mueven en presencia de al menos tres campos; los potenciales periódicos o casi periódicos producidos por los átomos en el cristal, los campos externos y el potencial de interacción entre electrones. Los potenciales atómicos, presentan una escala del orden de Angstrom y normalmente varían mucho más rápido que los demás. En este caso, si se asume que los estados electrónicos tienen energías cercanas al piso de la banda de conducción o cerca del techo de la banda de valencia, la teoría de semiconductores establece que el problema de un electrón que se mueve en presencia de potenciales atómicos así como de otros campos, puede ser sustituido por un problema mucho más simple con una masa diferente para el electrón, llamada masa efectiva m_e^* , que se mueve solo en presencia de campos externos, sin que estos campos varíen bruscamente respecto a la escala de la constante de red cristalina

del material [22]. Esta aproximación se denomina aproximación de masa efectiva (*AME*) y se utiliza exitosamente en el análisis de propiedades de semiconductores en bloque. La masa efectiva de la partícula no es la misma masa de la partícula libre, por ejemplo, en la mayoría de semiconductores la masa efectiva de los electrones es de 10 a 20 veces menor que la masa del electrón libre m_e . Además, en la mayoría de los casos la masa efectiva es anisotrópica, lo que significa que depende de la dirección del movimiento. En el caso de nanoestructuras es común que esta masa adicionalmente dependa de la posición del electrón, es decir, que cambie dependiendo si el portador de carga se encuentra en el interior o en el exterior de la estructura [11]. En la figura 4 se representa esquemáticamente la sustitución del potencial periódico cristalino del material por un pozo de potencial, en el cual ahora las partículas poseen una masa igual a la masa efectiva.

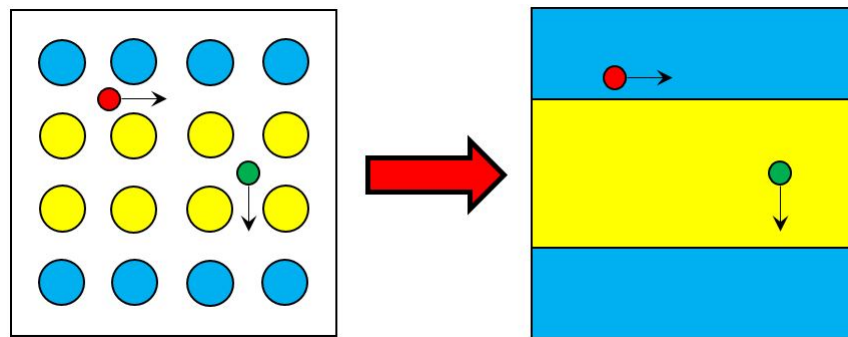


Figura 4: Aproximación de masa efectiva aplicado en una heterojuntura semiconductor.

1.4. ESPECTRO DE ENERGÍA DE UN ELECTRÓN EN UN ANILLO - 1D

Los niveles energéticos para un electrón en un anillo estrictamente 1D (cuando el ancho del anillo tiende a cero) se encuentran en forma exacta. Asimismo, estas estructuras cuasi-unidimensionales adquieren propiedades específicas tales como las corrientes persistentes, transparencia óptica para valores de campo magnético externo específicos, oscilaciones de los niveles energéticos con el incremento del campo magnético externo, saltos bruscos de la magnetización, entre otras. Estas propiedades de los anillos cuánticos 1D en presencia de un campo magnético externo y específicamente las oscilaciones de la energía del estado base se han asociado con el “efecto Aharonov-Bohm (*AB*)” [23]. Este es un fenómeno mecánico-

cuántico descubierto por Yakir Aharonov y David Josep Bohm en el año de 1959 [11], y se observa generalmente cuando una partícula cargada confinada en un sistema de baja dimensionalidad es afectada por un campo electromagnético externo; aunque es más fácil de observar experimentalmente cuando la partícula confinada se encuentra solo en presencia de campo magnético [11]. A continuación se expone de manera general y concisa algunas consecuencias de este efecto por medio del espectro energético en función de un campo magnético aplicado en la dirección perpendicular al plano del anillo para un electrón en un anillo cuántico 1D. La figura 5 es una representación esquemática de un anillo cuántico en presencia de un campo magnético perpendicular al plano del mismo.

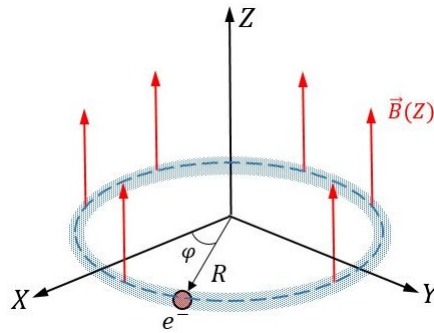


Figura 5: Esquema de un electrón confinado en un anillo cuántico.

El Hamiltoniano que describe el estado de un electrón dentro de un anillo cuántico y dentro del marco de aproximación de masa efectiva, está dado por:

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left[\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 \quad (1.1)$$

Teniendo en cuenta que el electrón solo dispone de un grado de libertad, el operador de momento lineal en coordenadas cilíndricas es:

$$\mathbf{p} = - \left[i\hbar \frac{d}{Rd\varphi} \right] \hat{e}_\varphi \quad (1.2)$$

Con el fin de introducir el campo magnético uniforme en la dirección del eje de simetría, se toma el vector potencial magnético como:

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \quad (1.3)$$

En su forma adimensional el Hamiltoniano resultante es:

$$H = - \left[\frac{1}{R^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + i\gamma \frac{d}{d\varphi} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} \right] \quad (1.4)$$

En la ecuación 1.4 se observan los términos diamagnético y paramagnético que se originan por la interacción del electrón con el campo magnético aplicado. Este Hamiltoniano conduce a la siguiente ecuación de onda que describe el estado m -ésimo del sistema y que además tiene solución analítica.

$$- \frac{1}{R^2} \frac{d^2 \phi_m(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \phi_m(\varphi) - i\gamma \frac{d\phi_m(\varphi)}{d\varphi} = E_m \phi_m(\varphi) \quad (1.5)$$

Dado que el electrón se encuentra confinado en un anillo unidimensional, solo presenta un grado de libertad el cual corresponde al ángulo azimutal φ , y por consiguiente las funciones de onda que satisfacen la ecuación de onda 1.5 serán funciones armónicas respecto al número cuántico azimutal m y estarán dadas por:

$$\phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (1.6)$$

Con esto último se tienen los posibles valores de energía que podrá tener el electrón en el sistema.

$$E_m = \frac{m^2}{R^2} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + \gamma m, \quad \text{con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.7)$$

En la ecuación 1.7 el término $\gamma^2 R^2/4$ corresponde a la energía diamagnética, la cual por ser siempre positiva produce un incremento en la energía cinética del electrón. Por otra parte, γm es la energía correspondiente al término paramagnético, que podrá ser positiva o negativa según el sentido de giro de la partícula dentro del anillo, cuando gira en sentido horario el término paramagnético produce un incremento de la energía y cuando gira en sentido anti-horario se da una reducción de la misma. La competencia entre estos dos términos conduce a una oscilación de la energía del estado base en función de la intensidad del campo magnético γ , esto es conocido como oscilaciones Aharonov-Bohm. Finalmente, el término m^2/R^2 se refiere a la energía cinética del electrón en ausencia del campo magnético.

En la figura 6 se observan las energías correspondientes a diferentes números cuánticos magnéticos m en función de la intensidad del campo magnético multiplicado por el cuadrado del radio del anillo γR^2 . Se ve que la competencia entre los términos diamagnético y paramagnético hace que las curvas adyacentes se crucen

cuando el campo magnético lleva a que γR^2 tome valores enteros. Por otra parte, cuando γR^2 toma valores pares, la energía del estado base es la correspondiente a un estado con número cuántico magnético diferente de cero, esto conlleva a la aparición de corrientes persistentes. Se observa también un efecto de transparencia del anillo ante el campo magnético externo, pues debido a la energía diamagnética, el electrón recibe la energía adicional para realizar la transición del estado base al estado excitado más cercano en los puntos donde existen cruces entre niveles, esto significa que el electrón puede cambiar de estado sin que haya absorción o emisión de fotones. Este conjunto de comportamientos y propiedades optoelectrónicas son consecuencia del efecto Aharonov-Bohm (AB).

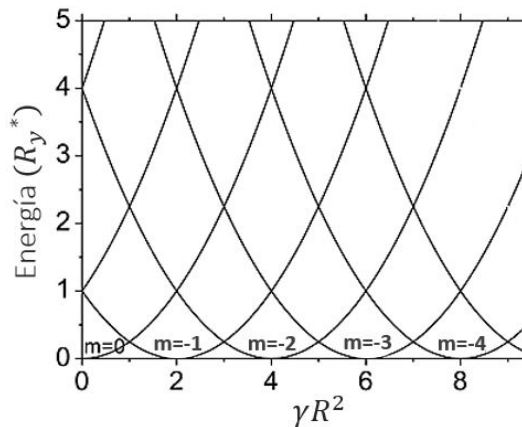


Figura 6: Oscilaciones Aharonov-Bohm en un anillo cuántico 1D con un electrón [22].

1.5. INFLUENCIA DE DEFECTOS SOBRE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE ANILLOS CUÁNTICOS

Como ya se mencionó en la sección 1.2.2, los anillos cuánticos son estructuras que generalmente no presentan una geometría circularmente perfecta. Asimismo, la presencia de estos defectos estructurales también altera la simetría axial de los QRs . Por otra parte, los defectos por impurezas al igual que los defectos estructurales alteran significativamente las propiedades electrónicas de estas nano-estructuras. Por consiguiente, desde el punto de vista teórico se ha hecho importante estudiar

la amplia variedad de defectos que tienen lugar en QRs con el fin de mejorar la comprensión de este tipo de estructuras semiconductoras.

1.5.1. Defectos estructurales

Teóricamente se ha confirmado que es posible fabricar estructuras anulares con morfología no-uniforme. La no uniformidad de estas estructuras se puede considerar de tres diferentes maneras: variación de ancho del anillo, variación de su altura y variación de su curvatura. En cada caso la no uniformidad conduce a un apagamiento de las oscilaciones AB de los niveles energéticos más bajos. No obstante, una curvatura no uniforme puede ser compensada por variaciones en el ancho del anillo [29]. En las figuras 7, 8 y 9 se observan diferentes modelos de estructuras anulares no-uniformes con las diferentes variaciones anteriormente mencionadas. Las figuras 7 y 8 han sido tomadas de la tesis doctoral realizada por Fredy Rodríguez bajo la dirección de Francisco García en el grupo FICOMACO de la Universidad Industrial de Santander, en la cual se estudia el efecto que tienen las variaciones del perfil y la no uniformidad en la altura de un QR tridimensional sobre el espectro de energía de un electrón [12]. La figura 9 muestra una transformación topológica basada en óvalos de Cassini en la que W. Gutiérrez y colaboradores analizan el efecto que tiene la variación de la curvatura [24].

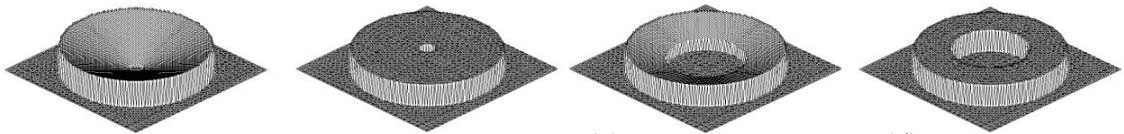


Figura 7: Modelos de estructuras anulares no-uniformes con simetría axial y con variación de ancho [12].

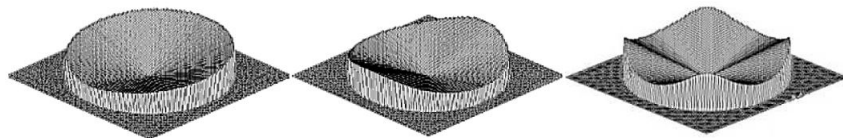


Figura 8: Modelos de estructuras anulares no-uniformes con simetría axial y con variación de grosor [12].

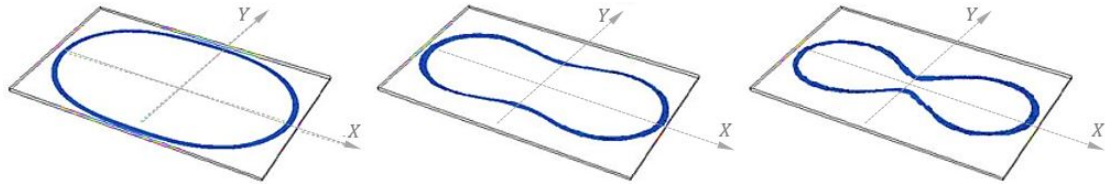


Figura 9: Modelos de estructuras no-uniformes con variación en la curvatura [24].

Cabe destacar que otros autores [28, 31, 39] han estudiado el efecto de la curvatura en anillos con forma elíptica y de limaçon, así como diferentes estructuras anulares que presentan algunas distorsiones en su geometría. En [28] los autores encontraron que la curvatura del camino tiene un efecto sobre la energía cinética de la partícula, es así, que para una nano-estructura angosta, un aumento en la curvatura produce una influencia estabilizadora efectiva debido a un potencial efectivo; este último está relacionado con el radio de curvatura R por la ecuación 1.8 [28]. Por consiguiente, un aumento en la curvatura crea regiones de bajo potencial efectivo (pozos de potencial), lo cual implica grandes amplitudes de probabilidad en regiones de alta curvatura. Por otra parte, otros trabajos [30, 40] sugieren que parámetros físicos como la conductancia y las corrientes inducidas presentan cambios drásticos con la curvatura. Por tanto, el interés del presente trabajo es estudiar el efecto de la curvatura sobre un modelo en el que se pueda realizar variaciones en la curvatura de forma relativamente sencilla.

$$V_c = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{1}{4R^2} \right) \quad (1.8)$$

1.5.2. Defectos por impurezas

Otra importante familia de defectos sobre las propiedades electrónicas de los QRs , son los que se manifiestan cuando algún tipo de impureza se encuentra ya sea dentro del anillo o en la vecindad del mismo. Es importante destacar que, en estos casos, aunque los defectos estructurales pueden llegar a compartir cierta similitud, no resultan así los espectros que exhiben. En este sentido, pequeñas variaciones estructurales, geométricas o posicionales de un modelo con respecto a otro pueden producir diferencias notables en sus propiedades electrónicas.

Un ejemplo del efecto que puede tener una impureza sobre el espectro energético de un QR se describe en [13], allí el autor encontró que la presencia de una impureza

za donadora neutra descentrada en un QR produce la extinción de las oscilaciones de Aharonov-Bohm para el estado base y algunos de los primeros estados excitados, esto significa que en los niveles energéticos más bajos no se manifiesta una dependencia respecto a la intensidad del campo magnético. Lo anterior sugiere que a medida que el núcleo de la impureza se aproxima al QR , se produce una transformación de los estados electrónicos rotacionales más bajos en estados fuertemente localizados, lo que supone una posible localización de Anderson en el sistema, también conocida como localización fuerte [33]. En definitiva, estos resultados sugieren que, en los estados invariantes ante la intensidad del campo magnético, el electrón se halla en un régimen de movimiento oscilatorio en la vecindad de la impureza y por tanto, estos estados se consideran estados localizados, mientras que para los niveles en los cuales el comportamiento en la energía se torna periódicamente oscilatorio, el electrón se halla en un régimen de movimiento rotacional a lo largo del anillo, ya que el electrón tiene la energía cinética suficiente para vencer la atracción Coulombiana.

Capítulo 2

MODELO TEÓRICO

En este capítulo se hace el planteamiento del problema a través de la caracterización de los parámetros geométricos que definen al sistema, así como las propiedades físicas del material que lo compone, se exponen las consideraciones que se tienen en cuenta para obtener el hamiltoniano que representa al sistema y por último se describe el esquema de solución con el que será posible obtener resultados para su posterior análisis.

2.1. GEOMETRÍA DEL SISTEMA

Para la descripción geométrica de las estructuras estudiadas en este trabajo, se consideró un modelo generalizado, el cual se muestra en la figura 10. En este modelo se considera una estructura cuya forma es la de un lazo cerrado de ancho constante y altura despreciable, localizada en el plano XY . Esta estructura se compone de algunas regiones rectas, así como algunas regiones curvas limitadas por segmentos de circunferencia de radio exterior r_{ext} y radio interior r_{int} . Asimismo, se utilizaron los parámetros w y r para definir respectivamente, el ancho del lazo y el radio de la línea central de estas regiones curvas (Ecuaciones 2.1 y 2.2). Finalmente, se combinan estas ecuaciones para expresar r en términos de w (Ecuaciones 2.3); esto último con el fin de facilitar variaciones en el radio central ya que el ancho se mantendrá constante en el presente trabajo.

$$w = r_{ext} - r_{int} \quad (2.1)$$

$$r = \frac{r_{int} + r_{ext}}{2} \quad (2.2)$$

$$r = r_{int} + \frac{w}{2} \quad (2.3a)$$

$$r = r_{ext} - \frac{w}{2} \quad (2.3b)$$

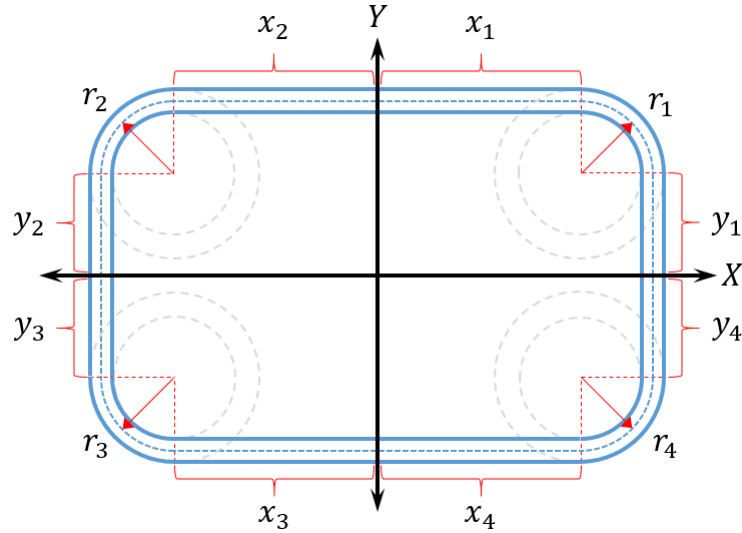


Figura 10: Modelo teórico general de la geometría de un lazo nanoscópico cerrado.

2.2. MATERIALES DEL SISTEMA

En esta sección se definen los parámetros físicos que se han tomado en cuenta para modelar las estructuras que se estudian en el capítulo 3. Para obtener resultados comparables con los de otros autores, se han considerado estructuras de $In_{0,55}Al_{0,45}As$ inmersas en una matriz de $Al_{0,35}Ga_{0,65}As$ [32]. Por otro lado, para facilitar los cálculos se ha despreciado el desajuste existente en las juntas tanto de la constante dieléctrica, como de la masa efectiva de los portadores de carga y se han tomado los valores que corresponden a la región interior de la nanoestructura ya que el confinamiento hace que los portadores de carga se encuentren principalmente en esta región. Además, el sistema ternario de $In_{0,55}Al_{0,45}As$ tiene una constante dieléctrica $\varepsilon = 12,71$ y una masa efectiva para el electrón $m_e^* = 0,076m_e$, donde m_e es la masa del electrón en el vacío. Asimismo, la constante de red del material de la nanoestructura es cercana a los $0,6 \text{ nm}$.

2.3. HAMILTONIANO MONO-ELECTRÓNICO DEL SISTEMA

Para facilitar el estudio del efecto AB en un anillo uniforme, resulta conveniente utilizar coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) , además de considerar un potencial de barrera infinita, el cual es cero dentro del anillo e infinito por fuera de éste (Ecuación 2.4). Por otra parte, el anillo se encuentra en presencia de un campo magnético externo homogéneo $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$, el cual está orientado a lo largo del eje de simetría y definido a través de su potencial vectorial $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho})$, a su vez, se aplica un campo eléctrico homogéneo $\mathbf{F} = F\hat{\mathbf{i}}$ en la dirección x del plano del anillo, definido por el potencial eléctrico $\Phi = e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$. Por consiguiente, el hamiltoniano que describe adecuadamente el comportamiento de un electrón confinado en un QR y con potencial de confinamiento estructural tipo barrera infinita, está dado por la ecuación 2.5.

$$V_0 = \begin{cases} 0 & \in QR \\ \infty & \notin QR \end{cases} \quad (2.4)$$

$$H = \frac{1}{2m_e^*} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}]^2 + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi) \quad (2.5)$$

La definición de los vectores momento lineal $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ y potencial magnético $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ permite obtener el conjunto de ecuaciones 2.6 y 2.7 (ver anexos 4 y 4).

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = -i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla \quad (2.6)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla. \quad (2.7)$$

Por sustitución de \mathbf{p} y los resultados 2.6 y 2.7 en la ecuación 2.5 se obtiene el siguiente resultado.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m_e^*}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m_e^*}\mathbf{A}^2 + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi). \quad (2.8)$$

Por último, se reemplaza en la ecuación 2.8 los vectores $\mathbf{A} = A_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ y $\nabla = \nabla_\rho\hat{\mathbf{e}}_\rho + \nabla_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ definidos en coordenadas polares, llegando finalmente a la expresión del hamiltoniano que permite estudiar el efecto de la curvatura de un QR en el espectro energético de un electrón.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 - \frac{i\hbar e B}{2m_e^*} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e^*} + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi) \quad (2.9)$$

2.4. ESQUEMA DE SOLUCIÓN

El hamiltoniano obtenido en la ecuación 2.9 es una ecuación diferencial en derivadas parciales (*EDP*) la cual no permite realizar una separación de variables, por lo tanto, debe recurrirse a algún método numérico para encontrar su solución. En este trabajo se ha hecho uso de la herramienta computacional COMSOL basado en un esquema de elementos finitos bidimensionales y triangulares. COMSOL ofrece la posibilidad de definir *EDPs* hasta de segundo orden en el tiempo y en el espacio, no mixtas, para lo cual solo basta definir el valor de cada uno de los coeficientes que acompaña cada una de las derivadas, a esto se le denomina *EDP* en forma de coeficientes. Es así, que por comodidad COMSOL utiliza la siguiente formulación para definir una *EDP* en forma de coeficientes.

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (2.10)$$

Siguiendo con la ecuación 2.9, está también corresponde a un problema de valores propios, para lo cual solo se debe añadir un estudio de valores propios en COMSOL, este por defecto asume que la variable dependiente u varía con el tiempo de la forma:

$$u(t) = u_0 e^{-\lambda t}, \quad (2.11)$$

donde u_0 es una amplitud compleja y λ es un valor propio. Al combinar las ecuaciones 2.10 y 2.11 se obtiene la expresión general (Ecuación 2.12) que permite resolver el problema de valores propios en forma de coeficientes.

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (2.12)$$

De acuerdo con la geometría del problema a estudiar, COMSOL ofrece una variedad de componentes, algunos de los cuales son muy útiles si el sistema a considerar presenta simetría axial; estos pueden ser: 3D, 2D axisimétrico, 2D, 1D axisimétrico, 1D y 0D. En este trabajo se utilizó un componente 2D en coordenadas cartesianas, para el cual $\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]$, además se ha dividido la ecuación 2.9 entre la unidad de

carga eléctrica e con el fin de expresar la energía en eV , por lo que las unidades de todos los parámetros físicos en la ecuación 2.9 son del S.I. Por todo lo anterior, los valores de los coeficientes de la ecuación 2.12 que se utilizaron para reproducir la ecuación 2.9 son:

$$\left. \begin{aligned} e_a &= 0 \\ d_a &= 1 \\ c &= \frac{\hbar^2}{2m_e^*e} \\ \alpha &= [0, 0] \\ \gamma &= [0, 0] \\ \beta &= \frac{i\hbar B}{2m_e^*} [y, -x] \\ a &= \frac{eB^2}{8m_e^*} (x^2 + y^2) \\ f &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

En este punto, se hizo necesario modelar el potencial de barrera infinita $V_0(\rho, \varphi)$ de la ecuación 2.4 mediante la imposición en COMSOL de la condición de contorno de Dirichlet, en la que la función de onda ψ se anula en la frontera. Finalmente, para realizar el procesamiento de datos, se diseñó un script en MATLAB que lee el documento de texto con los datos exportados desde COMSOL y los organiza en una matriz que permite realizar consecutivamente la gráfica allí mismo. Posteriormente, se lleva a cabo el análisis y comprensión del comportamiento físico de cada uno de los sistemas estudiados.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

Este capítulo expone las características geométricas de los modelos de lazos nanoscópicos cerrados que se realizaron con el propósito de estudiar el comportamiento energético de un electrón confinado, para ello se analiza la densidad electrónica dentro del lazo teniendo en cuenta el potencial de confinamiento del electrón debido a cambios en la curvatura, y su respuesta a campos externos eléctrico y magnético de manera individual y simultánea.

3.1. ARQUITECTURA DE LOS LAZOS

En esta sección se describen las consideraciones que dieron lugar a los diferentes modelos que se estudian en el presente capítulo. El objetivo de este trabajo es el de estudiar el efecto de la curvatura de un lazo cerrado de tamaño nanométrico sobre las propiedades energéticas de un electrón confinado. Para cumplir este objetivo es necesario prestar atención de las regiones curvas, de manera que se han tomado dos diferentes radios de curvatura media, uno de ellos múltiplo del otro, esto permitirá evidenciar la existencia de un potencial de confinamiento estructural debido a la curvatura del lazo. Por lo anterior, se han realizado una serie de transformaciones (ver figuras 11, 15, 16, 22, 23 y 24) sobre el modelo general de la figura 10, de tal manera que, para tener en cuenta las anteriores consideraciones, se tendrán como parámetros fijos el ancho $w = 10 \text{ nm}$ y la longitud de las regiones rectilíneas $l = 90 \text{ nm}$, asimismo se tomarán radios de curvatura media de 15 y 45 nm , estas dimensiones permitirán obtener lazos nanométricos con dimensiones comparables a las que obtuvieron experimentalmente *J.A. Floro, R. Hull, J.L. Gray* en su trabajo *Nonequilibrium Quantum Dot Microstructures* [38].

3.2. LAZO CIRCULAR

Los anillos cuánticos gozan de ser actualmente el foco de atención desde el punto de vista tanto experimental como teórico, esto se debe a sus ya conocidas propiedades, que son consecuencia de la geometría no simplemente conexa que presentan. Por lo tanto, son bien conocidas las oscilaciones Aharonov-Bohm en el espectro energético de un electrón confinado en un QR , así como algunas de las propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas de estos sistemas. En este sentido, el interés de esta sección será el de obtener resultados que permitan ser contrastados con los resultados de las otras geometrías que se estudian en este capítulo. Lo anterior con el fin de comprender lo que ocurre con un electrón confinado cuando se rompe la simetría axial de un QR circular.

$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 0$	$r = 45 \text{ nm}$
$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = 0$	$r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = r$

Tabla 1: Parámetros geométricos de un lazo circular para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

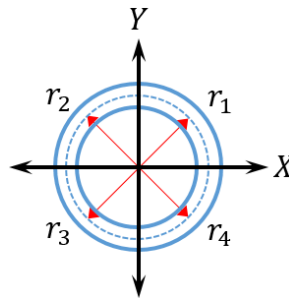


Figura 11: Geometría de un lazo circular para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

3.2.1. Efecto del campo magnético

Los resultados de esta sección corresponden a la geometría de la figura 11, cuyos parámetros geométricos son los que acompañan a la misma. El electrón confinado en este QR , se ha sometido a la acción de un campo magnético en la dirección de crecimiento del mismo, es decir en la dirección z . Como es de esperar, el electrón

exhibe un espectro energético en el que la energía presenta oscilaciones con respecto a la intensidad del campo magnético, con un periodo $\Delta B = \frac{2\hbar}{er^2} \approx 0,65 [T]$. Por lo anterior, en la figura 12 se observa una secuencia de mínimos idénticos, los cuales corresponden a diferentes valores del número cuántico m , esto involucra la aparición de corrientes persistentes.

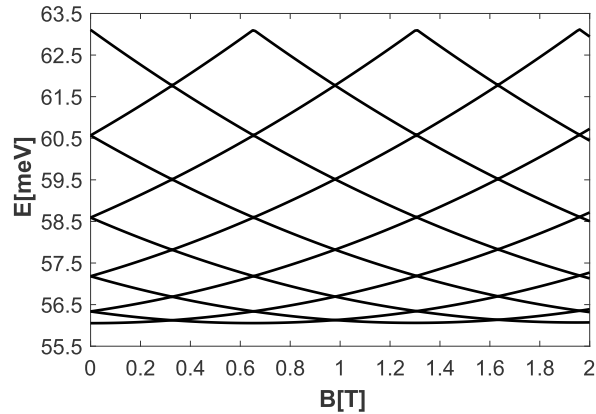


Figura 12: Energía de un electrón en un lazo circular, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento.

Un aspecto interesante que se aprecia en la figura 12, es la interacción que tiene el electrón con el campo magnético al generar un par de términos, el término diamagnético $\left(\frac{e}{8m_e^*}\right) B^2 r^2$ y el paramagnético $\left(\frac{\hbar}{2m_e^*}\right) mB$. El término diamagnético tiene un efecto de confinamiento central de tipo parabólico respecto a la intensidad del campo y a la variable radial, mientras el paramagnético presenta una dependencia lineal tanto del campo como del momento angular del electrón, por lo que este término es el que rompe el degeneramiento en la energía respecto al número cuántico magnético m . Pese a la compleja superposición de efectos de confinamiento, se puede observar que cuando el electrón se encuentra en un estado con un número cuántico $m < 0$, ocurre un descenso en la energía al comenzar a aplicar un campo magnético, esto ocurre debido a que el término paramagnético domina inicialmente, pero a medida que la intensidad del campo aumenta, el término diamagnético crece hasta llegar a ser igual y posteriormente mayor que el paramagnético, produciéndose así un consecuente aumento en la energía.

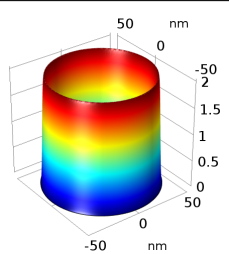
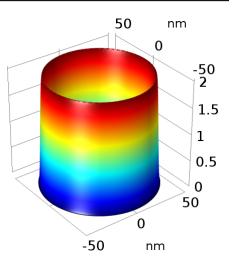
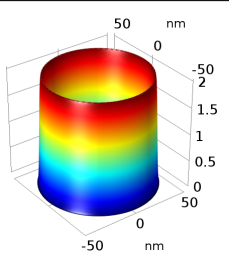
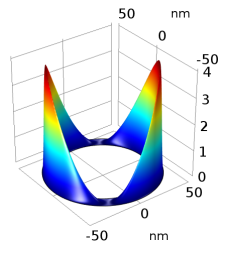
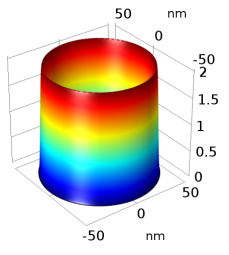
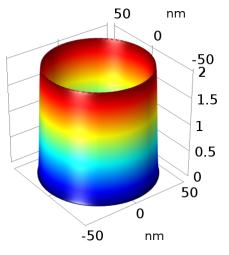
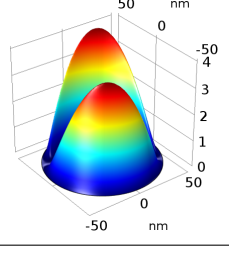
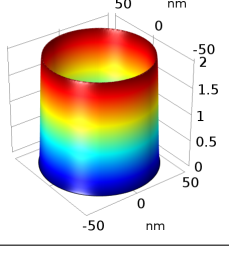
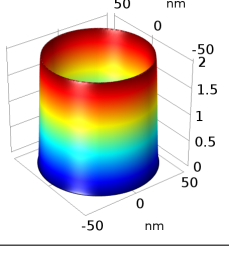
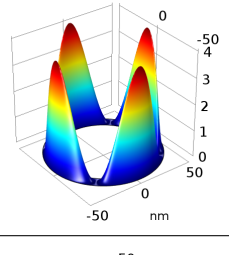
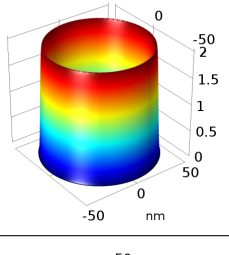
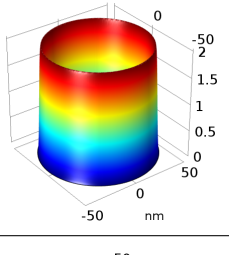
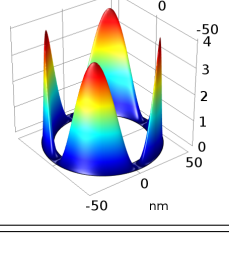
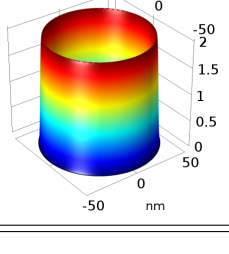
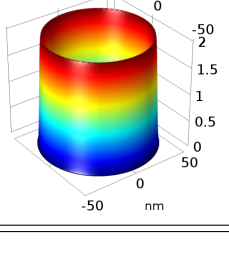
Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,6 [T]$	$B = 1,2 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 2: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo circular con $r = 45 \text{ nm}$.

En la tabla 2 se aprecia la densidad electrónica de los primeros 5 estados de energía para diferentes intensidades de campo magnético. Es de notar que la aplicación de un campo magnético da lugar a la aparición de corrientes al interior del lazo circular. A su vez, la densidad electrónica de los estados con número cuántico $m \neq 0$, en ausencia de campo magnético, permite ver que para estos estados no se forman corrientes, debido a la existencia de regiones donde se interrumpe la densidad electrónica. Asimismo ocurre para el estado base, donde no hay lugar a corrientes dado el valor de su número cuántico m .

3.2.2. Efecto del campo eléctrico

Un aumento en la intensidad de un campo eléctrico aplicado en la dirección positiva del eje x produce un incremento del confinamiento longitudinal del electrón. Por consiguiente, este tendrá mayor probabilidad de localizarse cerca del extremo izquierdo del QR , esto ocurre como resultado de la fuerza de Lorentz que actúa sobre el electrón debido al campo. Mas aún, en la gráfica 13 se observa que un aumento en la intensidad del campo produce un desacople de cada nivel de energía en dos (*Efecto Stark*), y se aprecia que para niveles de mayor energía, este desacople tiene lugar con campos cada vez mayores. Asimismo, en la gráfica 13 se observa un fuerte confinamiento del electrón para pequeños valores de campo eléctrico. Otro aspecto importante, es la envolvente lineal que se observa sobre los puntos donde se rompe el degeneramiento, cuya pendiente se relaciona con el tamaño de la estructura en la dirección en que se aplica el campo.

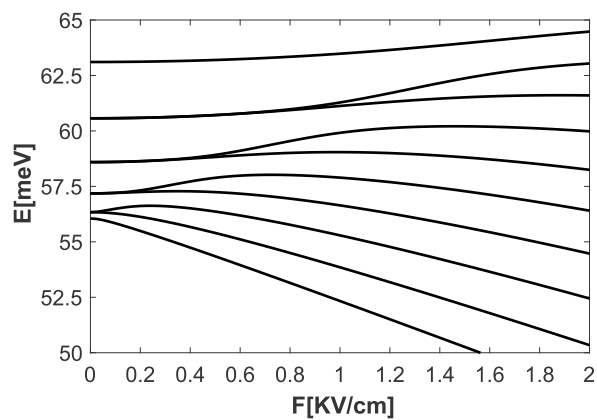


Figura 13: Energía de un electrón en un lazo circular, en función del campo eléctrico F en la dirección positiva del eje x .

3.2.3. Efecto de los campos eléctrico y magnético

A continuación, se busca comprender el efecto de la aplicación simultánea de los campos eléctrico y magnético sobre el espectro energético del electrón, para ello se ha utilizado un campo eléctrico constante de $0,1KV/cm$, aplicado igualmente en la dirección positiva del eje x . La escogencia de este valor de campo, se debe a que en la gráfica 13 se observa que dicho campo logra romper el degeneramiento sobre el primer estado excitado, lo cual, como se verá en las próximas secciones, permitirá realizar un análisis comparativo de las demás geometrías con respecto al QR circular, que a su vez permitirá comprender cómo afecta la simetría axial del sistema si esta se rompe.

Como ya se observó, la aplicación de un campo eléctrico en la dirección positiva del eje x , produce un incremento en el confinamiento del electrón en la región sobre la cual se aplica el campo. Por otro lado, el campo magnético produce un confinamiento central de tipo parabólico, hecho que ya se mencionó anteriormente, la acción simultánea de estos dos campos hace que se reestructure el espectro de energía, lo cual es evidente si se comparan entre sí las gráficas 12 y 14. Asimismo, el campo eléctrico produce la extinción de las oscilaciones AB para el estado base y una atenuación de las mismas para los dos primeros estados excitados, lo que sugiere una transformación de estos estados electrónicos rotacionales a localizados.

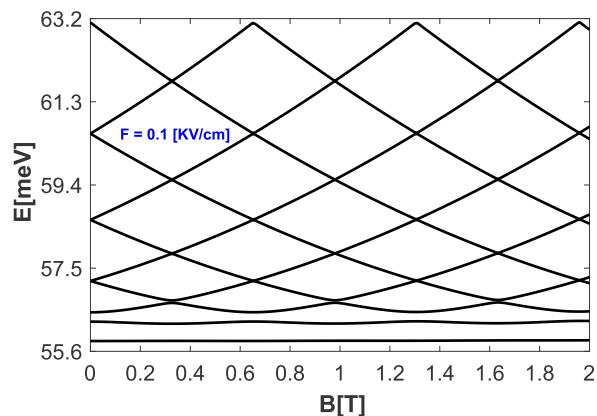


Figura 14: Energía de un electrón en un lazo circular, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento, para un campo eléctrico homogéneo F en la dirección positiva del eje x .

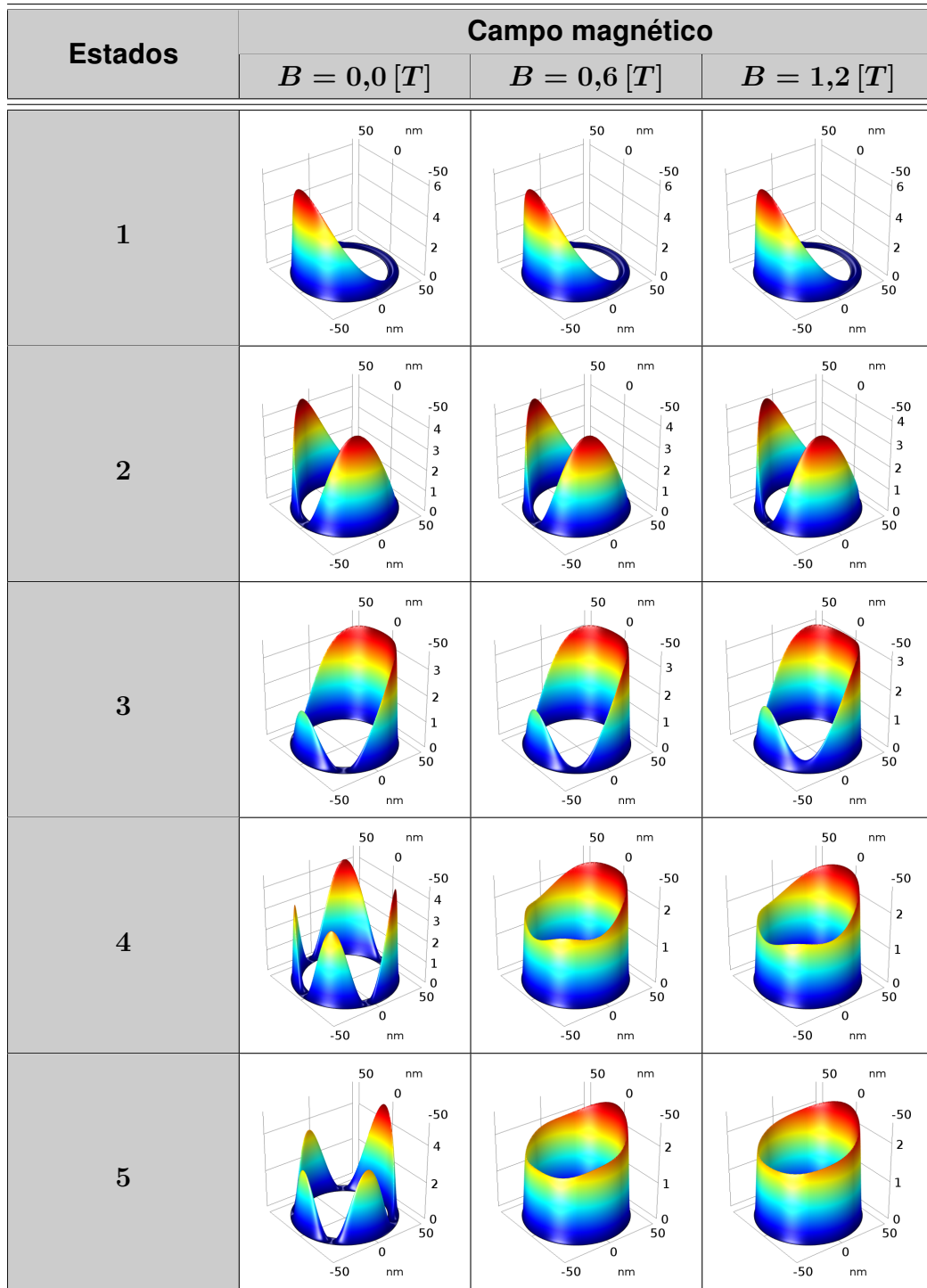


Tabla 3: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo circular con $r = 45 \text{ nm}$.

En la tabla 3 se observa para el estado base un fuerte confinamiento del electrón debido al campo eléctrico, a su vez se observa que no hay existencia de corrientes para los dos primeros estados. Asimismo, el tercer estado de energía muestra una débil corriente, coherente con la débil oscilación en la energía correspondiente a este mismo estado (Figura 14). Un hecho curioso que aparece en los tres últimos estados de la tabla 3 es la tendencia que tiene el electrón hacia el extremo derecho del QR , este resultado es aparentemente contradictorio si se tiene en cuenta que el confinamiento debido al campo eléctrico debería darse sobre la región izquierda. Este hecho se explica si se considera que el campo eléctrico tiene un efecto de desnivel sobre el pozo de energía en el cual se mueve el electrón, este desnivel hace que los estados de mayor energía se encuentren fuera de este pozo del lado izquierdo, pero ocurre lo contrario del lado derecho donde ahora se empiezan a encontrar estos estados de energía, razón por la cual se ve un corrimiento de la densidad electrónica hacia el borde derecho del QR . Finalmente, se observa que a medida que el electrón se encuentra en un estado de mayor energía, su densidad electrónica empieza a ser la misma en toda la longitud del QR .

3.3. LAZO RECTANGULAR OVALADO

Como ya se ha mencionado, el interés de este trabajo es el de comprender el efecto de la curvatura de un lazo cerrado de tamaño nanométrico sobre el espectro energético de un electrón confinado. Por ello, en esta sección se estudia una geometría en forma de rectángulo ovalado, que podría entenderse como un QR circular que se divide en dos partes iguales, que luego son separadas sobre el eje x una distancia L proporcional al radio de curvatura medio r del QR ($L \propto r$). Posteriormente, estas partes se unen por medio de segmentos rectilíneos de ancho w y largo L para formar lazos rectangulares ovalados como se puede observar en las figuras 15 y 16, de esta forma se consigue simultáneamente introducir cambios en la curvatura y romper la simetría axial con el eje z . Los parámetros geométricos de estos modelos de lazos nanoscópicos son los que acompañan a las figuras 15 y 16. Cabe señalar que, el parámetro L que representa la longitud de las regiones rectilíneas se mantendrá constante en los dos modelos, esto es con el fin de que, al comparar los mismos, estos difieran entre sí solo por sus regiones curvas.

$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = r$	$r = 45 \text{ nm}$
$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = 0$	$r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = r$

Tabla 4: Parámetros geométricos de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

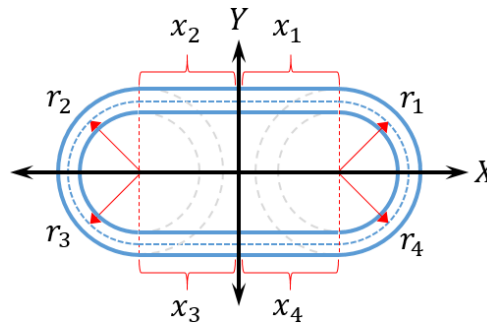


Figura 15: Geometría de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 3r$	$r = 15 \text{ nm}$
$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = 0$	$r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = r$

Tabla 5: Parámetros geométricos de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$.

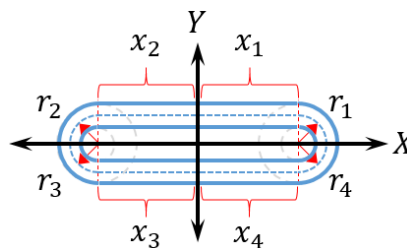


Figura 16: Geometría de un lazo rectangular ovalado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$.

3.3.1. Potencial de confinamiento estructural

Para poder explicar algunos de los aspectos presentes en las subsecciones siguientes, se debe tener en cuenta la existencia del potencial de confinamiento estructural debido a la variación de curvatura, cuyo valor está dado por la expresión matemática de la ecuación 1.8.

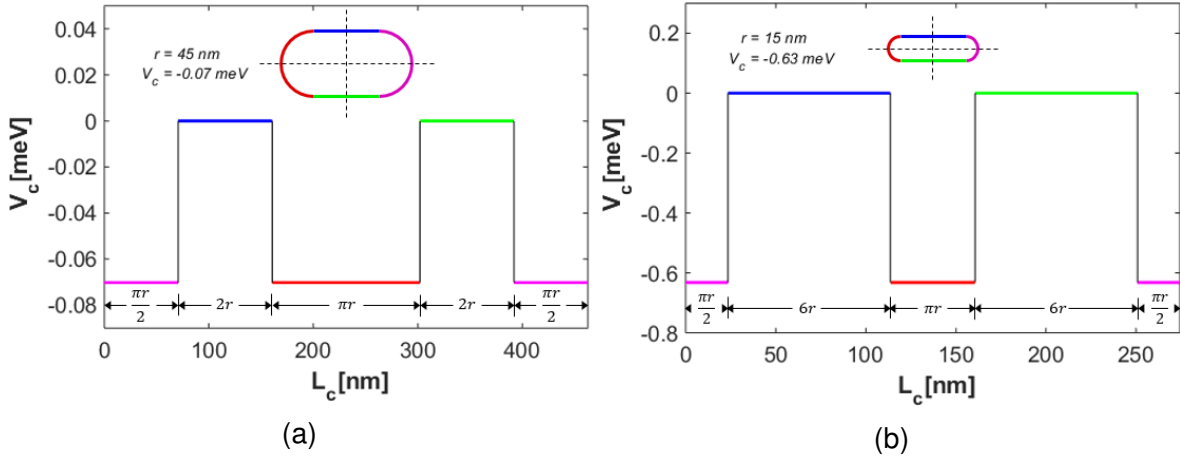


Figura 17: Potencial de confinamiento estructural de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función de la longitud del perímetro para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$.

En la gráfica 17, se observa el potencial de confinamiento estructural del electrón a medida que este avanza en el interior del lazo, allí claramente se observan los pozos de potencial que tienen lugar debido a las regiones curvas, y acorde con la ecuación 1.8, se observa que una reducción en el radio de curvatura produce un aumento en el potencial de confinamiento. Finalmente, como se podrá ver posteriormente, la existencia de este potencial se verá reflejado tanto en el espectro de energía del electrón confinado como en su densidad electrónica en presencia de campos eléctrico y magnético, permitiendo explicar el comportamiento del electrón debido a cambios en la curvatura del camino.

3.3.2. Efecto del campo magnético

En relación con el efecto de la aplicación de un campo magnético homogéneo en la dirección de crecimiento de un lazo rectangular ovalado, se deben considerar tres aspectos, estos son: el periodo y la amplitud de las oscilaciones AB , y la dupla entre

los estados de menor energía. En cuanto al periodo, aparece un notable aumento de las oscilaciones en la figura 18a acompañado de una disminución en la separación energética entre niveles, mientras que en la figura 18b, se aprecia una disminución en el periodo de oscilación, esta vez acompañado de aumento en la separación entre niveles. Con respecto a lo anterior, la variación en el número de oscilaciones está relacionada con la longitud del camino que recorre el electrón, es por ello que aparece un mayor número de oscilaciones en la geometría de mayor radio de curvatura. Por otro lado, la separación entre niveles energéticos es consecuencia del tamaño de estas dos estructuras, siendo de mayor amplitud las oscilaciones en la energía para la geometría de menor tamaño y viceversa.

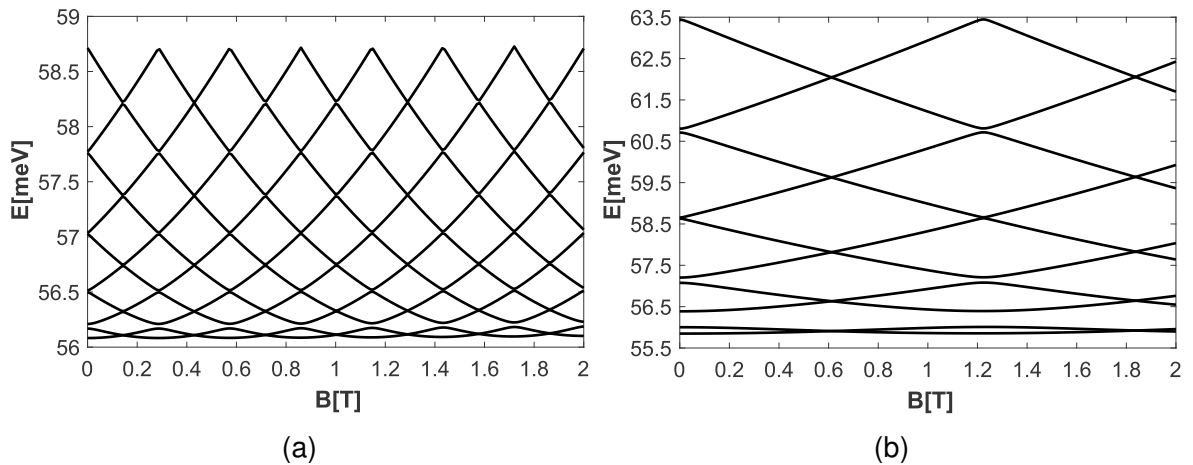


Figura 18: Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$.

Con respecto al comportamiento trenzado que presentan los dos primeros estados de energía de la figura 18a, así como el que presentan los cuatro primeros estados de la figura 18b, este se debe a un desacople causado por el potencial de curvatura, ya que la energía del electrón para estos primeros estados no supera la energía correspondiente a la profundidad de estos pozos de potencial. Cabe agregar que en la figura 18b, solo los tres primeros estados se encuentran dentro del pozo de potencial, la razón por la cual se forma una segunda trenza se debe a que la energía del cuarto estado es lo suficientemente cercana a la del pozo, presentando así un efecto de interferencia causado por el comportamiento ondulatorio del electrón. De acuerdo con lo anterior se deduce que la presencia de estos pozos

de potencial tiene un efecto de localización sobre el electrón, el cual dependerá del radio de curvatura medio de las regiones curvas presentes en la estructura.

Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,26 [T]$	$B = 0,52 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 6: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 45 \text{ nm}$.

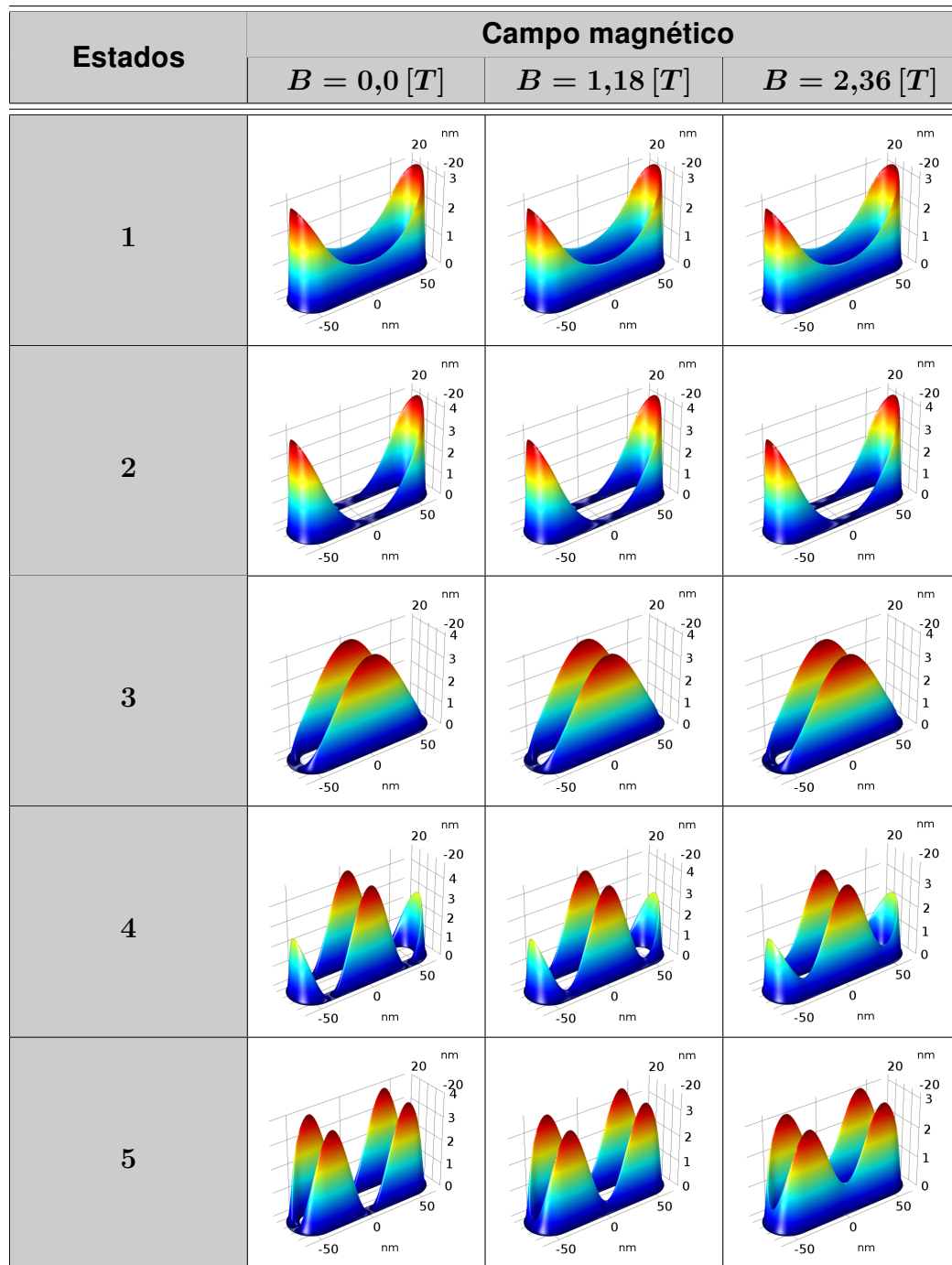


Tabla 7: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$.

En las tablas 6 y 7 se aprecia para los dos primeros estados energéticos el fuerte confinamiento estructural debido al potencial de curvatura, este resultado es cohe-

rente con las gráficas 18a y 18b, en las cuales se observa el trenzado en las energías de los dos primeros estados, desacoplándose de las demás energías. Por otra parte, en la tabla 7 se observa la ausencia de corriente en el segundo estado y la aparición de una débil corriente para los estados tres y cuatro, en concordancia con lo observado en la gráfica 18b para dichos estados. En contraste con lo anterior, en la tabla 6 se observan buenas corrientes debido al buen comportamiento oscilatorio que presentan sus energías en el gráfico 18a.

3.3.3. Efecto del campo eléctrico

Un análisis del comportamiento gráfico de las energías del electrón en presencia de un campo eléctrico homogéneo en la dirección positiva del eje x , muestra al igual que el QR circular un rápido confinamiento para pequeños valores de campo eléctrico, sin embargo, para el lazo de la figura 19a la disminución en la energía debido al campo, tiene lugar más rápido que en la figura 19b, esto se debe al tamaño del lazo, de manera que para el lazo de mayor curvatura la diferencia entre niveles energéticos será menor y por tanto el electrón posee menor energía para contrarrestar el efecto confinador del campo. Otro hecho interesante, es el que se observa en la figura 19b, en ella aparece el cruce de algunos estados, siendo este un comportamiento típico de una estructura con doble pozo cuántico, bajo la acción de un campo eléctrico.

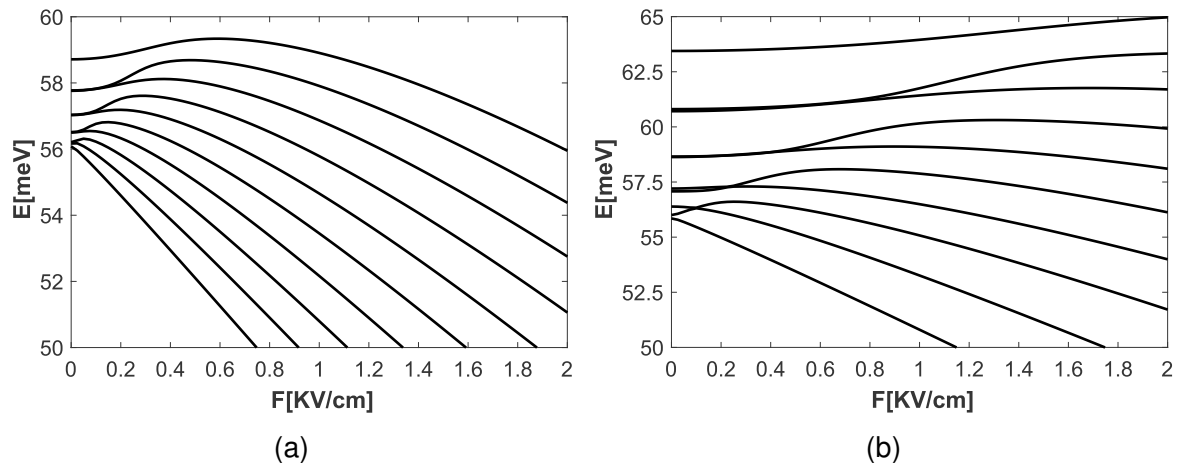


Figura 19: Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo eléctrico F en la dirección positiva del eje x para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$ y (b) $r = 15 \text{ nm}$.

Estados	Campo eléctrico		
	$F = 0,0 [KV/cm]$	$F = 0,2 [KV/cm]$	$F = 0,4 [KV/cm]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 8: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$.

En la figura 19a no se presentan efectos de trenzado de estados, ya que el pozo de potencial debido a la curvatura es poco profundo y solo el estado base se encuentra dentro del pozo. Por el contrario, en la figura 19b si se observa

trenzado en algunos estados de baja energía, para valores pequeños de campo eléctrico, esto es porque ahora el pozo es más profundo y los primeros tres estados no tienen la energía suficiente para escapar del pozo de potencial, sin embargo, la cercanía de los siguientes dos niveles al pozo es suficiente para que estos se trenzen débilmente por efectos de interferencia cuántica. Es así que, el pozo de confinamiento estructural logra que los cuatro estados siguientes al primero, cambien de estado a partir de $0,1 \text{ KV/cm}$ para los estados 2 y 3, y a partir de $0,2 \text{ KV/cm}$ para los estados 4 y 5.

Al igual que en la sección de lazo circular, en la tabla 8 se observa el efecto confinador que presenta el campo eléctrico sobre los dos primeros estados de energía, el cual puede entenderse a modo de desnivel sobre los pozos de curvatura que presenta la estructura, es por ello que para los estados de mayor energía, estos se hallan fuera del pozo de potencial del lado izquierdo y consecuentemente se encuentran dentro del pozo de potencial de la derecha, quedando explicado el hecho de que la densidad electrónica presenta un corrimiento hacia la derecha para estados de mayor energía, como se aprecia en la tabla 8 para los tres últimos estados.

3.3.4. Efecto de los campos eléctrico y magnético

En esta ocasión se busca analizar la respuesta de la estructura sobre la energía del electrón cuando se aplican en simultáneo los dos campos, manteniendo constante el campo eléctrico en $0,1 \text{ KV/cm}$. A primera vista los resultados muestran la extinción de algunos de los primeros estados de energía, siendo mucho más fuerte el efecto del campo eléctrico en la figura 20a, allí se observa una fuerte localización sobre los primeros cuatro estados, asimismo se aprecia un decremento en los valores de energía con respecto al resultado sin campo eléctrico (Figura 18a).

Los resultados anteriores, se explican nuevamente por el hecho de que el gran tamaño de la estructura de la figura 20a hace que el electrón presente energías más bajas, facilitando que la fuerza eléctrica confine fácilmente al electrón con respecto a la figura 20b para un mismo valor de campo eléctrico. A su vez, estos resultados implican que se debe aplicar un campo eléctrico de mayor intensidad para conseguir el mismo confinamiento sobre la estructura de menor radio. Este resultado es porque debido al menor radio de curvatura, la estructura se hace de menor tamaño y para no violar el principio de incertidumbre, el electrón adquiere mayor energía,

en consecuencia, se requiere de un gran campo eléctrico para hacer que el electrón tienda a localizarse un poco. En adición a lo anterior, también se observa en la figura 20b una disminución en la energía de los primeros estados electrónicos, claramente como consecuencia del efecto de confinamiento del campo eléctrico. Asimismo, en la figura 20b así como en la figura 20a se encuentran estados débilmente localizados, que se manifiestan por la atenuación de sus correspondientes oscilaciones AB .

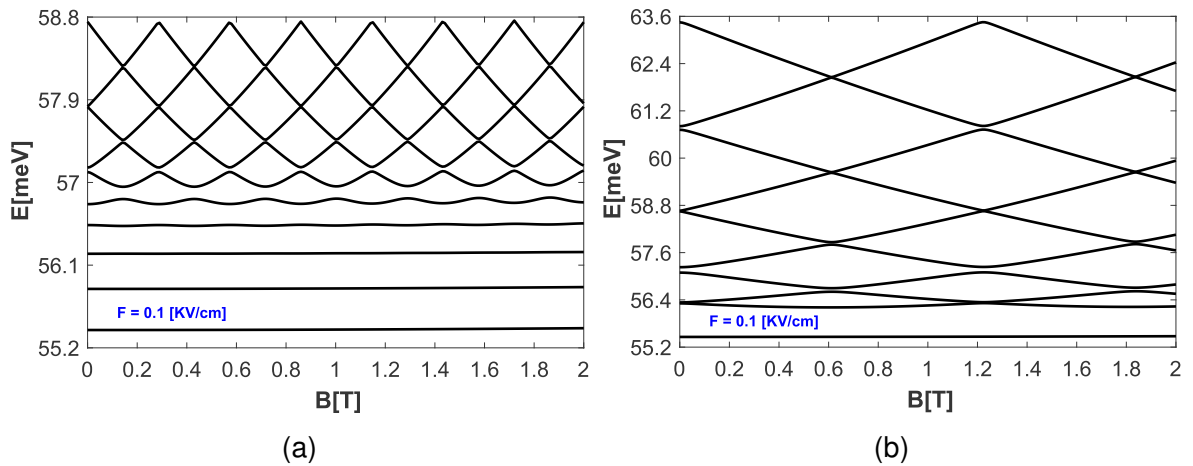


Figura 20: Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del campo magnético B en la dirección de crecimiento, para un campo eléctrico homogéneo F en la dirección positiva del eje x y para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45$ nm y (b) $r = 15$ nm.

En las tablas 9 y 10 se aprecia nuevamente el fuerte confinamiento del campo eléctrico sobre los dos primeros estados, pero a partir del tercer estado se observa el desplazamiento de la densidad electrónica hacia la derecha. Este hecho nuevamente es consecuencia del mismo campo eléctrico, debido al desnivel que este ocasiona sobre los pozos de potencial de curvatura, esto causa que los estados de poca energía aparezcan solo en el pozo de la izquierda y explica porque los estados de mayor energía aparecen solo en el pozo derecho.

Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,26 [T]$	$B = 0,52 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 9: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 45 \text{ nm}$.

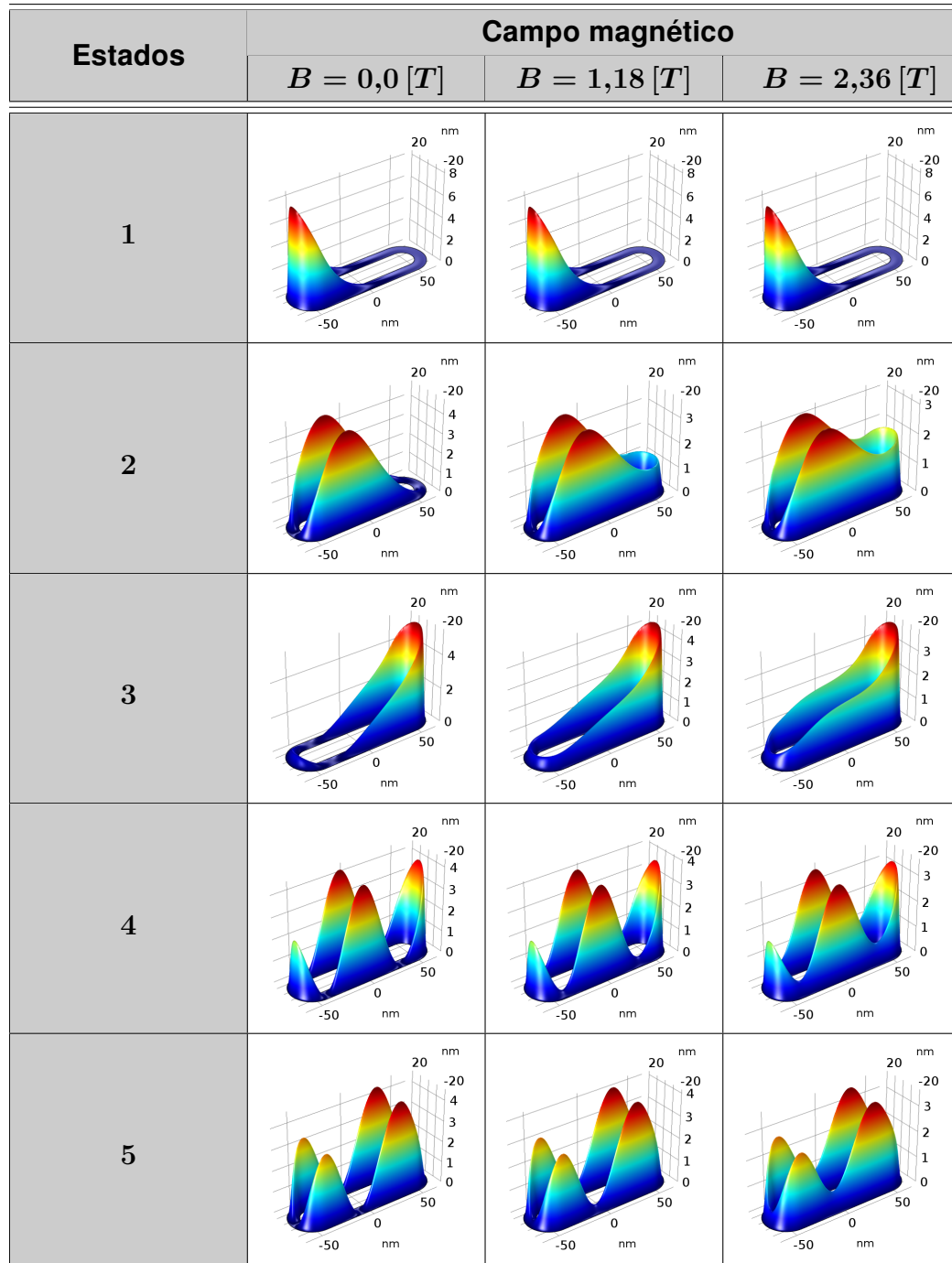


Tabla 10: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo rectangular ovalado con $r = 15 \text{ nm}$.

En adición a lo anterior, en la tabla 9 se aprecia que para todos los estados hay regiones que presentan una interrupción de la densidad electrónica, lo cual impli-

ca la desaparición de corrientes en la estructura, este hecho se corrobora con la aniquilación de las oscilaciones AB de los primeros cinco estados de energía correspondientes a la estructura de la figura 20a. Por otro lado, la tabla 10 muestra la aparición de corrientes a partir del tercer estado energético, esto es coherente con el gráfico 20b en el cual aparecen extintas las oscilaciones AB de los dos primeros estados de su correspondiente estructura.

3.3.5. Efecto de la variación del radio de curvatura

Como es de esperar, en las gráficas de la figura 21 se observa claramente que un aumento en el radio de curvatura medio de la estructura, produce una consecuente disminución en la energía del electrón, así se moverá por la estructura con una menor energía cinética rotacional. Una comparación de los gráficos 21a y 21c, permite ver que la aplicación de un campo eléctrico sobre la estructura, rompe el degeneramiento de los estados de menor energía, y éste efecto se vuelve más marcado a medida que crece el radio de curvatura, esto es porque el aumento en el tamaño de la estructura produce un decremento en la energía del electrón por el principio de incertidumbre y por ende el campo eléctrico tiende a localizar más estados de energía. Por otra parte, el agrupamiento en duplas de estas energías en la figura 21b, es consecuencia de los dos pozos de potencial presentes en extremos opuestos de la estructura debido al confinamiento estructural de las regiones curvas. Por otra parte, al comparar el gráfico 21c con el gráfico 21a, se aprecia una disminución en la energía del estado base, esto es debido al confinamiento que se produce por la aplicación del campo eléctrico. Finalmente, resulta interesante señalar que en todos los gráficos las energías de los dos primeros estados se curvan hacia abajo, contrario a lo que se debería esperar, ya que a menor radio de curvatura el electrón debería presentar un aumento en su energía como se puede apreciar para los demás estados, la explicación a este hecho curioso es sencilla, estos estados de menor energía, quedan atrapados dentro del profundo pozo de potencial que se produce para radios de curvatura tan pequeños. Otro aspecto importante que presenta la figura 21b, es que los dos estados más profundos exhiben pequeñas oscilaciones AB , lo que indica que no son absolutamente vibracionales, esto quiere decir que para estos estados hay un tunelamiento del electrón en las regiones sin curvatura.

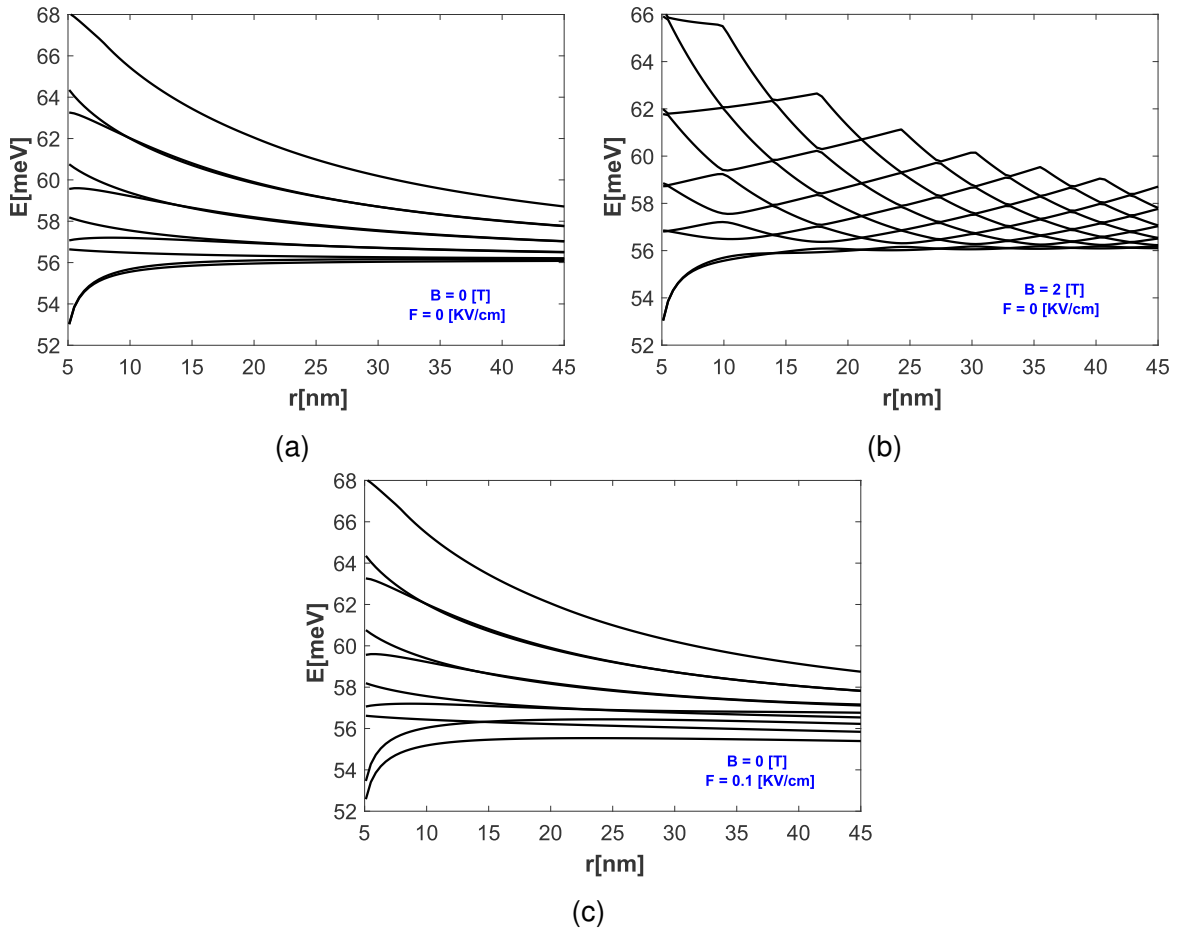


Figura 21: Energía de un electrón en un lazo rectangular ovalado, en función del radio de curvatura medio r para tres diferentes configuraciones de campos aplicados. (a) Sin campos, (b) Con campo magnético $B = 2 T$ y (c) Con campo eléctrico $F = 0,1 KV/cm$.

3.4. LAZO CUADRANGULAR REDONDEADO

En esta sección final, se estudia el efecto de la curvatura de un lazo nanométrico cerrado en forma de cuadrado con bordes redondeados. Este también puede entenderse como un QR circular que ahora se divide en cuatro partes iguales, separadas sobre cada semieje una distancia $L = 90 nm$. Finalmente, estos se unen a través de regiones rectilíneas de longitud L para dar forma a tres diferentes casos: (Figuras 22, 23 y 24). El último caso que se estudiará es asimétrico ya que este no guarda simetría con los ejes x e y .

A continuación, se presentan los parámetros geométricos para construir los tres casos mencionados anteriormente. Cabe destacar que, aunque el último caso presenta dos radios de curvatura medio diferentes, su geometría se ha construido en función de único radio r con el fin de facilitar en COMSOL el barrido paramétrico que permite estudiar el efecto de la variación del radio de curvatura.

$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = r$	$r = 45 \text{ nm}$
$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = r$	$r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = r$

Tabla 11: Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

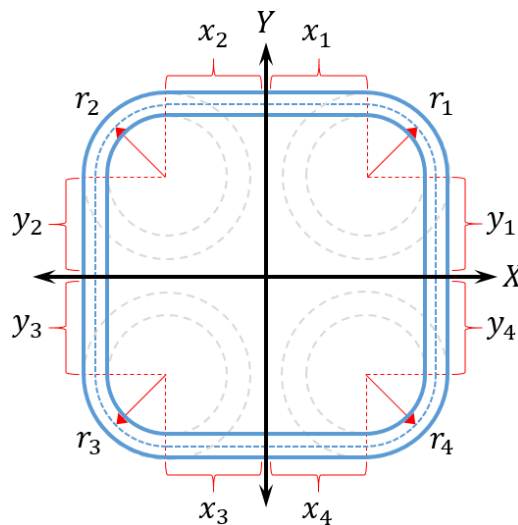


Figura 22: Geometría de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 45 \text{ nm}$.

$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 3r$	$r = 15 \text{ nm}$
$y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = 3r$	$r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = r$

Tabla 12: Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$.

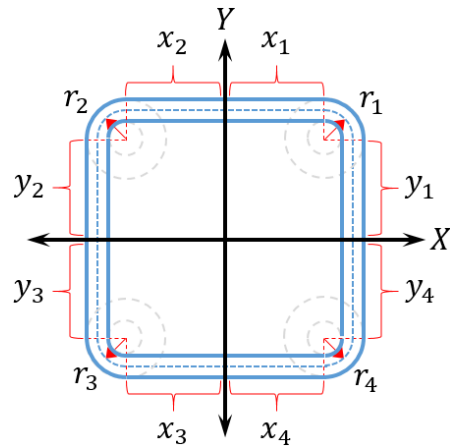


Figura 23: Geometría de un lazo cuadrangular redondeado para un radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$.

$x_1 = x_3 = y_1 = y_3 = 4r$	$r = 15 \text{ nm}$	
$x_2 = x_4 = y_2 = y_4 = 2r$	$r_1 = r_3 = r$	$r_2 = r_4 = 3r$

Tabla 13: Parámetros geométricos de un lazo cuadrangular redondeado asimétrico para dos radios de curvatura medio $r_I = 15 \text{ nm}$ y $r_{II} = 45 \text{ nm}$.

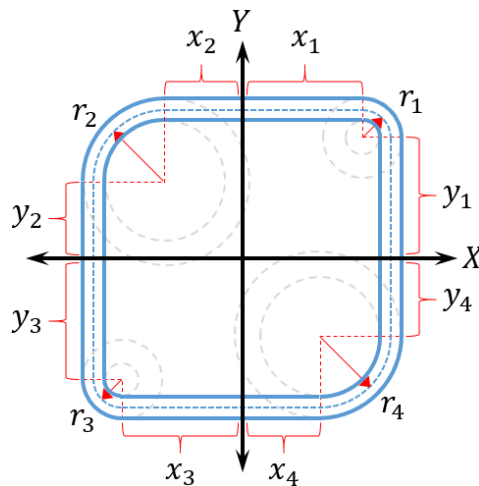


Figura 24: Geometría de un lazo cuadrangular redondeado asimétrico para dos radios de curvatura medio $r_I = 15 \text{ nm}$ y $r_{II} = 45 \text{ nm}$.

3.4.1. Potencial de confinamiento estructural

En la figura 25 se observa el potencial de confinamiento estructural de las tres estructuras que se estudian en esta sección, en estas gráficas se aprecian los cuatro pozos de potencial que corresponden a las cuatro esquinas redondeadas y en la figura 25c se aprecia la notable diferencia en la profundidad y ancho de los mismos.

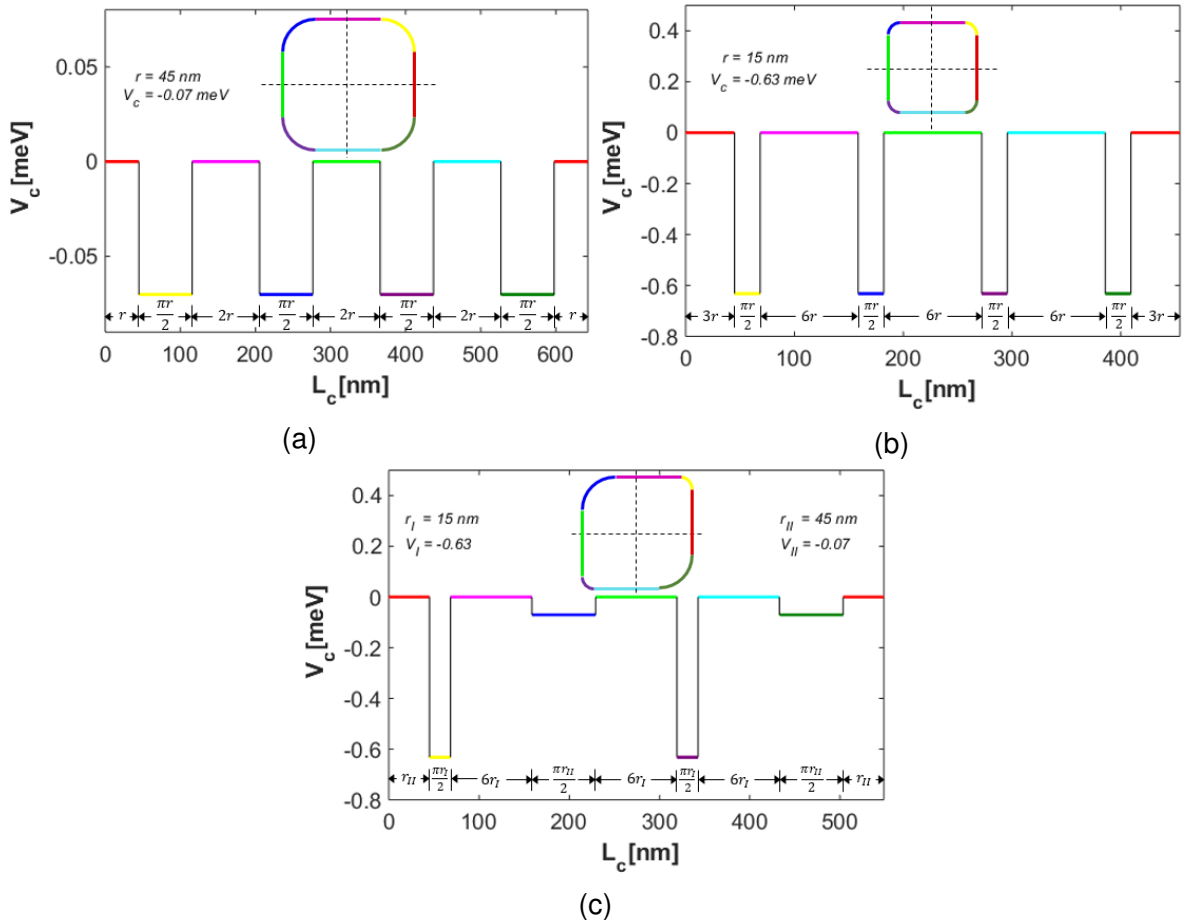


Figura 25: Potencial de confinamiento estructural de un electrón en un lazo cuadrangular redondeado, en función de la longitud del camino para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$, (b) $r = 15 \text{ nm}$ y (c) Ambos radios.

3.4.2. Efecto del campo magnético

El comportamiento energético del electrón en presencia de un campo magnético homogéneo al interior de estas estructuras en forma de cuadrado redondeado (Figura 26), no dista mucho del comportamiento mostrado por los lazos en forma de

rectángulo ovalado (Figura 18). Las principales diferencias son: menor periodo de oscilación debido al mayor recorrido que realiza el electrón en cada vuelta, menor amplitud en las oscilaciones de la energía también como consecuencia del mayor tamaño que presentan estas estructuras y la aparición de cuádruplas en los estados energéticos, este último aspecto se debe a la presencia de los cuatro pozos de potencial. Un hecho importante a tener en cuenta en la figura 26c es la aparición de duplas en la energía en lugar de cuádruplas, esto lo explica la importante diferencia energética que presentan los pozos de potencial de curvatura, siendo más dominante el efecto de los pozos de las regiones de menor radio de curvatura.

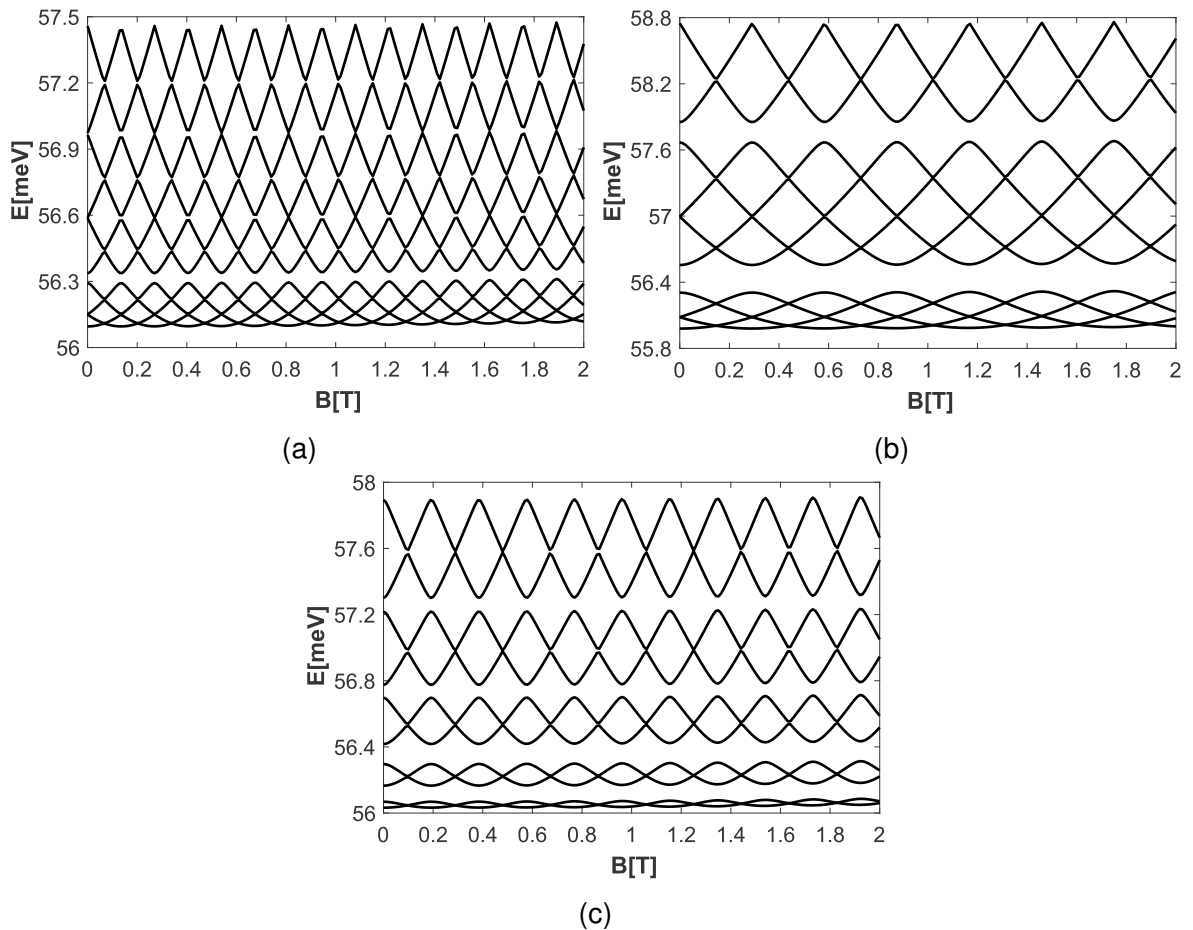


Figura 26: Energía en función del campo magnético para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45 \text{ nm}$, (b) $r = 15 \text{ nm}$ y (c) combinación de (a) y (b).

Como es de esperar, un análisis comparativo de las gráficas de la figura 26, muestra la relación que existe entre la longitud del camino con el número de oscilaciones en la energía y con la amplitud de las mismas. Es por ello, que la

figura 26a presenta mayor número de oscilaciones seguido por la figura 26c, con la amplitud de las energías sucede lo mismo, la figura 26a es la de menor amplitud seguido por la figura 26c. Por último, si se compara la figura 26 con la figura 18, se aprecia un mayor número de estados desacoplados en todos los gráficos de la figura 26, esto es porque la mayor longitud del camino produce una disminución en la energía rotacional del electrón y por tanto sus estados se ubican esta vez más cerca del pozo de potencial, presentando efectos de interferencia que dan lugar a una mayor cantidad de trenzas en las oscilaciones de energía.

En los gráficos de las tablas 14, 15 y 16 se observa la aparición de corrientes debido a la aplicación de un campo magnético. Sin embargo, resulta interesante notar que en los dos últimos estados de la tabla 15, los cuales corresponden a la geometría con radio de curvatura medio $r = 15 \text{ nm}$, se observa una débil corriente que puede ser el resultado del desacople energético entre estos dos estados, debido al efecto del potencial de curvatura, el cual resulta más fuerte en este caso considerando que este presenta una mayor profundidad. Es por lo anterior que, debido a la poca profundidad de los pozos de potencial de la geometría de la tabla 14, allí no se presenta una disminución importante en la corriente de los últimos dos estados de energía. Por otra parte, en la tabla 16 es posible observar la dominancia que presentan los pozos de potencial que corresponden a un menor radio de curvatura. Este mismo potencial de curvatura es el responsable de producir las corrientes débiles que se observa en todos los estados de la tabla 16, como ya se mencionó anteriormente, es posible que este hecho se deba al desacople que el potencial de curvatura induce sobre cada par de estados de energía.

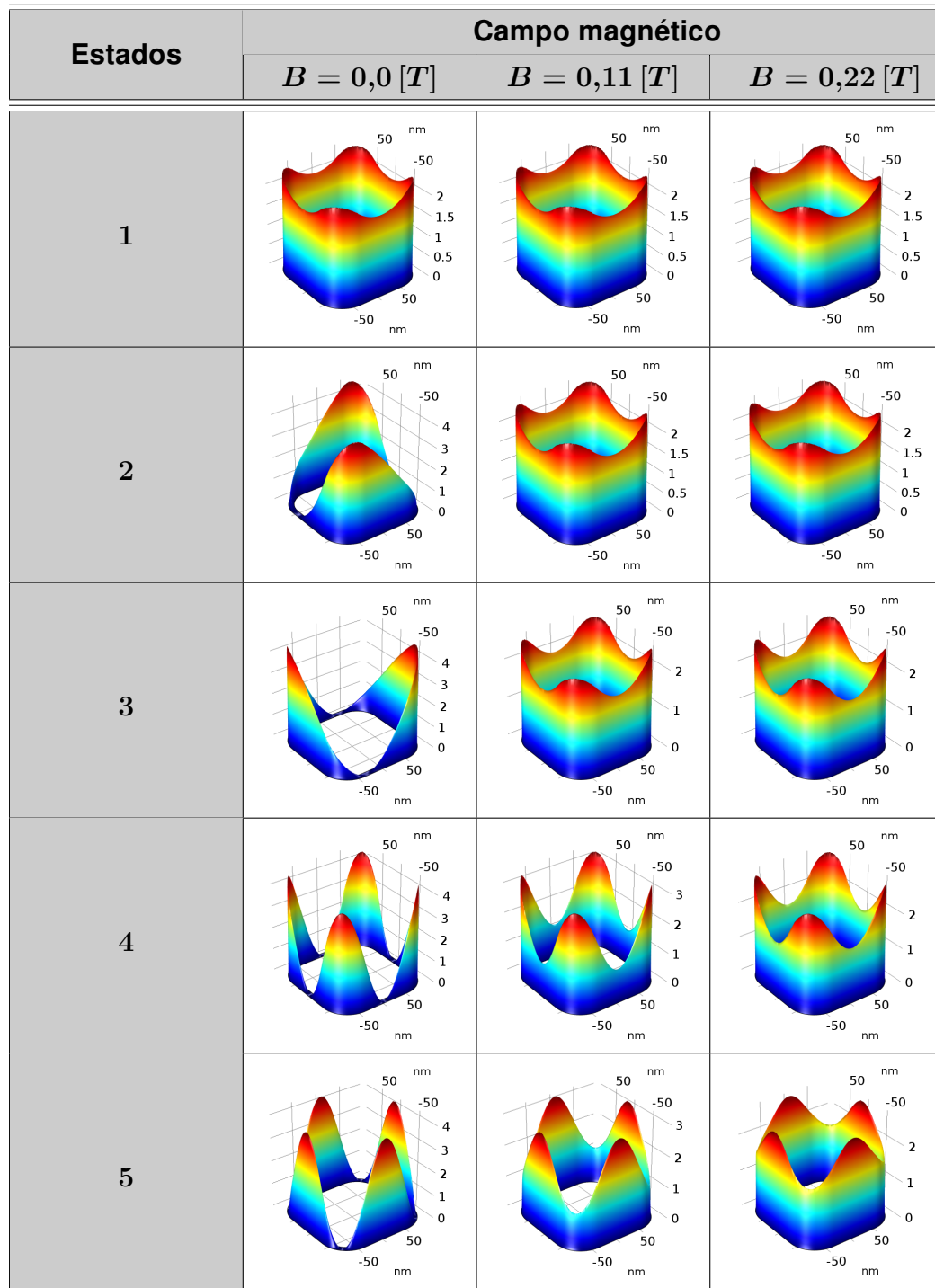


Tabla 14: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 45 \text{ nm}$.

Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,26 [T]$	$B = 0,52 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 15: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$.

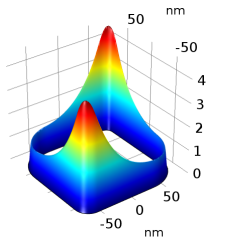
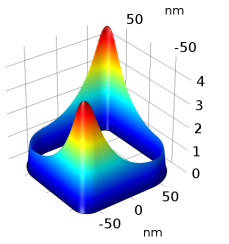
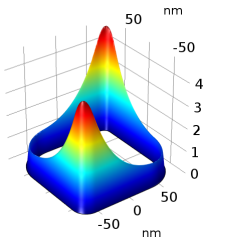
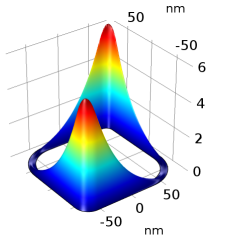
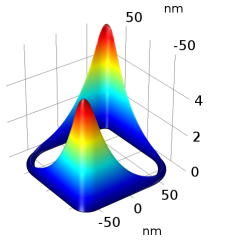
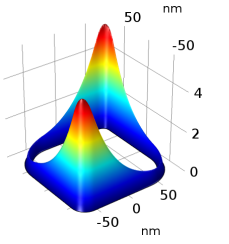
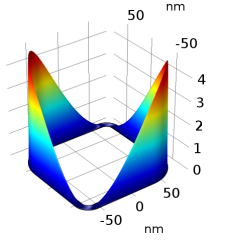
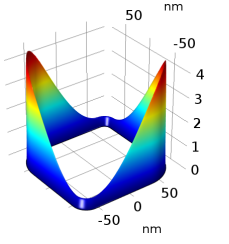
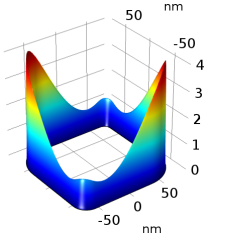
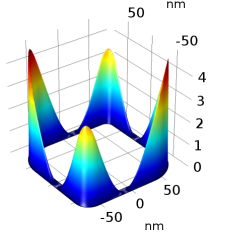
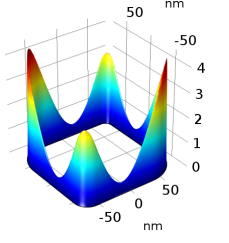
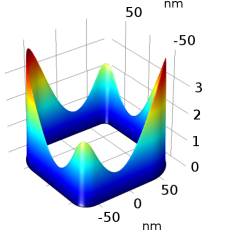
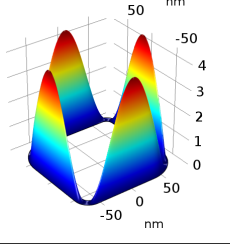
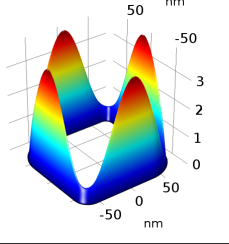
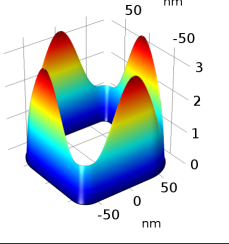
Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,16 [T]$	$B = 0,32 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 16: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.

3.4.3. Efecto del campo eléctrico

Igual que en resultados anteriores, la aplicación de un campo eléctrico homogéneo en la dirección positiva del eje x , muestra un rápido confinamiento para un campo pequeño, también se aprecia el efecto de la longitud del camino en el confinamiento debido al campo eléctrico, ya que este se hace más fuerte en la estructura de mayor tamaño, lo cual se traduce en un mayor número de estados localizados. Las figuras 27b y 27c muestran un débil trenzado de algunos estados, una vez más eso se debe a la profundidad de los pozos de potencial de las regiones curvas que exhiben sus correspondientes geometrías. Por otra parte, en la figura 27a no se manifiesta el trenzado de estados por la escasa profundidad que presentan sus pozos de potencial de curvatura, el cual no alcanza a conseguir efectos de interferencia que ocasionen un trenzado de los estados de menor energía.

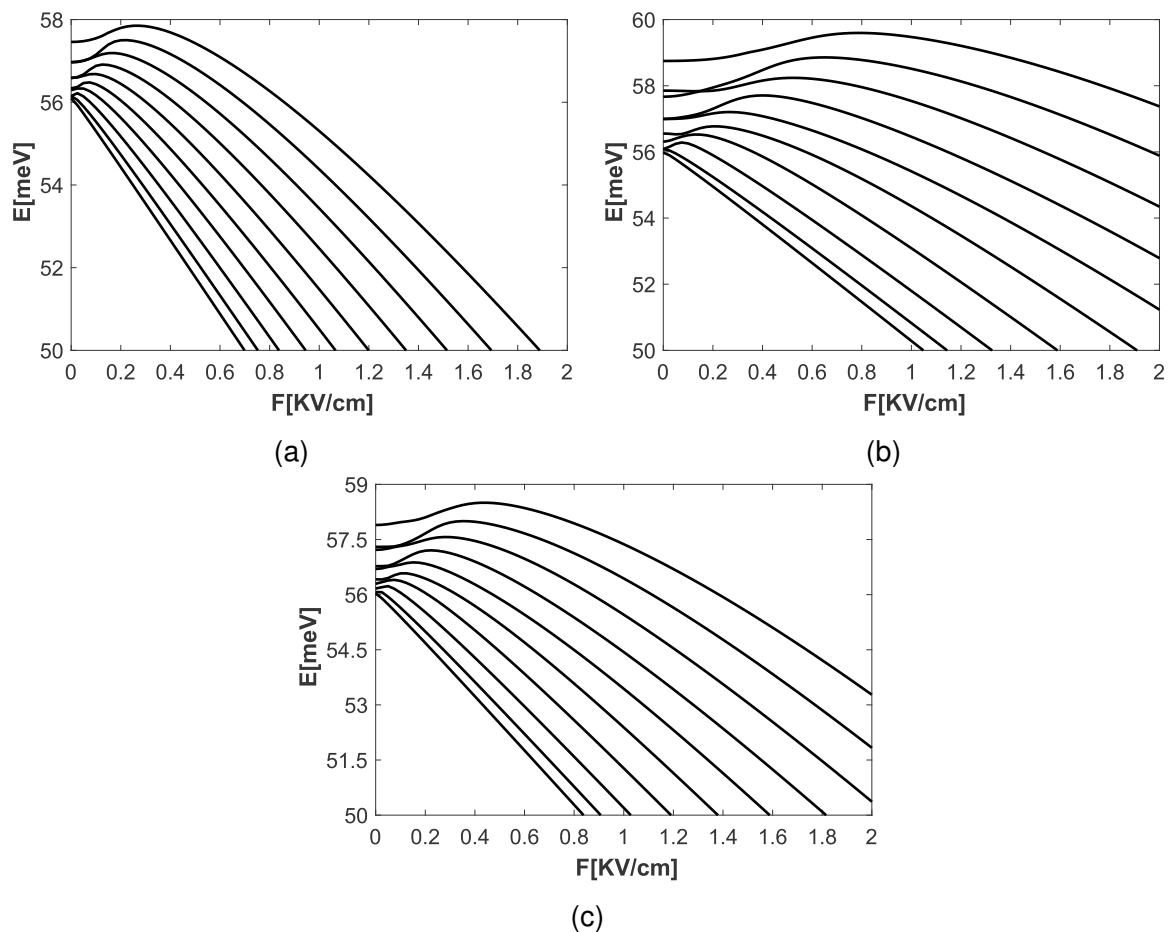


Figura 27: Energía en función del campo eléctrico para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45$ nm y (b) $r = 15$ nm.

Estados	Campo eléctrico		
	$F = 0,0 [KV/cm]$	$F = 0,07 [KV/cm]$	$F = 0,14 [KV/cm]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 17: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$.

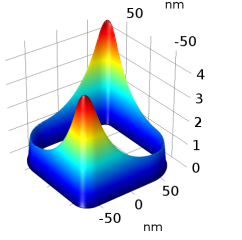
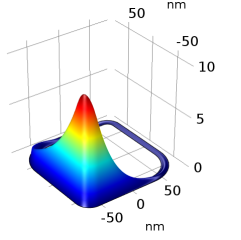
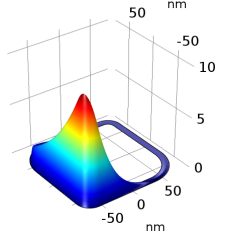
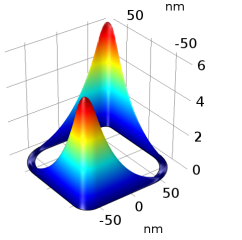
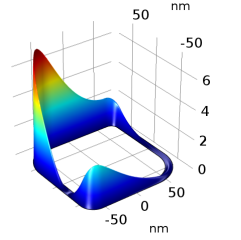
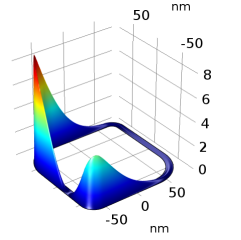
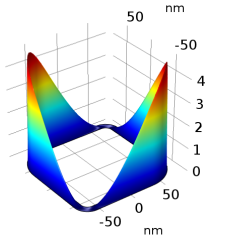
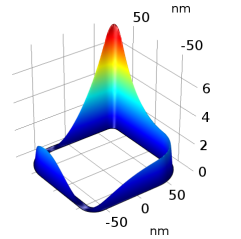
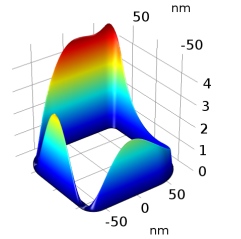
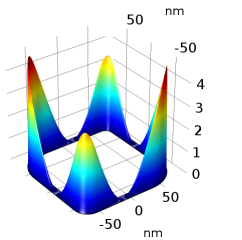
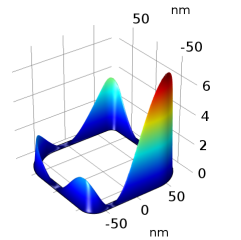
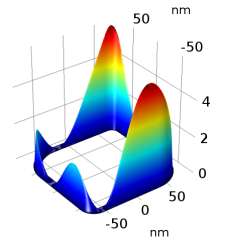
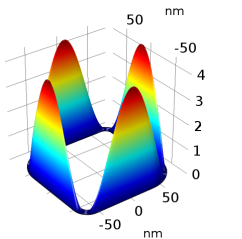
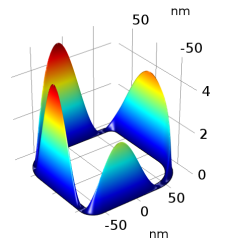
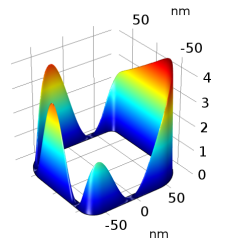
Estados	Campo eléctrico		
	$F = 0,0 [KV/cm]$	$F = 0,02 [KV/cm]$	$F = 0,04 [KV/cm]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 18: Densidad electrónica de los estados más bajos para diferentes valores de campo eléctrico F en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.

Las tablas 17 y 18 corresponden a las densidades electrónicas de las geometrías de las figuras 23 y 24 respectivamente, en ellas se observa al igual que para el lazo rectangular ovalado, un fuerte confinamiento de los dos primeros estados hacia la región donde se aplica el campo eléctrico. Posteriormente, se observa que para estados de mayor energía la densidad electrónica presenta un corrimiento hacia la región opuesta, esto como ya se mencionó, es posible de explicar si se interpreta el efecto del campo eléctrico como un desnivel en los pozos de potencial presentes en las regiones curvas, el cual se da hacia la región sobre la cual se aplica dicho campo. Por otro lado, es importante destacar que, en la tabla 18 este corrimiento en la densidad electrónica, no se produce de forma simétrica, contrario a los resultados que se han analizado hasta el momento, desde luego este es un efecto más del potencial de curvatura, ya que, al tener dos curvaturas diferentes, el electrón no siente el mismo potencial en dichas regiones curvas, lo cual termina por romper la simetría en la densidad electrónica.

3.4.4. Efecto de los campos eléctrico y magnético

Un análisis comparativo de las gráficas de la figura 28, refleja cómo es de esperar, un confinamiento debido al campo eléctrico mucho más fuerte sobre la geometría de la figura 28a, nuevamente debido a la menor energía que presenta el electrón al moverse en una estructura de mayor longitud, esto hace que haya mayor presencia de estados localizados. Una vez se corroboran las observaciones de las secciones anteriores: menor periodo de oscilación para los lazos de mayor longitud, así mismo menor amplitud de oscilación, se procede a analizar el hecho interesante de que aquí ya no se observa un trenzado de estados, esto se debe a que los estados más bajos o más cercanos a los pozos de potencial estructural, son fuertemente afectados por el campo eléctrico aplicado, esto además de producir la extinción de las oscilaciones en la energía, produce el desacople de las mismas, haciéndose visible solo para los estados de mayor energía, los cuales se escapan del efecto de confinamiento del campo eléctrico, pero sin embargo logran acoplarse débilmente debido al efecto de confinamiento de los pozos potencial.

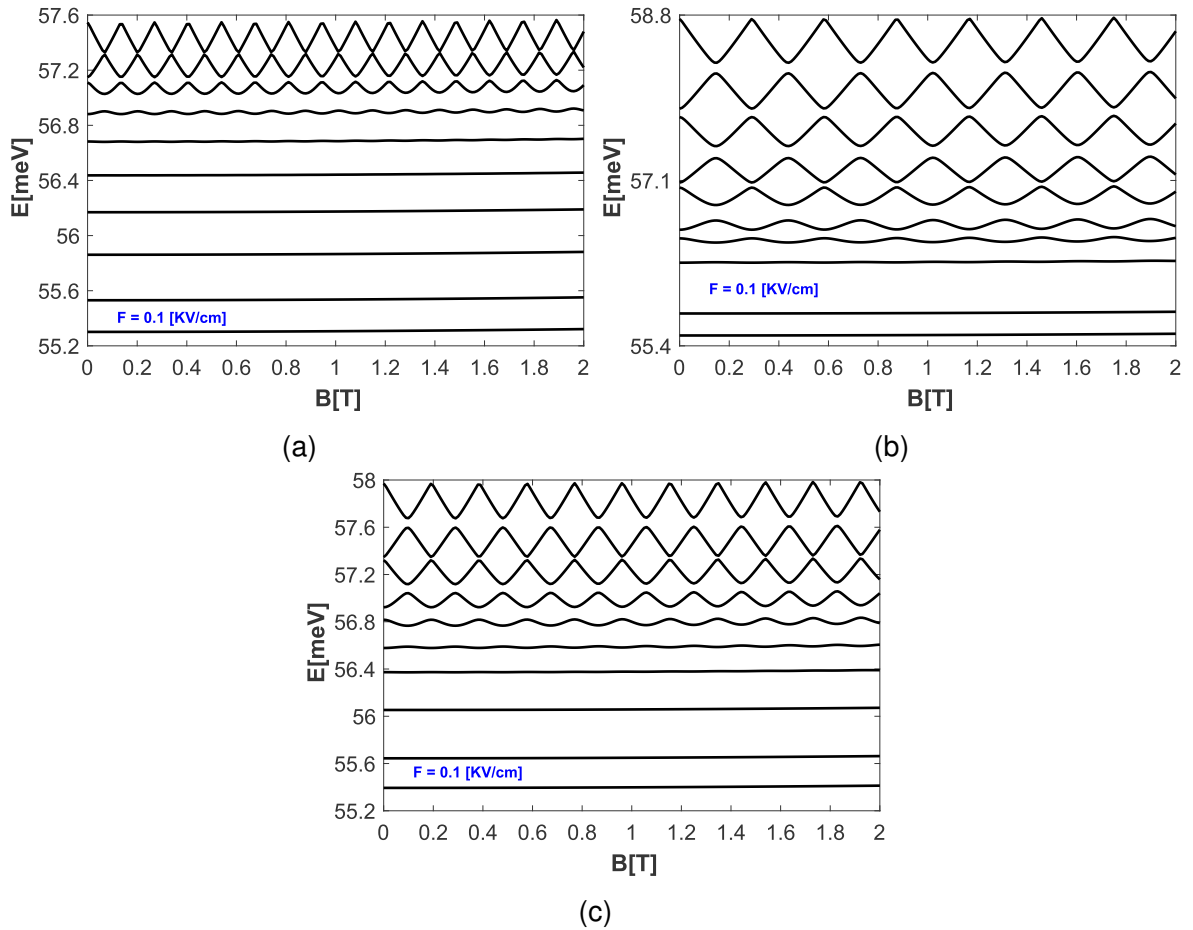


Figura 28: Energía en función del campo magnético con un campo eléctrico constante aplicado en la dirección positiva del eje x para dos radios de curvatura medio diferentes. (a) $r = 45$ nm y (b) $r = 15$ nm.

En las gráficas 28a, 28b y 28c se puede apreciar la extinción de los primeros cinco estados de energía, con la salvedad de que en la figura 28b solo se produce la extinción de los tres primeros estados. Estos resultados son coherentes con las gráficas de densidad electrónica, pues en ellas se puede ver que no hay presencia de corrientes, ya que, con excepción del quinto estado de la tabla 20, las densidades electrónicas presentan regiones donde se ven interrumpidas. Por otra parte, también se observa un fuerte confinamiento debido al campo eléctrico solo para los dos primeros estados, pues a partir del tercer estado la densidad electrónica empieza a migrar hacia la región opuesta (lado derecho). Asimismo, en la tabla 21 se puede observar cómo se rompe la simetría en la densidad electrónica debido a la falta de simetría en los pozos de potencial de curvatura.

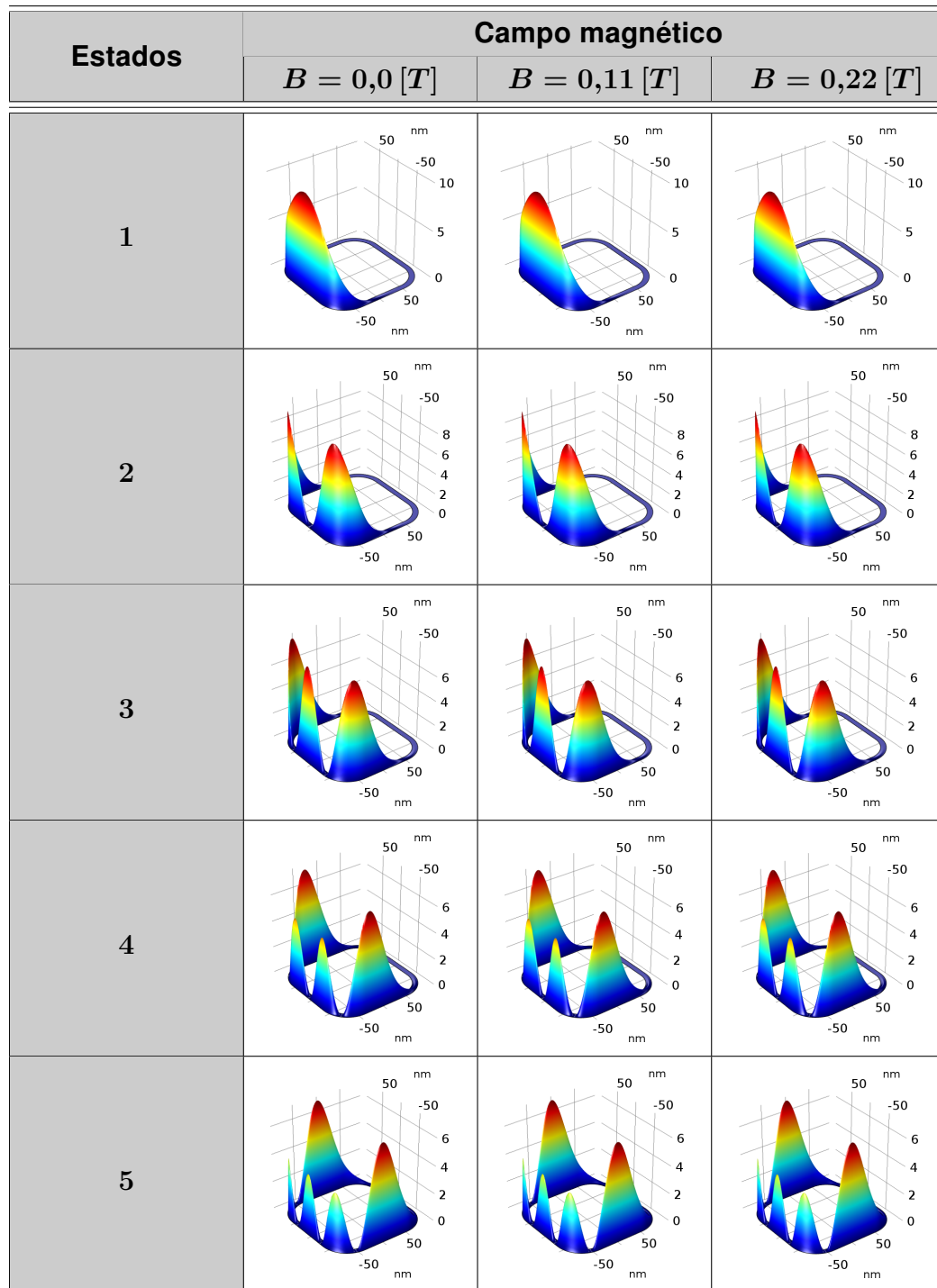


Tabla 19: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 45 \text{ nm}$.

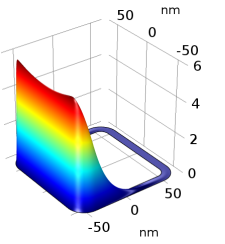
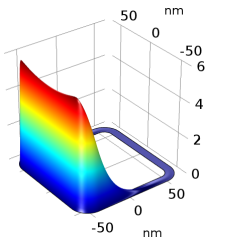
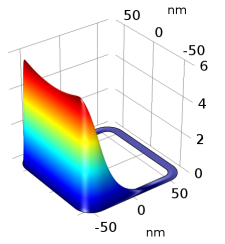
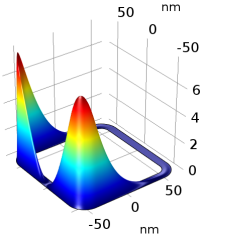
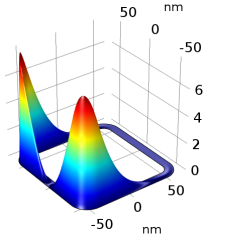
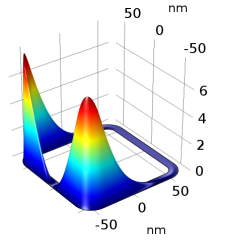
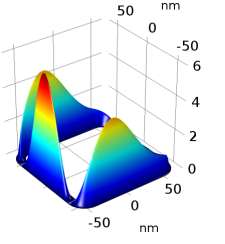
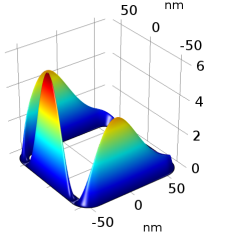
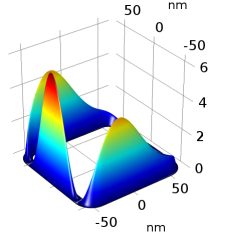
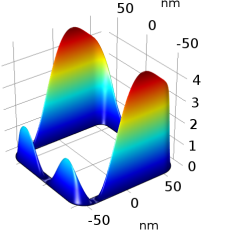
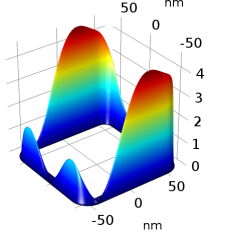
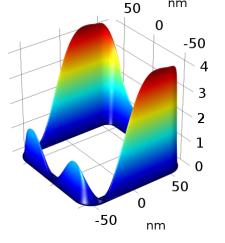
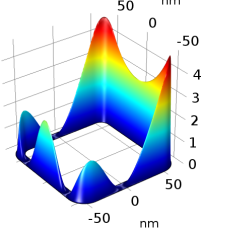
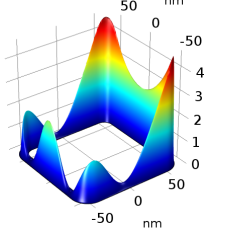
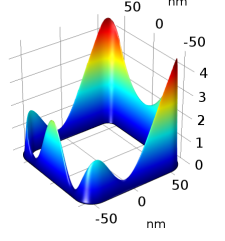
Estados	Campo magnético		
	$B = 0,0 [T]$	$B = 0,26 [T]$	$B = 0,52 [T]$
1			
2			
3			
4			
5			

Tabla 20: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado con $r = 15 \text{ nm}$.

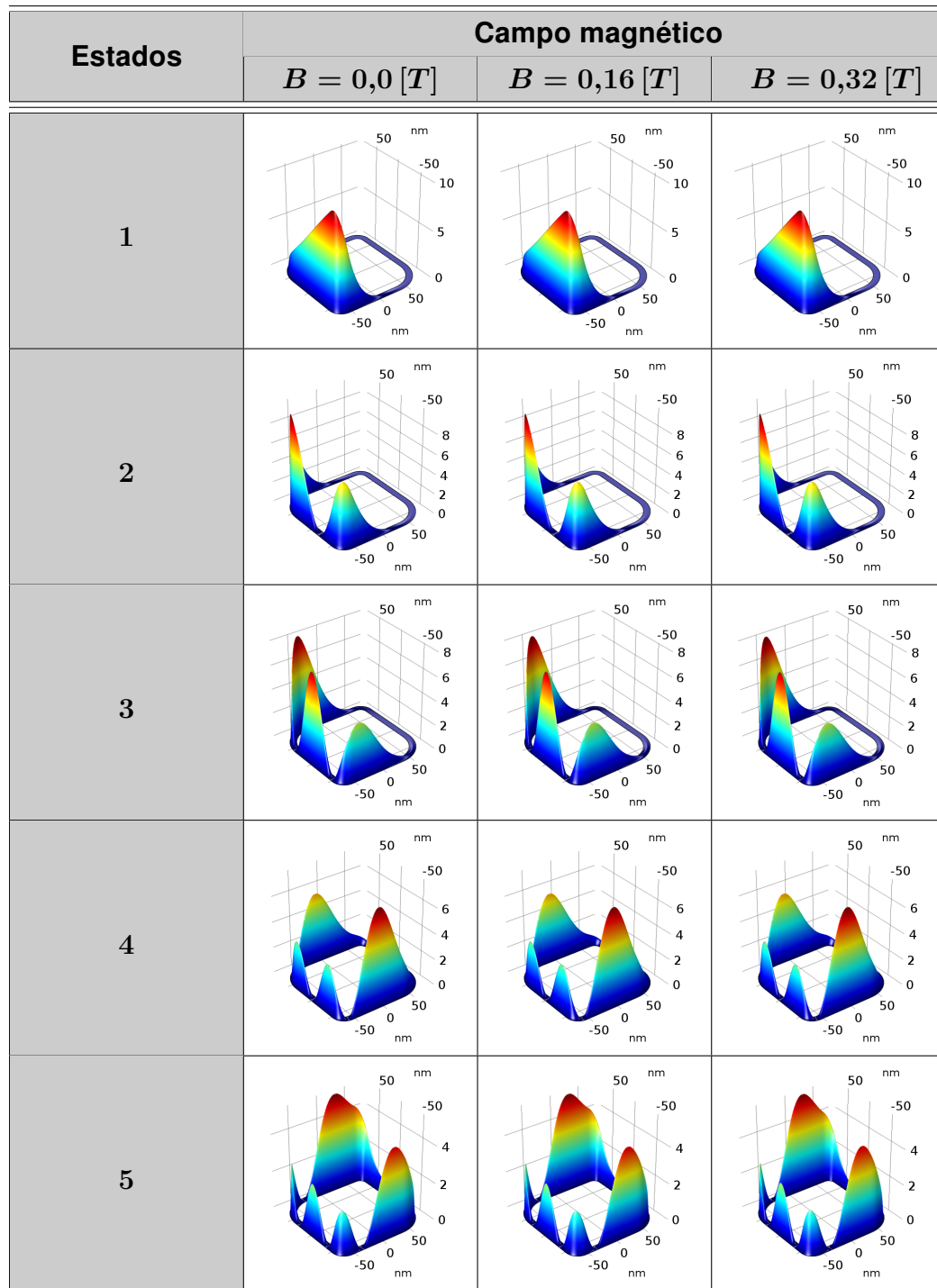


Tabla 21: Densidad electrónica de los estados más bajos para un campo eléctrico $F = 0,1 \text{ KV/cm}$ y diferentes valores de campo magnético B en un lazo cuadrangular redondeado asimétrico.

3.4.5. Efecto de la variación del radio de curvatura

Nuevamente se observa en la figura 29, que la energía del electrón al interior de los lazos disminuye con el aumento en el radio de curvatura media de los mismos. Asimismo, la aplicación de un campo magnético produce cuádruplas en la energía en lugar de duplas, esto se debe a la presencia de los cuatro pozos de potencial correspondientes a igual número de regiones curvas. Por otra parte, al comparar la figura 29c con las figuras 29a y 29b, se observa una disminución en la energía de los dos primeros estados como consecuencia del campo eléctrico aplicado. A su vez, se destaca el hecho de que los estados de menor energía se curvan hacia abajo al disminuir el radio de curvatura, esto es por el fuerte confinamiento debido al consecuente aumento en la profundidad de los pozos de potencial.

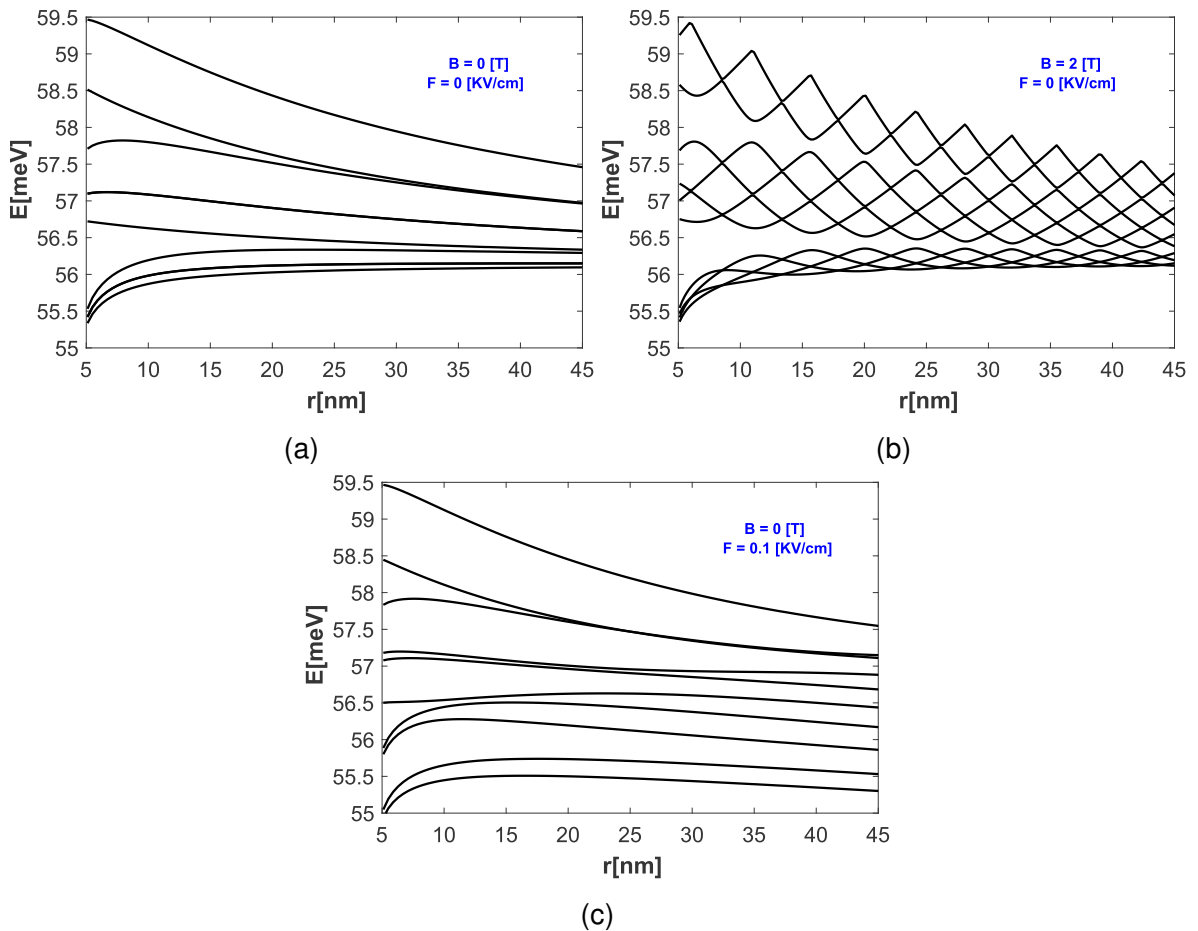


Figura 29: Energía de un electrón en un lazo cuadrangular redondeado, en función del radio de curvatura medio r para tres diferentes configuraciones de campos aplicados. (a) Sin campos, (b) Con campo magnético $B = 2$ T y (c) Con campo eléctrico $F = 0,1$ KV/cm.

CONCLUSIONES

En concreto, luego de la realización de este trabajo de grado, se pueden establecer las siguientes conclusiones:

- Nuestros resultados ponen en evidencia la aparición de variaciones en el potencial de confinamiento que experimenta una partícula (electrón) confinada en un lazo cerrado nanoscópico debido a cambios en la curvatura de dicha estructura. Mediante nuestro método de solución basado en elementos finitos se corrobora la aparición de verdaderos pozos de potencial cuya profundidad es inversamente proporcional al cuadrado del radio de curvatura de la trayectoria.
- Los resultados obtenidos también muestran que la formación de pozos de potencial a lo largo del lazo, debido a cambios en la curvatura, inducen la aparición de espectros de tipo molecular similares a los mostrados por anillos nanoscópicos en presencia de impurezas donadoras o de variaciones en la altura de la estructura. De igual manera se observó cómo estos cambios de curvatura, según sea la simetría de la estructura, pueden inhibir la aparición de oscilaciones Aharonov-Bohm en los niveles energéticos más bajos, y por lo tanto inhibir también la aparición de corrientes persistentes.
- Este estudio pone de manifiesto la alta sensibilidad que presenta el espectro electrónico ante pequeñas variaciones en la curvatura de un lazo cerrado de tamaño nanométrico, lo cual es indicio de lo sensibles que pueden llegar a ser las propiedades ópticas y magnéticas de dichas estructuras.

- Otro alcance de este trabajo ha sido proponer un modelo teórico generalizado y sencillo, para una guía de onda nanoscópica delgada, que permite obtener diferentes configuraciones morfológicas mediante la variación de algunos parámetros geométricos.
- Se recomienda como posible trabajo futuro, la realización de un estudio teórico de diferentes geometrías de lazos nanoscópicos cerrados delgados, que mantenga constante la longitud del camino que recorre el electrón. Lo anterior se propone con el fin de que la comparación entre los diferentes espectros de energía sea más justa.

Bibliografía

- [1] P. YU and M. CARDONA, *Fundamentals of Semiconductors*, Berlin, Springer-Verlag (1996); J. SINGH, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, Singapore (1993); V. SHCHUKIN, N. N. LEDENTSOV, and D. BIMBERG, *Epitaxy of Nanostructures*, Springer, Berlin/Heidelberg (2003).
- [2] L. ESAKI and R. TSU, *IBM, J. Res. Dev.* 14, 61(1970).
- [3] P. HARRISON, *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley-Interscience (2005).
- [4] T. ANDO, A. B. FOWLER and F. STERN, *Reviews of Modern Physics*, 54, N° 2, 437 (1982).
- [5] D. R. BOWLER, *J. PHYS, Condens Matter* 16, R721-R754 (2004).
- [6] L. JACAK, P. HAWRYLAK, A. WÓJS, *Quantum Dots*, Springer-Verlag, New York (1997).
- [7] *Qué hace de la nanotecnología algo especial.*
<https://nanova.org/que-hace-de-la-nanotecnologia-algo-especial/>
- [8] WILLIAMS, LINDA AND WADE ADAMS, *Nanotechnology Demystified*, McGraw-Hill Professional: New York, 2006.
- [9] M. S. DRESSELHAUS, G. DRESSELHAUS, P. AVOURIOUS, *Carbon Nanotubes*, Topics in applied physics, 80, 1-9. Springer - Verlag Berlin Heidelberg (2001).
- [10] *Nanoestructuras, una mirada hacia adentro.*
<http://conacytprensa.mx/index.php/tecnologia/nanotecnologia/21051-nanoestructuras-mirada-hacia-adentro>

- [11] DAVID VELASCO VILLAMIZAR, *Efecto Aharanov – Bohm en anillos casi – circulares*, Tesis de pregrado, Universidad Industrial de Santander, Escuela de física, 2009.
- [12] FREDDY ANTONIO RODRÍGUEZ PRADA, *Sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos no uniformes*, Tesis doctoral, Universidad Industrial de Santander, Escuela de física, 2013.
- [13] WILLIAN GUTIERREZ NIÑO, *Estados ligados de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras*, Tesis doctoral, Universidad Industrial de Santander, Escuela de física, 2010.
- [14] A. LORKE, R.J. LUYKEN, A.O. GOVOROV, J.P. KOTTHAUS, J.M. GARCIA, P.M. PETROFF, *Phys. Rev. Lett.* 84, 2223 (2000).
- [15] J.M. GARCIA, G. MEDEIROS-RIBEIRO, K. SCHMIT, T. NGO, J.L. FENG, A. LORKE, J.P. KOTTAUS, P.M. PETROFF, *Appl. Phys. Lett.* 71, 2014 (1997).
- [16] A. AIERKEN, T. HAKKARAINEN, J. RIIKONEN AND M. SOPANEN, *Nanotechnology* 19, 245304 (2008).
- [17] JOHN H. DAVIS, *The physics of low-dimensional semiconductors an introduction*, Cambridge University Press. (1998), p. 80.
- [18] W. HORNISCHER, P. GRAMBOW, T. DEMEL, E. BAUSER, D. HEITMANN, K. VON KLITZING, AND K. PLOOG, *Appl. Phys. Lett.* 60, 2998 (1998).
- [19] F. C. FRANK AND J. H. VAN DER MERWE, *Proc. Roy. Soc. London*, A 198, 216 (1949).
- [20] M. VOLMER AND A. WEBER, *Z. Physik. Chem*, 119, 277 (1926).
- [21] I. N. STRANSKI AND L. KRASTANOV, *Sitz. Ber. Akad. Wiss, Math - naturewiss*, Kl. Abt. IIb 146, 797 (1938).
- [22] FRANCY KARINA DUARTE CAMACHO, *Influencia de una impureza sobre el espectro de un magnetoexcitón en un anillo cuántico*, Tesis de pregrado, Universidad Industrial de Santander, Escuela de física, 2014.
- [23] YEISON FABIAN SANTOS, *Análisis comparativo del espectro energético del magnetoexcitón en anillos concéntricos y nanotubo*, Tesis de pregrado, Universidad Industrial de Santander, Escuela de física, 2015.

- [24] W. GUTIÉRREZ, L. F. GARCÍA, I. D. MIKHAILOV, *Effect of bipartition on spectral properties of nanorings*, Elsevier, Physica B 421 (2013) 63-68.
- [25] P. BOONPENG, W. JEVASUWAN, S. SURAPRAPAPICH, S. RATANATHAMMAPHAN, S. PANYAKEOW, *Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application*, Microelectronic Engineering, Volume 86, Issues 4–6, Pages 853–856.
- [26] A. AIERKEN, T. HAKKARAINEN, J. RIIKONEN, M. SOPANEN, *Transformation of InAs islands to quantum ring structures by metalorganic vapor phase epitaxy*, IOP Publishing, Nanotechnology 19 (2008) 245304.
- [27] JIHOON H. LEE, ZHIMING M. WANG, MORGAN E. WARE, KUSHAL C. WIJESUNDARA, MAURICIO GARRIDO, ERIC A. STINAFF, GREGORY J. SALAMO *Super low density InGaAs semiconductor Ring-shaped nanostructures*, Crystal Growth and Design, 2008, Vol. 8, No. 6, 1945-1951.
- [28] EUGENE SWITKES, ERIC L. RUSELL, JAMES L. SKINNER, *Kinetic energy and path curvature in bound state systems*, J. Chem. Phys. 67, 3061 (1977); doi: 10.1063/1.435271.
- [29] A. BRUNO ALFONSO, A. LATGÉ, *Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field*, Physical Review B 77, 205303 (2008).
- [30] YURIY V. PERSHIN and CARLO PIERMAROCCHI, *Persistent and radiation-induced currents in distorted quantum rings*, Physical Review B 72, 125348 (2005).
- [31] EUGENE SWITKES and ERIC L. RUSELL, *The quantum mechanical behavior of a particle between ellipses*, J. Chem. Phys. 64, 3774 (1976); doi: 10.1063/1.432693.
- [32] K. L. JANSSENS, F. M. PEETERS and V. A. SCHWEIGERT, *Magnetic-field dependence of the exciton energy in a quantum disk*, Physical Review B 63, 205311 (2000).
- [33] P. W. ANDERSON, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Physical Review 109, 1492 (1958).

- [34] HEYN C, STEMMANN A, STRELOW C, KÖPPEN T, SONNENBERG D, GRAF A, MENDACH S, HANSEN W, *Self-Assembly of semiconductor quantum rings by local droplet etching*, J. Nanoelectron Optoelectron, **6** 62, 2011.
- [35] NEMCSICS Á, HEYN C, STEMMANN A, SCHRAMM A, WELSCH H, HANSEN W, *The RHEED tracking of the droplet epitaxial grown quantum dot and ring structures*, Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol. **165** 118, 2009.
- [36] SOMASCHINI C, BIETTI S, SANGUINETTI S, KOGUCHI N, FEDOROV *Self-Assembled GaAs/AlGaAs coupled quantum ring-disk structures by droplet epitaxy*, Nanotechnology **21** 125601, 2010.
- [37] LINARES-GARCÍA G, MEZA-MONTES L, STINAFF E, ALSOLAMY S. M, WARE M. E, MAZUR Y. I, WANG Z. M, LEE J, SALAMO G. J, *Optical Properties of a Quantum Dot-Ring System Grown Using Droplet Epitaxy*, Nanoscale Res. Lett. **11** 309, 2016.
- [38] J. A. FLORO, R. HULL, J. L. GRAY, *Short-Range Lateral Ordering of GeSi Quantum Dots Due to Elastic Interactions*, NanoScience and Technology, Lateral Alignment of Epitaxial Quantum Dots, Springer Berlin Heidelberg New York, 2007, Pag 92.
- [39] J PLANELLES, F. RAJADELL, J. I. CLIMENTE, *Electron states in quantum rings with structural distortions under axial or in-plane magnetic fields*, IOP Publishing, Nanotechnology 18 (2007) 375402.
- [40] S. N. SHEVCHENKO, YU. A. KOLESNICHENKO, *Conductance of the Elliptically Shaped Quantum Wire*, Journal of Experimental and Theoretical Physics, Vol. 92, No. 5, 2001, pp. 811–815.

Anexos

Anexo A

VERIFICACIÓN DEL GAUGE DE COULOMB

Antes de proceder a describir en detalle los pasos que permiten obtener la expresión del Hamiltoniano mono-electrónico de la sección 2.3, se procederá a verificar que la elección del potencial vectorial magnético en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) definido por $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho})$ con $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$, cumple la condición de Gauge de Coulomb, esto es $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

Primero se reemplazan \mathbf{B} y $\boldsymbol{\rho}$ en la expresión del potencial vectorial \mathbf{A} , para encontrar su magnitud y dirección.

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

$$= \frac{1}{2}(B\hat{\mathbf{k}}) \times (\rho\hat{\mathbf{e}}_\rho) \quad (\text{A.2})$$

$$= \frac{1}{2}B\rho\hat{\mathbf{e}}_\varphi \quad (\text{A.3})$$

De acuerdo a lo anterior, el potencial vectorial \mathbf{A} solo presenta componente φ , siendo $A_\varphi = \frac{1}{2}B\rho$. Por lo tanto se procede a tomar la divergencia del vector $\mathbf{A} = A_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ para verificar que se cumple la condición de Gauge de Coulomb.

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} A_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} A_z \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \underbrace{\left(\frac{1}{2}B\rho \right)}_0 = 0 \quad (\text{A.5})$$

Anexo B

HAMILTONIANO MONO-ELECTRÓNICO

Tras la verificación anterior, se procede a exponer cada uno de los pasos para obtener la expresión final del Hamiltoniano que describe el comportamiento de un electrón confinado en un QR . A continuación, se considera un potencial de confinamiento estructural de barrera infinita dado por:

$$V_0 = \begin{cases} 0 & \in QR \\ \infty & \notin QR \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

El hamiltoniano del sistema bajo campos eléctrico $\mathbf{F} = F\hat{i}$ y magnético $\mathbf{B} = B\hat{k}$ esta dado por la ecuación 7, donde los campos estan representados por los potenciales escalar eléctrico $\Phi = e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$ y vectorial magnético $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho})$.

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_e^*} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}]^2 + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi) \\ &= \frac{1}{2m_e^*} [\mathbf{p}^2 + e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2\mathbf{A}^2] + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

La definición de los vectores momento lineal $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ y potencial magnético $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\varphi$ permite obtener el conjunto de ecuaciones 8 y 9.

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}\psi &= -i\hbar\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) \\ &= -i\hbar \underbrace{(\nabla \cdot \mathbf{A})}_0 \psi - i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla\psi \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}\psi &= \mathbf{A} \cdot (-i\hbar\nabla\psi) \\ &= -i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla\psi\end{aligned}\quad (\text{B.4})$$

Por sustitución de \mathbf{p} y los resultados 8 y 9 en la ecuación 7 se obtiene el siguiente resultado.

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m_e^*} [-\hbar^2\nabla^2 - 2i\hbar e\mathbf{A} \cdot \nabla + e^2\mathbf{A}^2] + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m_e^*}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m_e^*}\mathbf{A}^2 + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi).\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

Por último, se reemplaza en la ecuación 10 los vectores $\mathbf{A} = A_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ y $\nabla = \nabla_\rho\hat{\mathbf{e}}_\rho + \nabla_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi$ definidos en coordenadas polares, llegando finalmente a la expresión del hamiltoniano que permite estudiar el efecto de la curvatura de un QR en el espectro energético de un electrón.

$$\begin{aligned}H &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m_e^*}\left(\frac{1}{2}B\rho\hat{\mathbf{e}}_\varphi\right) \cdot (\nabla_\rho\hat{\mathbf{e}}_\rho + \nabla_\varphi\hat{\mathbf{e}}_\varphi) + \frac{e^2}{2m_e^*}\left(\frac{1}{2}B\rho\hat{\mathbf{e}}_\varphi\right)^2 + eF\rho \cos \varphi \\ &\quad + V_0(\rho, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m_e^*}\left(\frac{1}{2}B\rho\right)\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{e^2B^2\rho^2}{8m_e^*} + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar eB}{2m_e^*}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2B^2\rho^2}{8m_e^*} + eF\rho \cos \varphi + V_0(\rho, \varphi)\end{aligned}\quad (\text{B.6})$$